

Nº 1
225



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO

FACULTAD DE QUIMICA

COMPARACION DE METODOS PARA
DESTILACION MULTICOMPONENTE

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE
INGENIERO QUIMICO
P R E S E N T A
ANTONIO ASTORGA RODRIGUEZ



MEXICO, D. F., CIUDAD UNIVERSITARIA

1992

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

INDICE GENERAL

	No PAG.
Lista de tablas.	I
Lista de figuras.	II
Lista de diagramas.	III
Lista de gráficas	III
Nomenclatura.	V
Introducción.	I

CAPITULO I

1. GENERALIDADES SOBRE DESTILACION Y MEZCLAS MULTICOMPONENTES

1.1 Desarrollo.	4
1.2 Definición.	4
1.3 Tipos de destilación:	
1.3.1 Destilación instantánea.	6
1.3.2 Destilación diferencial.	6
1.3.3 Destilación fraccionaria.	6
1.3.4 Destilación azeotrópica.	7
1.3.5 Destilación extractiva.	7
1.3.6 Destilación al vacío.	7
1.3.7 Destilación molecular.	7
1.4 Conceptos básicos de destilación.	
1.4.1 Componentes clave.	8
1.4.2 Etapas de equilibrio.	8
1.4.3 Condición térmica de la alimentación.	9
1.4.4 Número mínimo de etapas.	9
1.4.5 Reflujo mínimo.	11
1.4.6 Reflujo de operación.	14
1.4.7 Etapa de alimentación.	14
1.4.8 Flash Isotérmico.	14
1.4.9 Presión de Operación.	15
1.5 Generalidades sobre mezclas multicomponentes.	
1.5.1 Gases y soluciones ideales y reales.	21
1.5.2 Equilibrio termodinámico.	22
1.5.3 Selectividad y coeficientes de distribución.	23
1.5.4 Entalpías.	23

1.5.5 Reglas de idealidad para mezclas liquido-vapor	24
1.5.6 Punto de burbuja y de rocío.	24

CAPITULO II

2. METODOLOGIAS PARA DESTILACION.

2.1 Clasificación.	
2.1.1 Métodos cortos.	27
2.1.2 Métodos rigurosos.	28
2.2 Selección.	32
2.3 Método de Smith-Brinkley.	32
2.4 Método de Wang-Henke.	
2.4.1 Modelo teórico de una etapa de equilibrio.	40
2.4.2 Método de punto de burbuja.	43
2.4.3 Método Theta de convergencia.	49

CAPITULO III

3. ALGORITMOS

3.1 Algoritmos.	
3.1.1 Método Smith-Brinkley.	52
3.1.2 Método de Wang-Henke.	53
3.2 Métodos Numéricos empleados.	
3.2.1 Método de Newton.	55
3.2.2 Método de Interpolación lineal	56
3.2.3 Método de Muller.	57
3.3 Lenguaje de Programación.	
3.3.1 Justificación.	58

CAPITULO IV

4. RESULTADOS

4.1 Resultados.	72
-----------------	----

CAPITULO V

5. ANALISIS DE RESULTADOS Y CONCLUSIONES

5.1 Análisis de resultados.	119
Conclusiones.	121
Bibliografía.	122
Apéndices.	

LISTA DE TABLAS

TABLA NUM	PIE DE TABLAS	No PAG.
4.1	Parámetros variables ejemplo 2.	73
4.2	% de recuperación para componentes clave.	75
4.3	Temperaturas terminales.	75
4.4	Distribución de componentes.	76
4.5	Cargas térmicas.	76
4.6	Perfiles de vapor y líquido.	76
4.7	Perfil de temperatura.	77
4.8	Condiciones generales.	85
4.9	Resultados generales método corto.	85
4.10	Distribución de componentes en el destilado.	85
4.11	Distribución de componentes en fondo método corto.	86
4.12	Flujos de vapor método corto.	86
4.13	Flujos de líquido método corto.	86
4.14	Resultados generales método riguroso.	86
4.15	Composición destilado por método riguroso.	87
4.16	Composición fondos por método riguroso.	87
4.17	Flujos de vapor por método riguroso.	87
4.18	Flujos de líquido por método riguroso.	88
4.19	Temperaturas por etapa método riguroso.	88
4.20	Datos generales.	109
4.21	Resultados generales.	109
4.22	Distribución de componentes.	109
4.23	Flujos de líquido y vapor.	110
4.24	Temperaturas por etapa.	110

LISTA DE FIGURAS

FIGURA NUM	PIE DE FIGURAS	No PAG
1.1	Columna de destilación convencional.	5
1.2	Condición térmica de la alimentación.	10
1.3	Ubicación del plato de alimentación según la condición térmica de la alimentación.	12
1.4	Flujos de líquido-vapor según la condición térmica de la alimentación.	13
1.5	Reflujo mínimo, total y de operación	17
1.6	Gráfica de Gilliland.	18
1.7	Gráfica de ψ .	19
1.8	Relación entre los flujos de líquido y vapor	20
2.1	Modelo de equipo para deducción de la ecuación general.	34
2.2	Modelo columna simple con condensador total.	37
2.3	Modelo de una etapa de equilibrio.	41
2.4	Cascada de etapas en contracorriente.	42
3.1	Método de Newton-Raphson.	59
3.2	Método de Interpolación lineal	60
3.3	Método de Muller.	61

DIAGRAMA NUM	LISTA DE DIAGRAMAS	No PAG.
3.1	Método de Smith-Brinkley.	62
3.2	Método de Wang-Henke.	65
3.3	Método de Newton.	68
3.4	Método de Interpolación lineal	69
3.5	Método de Muller.	70

GRAFICA NUM	LISTA DE GRAFICAS	No PAG.
4.1	Recuperación componente ligero.	78
4.2	Recuperación componente pesado.	79
4.3	Perfil de temperatura.	80
4.4	Flujos de vapor por etapa.	81
4.5	Flujos de líquido por etapa.	82
4.6	Fracción mol vs número de etapas (M. Riguroso).	83
4.7	Fracción mol vs número de etapas (M. Riguroso Escala Ampliada).	84
4.8	% Recuperación ligero (alimentación vaporizada)	89
4.9	% Recuperación ligero (alimentación a punto de burbuja).	90
4.10	% Recuperación pesado (alimentación vaporizada)	91
4.11	% Recuperación pesado (alimentación a punto de burbuja).	92
4.12	Cargas térmicas condensador (alimentación vaporizada).	93
4.13	Cargas térmicas condensador (alimentación a punto de burbuja).	94
4.14	Cargas térmicas rehedidor (alimentación vaporizada).	95
4.15	Cargas térmicas rehedidor (alimentación a punto de burbuja).	96
4.16	Perfil de temperaturas (q=0.129 y condensador total).	97
4.17	Perfil de temperaturas (q=0.129 y condensador parcial).	98
4.18	Perfil de temperaturas (q=1 y condensador total)	99
4.19	Perfil de temperaturas (q=1 y condensador parcial)	100
4.20	Flujo de vapor (q=0.129 y condensador total)	101

4.21	Flujo de vapor ($q=0.129$ y condensador parcial)	102
4.22	Flujo de vapor ($q=1$ y condensador total)	103
4.23	Flujo de vapor ($q=1$ y condensador parcial)	104
4.24	Flujo de líquido ($q=0.129$ y condensador total)	105
4.25	Flujo de líquido ($q=0.129$ y condensador parcial)	106
4.26	Flujo de líquido ($q=1$ y condensador total)	107
4.27	Flujo de líquido ($q=1$ y condensador parcial)	108
4.28	% Recuperación clave ligero	111
4.29	% Recuperación clave pesado	112
4.30	Cargas térmicas	113
4.31	Temperatura por etapa	114
4.32	Flujo de vapor por etapa	115
4.33	Flujo de líquido por etapa	116

NOMENCLATURA

A continuación se incluye la nomenclatura utilizada en este trabajo, el sistema de unidades es el inglés y a menos que se indique lo contrario es la siguiente:

A	Coficiente matriz tridiagonal.
B	Coficiente matriz tridiagonal, Flujo de fondos.
C	Coficiente matriz tridiagonal.
C _p	Capacidad calorífica
D	Coficiente matriz tridiagonal; destilado.
Desp	Destilado especificado
E	Operador
F	Flujo de alimentación.
H	Entalpia
h ^L	Entalpia del liquido
h ^V	Entalpia del vapor
K	Constante de equilibrio
k	Iteración
L	Flujo de liquido, flujo de liquido rectificación.
L'	Flujo de liquido agotamiento
M+1	Etapas de alimentación (Smith-Brinkley).
M	Etapas abajo alimentación.
m	Iteración,
N	Etapas teóricas
N _c	Número de componentes
N _m	Número mínimo de etapas
P	Presión
Q	Calor
Q _c	Calor del condensador
Q _r	Calor del rehervidor
R	Razón de reflujo; constante universal de los gases.
R'	Coficiente ec. general

R_m	Reflujo mínimo
S	Factor de desorción
S_n	Factor desorción rectificación
S_m	Factor desorción agotamiento
T	Temperatura.
T_n	Temperatura efectiva zona rectificación
T_m	Temperatura efectiva zona agotamiento
T_{m+1}	Temperatura alimentación
T_i	Temperatura rocío (destilado)
T_N	Temperatura burbuja (fondos)
V	Flujo de vapor, flujo de vapor rectificación
V'	Flujo de vapor agotamiento
a	Coefficiente ec. polinomial temperatura.
b_i	Moles fondo de i
d_i	Moles destiladas de i
f_i	Factor de separación del componente i
g, h_i	Coefficientes característicos ec. general.
n	Moles
m	etapas abajo alimentación
$m+1$	etapa alimentación
q	Condición térmica
q_r	Coefficiente ec. general.
x_{ij}	Fracción mol en el líquido del componente i en etapa j
y_{ij}	Fracción mol en el vapor del componente i en etapa j

LETRAS GRIEGAS

α_j	Volatilidad relativa de i con respecto a j
β	Coefficiente matriz didiagonal
γ	Coefficiente matriz didiagonal
Δ	Diferencia de dos cantidades
ϵ	Tolerancia.
ϕ	Raíz de ec. Underwood
μ_i	Fugacidad del componente i
θ	Raíz ec. Holland
ψ	Fracción evaporada

INTRODUCCION

En la ingeniería química la separación de una mezcla en sus componentes puros es una de las operaciones de mayor importancia, por el valor de estos productos para la obtención de diversos satisfactores provenientes de estos. Para ello se tienen una gran variedad de operaciones para lograr esta separación (destilación, absorción, intercambio iónico, etc). El tener una separación de forma eficiente, rápida y general a motivado el surgimiento de una inmensidad de métodos para solucionar el problema. Con el tiempo se ha dado la tendencia a utilizar frecuentemente modelos más complicados para describir y obtener resultados más cercanos a la realidad, lo cual ha originado que sean prácticamente desconocidos otras posibilidades que en ciertos casos pueden auxiliar por ser rápidos y de fácil comprensión; entre estos tenemos los métodos cortos, los cuales abren la posibilidad de comprender estos fenómenos y algunas variables de operación en especial para destilación.

En el presente trabajo, por la diversidad de opciones, se a delimitado el problema a destilación convencional por ser la más utilizada para fines didácticos, así como el uso de un métodos corto y un método riguroso, siendo el objetivo conocer ventajas, aplicabilidad, suposiciones y limitaciones de los métodos en base de los resultados.

La metodología seguida para realización de este trabajo fue la siguiente:

a)Revisión bibliográfica de conceptos de destilación y de mezclas multicomponentes.

b)Algoritmos y elaboración de un programa de cómputo para la generación de resultados, con opciones para simular diferentes tipos de condiciones.

c)Estudio de algunos sistemas.

d) Análisis y conclusiones.

La distribución llevada para este trabajo se consideró como la más adecuada:

Capítulo 1: Se dan las generalidades de la operación unitaria, así como de conceptos básicos de mezclas multicomponentes y destilación.

Capítulo 2: Clasificación de métodos de destilación; elección de los métodos a comparar y su explicación.

Capítulo 3: En este capítulo se presentan los algoritmos y los métodos numéricos utilizados así como la justificación del lenguaje de programación seleccionado.

Capítulo 4: Se muestran los resultados obtenidos.

Capítulo 5: Se analizan los resultados.

**GENERALIDADES SOBRE DESTILACION Y MEZCLAS
MULTICOMPONENTES.**

**"...hay una razón para vivir!. Podemos
alzarnos sobre nuestra ignorancia,
podremos descubrirnos como criaturas de
perfección, inteligencia y habilidad..."**

Juan Salvador Gaviota

1.1 DESARROLLO

La destilación es una actividad que se realiza de forma desapercibida desde muchos años atrás, pero su estudio como operación unitaria inició con los trabajos de Sorel (1893), continuándolos Rayleigh, Lewis, etc. quienes haciendo uso de los principios físico-químicos y aplicándolos en la explicación de estos fenómenos, encontraron modelos matemáticos que los representarían. En la actualidad ha tomado mayor auge esta operación unitaria para la separación de mezclas de hidrocarburos provenientes del petróleo, aunque se utiliza en otras industrias.

1.2 DEFINICION (15,18,21,22,27,37,40,42)

La destilación es aquella operación unitaria que tiene como finalidad principal la separación de los componentes con diferentes presiones de vapor a una temperatura determinada, por lo cual se crea una segunda fase en la que se tendrán separados los componentes. Esto se logra mediante el uso de un equipo que recibe el nombre de columna de destilación el que se muestra en la figura 1.1. La columna consta de 5 partes primarias que son: un condensador, un rehervidor, zona de alimentación, zona de agotamiento o de fondos y zona de rectificación.

En la torre se introduce la alimentación en algún punto y por el calor que se obtiene del rehervidor parte del líquido se convierte en vapor, el cual va ascendiendo por la columna por una menor densidad que la del líquido que desciende, con lo cual se va realizando un contacto íntimo entre las dos fases por el mezclamiento de estas en etapas de equilibrio; este vapor va enfriándose gradualmente y condensando los componentes más pesados, mientras que el líquido aumenta su temperatura por la vaporización de los componentes ligeros, el vapor que llega a la parte superior de la torre entra al condensador y ahí el calor que tiene se remueve obteniéndose un líquido o una mezcla líquido - vapor en equilibrio, parte del líquido se recirculará para repetir el proceso mientras que la otra se obtendrá como producto destilado, dependiendo la fase del tipo de condensador usado.

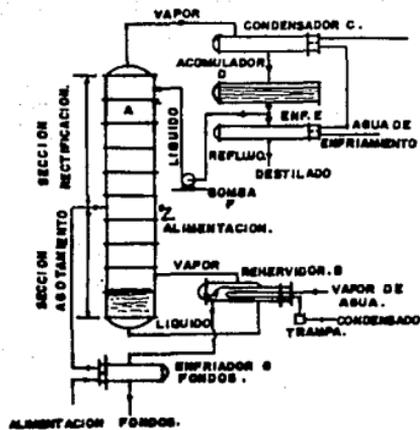


FIG 1.1 COLUMNA DE DESTILACION CONVENCIONAL.

1.3 TIPOS DE DESTILACION ^(7,13,15,18,21,27,33,40)

Existen diferentes tipos de destilación dependiendo esto de los medios ó manera en que se realice esta operación.

1.3.1 DESTILACION INSTANTANEA

Es conocida tambien como destilación en el equilibrio, en donde se realiza la evaporación parcial de una mezcla liquida en una sola etapa, en esta se permite que se establezca el equilibrio entre el vapor y el líquido, separando y eliminando las fases resultantes.

1.3.2 DESTILACION DIFERENCIAL

Esta es una extensión de la destilación instantánea aplicada sucesivamente, puesto que en cada operación solo una pequeña parte (diferencial) se evapora del líquido, en esta el primer destilado que se obtiene es el más rico en el componente más volátil, al continuar esta se va concentrando el líquido en los componentes más pesados, esto implica que esta operación se realiza por fracciones y se tienen productos con diferente pureza.

1.3.3 DESTILACION FRACCIONARIA

Es muy común este tipo de destilación y se basa en tener una mezcla que entra en una columna multietapas, en esta el vapor que se forma en la alimentación se eleva y se enriquece del componente más volátil que proviene del líquido que se condensa en la parte superior y que regreso como reflujo (otra se obtiene como producto final), el líquido se vaporiza en el calentador y parte sale por el fondo con los componentes más volátiles, los líquidos y vapores se encuentran en sus puntos de burbuja y rocío respectivamente. En cada plato se tienen cuatro flujos que pasan por el, siendo: a) líquido que escurre del plato sobreyacente; b) vapor que entra del plato subyacente; c) líquido que escurre del plato adyacente; c) vapor que asciende del plato sobreyacente.

La precisión de este tipo de destilación es muy alta en mezclas multicomponentes, ya que la separación puede llevarse a cabo a través

de intervalos de temperatura de hasta 0.5 C. Los equipos de destilación fraccionaria se dividen en simples ó complejos, de acuerdo de acuerdo al número de corrientes y equipos que se manejen.

1.3.4 DESTILACION AZEOTROPICA

Esta se utiliza en los casos de difícil separación de mezclas por fraccionamiento común, se logra la separación por la formación de un azeótropo de punto de ebullición más bajo que del componente original, esto se logra por el uso de un componente "arrastrador".

1.3.5 DESTILACION EXTRACTIVA

La forma de realizarla es similar a la anterior operación, solo que aquí el componente que se le agrega se conoce como "disolvente" y altera la volatilidad relativa de los componentes, este debe ser de baja volatilidad; estos disolventes tienen alta selectividad para alterar los equilibrios, facilidad de disolver los componentes y no formar azeótropos. Estos procesos dependen de obtener la no idealidad entre el disolvente y los componentes (con mayor volatilidad).

1.3.6 DESTILACION AL VACIO

Es utilizada en aquellas sustancias en las cuales al calentamiento a temperaturas normales de ebullición las descompone, por lo cual la presión y temperatura se disminuyen además de un tiempo mínimo.

1.3.7 DESTILACION MOLECULAR

Se lleva a cabo a presiones reducidas (de 0.133 a 0.0133 Pa) en sustancias sensibles al calor , se basa en que la rapidez de evaporación aumenta al disminuir la presión y evitar que por los choques de las partículas se regrese parte al líquido. La rapidez se da por:

$$N_A = 1006pa \left(\frac{1}{2pMART} \right)^{0.5} \quad (1.1)$$

para mantenerla se renueva constantemente la superficie del líquido.

1.4 CONCEPTOS BASICOS DE DESTILACION ^{3,8,15,16,18,21,22,26,27,33,36,40}

A continuación se dan algunos conceptos importantes en esta operación unitaria.

1.4.1 COMPONENTES CLAVE

Recibe el nombre de componentes clave a aquellos componentes que se escojen como punto de referencia para llevar a cabo la separación de una mezcla. Se conoce como *Clave Ligero (LK)* al componente que es más ligero ó más volátil especificado en el producto de base y el otro como *Clave Pesado (HK)*, siendo el más fijo ó menos volátil del destilado.

Para la selección de estos componentes en una mezcla multicomponente, se basa en los siguientes criterios por parte del diseñador:

- a)Componentes a separar. .
- b)Facilidad de realizar la separación.

En base a esto se escojen los claves lograndose la separación de todos los demas ya que los más pesados que el clave pesado estaran en el fondo y los más ligeros que el ligero en el destilado.

1.4.2 ETAPAS DE EQUILIBRIO

La separación de una mezcla binaria ó multicomponente, como se menciona se realiza en una columna de destilación, la cual en su interior tiene accesorios para promover la transferencia de materia. Estos accesorios pueden ser platos ó empaques, dependiendo esto de las características del sistema y reciben el nombre de etapas de equilibrio, puesto que se intenta el mayor intercambio de materia el cual se logra en el equilibrio.

1.4.3 CONDICION TERMICA DE LA ALIMENTACION

La alimentación puede estar en cinco diferentes estados para ser suministrada a la columna, siendo éstos : líquido saturado, vapor saturado, mezcla líquido-vapor, vapor sobrecalentado y líquido subenfriado. (fig 1.2)

La condición térmica modifica la localización del plato de la alimentación, así como los flujos de cada corriente. (fig 1.3 y 1.4).

El valor que representa la condición térmica de la alimentación, se llama q , el cual esta definido como:

$$q = \frac{\text{moles liquido saturadas}}{\text{moles alimentadas}} \quad (1.2)$$

tomando los balances de materia y energia se tiene también la siguiente definición:

$$q = \frac{\bar{L} - L}{F} = \frac{H_v - H_f}{H_v - H_L} \quad (1.3)$$

los valores de q denotan la condición de la alimentación:

- $q > 1$ líquido subenfriado
- $q = 1$ líquido a punto de burbuja
- $0 < q < 1$ mezcla líquido-vapor
- $q = 0$ vapor saturado
- $q < 0$ vapor sobrecalentado

1.4.4 NUMERO MINIMO DE ETAPAS

Para realizar una separación se necesita un número de etapas, éste dependerá de la mezcla en particular; de tener un proceso en el cual la fuerza impulsora fuera máxima en cada etapa para la transferencia de materia daría por resultado que el número de etapas sería mínimo por tener una eficiencia del cien por ciento. La forma de obtener este mínimo número se puede lograr mediante un regreso a la torre de todo el destilado en forma de reflújo, no obteniendo fondos y sin alimentar más ó por medio de simuladores en las que el reflújo se hace muy grande en comparación del destilado.

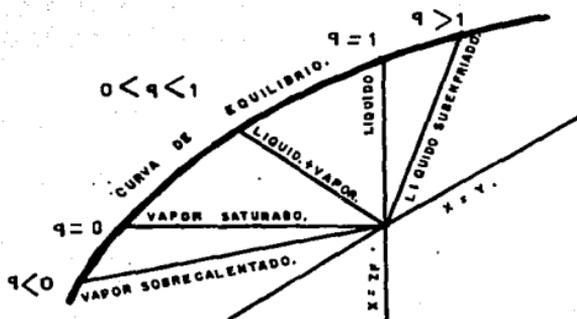


FIG 1.2 CONDICION TERMICA DE LA ALIMENTACION.

Para mezclas multicomponentes se tiene una ecuación para obtener el número mínimo de etapas, la cual es la ecuación de Fenske:

$$N_{\min} = \frac{\log \left[\left[\frac{d_i}{d_j} \right] \left[\frac{b_j}{b_i} \right] \right]}{\log \alpha_j} \quad (1.4)$$

1.4.5 REFLUJO MÍNIMO

Se conoce como reflujo mínimo a aquella relación de reflujo en la cual se necesitarían un número infinito de platos para lograr la separación deseada. Este reflujo es finito y se pueden obtener productos así como alimentar. Una columna no puede operar a estas condiciones para tener una separación de los componentes por el número infinito de platos. A la zona donde se ubican estos se le denomina zona de *infinitud*. En este caso al tener una zona infinita de etapas no existen cambios de composición entre cada una de las corrientes. Este corresponde a la carga máxima del rehornador y de enfriamiento para el condensador.

Para los sistemas binarios se presenta la zona de *infinitud* en la etapa de alimentación, mientras que para los multicomponentes, se tienen dos casos: uno similar a los sistemas binarios y otro en el cual no hay una distribución de todos los componentes, esto es que uno ó más componentes no aparece en el destilado ó fondos.

Underwood, desarrolló una expresión para obtener para sistemas multicomponentes el reflujo mínimo:

$$\sum_{i=1}^c \frac{\alpha_i z_i f}{\alpha_i - \phi} = 1 - q \quad (1.5)$$

$$\sum_{i=1}^c \frac{\alpha_i x_i d}{\alpha_i - \phi} = 1 + R_m \quad (1.6)$$

Esta ecuación puede resolverse por medio de algún método numérico (bisección, secante, etc.)

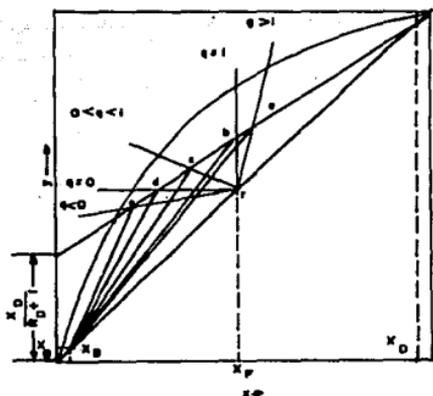


FIG 1.3 UBICACION DEL PLATO DE ALIMENTACION SEGUN LA CONDICION TERMICA DE LA ALIMENTACION.

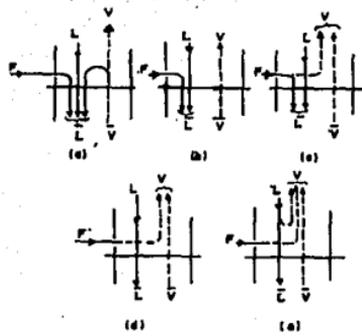


FIG 1.4 FLUJOS DE LIQUIDO-VAPOR SEGUN LA CONDICION TERMICA DE LA ALIMENTACION

El reflújo mínimo es de gran utilidad, puesto que limita los puntos en los cuales se puede llevar a cabo la separación. En la fig. 1.5 se observan estas condiciones de reflújo mínimo y total.

1.4.6 REFLUJO DE OPERACION

Conociendo los límites de operación (R_m , R_{total}, N_m), se puede obtener el reflújo con el cual se puede obtener la mejor separación posible al número de etapas actuales. Existe correlaciones que relacionan esto, la más popular es la de Gilligand de 1940 (fig 1.6), en la que se tienen las condiciones limitantes (R_{total}, N_m, R_m). Esta se obtuvo para 8 diferentes sistemas, los límites son:

Número de componentes	:	2 a 11
Q	:	0.28 a 1.42
Presión	:	Vacío a 600 psig
α	:	1.11 a 4.05
R_m	:	0.53 a 9.09
N_m	:	3.4 a 60.3

1.4.7 ETAPA DE ALIMENTACION

Para sistemas multicomponentes, la etapa de alimentación se puede obtener de acuerdo a:

- a) Diagrama de Mc Thiele modificado para los componentes clave.
- b) La suma residual de cuadrados de composiciones del plato y alimentación tiendan a cero.
- b) La temperatura del plato de alimentación es similar a la temperatura la alimentación.

1.4.8 FLASH ISOTERMICO

Para poder realizar ó conocer la cantidad de una mezcla que esta vaporizada se utiliza un flash. Como en nuestro caso se conocen la presión, composiciones y temperatura del sistema, se evalúa con este tipo de flash considerando que es una condición puntual.

La ecuación del flash isotérmico se obtiene por medio de un balance de materia que da la siguiente ecuación:

$$\sum_{i=1}^C \frac{z_i(1 - K_i)}{1 + \psi(K_i - 1)} = 0 \quad \psi = V/F \quad (1.7)$$

de aquí se pueden obtener la cantidad que existe como líquido ó vapor en la alimentación y la condición térmica de la misma. Esta ecuación puede ser resuelta para sistemas donde las K's no depende de la composición por el método de Rice-Rachford. Para ello se usa el método de Newton-Raphson por ejemplo, donde se necesita la derivada de (1.7), que es:

$$\sum_{i=1}^C \frac{z_i(1 - K_i)^2}{[1 + \psi(K_i - 1)]^2} \psi = 0 \quad (1.7a)$$

y las fracciones mol de la fase líquida y vapor se obtienen por:

$$x_{iF} = \frac{z_i}{1 + \psi(K_i - 1)} \quad (1.7b)$$

$$y_{iF} = \frac{z_i K_i}{1 + \psi(K_i - 1)} = x_{iF} K_i \quad (1.7c)$$

$$L_F = F(1 - \psi) \quad (1.7d)$$

$$Q = H_V V + H_L L - H_F F \quad (1.7e)$$

El parámetro ψ además de dar la cantidad vaporizada, indica si se produce una mezcla líquido-vapor ó su condición térmica de acuerdo a: (fig. 1.7)

$\psi \in (0, 1)$	Mezcla líquido - vapor
$\psi = 0$	Líquido saturado.
$\psi = 1$	Vapor saturado
$\psi = 0 \quad f(\psi) > 0$	Líquido subenfriado.
$\psi = 1 \quad f(\psi) < 0$	Vapor sobrecalentado.

1.4.9 PRESION DE OPERACION.

La presión de operación de la columna por lo regular se fija por la temperatura de condensación del destilado de acuerdo con el condensador empleado, el cual dependera de la temperatura del medio

de enfriamiento disponible. En aquellos casos en que esto no sea posible por manejar materiales sensibles al calor, se especificara la presión de operación tomando en cuenta la temperatura de burbuja de los fondos (cuidando que no sea tampoco la crítica ó. de descomposición), y dando un valor máximo y en base a esto se calcula la presión y la temperatura del condensador; esto denota la importancia de conocer las propiedades de los materiales a manejar así como de los servicios auxiliares.

Se debe tener cuidado también en las caídas de presión en la torre ocasionadas por variables de operación (flujos de líquido y de gas a través de la columna), puesto que se pueden ocasionar llovizno, inundaciones, arrastre, etc. y salir de la zona de operación satisfactoria (fig. 1.5). En las referencias se dan algunos valores de caídas de presión recomendadas por plato para presiones totales.

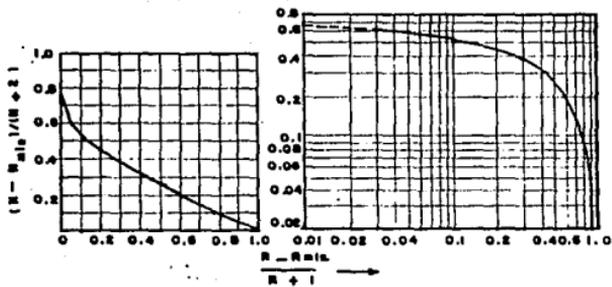


FIG 1.6 GRAFICA DE GILLIGAN

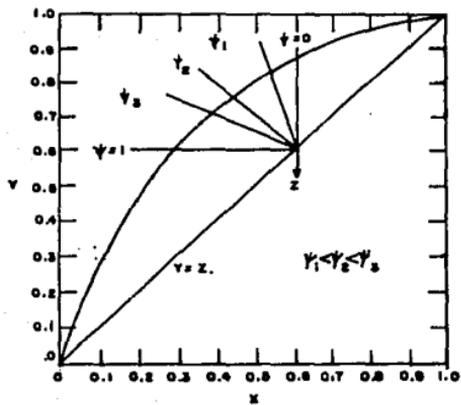


FIG 1.7 GRAFICA DE ψ



FIG 1.8 RELACION ENTRE FLUJOS DE LIQUIDO Y VAPOR

1.5 GENERALIDADES SOBRE MEZCLAS MULTICOMPONENTES^{14,16,18,21,22} 39,40,41,44)

Como se van a tratar mezclas multicomponentes, son necesarios algunos conceptos importantes sobre estas.

1.5.1 GAS Y SOLUCIONES IDEALES Y REALES

Se define por gas ideal, a aquel que cumple con la ley de los gases ideales:

$$PV = nRT$$

(1.8)

Las condiciones a las cuales un componente ó mezcla se aproximan a este comportamiento dependen de la temperatura y presión críticas, aunque es buena suposición a presiones bajas y será más precisa cuanto más alta se encuentre la temperatura con relación de la temperatura crítica y más bajo se encuentre la presión de la presión crítica. (por lo regular se considera entre 207 a 345 kPa).

La ecuación del gas ideal, aunque simple, tiene una aplicación restringida, (bajas presiones y temperaturas altas), a todo gas que no cumple con lo anterior se le denomina gas real y debido a esto se han propuesto diversas ecuaciones que los representen ampliamente. En estas se encuentran correcciones a los parámetros que no toma en cuenta el gas ideal, de donde surgen una amplia gama de ecuaciones para ello, como son la ecuación de Van Der Waals, Soave, Peng-Robinson, etc. así como de correlaciones en función de la temperatura, etc.

Para las soluciones ideales, también se tiene una ley límite como en los gases, la cual recibe el nombre de ley de Raoult, y explica que la presión del solvente sobre la solución es igual a la presión de vapor del solvente puro multiplicado por la fracción molar del solvente en la solución. Cumpliéndose esta mejor a medida que las soluciones se hacen más diluidas, siendo la ecuación que lo representa:

$$P_i = x_i P_i^0$$

(1.9)

Se tiene que para corregir la no idealidad en soluciones, se han creado diversas ecuaciones que toman en cuenta las fuertes interacciones entre moléculas como son Margules, Van Laar, etc.

1.5.2 EQUILIBRIO TERMODINAMICO

Para los problemas de destilación, se tienen que resolver un conjunto de ecuaciones con condiciones fijas, siendo estas: las relaciones de equilibrio, balances de materia y energía. Al tener ciertas condiciones de temperatura y de presión, se encuentra la coexistencia de fases líquida y vapor en equilibrio, en donde se cumplen un equilibrio físico ó termodinámico, y se satisfacen las siguientes condiciones:

a) Las temperaturas de la fase líquida y vapor son iguales. De no existir esto, existiría un gradiente de temperaturas, lo cual resultaría en flujo de calor entre fases.

$$T^L = T^V \quad (1.10)$$

b) La presión de ambas fases es igual, lo cual implica que no hay un desplazamiento de la frontera que divide a las fases.

$$P^L = P^V \quad (1.11)$$

c) La tendencia a escapar de cada componente en la fase líquida a la fase vapor es igual a su tendencia a escapar de la fase vapor a la líquida. Lo cual se cuantifica por medio de los potenciales químicos, de no existir, se tendría acumulación de materia en alguna fase.

$$\mu^L = \mu^V \quad (1.12)$$

Aquí se logra el equilibrio y la mayor transferencia de materia en el proceso.

1.5.3 SELECTIVIDAD Y COEFICIENTES DE DISTRIBUCION:

Todo proceso de separación de fases, se puede describir en función de un factor de selectividad, el cual relaciona las composiciones de las distintas fases, representandose por:

$$\alpha_{ij} = \frac{z_i^1 / z_i^2}{z_j^1 / z_j^2} \quad (1.13)$$

donde α_{ij} es el factor de separación, los subíndices son los componentes, contenidos en las fases 1 y 2. Si α es 1 no es posible la separación, debido a una fuerza impulsora cero. si $\alpha > 1$ componente i se acumularía más en la fase 1 que en 2 y la concentración de j sería mayor en 2 que en 1. Rearreglando la selectividad para dar la proporción de cada componente en cada fase, se llega a la relación de distribución de equilibrio:

$$K_i = \frac{z_i^1}{z_i^2} \quad (1.14)$$

Los valores de las constantes de equilibrio (K) pueden obtenerse por medio de ecuaciones de estado (Soave, Peng-Robinson, etc); Empíricas (Antoine, Ley de Henry); Métodos de Coeficiente de Actividad (Wilson, Van Laar, Margules, etc); Polinómios en función de temperatura, etc.

1.5.4 ENTALPIAS

Tomando el modelo de gas ideal, este depende de la temperatura solamente, por lo que la entalpía también será solo función de esta, lo que da la siguiente ecuación:

$$H = H_0 + \int_{T_0}^T C_p dT \quad (1.15)$$

Si las corrientes de vapor son ideales las entalpías por mol de vapor son:

$$H_v = \sum (y_i H_i) \quad (1.16)$$

Las entalpías del líquido serán:

$$H_L = \sum (h_i x_i) \quad (1.16a)$$

Para corregir con respecto a los gases reales se le adiciona un término que toma la no idealidad en cuenta.

1.5.5 REGLAS EN MEZCLAS MULTICOMPONENTES LIQUIDO-VAPOR PARA IDEALIDAD

idealidad

- a) Mezclas de isómeros son soluciones ideales.
- b) Mezclas de hidrocarburos alifáticos con cercanos puntos de ebullición están cerca de la idealidad
- c) Mezclas de compuestos cercanos en peso molecular y estructura no se desvían mucho de la idealidad.
- d) Mezclas de alifáticos simples y compuestos aromáticos se desvían poco.
- e) Inertes ($\text{CO}_2, \text{H}_2\text{S}, \text{H}_2, \text{N}_2$) en mezclas las desvían.
- f) Mezclas polares y no polares se desvían fuertemente.
- g) Azeótropos no son ideales.

no idealidad.

1.5.6 PUNTO DE BURBUJA Y ROCIO

Se define el punto de burbuja de una mezcla líquida al punto en el cual a una temperatura y presión dadas, se forma la primera burbuja de vapor, esta cantidad de vapor es tan pequeña que no tiene efecto alguno sobre la composición del líquido.

El punto de rocío es aquel en el cual la combinación de temperatura y presión son tales que se condensa la primera gota de líquido, siendo esta diferencial y por lo tanto la composición global del vapor es prácticamente constante.

Las relaciones de equilibrio describen el estado de equilibrio en un sistema de dos fases con N componentes:

$$K_i = \frac{y_i}{x_i}$$

(1.17)

$$\sum_{l=1}^{Nc} y_l = 1 \quad (1.18)$$

$$\sum_{l=1}^{Nc} x_l = 1 \quad (1.19)$$

De donde se tiene que el criterio para la temperatura de burbuja es:

$$\sum_{l=1}^{Nc} K_l x_l = 1 \quad (1.20)$$

y el criterio para la temperatura de rocío:

$$\sum_{l=1}^{Nc} y_l / K_l = 1 \quad (1.21)$$

Estas ecuaciones se resuelven por prueba y error, por depender la constante de equilibrio tanto de la temperatura y presión como de la composición con algún método iterativo.

METODOLOGÍAS PARA DESTILACION.

" No pretendo que pienses como yo pienso ni tampoco que aceptes lo que lees como si fuera la verdad, solo estoy comunicando lo que pienso, pues es una forma de compartir la vida con los demas".

José Hernández Trebal

2.1 CLASIFICACION^(7,20,30,38)

En la actualidad se cuenta con dos tipos de métodos, ya sea para resolver los problemas de diseño, optimización y/o simulación en las columnas de destilación, los cuales son:

2.1.1 METODOS CORTOS^(8,9,11,12,14,16,18,21,26,27,33,35,37,38)

Los métodos cortos, son aquellos que en base a consideraciones en los balances de energía, materia, relaciones de equilibrio y datos termodinámicos simplifican el problema, dando resultados aproximados, los cuales se utilizan en estudios preliminares de costo, evaluaciones de variables de operación, separaciones que no requieran purezas precisas (ej: contaminantes > 0.5% en peso), diseños detallados para sistemas ideales ó cercanos a la idealidad y diseños en los cuales los datos de equilibrio no son accesibles.

Los métodos cortos, a su vez se pueden clasificar de acuerdo a la forma en que se representa el problema en:

a) METODOS GRAFICOS

En estos encontramos el conocido Mc Thiele y el Ponchon-Savarit, que suponen volatilidades constantes y flujos molares iguales obteniendo de manera rápida y confiable de acuerdo a los datos empleados R_m , R_{op} , Número de etapas, N_r , composiciones, etc. Es aplicado casi exclusivamente a sistemas binarios.

b) METODOS ANALITICOS

Aquí se encuentran los métodos más conocidos y utilizados para mezclas multicomponentes como son Fenske, Underwood, Gilliland, los cuales calculan algunos parámetros y que juntos dan métodos nuevos (F.U.G.), a los cuales se les han adicionado correcciones para generalizarlos ó acercarlos más a los valores correctos (Treybal, Van Winkle - Todd, Shiras, etc.)

Estos son bastantes comunes y fáciles de utilizar, pero tienen una gran cantidad de suposiciones, por ejemplo la ecuación de Fenske que se basa en componentes claves (los cuales si se ven modificados darían una serie de resultados distintos); la volatilidad constante ó promedio y flujos molares constantes afectan por ejemplo en la ecuación de Underwood para el cálculo de R_m ya que no da una gran confiabilidad para un rango amplio de ebullición.

c) METODOS DE GRUPO

La posibilidad de extrapolar todos los fenómenos de transferencia de masa por medio de zonas generales en los equipos, dio lugar a estos métodos los cuales se basan en un *factor de absorción* o *factor de desorción*, que aplicándolos a cada etapa son rigurosos, pero si se toman a los sistemas en 3 zonas (absorción, desorción y alimentación), proporciona resultados aproximados. Estos métodos han sido desarrollados para relacionar las corrientes de entrada y salida con el número de etapas de la cascada sin considerar los detalles de cambios de temperatura y composiciones individuales. Kremser, Edmister, Smith-Brinkley, Horton-Franklin, etc. dieron una serie de métodos fáciles de usar y rápidos en los que se toman flujos constantes y se obtienen resultados terminales rápidos.

2.1.2 METODOS RIGUROSOS^(1,7,9,10,21,22-24,26,28,39,35-37,43)

La necesidad de representar más exactamente los sistemas de destilación, dio origen a estos métodos, utilizándose en aquellos casos en los que se requiere gran pureza, en sistemas con un gran número de componentes ideales ó no ideales, en sistemas que se conoce una gran cantidad de datos de equilibrio; en los que se tiene volatilidad entre los componentes ligero y pesado mayor a 1.3 ó si algunos de los componentes se encuentra cerca de la presión crítica.

Se conocen como métodos rigurosos aquellos que resuelven los balances de materia, energía, relaciones de equilibrio y sumatorias de fracciones mol (MESH del inglés), de manera simultánea por complicados algoritmos matemáticos debido a la no linealidad de las ecuaciones.

Históricamente, la solución de este conjunto de ecuaciones ha dependido del desarrollo de la computación, puesto que los métodos inicialmente reducían un sistema multicomponente a un equivalente binario por medio de componentes clave. No fue hasta 1930 que Lewis-Matheson y Thiele-Geddes, publicaron métodos que resolvían el conjunto de ecuaciones y en 1950 cuando estos métodos fueron fuertemente implantados con la llegada de computadores digitales de gran capacidad y de lenguajes especializados (FORTRAN, PASCAL, BASIC, etc), además de software y hardware alternados con métodos matemáticos desarrollados para la solución de estos sistemas no lineales de ecuaciones (método de Thomas, Broyden, etc).

Existen dos clasificaciones para los métodos rigurosos, una es de acuerdo a las variables de entrada y el otro por la forma en que se agrupan los sistemas de ecuaciones para su solución.

Para la primera clasificación, se tiene que se dividen en lo siguiente:

a) METODOS DE DISEÑO

En esta división se tienen el método de Lewis-Matheson, Lewis-Sorel, etc. En que las especificaciones se inician en términos de los componentes clave en los productos terminales y la concentración de los demás componentes será supuesta. Los cálculos de las etapas vienen de las terminales de la columna a la alimentación, calculando por etapa los balances de materia, energía y relaciones de equilibrio.

b) METODOS DE APRECIACION

Se iniciaron con Thiele-Geddes, en los cuales se especifican número de etapas, reflujo y velocidades de separación, dando una matriz de tipo tridiagonal que resolviendo da las composiciones.

A continuación, se dan las variables de entrada a los métodos más comunes:

<u>M. Diseño.</u>	<u>M. Apreciación</u>
<u>Entrada:</u>	<u>Entrada:</u>
Alimentación	Número de etapas
Composición fondos	Etapa alimentación
Composición destilado	Razón destilado
R/Rm	Alimentación
	Razón reflújo
<u>Salida:</u>	<u>Salidas</u>
Número de etapas	Composición destilado
Etapa alimentación	Composición fondos
Razón destilado	
Razón reflújo	

En la segunda clasificación, la diferencia es en el modelo matemático y variables de iteración usada, así como la forma de agrupar y resolver las ecuaciones.

MÉTODOS DE DESCOMPOSICION DE ECUACIONES

Las ecuaciones MESH, se agrupan por tipo ó etapas, se necesitan estimados iniciales de las variables de iteración, y así este grupo de ecuaciones se resuelven, en un orden prescrito, manteniendo el resto fijo, repitiendo el procedimiento hasta la convergencia.

Para el procedimiento por etapa, se tienen incluidos los métodos de Lewis-Matheson, Thiele-Geddes y Theta. resolviendo las ecuaciones por etapa a partir de los extremos de la columna.

La descomposición por tipos es muy usada, aquí se suponen las temperaturas y flujos por etapas, combinando las ecuaciones de materia con las de equilibrio para dar un subconjunto de ecuaciones, las cuales son linealizadas manteniendo flujos y valores de K invariantes y se resuelven para composiciones de etapa ó flujo de componentes. En caso de que K sea función de la composición, se repiten los cálculos hasta una consistencia entre este conjunto de variables.

Con estas composiciones , se resuelven las ecuaciones de energía y las sumatorias separada ó simultaneamente para dar nuevos valores de temperaturas de platos y flujos, todo el procedimiento se repite hasta llegar a una convergencia predefinida.

En estos métodos encontramos que los más conocidos son el de Admanson y Pontinen (1958), Sujata ó de suma de flujos (1961), Wang-Henke(1966), Tomich (1970), etc.

c)METODOS DE RELAJACION

Estos métodos son diferentes a todos los tratados anteriormente, debido a que las ecuaciones MESH, se resuelven en estado estacionario. El primero en usar este método fue Rose et al. (1958), aquí las ecuaciones de materia se escriben en función del tiempo. Los cálculos se inician con valores supuestos de x_i , temperatura, flujos de liquido y vapor, calculando nuevas temperaturas y nuevos flujos a partir de las ecuaciones S y H, repitiendo el proceso hasta que los cambios de las fracciones mol no sea mayor a la tolerancia especificada. Estos métodos son muy estables y siempre convérgen.

d)METODOS DE SOLUCION SIMULTANEA

Aquí se linearizan las ecuaciones MESH y se resuelven simultáneamente por medio de la técnica de Newton-Raphson. Se genera una matriz Jacobiana, que tiene un gran número de derivadas parciales, pero que no todas se pueden encontrar analíticamente, lo que da un gran gasto en tiempo en resolverla. Para este método es importante un buen estimado inicial, los cuales se puede generar por medio de métodos cortos.

Entre los trabajos más importantes se encuentran los realizados por Ishii y Otto (1973), Naphtali-Sandholm (1971), Goldstein-Stanfield (1970).

2.2 SELECCION

En base a lo anterior, se observa que hay una gran variedad de métodos, lo cual daría para una comparación de los mismos un trabajo casi imposible, por la serie de modificaciones existentes. Además recordando que el objetivo del trabajo es analizar las diferencias entre métodos cortos y rigurosos, se escojeran solo dos métodos para realizar la comparación (uno corto y uno riguroso).

Se han seleccionado entre los métodos cortos el método de grupo de Smith-Brinkley, por poder utilizarse tanto en simulación como diseño y predecir condiciones de operación, lo que otros métodos (F.U.B.) no toman en cuenta, así como por ser fácil de entender y utilizar. Para los métodos rigurosos debido al énfasis que se ha dado por la simulación en cambio se ha escogido un método que es uno de los más conocidos y que sirve de buena base para la comprensión de otros algoritmos más complicados como es el método de Wang-Hunke. Otra razón para seleccionar estos algoritmos es que son muy útiles para mezclas de hidrocarburos, que es uno de los ejemplos típicos para conocer esta operación.

2.3 METODO DE SMITH-BRINKLEY^[P.41,48,37,39]

Este método es una extensión del desarrollo de Kremser. Se basa en una solución analítica de ecuaciones de diferencias finitas que representan la relación de las composiciones de las zonas terminales con cualquier número de etapas. Smith y Brinkley supusieron para su método que los coeficientes de distribución (K_i) y los flujos de fases son constantes. Tomando en cuenta esto, las ecuaciones para cada componente en cada zona de la columna (la etapa 1 es la del fondo y la N es la de arriba, fig 2.1), se plantean para dos secciones; las soluciones de las ecuaciones de diferencias para cada una de estas pueden ser combinadas con un balance alrededor de la etapa de alimentación dando una ecuación aplicable a toda la columna.

Escribiendo un balance para cualquier componente alrededor de la etapa $n+1$ y eliminando las y 's, reorganizando para tener el modelo de ecuaciones de diferencias, para un componente en la sección superior de la columna:

$$x_{n+2} - \left(\frac{K_{n+1}V_{n+1}}{L_{n+2}} \right) x_{n+1} + \frac{K_n V_n}{L_{n+2}} x_n = 0 \quad (2.1)$$

se omite el subíndice del componente por simplicidad. Rearreglando la ecuación con coeficientes constantes para una simple solución matemática.

$$\left[E^2 - \left(\frac{KV}{L} + 1 \right) E + \frac{KV}{L} \right] x_n = 0$$

la solución tiene dos raíces KV/L y 1 , de donde puede ser escritas para cada sección como:

a) Sección del refinado:

$$x_n = C_1(S_n)^n + C_2 \quad (2.2)$$

b) Sección inferior ó del extracto:

$$x_m = C_3(S_m)^m + C_4 \quad (2.3)$$

Realizando un balance de componentes alrededor de las etapas N y 1 respectivamente y combinándolas con las ecuaciones alrededor de la etapa de alimentación:

$$\frac{(1 - S_n^{N-M}) + R(1 - S_n) + q_r(S_n^{N-M} - S_n) + hq_f S_n^{N-M}(1 - S_m^M)}{(1 - S_n^{N-M}) + R(1 - S_n) + hS_n^{N-M}(1 + S_n^{N-M}) + h\left(\frac{1+R}{1+qR}\right) S_m^M S_n^{N-M}(1 - S_m)} \quad (2.4)$$

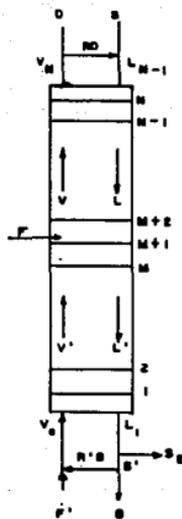


FIG 2.1 MODELO DE EQUIPO PARA DEDUCCION ECUACION GENERAL

La deducción se encuentra en el apéndice A. Esta ecuación predice la fracción de cualquier componente que sea recuperado en los fondos de la columna.

Para aplicarla a destiladores, se tiene que como la transferencia es más continua, la ecuación (2.4), se simplifica considerando que se tienen promedios ó valores efectivos de agotamiento. De ésto, teniendo que es para una columna con condensador total y una alimentación, tenemos que :

$$q_0 = q_r = R' = g = 0$$

lo cual da, despues de combinar el segundo y cuarto términos en el denominador :

$$f = \frac{(1 - S_n^{N-M}) + R(1 - S_n)}{(1 - S_n^{N-M}) + R(1 - S_n) + hS_n^{N-M}(1 - S_m^{M+1})} \quad (2.5)$$

Aquí se tiene que de (2.4) $S = F' = R' = S_k = 0$ y puede además obtener los valores del rehervidor y condensador. Lo cual se ve en la fig.2.2

De esta ecuación, se tiene que :

$$R = L_i / D_{sp} \quad (2.6)$$

$$f = (Bxb / Fxf) \quad (2.7)$$

y como está dividida en 3 zonas, se tienen que los factores de agotamiento son para cada una de estas secciones:

Para la zona arriba de la alimentación:

$$S_{n,i} = K_i V / L \quad (2.8)$$

$$K_i = f(T_n) \quad (2.9)$$

$$L = R \cdot D_o \quad (2.10)$$

$$V = D - L \quad (2.11)$$

Para la zona abajo de la alimentación:

$$S_m = K_L \cdot V' / L' \quad (2.12)$$

$$K_L = f(T_m) \quad (2.13)$$

$$V' = V - qF \quad (2.14)$$

$$L' = L + (1-q)F \quad (2.15)$$

el valor h es una cantidad que depende de la condición térmica de la alimentación.

Si es en su mayoría líquida la alimentación:

$$h_L = \frac{K_L \cdot L}{K_L \cdot L} \left[\frac{1}{1} - \frac{S_m}{S_m} \right]_L \quad (2.16)$$

Si es principalmente vapor:

$$h_L = \frac{L}{L} \left[\frac{1}{1} - \frac{S_m}{S_m} \right]_L \quad (2.16a)$$

Para mezclas líquido-vapor, se toma en cuenta la cantidad evaporada para tomar un valor de h promedio.

$$h_L = x_i h_L^L + y_i h_L^V \quad (2.16b)$$

Se observa que los factores de agotamiento depende de una temperaturas T_N y T_m , las cuales se conocen como *temperaturas efectivas*, puesto que como se dijo se considera a las zonas arriba y abajo de la columna como un solo plato en cada una, con lo cual para tomar en cuenta un mejor efecto se toma un promedio aritmético en el inicio y fin de la columna:

$$T_N = (T_N + T_{N+1})/2 \quad (2.17)$$

$$T_m = (T_{m+1} + T_1)/2$$

Donde se evalúan la T_N y T_1 con el punto de rocío calculado del producto superior y el punto de burbuja de los productos del fondo, lo cual deja a T_{m+1} como única variable a modificar, tomándose como temperatura inicial la temperatura de alimentación y modificándola hasta encontrar un valor tal que se llegue a la convergencia.

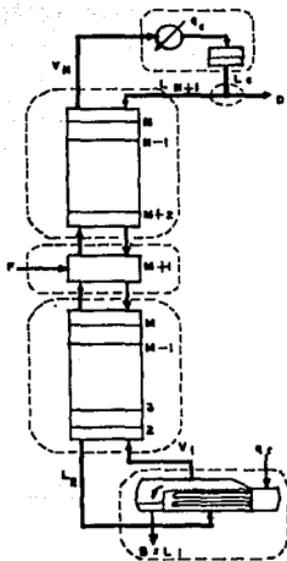


FIG 2.2. MODELO COLUMNA SIMPLE CON CUNDENSADOR TOTAL

Otra consideración que se hace es la de *derrame molar constante* en cada zona, puesto que estos valores L , V , L' , V' se mantienen constantes en la zona correspondiente, variando su valor de acuerdo a la condición de la alimentación. Esta simplificación indica que los calores de mezclado son cero ó despreciables para los componentes en la mezcla ($L_i=L_{m+1}$ por ejemplo) y que los calores latentes de vaporización son iguales ó prácticamente iguales (por ejemplo $V_i=V_{m+1}$).

Para columnas con condensadores parciales (2.5) no es estrictamente aplicable, puesto que ignora cualquier posible cambio entre las composiciones del producto y del reflujo. Sin embargo el efecto de un condensador parcial podría aproximarse teniendo en cuenta que funciona como otra etapa de equilibrio y por ende incrementar N en 1.

El criterio de convergencia es que la suma de las fracciones mol en el destilado sea igual al destilado real, esto es:

$$\sum D_i = D_{\text{calculado}} \quad (2.18)$$

$$\epsilon = > (D_{\text{calculado}} - D_{\text{esp}}) / D_{\text{esp}} \quad (2.19)$$

donde ϵ es una tolerancia preestablecida, por ejemplo $\epsilon = 1 \times 10^{-5}$. De aquí para encontrarla temperatura de la alimentación se puede utilizar un método numérico tal como el de Newton-Raphson, Falsa posición, Müller, etc. Para el caso de usar el método de Falsa Posición, la ecuación para encontrar la temperatura sería:

$$T_F^{k+1} = T_F^k - \frac{\epsilon^k (T_F^{k-1} - T_F^k)}{\epsilon^{k-1} - \epsilon^k} \quad (2.20)$$

Para el caso de diseño de columnas de destilación, este método puede utilizarse también, pero se utiliza más frecuentemente en la simulación de torres.

El procedimiento consta de dos ciclos para resolver los problemas, uno exterior de temperaturas terminales y otro interior de temperatura del plato de alimentación. Como se necesitan unas temperaturas iniciales de rocío y de burbuja y no se conocen por no saber las composiciones del destilado y fondos se hace una primera suposición de separación y se calculan las composiciones, ajustando el valor de E_d para que concuerde con el valor especificado (con el método theta de convergencia).

El procedimiento es aplicable a mezclas ideales y no ideales además de que se puede representar la constante de equilibrio en cualquier forma.

Al concluir con el método se cuenta con 3 puntos que pueden servir de base para un método riguroso: las temperaturas terminales y la de el plato de alimentación. Además de que las predicciones que realiza a un determinado reflújo diferente al mínimo ó al total, siendo posibles tomar también estos casos. Esto le da una gran ventaja para la simulación y aun diseño sobre el método corto más utilizado (F.U.G.). Con los valores obtenidos de temperaturas terminales, es posible entonces calcular las cargas térmicas necesarias para el condensador y el rehevador.

Para un condensador parcial, el balance de calor esta representado por:

$$Q_c = V_1 H_{v1} - D H_b - H L_o \quad (2.21)$$

y para uno total:

$$Q_c = V_1 (H_{v1} - H_b) \quad (2.22)$$

y para el rehevador, con un balance para toda la columna se tiene que:

$$Q_r = D H_b + B H_b + Q_c - F H_r \quad (2.23)$$

Los posibles problemas que se pueden tener es que si $S = 1$ esta ecuación toma un valor 0/0 y el valor de f se obtiene por diferenciación del numerador y denominador (Regla de L'Hospital) y evaluando nuevamente la nueva fracción así obtenida. El que S tome un valor de 1 implica que se detiene la transferencia de materia en la torre, ya que se llega a un equilibrio termodinámico.

2.4 METODO DE WANG-HENKE^(1,10,23,30,42)

Antes de iniciar con la explicación de los métodos, iniciaremos con algunos conceptos necesarios para comprender el modelo matemático.

2.4.1 MODELO TEORICO DE UNA ETAPA DE EQUILIBRIO.

Es aquella etapa j (fig 2.3) y en donde se supone un mezclado perfecto en el plato, por esta razón, el líquido que entra al plato por la parte superior (L_{j-1}) y el vapor que entra al plato por abajo (V_{n+1}), se considera que se mezclan de forma tal que se alcanza un equilibrio termodinámico en la mezcla resultante. Entonces, esta mezcla se separa en una corriente de vapor (V_j) y una corriente líquida (L_j) que se encuentran en equilibrio.

Puede también transferirse Q_j de ó a la etapa que tendrán un signo (+) si entra a la etapa y (-) si sale de ella, además las ecuaciones que describen a una etapa de equilibrio son las ecuaciones MESH.

Toda sobrepresión que existiese en la alimentación se eliminaría por medio de una válvula adiabáticamente y para los flujos de vapor igualmente con válvulas, mientras que para los líquidos con variación de la carga hidrostática.

Se pueden tener además para este modelo calentadores y enfriadores interetapas pero no admite bombas de calor.

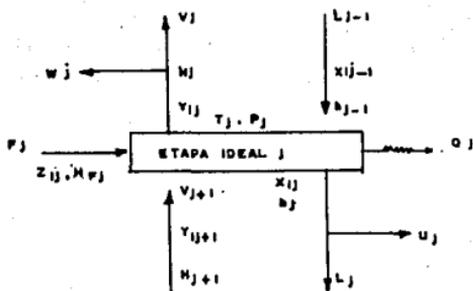


FIG 2.3 MODELO DE UNA ETAPA DE EQUILIBRIO.

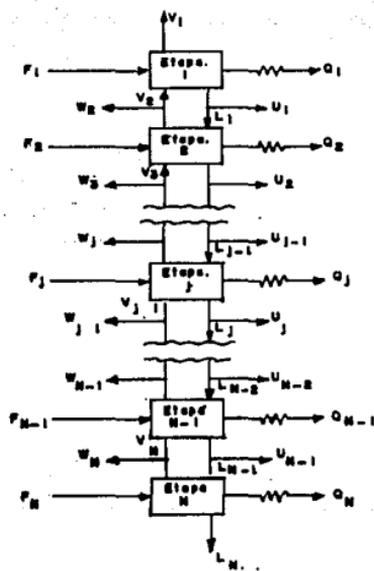


FIG 2. 4 CASCADA A CONTRACORRIENTE DE N ETAPAS

2.4.1 METODO DE PUNTO DE BURBUJA

A continuación se presenta el desarrollo de Wang-Henke. Realizando los balances alrededor de cada etapa:

Ecuación M:

$$M_{i,j} = L_{j-1}x_{i,j-1} + V_{j+1}y_{i,j+1} + F_{j,z_i} - (L_j + U_j)x_{i,j} - (V_j + W_j)y_{i,j} = 0 \quad (2.24)$$

Relaciones de equilibrio:

$$E_{i,j} = y_{i,j} - K_{i,j}x_{i,j} = 0 \quad (2.25)$$

Suma de fracciones mol:

$$(S_y)_j = \sum_{i=1}^c y_{i,j} - 1 = 0 \quad (2.26)$$

$$(S_x)_j = \sum_{i=1}^c x_{i,j} - 1 = 0 \quad (2.26a)$$

Balance de energía (ecuación H):

$$H_j = L_{j-1}h_{j-1} - (V_j + W_j)h_j - (L_j + U_j)h_j + V_{j+1}H_{j+1} + F_{j,H} - Q_j = 0 \quad (2.27)$$

Las ecuaciones (2.26) y (2.24) se combinan y tomando en cuenta que $\sum z_i = 1$ sumando para todos los componentes y todas las etapas de 1 a j da (Fig 2.4)

$$L_j = V_{j+1} + \sum_{k=1}^j (F_k - W_k - U_k) - V_1 \quad 2 \leq j \leq n \quad (2.28)$$

Las ecuaciones de materiales pueden ser reducidas a una matriz tridiagonal, modificando las ecuaciones de materiales substituyendo (2.25) en (2.24) para eliminar y, y substituyendo (2.28) en (2.24) para eliminar L, de esta forma las ecuaciones para calcular y y L son divididas de las otras ecuaciones. El producto para cada componente y etapa es:

grande de memoria, puesto que solo se guardan los valores de la tridiagonal; además de que evita la recomposición de errores de ruptura por no aparecer casi diferencias entre cantidades casi iguales. .

El método de Thomas, se vale de dos cantidades auxiliares p_j y q_j las cuales son calculadas inicialmente para p_1 y q_1 hacia adelante con incrementos j , lo cual es:

$$\begin{aligned}
 p_1 &= C_1/B_1; \quad q_1 = D_1/B_1 \\
 p_j &= C_j/(B_j - A_j p_{j-1}), \\
 &\qquad\qquad\qquad 2 \leq j \leq n-1 \\
 q_j &= (D_j - A_j q_{j-1}) / (B_j - A_j p_{j-1}) \\
 &\qquad\qquad\qquad 2 \leq j \leq n
 \end{aligned}
 \tag{2.35}$$

x_{1n} se obtiene del último valor de q_n y después atrás con decremento j haciendo x_{ij} así:

$$\begin{aligned}
 x_{1n} &= q_n \\
 x_{i,j} &= q_j - p_j x_{i,j-1} \\
 &\qquad\qquad\qquad 1 \leq j \leq n-1
 \end{aligned}
 \tag{2.35a}$$

Se asume un perfil inicial de los flujos de vapor y de temperatura, así como definir todas las P_j, U_j, W_j, Q_j excepto Q_c y Q_r , T_{Fj} , P_{Fj} , z_{ij} y tipo de condensador, $Desp$, Rop , número de etapas, Nr . De el método de Thomas se obtienen las x_{ij} y si fuesen mayor a 1 ó menor de 0, se usan las siguientes relaciones:

$$(x_{i,j})_{nueva} = \frac{(x_{i,j})_{vieja} + 0}{\sum x_{i,j}} \quad x_{i,j} > 1 \tag{2.36}$$

$$(x_{i,j})_{nueva} = \frac{(x_{i,j})_{vieja} + 1}{\sum x_{i,j}} \quad x_{i,j} < 0 \tag{2.36a}$$

Aunque en el artículo original no se menciona una normalización de las x_i , ésta es necesaria, para que se cumpla (2.26)

$$(x_i)_\text{normalizada} = \frac{x_i}{\sum_{i=1}^c x_i} \quad (2.37)$$

Estos valores normalizados, se usan para todos los subsecuentes cálculos que involucren a x_i en la iteración.

Si las K 's se expresan como un polinomio función de la temperatura:

$$K_i = a_i + a_2 T_j + a_3 T_j^2 + a_4 T_j^3 \quad 1 \leq i \leq N$$

Lo que provoca que la ecuación de suma de fracciones mol sea una función de la temperatura:

$$S_j = S_j(T_j)$$

$$S_j(T_j) = \sum_{i=1}^m \left(\sum_{l=1}^4 a_{l,i} T_j^{l-1} \right) x_{i,j} - 1 \quad 1 \leq j \leq N \quad (2.38)$$

Para la solución de esta ecuación, se pueden emplear diversos métodos iterativos tal como Newton-Raphson, falsa posición, etc. podrán ser utilizados, pero el método de Muller, se usó originalmente por los autores. Con esto se obtiene un nuevo conjunto de temperaturas para los subsecuentes cálculos.

Los balances de energía necesitan el cálculo de las entalpías, las cuales son función a su vez de la temperatura, por lo tanto usando también un polinomio para representarlas.

$$H_j = \sum_{i=1}^m x_{ij} (b_1 + b_2 T_j + b_3 T_j^2 + b_4 T_j^3)$$

$1 \leq j \leq N$

(2.39)

$$h_j = \sum_{i=1}^m x_{ij} (c_1 + c_2 T_j + c_3 T_j^2 + c_4 T_j^3)$$

$1 \leq j \leq N$

las entalpías de alimentación se especifican de acuerdo a la condición térmica de la misma.

El cálculo de los calores de el rehevridor y del condensador se efectua de la siguiente forma:

a) Condensador.- despejando de (2.27) Q_c y tomando el balance para la etapa 1.

$$Q_c = V_2 h_2 + H_1 - (L_1 + U_1) h_1 - (V_1 + W_1) h_1$$

(2.40)

donde V_2 es obtenida:

$$V_2 = V_1 + L_1 - F_1$$

(2.41)

y L_1, W_1, U_1, V_1 son especificados.

b) Rehevridor.- Sumando para todas las etapas (2.27) se determina la carga térmica del rehevridor, lo que da:

$$Q_R = \sum_{j=1}^N (F_j H_j - U_j h_j - W_j H_j) - \sum_{j=1}^{N-1} Q_j - V_N h_N - L_N h_N$$

(2.42)

Para obtener los nuevos flujos de vapor se obtienen mediante una modificación al balance de energía, combinando (2.27) y (2.28) dos veces para eliminar los flujos de líquido L_{j-1} y L_j , donde resultan la siguiente ecuación:

$$\alpha_j V_j + \beta_j V_{j+1} = \gamma_j$$

(2.43)

Donde se definen las variables α_j y β_j como:

debido a que el cálculo para la determinación de temperaturas por medio del punto de burbuja, es muy sensible a la composición en la fase líquida y por lo tanto el balance de energía es más variable a estos cambios que a los flujos interetapas.

Otro problema importante es el de la convergencia, puesto que como en si es un método de sustitución directa, la velocidad es impredecible y depende mucho de los estimados iniciales.

Ademas se ha presentado que para mezclas fuertemente no ideales, llega a no converger ó lo hace difícilmente.

En aquellos equipos en los cuales el separador presenta el comportamiento de absorbedor ó desorbedor en una de las secciones y de fraccionador en la otra tambien no llega a converger.

La gran ventaja de este método es que para mezclas de hidrocarburos adyacentes, es de buena confiabilidad.

2.5 METODO THETA DE CONVERGENCIA ^[21,22]

Para que el destilado calculado a partir de los balances de materia concordara con el valor especificado, en aquellos casos en que no fuera así. Holland y colaboradores desarrollaron un método arbitrario de corrección para ajustar las moles del destilado, aprovechando la relación:

$$d_i = \frac{Fz_i}{\left[1 + \frac{b_i}{d_i} \right]} \quad (2.47)$$

$$D_{esp} \neq \sum_{i=1}^{N_c} d_i \quad (2.48)$$

propusieron que si ocurría (2.48), se forzara la concordancia por medio de un valor Θ , tal que se cumpliera con esto. A continuación se presenta el método.

Si se cumple (2.49), encontrar un valor θ , tal que:

$$De_{sp} = \sum_{i=1}^{Nc} d_i = \frac{Fz_i}{\left[1 + \theta \frac{b_i}{d_i} \right]} \quad (2.49)$$

el valor de θ , que se usa para el cálculo es el mismo para todos los componentes. Se debe de hallar este valor por medio de un procedimiento iterativo, Holland además recomienda que se suponga un valor de θ inicial igual a 1 para converger siempre en la raíz positiva de la función.

Planteando el método de Newton-Raphson queda de la siguiente forma:

$$g(\theta) = \sum_{i=1}^{Nc} \frac{Fz_i}{\left[1 + b_i/d_i \right]} - De_{especificado} \quad (2.50)$$

$$g'(\theta) = - \sum_{i=1}^{Nc} \frac{Fz_i (b_i/d_i)}{\left[1 + \theta b_i/d_i \right]^2} \quad (2.50a)$$

$$\theta_{n+1} = \theta_n - \frac{g(\theta)}{g'(\theta)} \quad (2.50b)$$

al haber encontrado el valor θ , tal que se cumpla (2.49), se encuentran los moles de fondos con:

$$b_i = Fz_i - d_i \quad (2.51)$$

El método theta, proporciona un ajuste conveniente a los cálculos de balance de materia en la columna.

ALGORITMOS Y METODOS NUMERICOS.

" La verdad os hará libres ... "

Jesucristo

3.1 ALGORITMOS.

A continuación se presentan los algoritmos de los métodos empleados así como los diagramas de flujo para la fácil comprensión de los métodos. Se considera en los dos métodos que la presión en la torre es constante ($\Delta P \approx 0$) y además en la alimentación tampoco existe diferencia de presión con respecto a la columna. Las constantes de equilibrio pueden ser representadas por un polinomio en función de la temperatura.

3.1.1 METODO DE SMITH - BRINKLEY

Los pasos a seguir en este método son los siguientes:

a) Suministrar los datos de presión de operación, condición térmica de la alimentación (P_r , T_r , z_i , F ó en su caso Q); cantidad destilada (D_{esp}), $R_{operacion}$, número de componentes, etapas teóricas, etapa de alimentación, Componentes clave ligero, pesado y el tipo de condensador de la torre.

b) Se supone una separación inicial y se ajusta con (2.50) a (2.50b)

c) Obtener de ser necesario Q ó T_r ó ψ con (1.3), (1.7) a (1.7c) ó (1.20) ó (1.21)

d) Calcular L , L' , V , V' con (2.10), (2.11), (2.14), (2.15)

e) Se calcula con (1.20) y (1.21) unas temperaturas de rocío y burbuja iniciales T_{ro} y T_{bo} .

f) Con la temperatura de alimentación se supone una temperatura de plato inicial, $T_r = T_{m+1}$.

g) Se calculan las temperaturas efectivas para cada zona con (2.17) y en base a ellas se calculan los factores de desorción S_{m+1} y S_n (2.8), (2.12) y según la condición térmica calcular h_i .

h) Calcular el factor de separación f con (2.5).

i) Obtener Bx_i de (2.7) y de ahí d_i con (2.51)

j) Calcular el error con (2.19), si se cumple con la tolerancia continuar con (k), sino calcular una nueva temperatura con (2.20)

k) Calcular una nuevas temperaturas de rocío y burbuja T_r^{n+1} y T_b^{n+1} ; si la diferencia de estas con las anteriores cumple con una tolerancia preestablecida (ϵ), de lo contrario utilizar estas como nuevas variables y repetir los pasos (f) a (j).

l) Checar que $Ed_i = \text{Despecificado}$, sino usar (2.49) a (2.51) y calcular las Q_c y Q_r con (2.21) ó (2.22) y (2.23)

m) Terminar el algoritmo.

3.1.2 METODO DE WANG-HENKE

Este método tiene la dificultad de depender directamente de una buena estimación de temperaturas, por lo cual el método corto se usa como fuente de esos datos. El algoritmo es el siguiente:

a) Suministrar los datos de Presión de operación, condición térmica de la alimentación (P_F, T_r, z_i, F ó en su caso Q); cantidad destilada (D_{esp}), Roperacion, Número de componentes, etapas teóricas, etapa de alimentación, Componentes clave ligero y pesado y el tipo de condensador de la torre. U_j, W_j y todos los Q_j exepto Q_c y Q_r

b) Si es condensador total $U_t \neq 0$, calcular L_N de un balance de materiales, si es parcial entonces $U_t = 0$, especificar V_1 y calcular L_N de un balance de materia y L_1 .

c) Calcular V_2 con (2.41)

d) Del método corto obtener un perfil inicial de temperaturas lineal para cada zona.

- e) Calcular los flujos de vapor de acuerdo a la condición térmica.
- f) Calcular la entalpía de la alimentación con T_F y (1.16) según sea el caso.
- g) $k=1$
- h) Estime todos las K_{ij}
- i) Calcular x_{ij} con método de Thomas (2.29) a (2.35)
- j) Normalizar ó corregir las x_{ij} con (2.36) a (2.37), calcular las y_{ij} con (1.17)
- l) $k=k+1$
- m) Resolver (2.38) con método de Müller.
- n) Calcular las cargas térmicas con (2.39) a (2.42)
- o) Calcular los nuevos V_j con (2.41) y (2.43) a (2.45) y L_j con (2.28).
- p) Verificar criterio de convergencia con (2.46) si se cumple (r), sino seguir.
- q) Utilizar estas nuevos valores de T_j y V_j para repetir pasos (h) a (p)
- r) Checar que $E_d = \text{Despecificado}$, sino usar (2.47) a (2.51)
- s) Finalizar el programa.

3.2 METODOS NUMERICOS^{12,5,101}

Como se ha observado es forzoso evaluar ciertas funciones de manera iterativa por no poder resolverlas analíticamente (funciones como punto de burbuja, flash isotérmico, etc.) y encontrar el valor deseado. Por ello se utilizaron tres métodos numéricos los cuales son: el método de Newton-Raphson, método de Müller y el método de falsa posición ó interpolación lineal. Los métodos se explican a continuación:

3.2.1 METODO DE NEWTON-RAPHSON

Es uno de los métodos más ampliamente utilizados para resolver ecuaciones. Se comienza con una estimación inicial de la raíz x_0 y se extrapola a lo largo de la tangente hasta su intersección con el eje "x", y se toma la siguiente aproximación, continuando esto hasta que los valores de x_i estén suficientemente cercanos entre sí ó el valor de la función sea prácticamente igual a cero. El algoritmo para el método es descrito a continuación:

a) Definir la función = igualar a cero

$$f(x) = 0$$

b) Dar aproximación inicial de $x_0 = x$

c) Evaluar $f(x)$

d) Si error \leq tolerancia entonces (h) , en caso contrario continuar.

e) Evaluar la $f'(x)$

f) Calcular nueva aproximación con:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \quad (3.1)$$

g) Regresar a (d)

h) Fin del algoritmo.

La gran ventaja de este método es que es de los que más rápido converge, pero el inconveniente de tener que conocer y evaluar la derivada de la función.

El diagrama de flujo y la explicación gráfica se observan en la fig 3.1.

3.2.2 METODO DE INTERPOLACION LINEAL

Este método se utiliza por la sencillez y rapidez que tiene. En él se supone que la función es lineal sobre un intervalo (x_1, x_2) y donde las funciones $f(x_1)$ y $f(x_2)$ son contrarias de signo, de la figura 3.2 se observan los triángulos semejantes, de donde se obtiene:

$$x_3 = x_2 - \frac{f(x_2)(x_2 - x_1)}{f(x_2) - f(x_1)} \quad (3.2)$$

de donde se obtiene la nueva aproximación y se interpola nuevamente los valores en los cuales la función cambia de signo, para hallar la nueva aproximación hasta llegar a la tolerancia. El algoritmo es el siguiente:

a) Igualar la función a cero.

b) Dar aproximaciones iniciales de x_1 y x_2 , calculando la función en estos puntos.

c) Calcular x_3 con (3.2)

d) Si $f(x_3) \leq \text{tolerancia}$ (h) sino (e)

e) Si $f(x_3)f(x_1) < 0$ entonces $x_2 = x_3$ sino $x_1 = x_3$

g) Evaluar nuevamente x_3 repetir (d)

h) fin algoritmo.

3.2.3 METODO DE MÜLLER

El método de Müller, es un método que es una generalización del método de Interpolación lineal, puesto que la interpolación que utiliza es cuadrática en lugar de lineal. Se hace que un polinomio de segundo grado encaje en tres puntos cercanos a la raíz (x_0, x_1, x_2) y evaluando la función en estos, de esto se encuentran con cantidades auxiliares los valores de una ecuación cuadrática, la cual se utiliza para dar una mejor aproximación de la raíz. La explicación se hace en base al trabajo desarrollado por Wang-Henke.

a) Definir la función e igualar a cero

b) Tener las aproximaciones $x_0, x_1, x_2, x = x_2$

c) Evaluar $f(x)$, si $f(x) \leq \text{error } (q)$, de lo contrario seguir.

d) Encontrar las cantidades auxiliares b, c, d y evaluar la ecuación cuadrática:

$$k = 3, ds = \frac{x_2 - x_0}{x_1 - x_0}$$

$$b = f(x_{k-3})dk^{-1} - f(x_{k-2})(1 + dk^{-1})^2 + f(x_{k-1})(1 + 2dk^{-1})$$

$$c = f(x_{k-3})dk^{-1} - f(x_{k-2})(1 + dk^{-1}) + f(x_{k-1})$$

Se $b > 0$ tomar el signo más, en caso contrario si $b < 0$ tomar el signo menos, si $b = 0$ es indiferente.

k>3

$$dk = \frac{-2f(x_{k-1})(1+dk-1)}{b \pm \sqrt{b^2 - 4f(x_{k-1})dk-1(1+dk-1)c}}$$

e) Evaluar la nueva aproximación con:

$$x_k = x_{k-1} + (x_{k-1} - x_{k-2})dk$$

f) Regresar al paso (c)

g) Fin del algoritmo.

Este método tiene la ventaja que no se necesita conocer la derivada y requiera pocas iteraciones. El diagrama de flujo y la representación gráfica del método se presentan en la fig. 3.3

3.3 LENGUAJE DE PROGRAMACION^(2,10)

Como se recuerda se a visto que el uso de la computadora ha simplificado y promovido el uso de estos métodos. Pero el tener adecuados lenguajes de programación es tan importante como lo son los algoritmos en sí, puesto que se pueden optimizar, incrementar, actualizar, detectar errores y tener una gran precisión, por lo que es necesario elegir un lenguaje adecuado.

3.3.1 JUSTIFICACION

Entre los lenguajes disponibles (BASIC, FORTRAN, PASCAL, C, etc), se eligió Pascal, debido a que esta siendo ampliamente utilizado en ciencias, por lo fuerte tipeteado, estructuración que dan una fácil comprensión, gran precisión y extensa ayuda para detectar errores, además de poder ser modificable y por el uso de unidades (TFU), no limitan el tamaño del programa y pueden ser utilizadas para diversos programas. Se realizó la codificación en Turbo Pascal v 3.5, de los métodos.

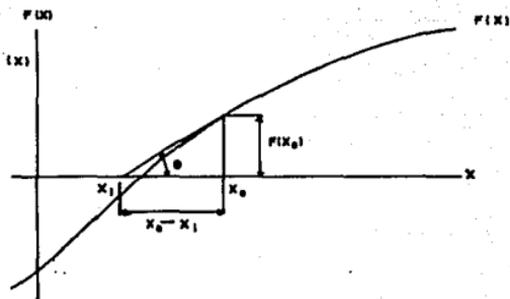


FIG 3.1 METODO DE NEWTON

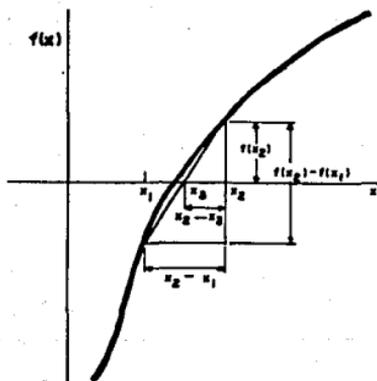


FIG 3.2 METODO FALSA POSICION

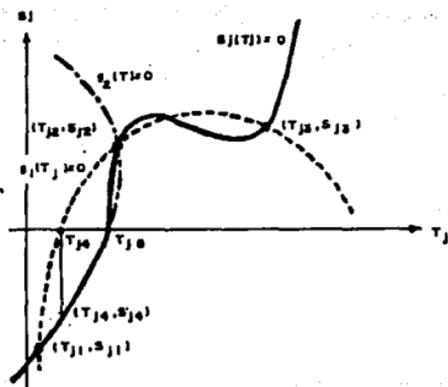


FIG 3.3 METODO DE MULLER PARA TEMPERATURAS

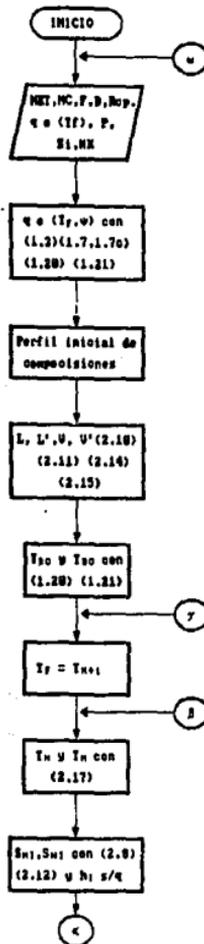
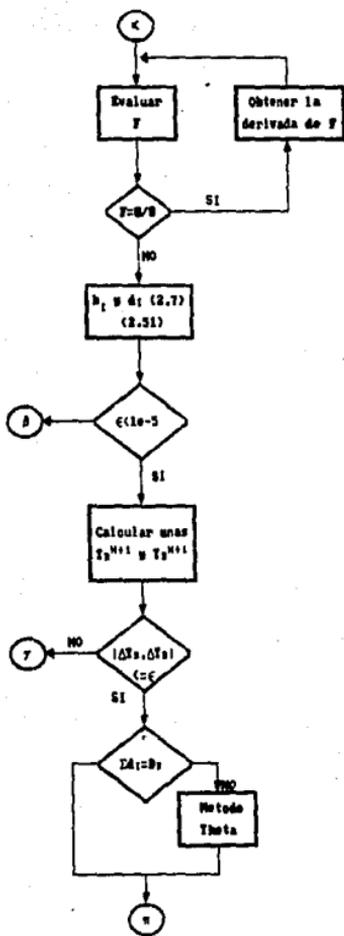
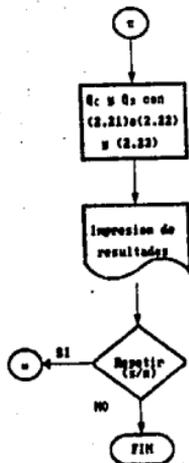


Diagrama (3.1)

ALGORITMO METODO SMITH-BIRDLEY



ALGORITMO SMITH-BRINKLEY.



ALGORITMO SMITH-BRINKLEY.

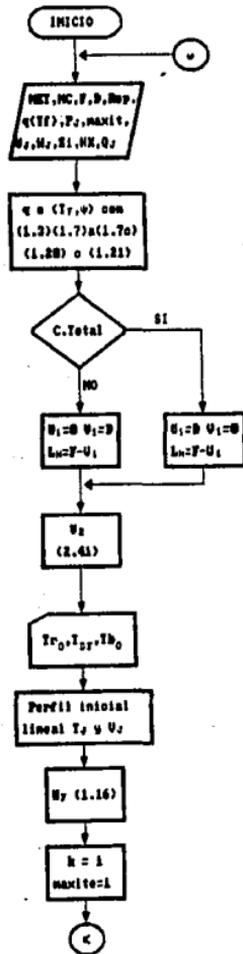
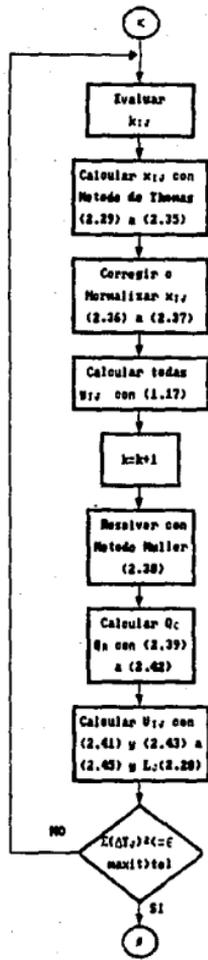
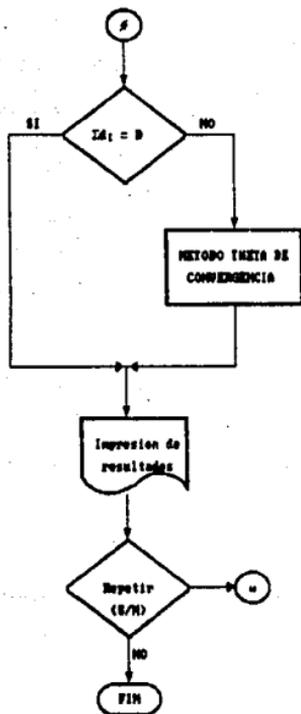


Diagrama (3.2)
ALGORITMO DE WANG-KOZMÉ.



ALGORITMO DE GAUSS-HENKE



ALGORITMO DE MANGIN-EDGE

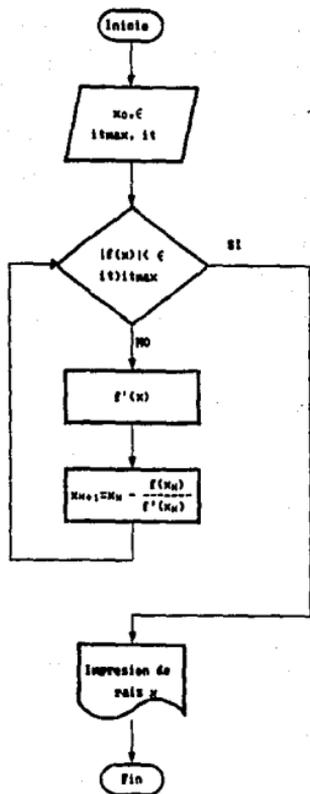


DIAGRAMA (3.3)
ALGORITMO METODO DE NEWTON

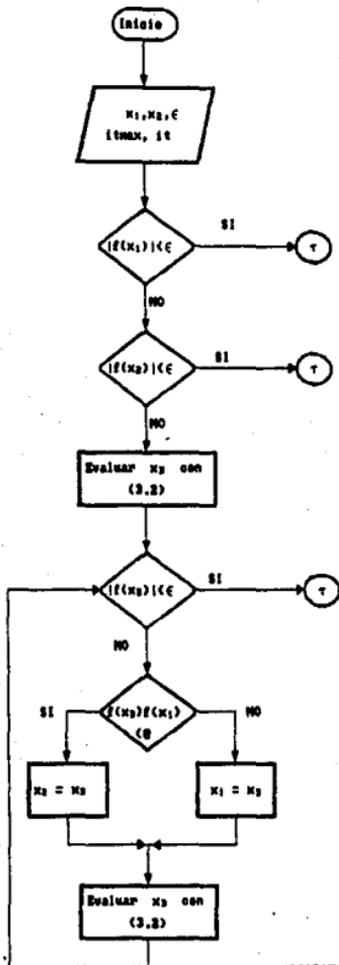


DIAGRAMA (3.4)
ALGORITMO INTERPOLACION LINEAL

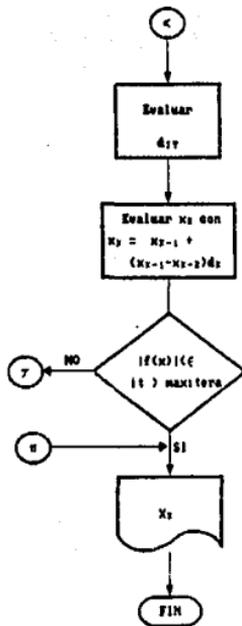
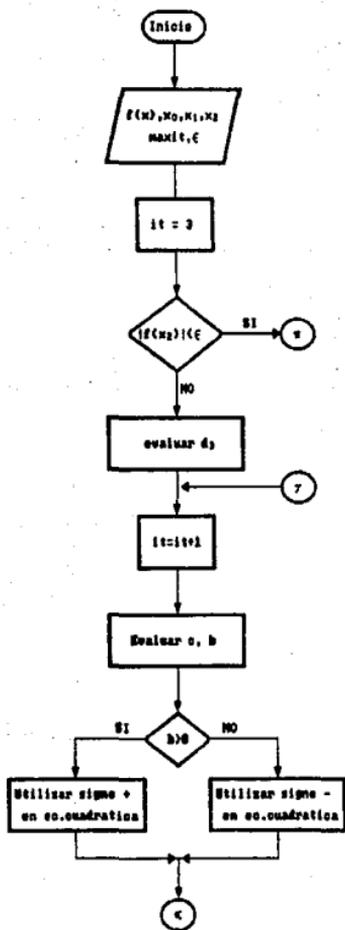


DIAGRAMA (3.5)
ALGORITMO DE MULLER

CAPITULO

4

RESULTADOS.

" Pensar es vivir "

Cicerón

4.1 RESULTADOS

Después de conocer las características de los métodos de seleccionados, se procederá a efectuar una serie de problemas numéricos, para observar el comportamiento de estos para diversos sistemas, variando para cada ejemplo diferentes parámetros y utilizando los dos simuladores que se programaron.

Ejemplo 1: se obtendrá la etapa óptima de alimentación de acuerdo al criterio de máxima recuperación de los componentes clave y para esta etapa óptima se tendrán:

a) Perfil de líquido y vapor vs número de etapas

b) Perfil de temperaturas vs número de etapas.

c) Perfil de concentraciones vs número de etapas.

siendo los parámetros fijos: condición térmica de alimentación, número de componentes, número de etapas teóricas, tipo de condensador, componentes clave y fracciones mol en alimentación. El problema que servirá de ejemplo es el siguiente:

Se tiene una mezcla de hidrocarburos para destilarse en una columna simple. Los componentes de esta son:

<u>Componente:</u>	<u>Alimentación [lbmol/hr]:</u>
C ₁	160
C ₂	370
C ₃	240
C ₄	25
C ₅	5

la alimentación entra a una temperatura de 105 °F. Se desea separar el etano del propano, para ello se opera la columna a 400 psia, esta consta de 13 etapas teóricas (incluyendo un rehervidor y

condensador parciales), la alimentando esta en la etapa 7. Se manejan 1000 lbmol/hr de reflujo a la torre y obteniéndose 530 lbmol/hr de destilado.

Ejemplo 2: Aquí se observaran para una mezcla definida como afectan el tipo de condensador. Esto se evaluara para una etapa de alimentación, reflujo, número de etapas teóricas y condiciones de alimentación fijos obteniendo los puntos (a) y (b) del ejemplo 1, así como los % de recuperación de los componentes clave y cargas térmicas. Las variables que se modifican se ven en la tabla 4.1

Problema:	Parámetros Variables.
2a	$q \in (0,1)$, condensador parcial
2b	$q \in (0,1)$, condensador total
2c	$q = 1$, condensador parcial
2d	$q = 1$, condensador total

TABLA 4.1 Parámetros variables ejemplo 2

El enunciado para el (2a) es: Se tiene una columna de destilación, la cual consta de 16 etapas teóricas (condensador rehevridor parcial incluidos) y una alimentación parcialmente vaporizada, la cual tiene una temperatura de 225 °F y esta compuesta de:

Componente:	Alimentación [lbmol/hr]:
C ₂	3
C ₃	20
n-C ₄	37
n-C ₅	35
n-C ₆	5

se obtienen 22.6 lbmol/hr de destilado , teniendo un reflujo de 154.3 lbmol/hr. La presión en la torre y en la alimentación es de 250 psia. La etapa de alimentación es la intermedia con respecto al método riguroso. Los componentes clave son el Propano y el n-Butano.

Para el (2b), solo cambia el tipo de condensador utilizado por uno total.

En el caso de (2c), se tiene la misma mezcla con igual composición pero se alimenta con un líquido saturado, se tienen 17 etapas incluyendo un rehervidor y condensador parcial; la presión de operación es de 250 psia; se tiene un flujo de destilado de 23 lbmol/hr, un reflujo de 150 lbmol/hr y etapa de alimentación intermedia.

Para (2d) se tienen iguales condiciones pero el condensador es total.

Ejemplo 3: Aquí se considera una mezcla con un gran número de componentes para ver el efecto que tienen esto en los métodos y se tienen fijos: número de etapas, etapa de alimentación, reflujo, tipo de condensador y condiciones de alimentación. El enunciado es el siguiente:

Se tienen una mezcla compuesta por 11 componentes con la siguiente composición:

<u>Componente:</u>	<u>Alimentación [lbmol/hr]:</u>
CH ₄	2.0
C ₂ H ₆	10.0
C ₃ H ₈	6.0
C ₄ H ₁₀	12.5
i-C ₅	3.5
n-C ₅	15.0
n-C ₆	15.2

n-C ₆	11.3
n-C ₇	9.0
n-C ₈	8.5
400	7.0

se destilan 31.6 lbmol/hr y reflujan 63.2 lbmol/hr. La alimentación esta en su punto de burbuja, condensador parcial, presión de la columna y alimentación de 300 psia, número de etapas: 12, etapa de alimentación:5. Se desea separar la mayor cantidad de Propano del i-Butano.

Se debe de tener en cuenta que la forma de numerar las etapas por los dos métodos es inversa y los resultados se presentan de acuerdo a la forma de numerar del método corto.

Solución ejemplo 1:

Se usaron los dos simuladores para obtener resultados modificando solamente la etapa de alimentación y escoger de acuerdo al criterio la etapa óptima. La tabla 4.2 muestra los resultados obtenidos para aquellas etapas donde los métodos convergen

Alimentación	Método Corto.		Método Riguroso.	
	N rec L.C	N rec F.C	N rec L.C.	N rec F.C
2	07.44	04.04	04.58	01.40
3	08.28	07.28	07.00	05.80
4	08.08	07.77	08.26	07.81
5	08.02	07.87	08.78	08.08
d	08.01	07.70	08.83	08.10
7	08.10	07.31	08.74	08.04
8	07.00	04.30	08.88	07.51
9	06.58	04.04	08.11	07.08

TABLA 4.2 % de recuperación para componentes clave.

De la tabla 4.2 se observa que los dos métodos muestran diferentes etapas óptimas para la alimentación. Para el método corto la etapa 9 (equivala a la etapa 5 del método riguroso) y para el método riguroso indica como la etapa óptima a la 6. Esto de acuerdo al criterio que escogimos para seleccionar la etapa óptima. Se observa más claramente en la gráfica 4.1 y 4.2 para la recuperación de los clave ligero y pesado.

Las temperaturas terminales obtenidas por ambos métodos para la etapa óptima así como los resultados de distribución de componentes, cargas térmicas, flujos de vapor y líquido y temperaturas por plato en las siguientes tablas y gráficas.

Temperatura Plato (°F)	Método Corto	Método Riguroso.
Domo	14.000	14.708
Alimentación	106.048	09.508
Fondos	101.428	102.170

TABLA 4.3 Temperaturas terminales.

Componente:	Destilado :		Fondo:	
	M. CORTO	M. RIGUROSO	M. CORTO	M. RIGUROSO
Metano	100.0000	150.0000	0.0000	0.0001
Etano	204.0000	200.0000	5.1000	4.2000
Propano	5.1000	4.2000	204.0000	200.0000
n-Butano	0.0000	0.0000	24.0000	24.0000
n-Pentano	0.0000	0.0000	5.0000	5.0000

TABLA 4.4 Distribución de componentes.

Metodo	abs:Condensador:1 Btu/hr	abs:Rehervidor:1 Btu/hr
Corto	0,022,842.05	2,270,242.78
Riguroso	4,001,222.00	2,220,207.00

TABLA 4.5 Cargas Térmicas .

Etapa:	Flujo de Vapor:		Flujo de Líquido:	
	M. Corto:	M Riguroso:	M. Corto:	M. Riguroso
1	580.00	580.00	000.00	000.00
2	1520.00	1520.00	000.00	070.18
3	1520.00	1500.18	000.00	014.00
4	1520.00	1444.85	000.00	000.00
5	1520.00	1300.08	000.00	000.00
6	728.00	1808.00	008.00	702.17
7	728.00	022.10	008.00	000.00
8	728.00	000.00	008.00	017.85
9	728.00	047.85	008.00	023.74
10	728.00	000.78	008.00	020.72
11	728.00	000.71	008.00	000.48
12	728.00	000.47	008.00	000.10
13	728.00	000.10	070.00	070.00

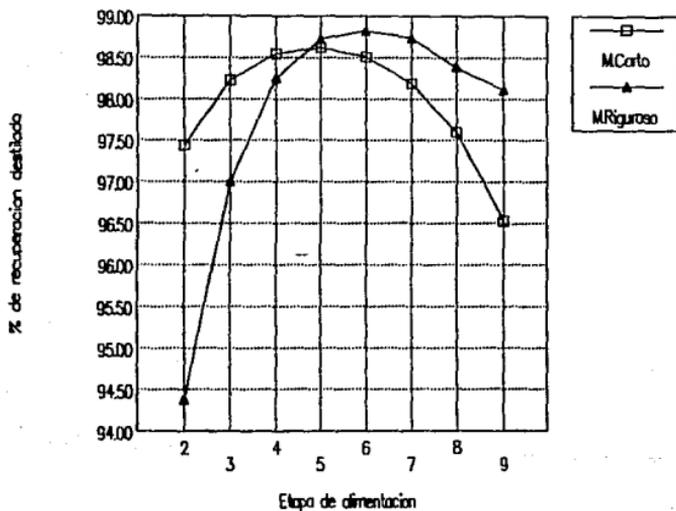
TABLA 4.6 Perfiles de Vapor y Líquido.

Etapa:	Temperatura (F)	
	M. Corio:	M. Riguroso
1	14.96	14.70
2	60.50	55.75
3	60.50	49.43
4	60.50	65.46
5	106.04	80.83
6	133.75	93.50
7	133.75	113.20
8	133.75	126.16
9	133.75	136.39
10	133.75	144.42
11	133.75	150.46
12	133.75	155.41
13	161.42	162.18

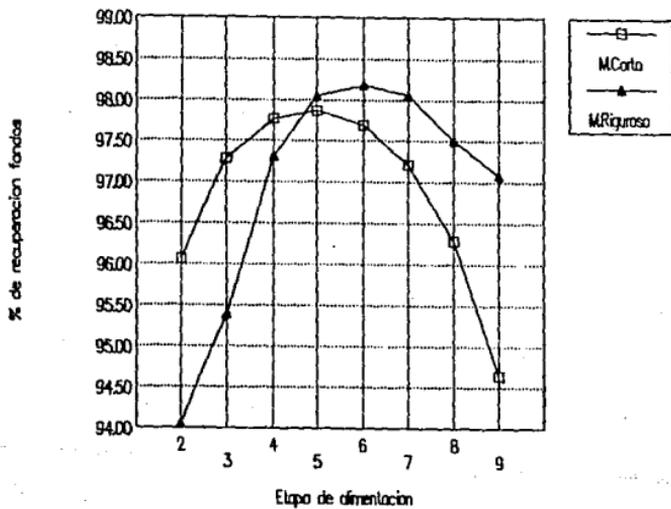
TABLA 4.7 Perfil de Temperatura.

ESTA TESIS NO DEBE
SALIR DE LA BIBLIOTECA

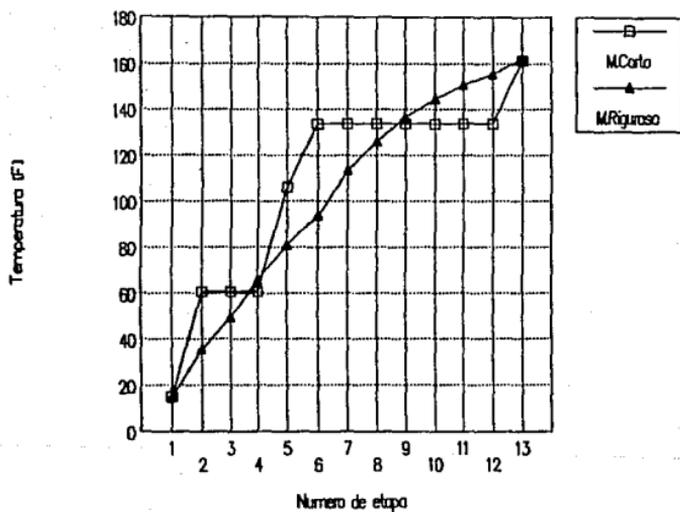
Recuperacion componente ligero



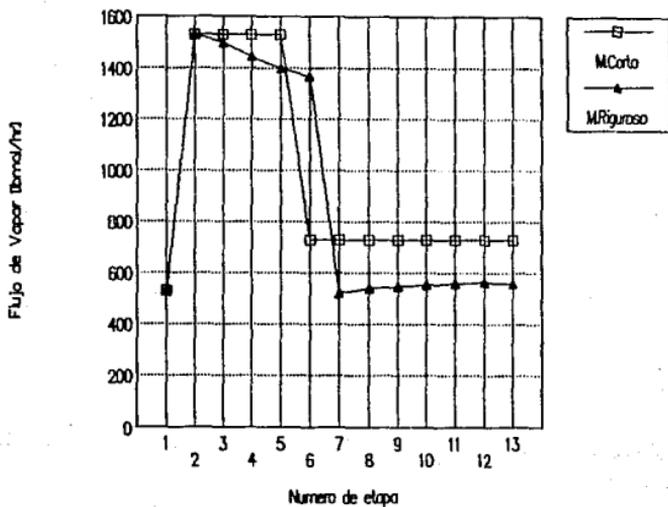
Recuperacion componente pesado



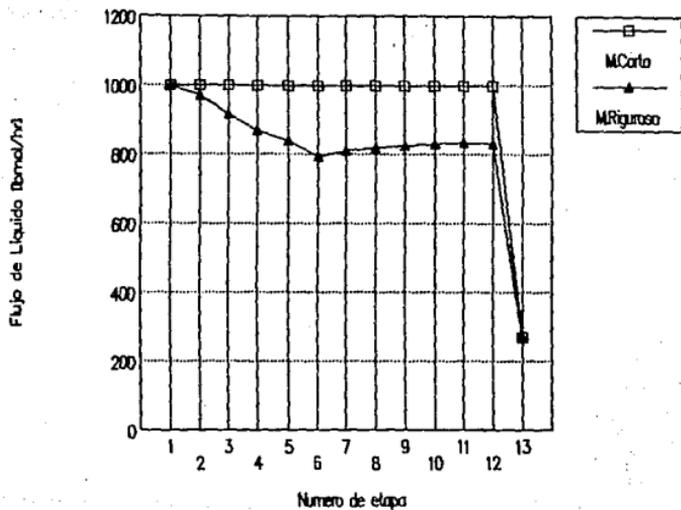
Perfil de Temperatura



Flujos de vapor por etapa

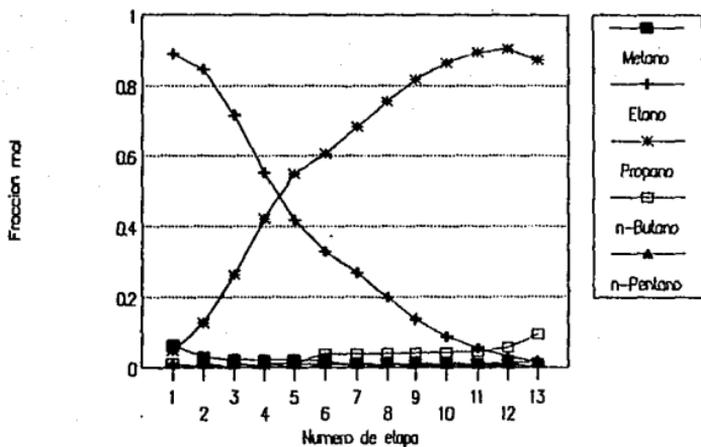


Flujos de Liquido por etapa



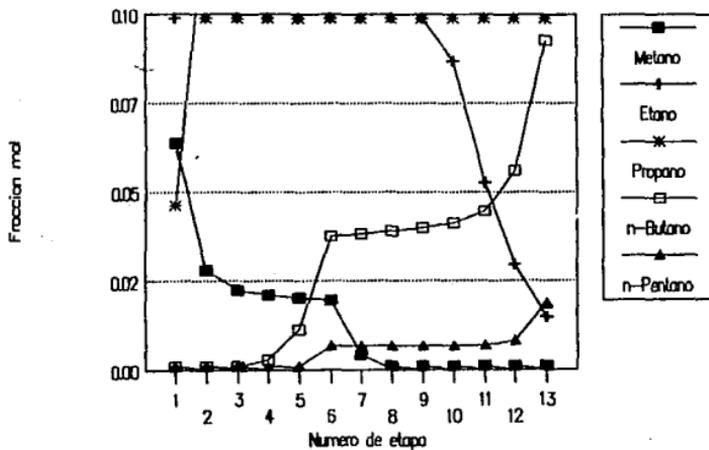
Fracciones mol vs Numero de etapas

M.Riguroso



Fracciones mol vs Numero de etapas

M.Riguroso (escala ampliada)



Solución ejemplo 2:

Se alimentaron las condiciones dadas a los simuladores y se obtuvo los siguientes resultados:

Concepto	Problema			
	2a	2b	2c	2d
Nc	5	5	5	5
NET	1d	1d	17	17
NI	8	8	8	8
F	100	100	100	100
D	22.d	22.d	28	28
L/D	0.8274	0.8274	0.5217	0.5217
q	(0,1)	(0,1)	1	1
(V/F)	0.120	0.120	0	0

TABLA 4.8 Condiciones generales.

Concepto	Metodo Corto			
	2a	2b	2c	2d
M rec. C.L.	05.00	05.28	07.28	0d.81
M rec. C.F.	08.01	08.58	08.58	08.27
Temp Plato F				
Domo	119.841	05.128	121.859	0d.1d7
Alimentac.	185.471	181.018	207.782	208.082
Fondo	275.772	275.881	276.774	276.508
Temp Alim. F	225.000	225.000	218.080	218.080
Qc	07810d.0d	08377d.1d	088848.47	0888d7.0d
Gr	1188875.01	1000802.18	124d014.80	1112724.20
Condensador	Parcial	Total	Parcial	Total

TABLA 4.9 Resultados generales método corto.

Componente:	Destilado			
	2a	2b	2c	2d
Etano	3.0000	3.0000	3.0000	3.0000
Propano	10.1077	10.05d0	10.45d0	10.3d15
n-Butano	0.4028	0.5427	0.5423	0.4884
n-Pentano	0.0001	0.0008	0.0001	0.0002
n-Hexano	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

TABLA 4.10 Distribución de componentes en el destilado.

Componente:	Fondos:			
	2a	2b	2c	2d
Etano	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Propano	0.8028	0.8440	0.8484	0.8385
n-Butano	84.8077	84.4988	86.4987	84.8614
n-Pentano	84.0000	84.0000	84.0000	84.0000
n-Hexano	5.0000	5.0000	5.0000	5.0000

TABLA 4.11 Distribución de componentes en fondos método corto.

Zona:	Flujos de Vapor			
	2a	2b	2c	2d
Enriquecedor	176.899	176.899	172.000	172.000
Alimentación	12.898	12.899	0.000	0.000
Agotador	164.001	164.001	172.000	172.000

TABLA 4.12 Flujos de vapor por método corto.

Zona:	Flujos de Líquido			
	2a	2b	2c	2d
Enriquecedor	194.299	190.299	140.000	140.000
Alimentación	87.102	87.102	100.000	100.000
Agotador	241.401	241.401	240.000	240.000

TABLA 4.13 Flujos de líquido por método corto.

Para el método riguroso se tiene:

Concepto:	Método Riguroso			
	2a	2b	2c	2d
Q	(0,1)	(0,1)	1	1
(V/F)	0.129	0.129	0	0
M rec C.L.	98.29	98.78	98.08	97.88
M rec C.F.	98.08	98.78	98.08	98.88
Temp Plato				
Domo	118.071	94.594	110.551	94.849
Alimentación	211.202	207.201	210.200	211.452
Fondo	275.751	275.500	277.000	276.857
Temp Alm.	225.000	225.000	218.080	218.080
abs(Qc)	871805.24	1060025.72	848912.42	1084257.41
abs(Qr)	1081056.08	1085060.87	1180048.75	1183314.81
Condensador.	Parcial	Total	Parcial	Total

TABLA 4.14 Resultados generales método riguroso.

Componente:	Destilado			
	Za	Zb	Zc	Zd
Etano	3.0000	3.0000	3.0000	3.0000
Propano	19.2584	19.1495	19.6155	19.5667
n-Butano	0.3414	0.4500	0.3845	0.4334
n-Pentano	0.0002	0.0005	0.0001	0.0002
n-Hexano	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

TABLA 4.15 Composición destilado por método riguroso.

Componente:	Fondo			
	Za	Zb	Zc	Zd
Etano	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Propano	0.7416	0.8505	0.3845	0.4333
n-Butano	34.6586	34.5500	34.6155	34.5667
n-Pentano	34.9998	34.9995	34.9999	34.9998
n-Hexano	5.0000	5.0000	5.0000	5.0000

TABLA 4.16 Composición fondo por método riguroso.

Etapa:	Flujo de Vapor			
	Za	Zb	Zc	Zd
1	22.60	0.00	22.00	0.00
2	170.89	170.89	172.09	172.09
3	178.27	185.29	173.09	181.39
4	175.43	185.87	171.02	182.42
5	170.07	181.73	166.00	179.14
6	162.08	174.56	160.19	173.45
7	154.27	164.83	154.86	166.38
8	148.04	152.54	148.29	159.18
9	129.33	137.14	140.92	148.39
10	132.27	139.09	146.35	152.31
11	134.70	141.38	150.48	155.57
12	137.33	144.10	153.22	158.53
13	139.75	146.69	155.71	161.42
14	141.29	148.38	157.05	163.76
15	141.12	148.22	158.42	164.79
16	138.48	145.44	157.27	163.67
17	-----	-----	153.35	159.77

TABLA 4.17 Flujos de Vapor por método riguroso.

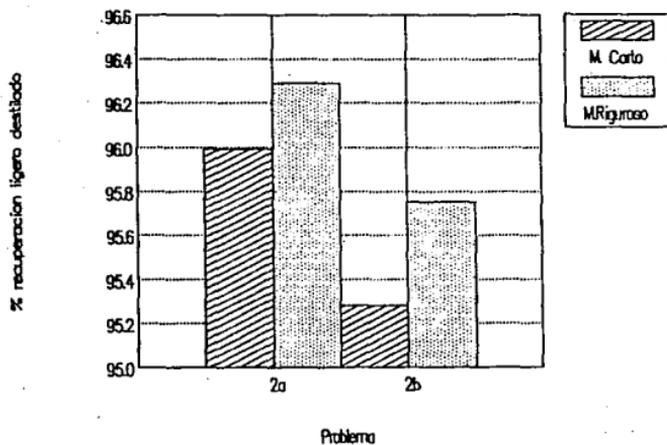
Etapa:	Flujos de Líquido			
	2a	2b	2c	2d
1	194.80	194.80	180.00	180.00
2	185.08	182.70	181.00	188.40
3	182.84	188.28	148.02	189.42
4	147.48	189.18	148.00	186.14
5	140.88	181.07	187.10	180.48
6	181.07	142.28	181.86	148.88
7	121.08	129.84	128.80	188.18
8	207.28	214.84	117.00	128.88
9	209.07	210.80	228.86	229.81
10	218.10	218.78	227.48	222.87
11	214.78	221.80	230.22	228.88
12	217.18	224.08	232.71	228.42
13	218.00	228.78	234.08	240.70
14	218.82	228.02	238.42	241.70
15	218.88	222.84	234.27	240.07
16	77.40	77.40	280.88	226.77
17	-----	-----	77.00	77.00

TABLA 4.18 Flujos de Líquido por método riguroso.

Etapa:	Temperatura			
	2a	2b	2c	2d
1	118.07	94.89	110.88	94.88
2	180.08	120.22	180.08	110.80
3	187.04	182.80	188.08	181.20
4	140.78	141.00	147.48	189.04
5	187.88	182.24	188.01	149.08
6	171.06	108.82	170.02	100.88
7	188.00	188.00	188.18	174.27
8	211.20	207.80	197.08	190.78
9	218.82	214.01	210.80	211.48
10	228.47	221.01	224.88	220.28
11	232.22	220.10	231.07	228.00
12	238.08	220.28	238.10	234.08
13	244.06	248.17	244.48	241.06
14	281.01	280.71	248.88	240.88
15	261.28	200.80	284.40	288.86
16	278.78	278.87	208.18	182.48
17	-----	-----	277.10	276.86

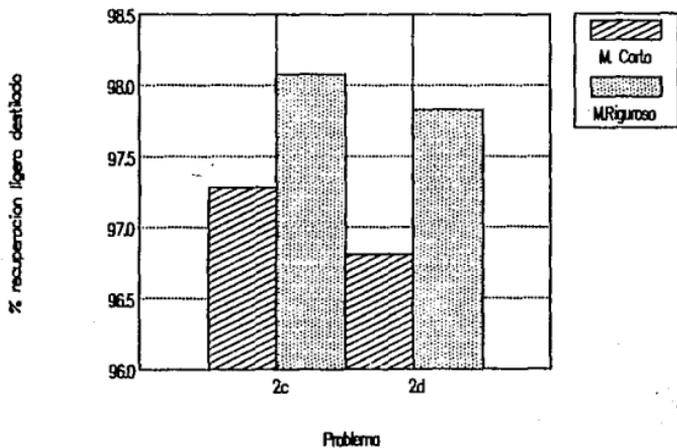
ABLA 4.19 Temperaturas por etapa método riguroso.

% Recuperacion ligero
Alimentacion vaporizada

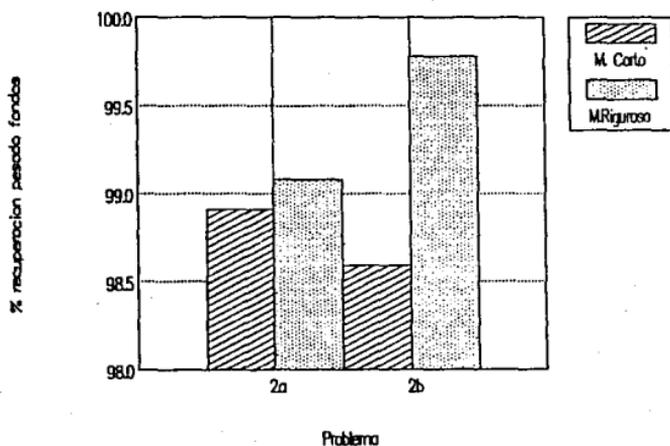


% Recuperacion ligero

Alimentacion a punto de burbuja

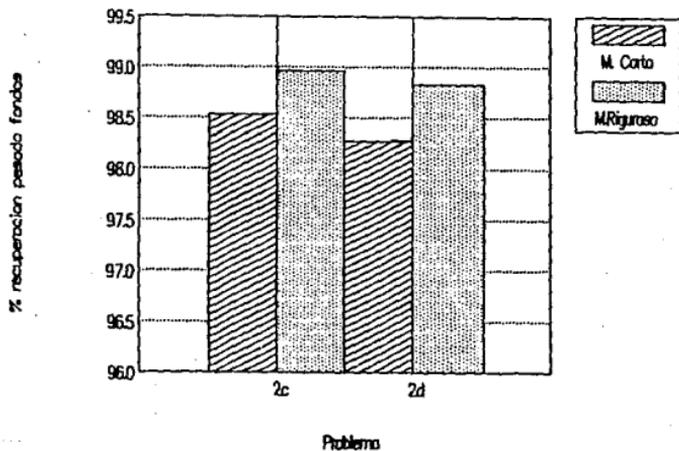


% Recuperacion pesado Alimentacion vaporizada



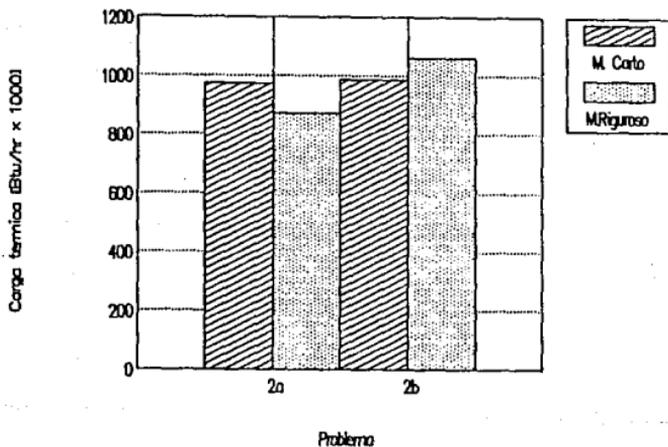
% Recuperacion pesado

Alimentacion a punto de burbuja



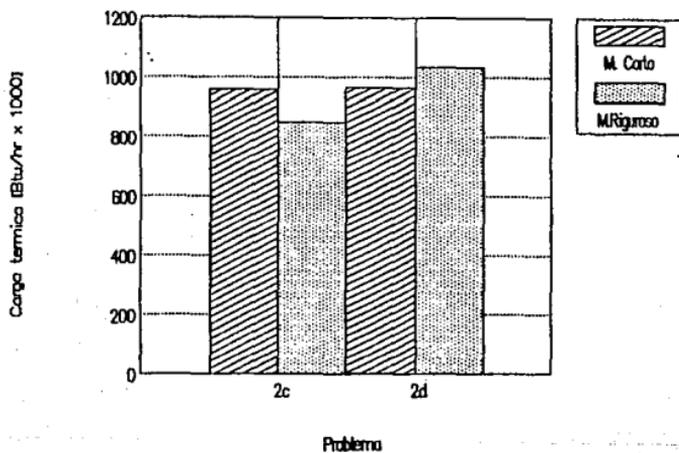
Cargas termicas condensador

Alimentacion vaporizada



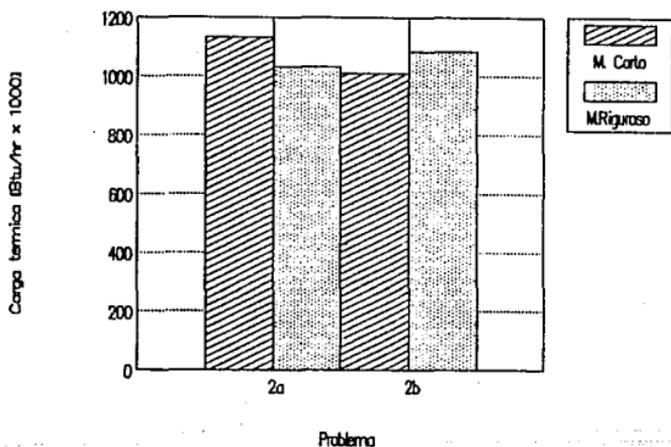
Cargas termicas condensador

Alimentacion a punto de burbuja



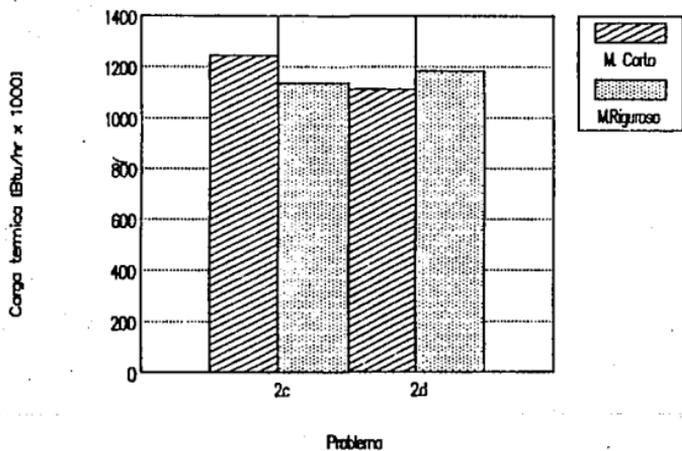
Cargas termicas rehervidor

Alimentacion vaporizada

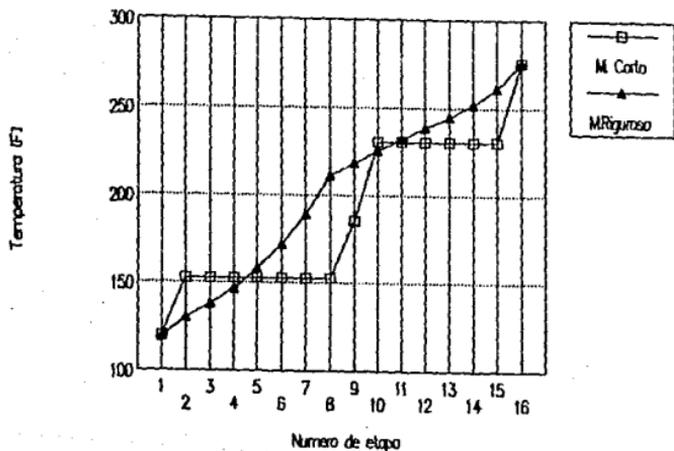


Cargas termicas rehervidor

Alimentacion a punto de burbuja

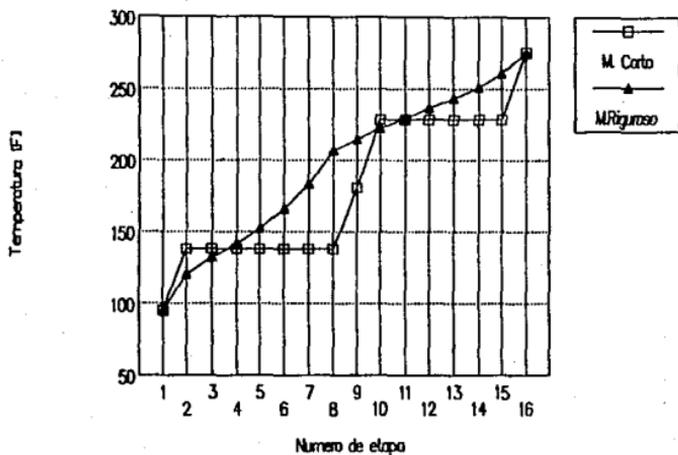


Perfil de temperaturas $q=0.129$ y Condensador Parcial

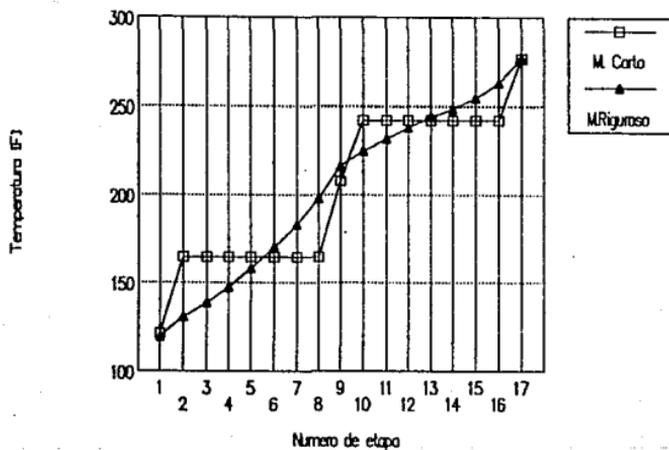


Perfil de temperaturas

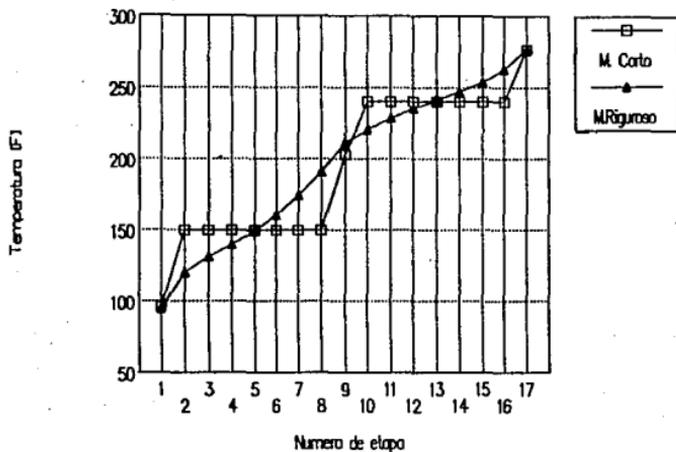
$q=0.129$ y Condensador Total



Perfil de temperaturas $q=1$ y Condensador Parcial

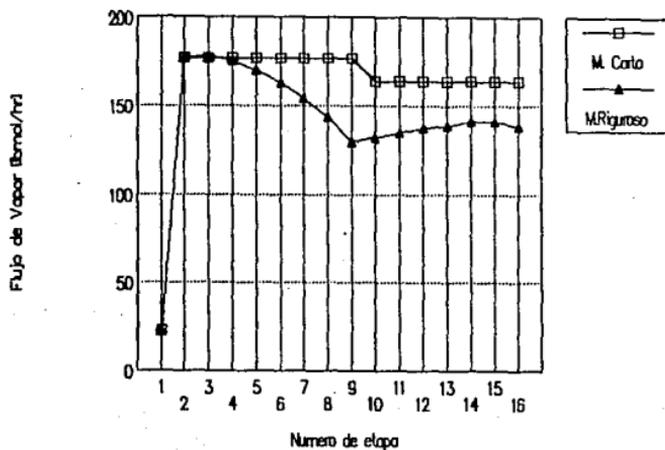


Perfil de temperaturas $q=1$ y Condensador Total



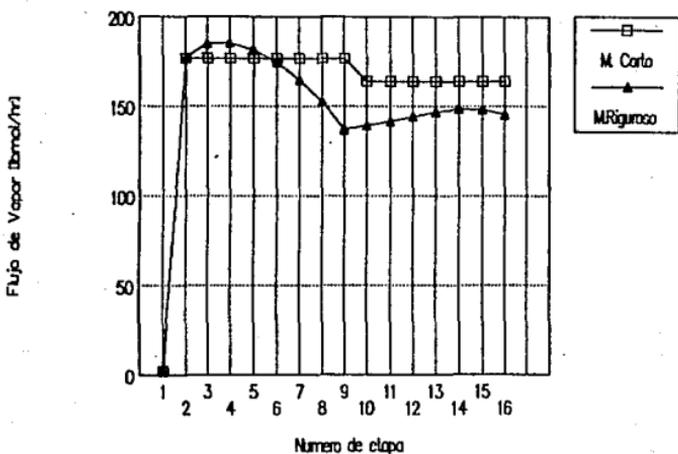
Flujo de Vapor

$q=0.129$ y Condensador Parcial



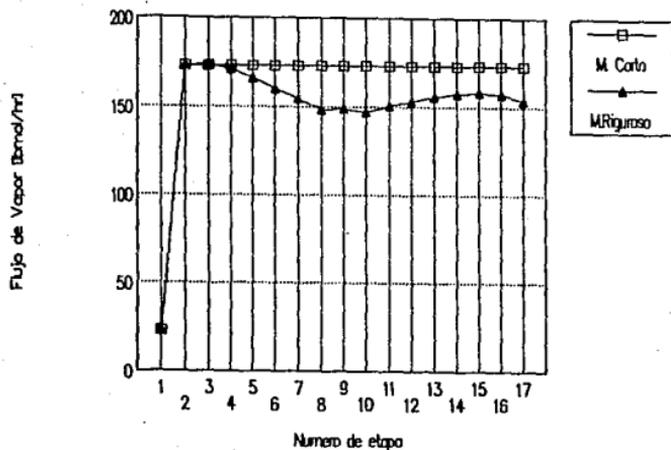
Flujo de Vapor

$q = 0.129$ y Condensador Total



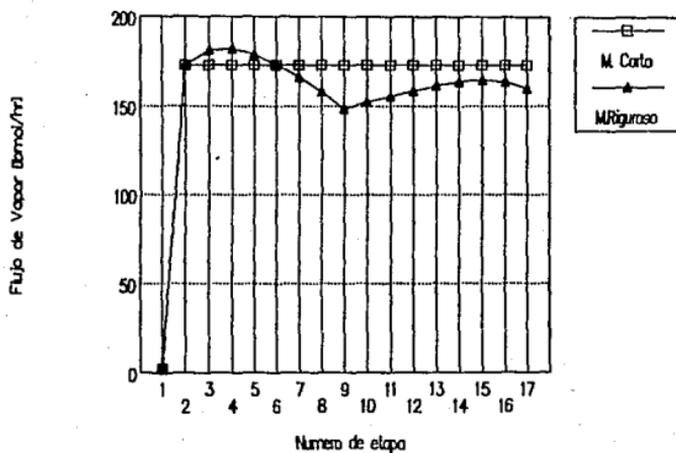
Flujo de Vapor

$q = 1$ y Condensador Parcial



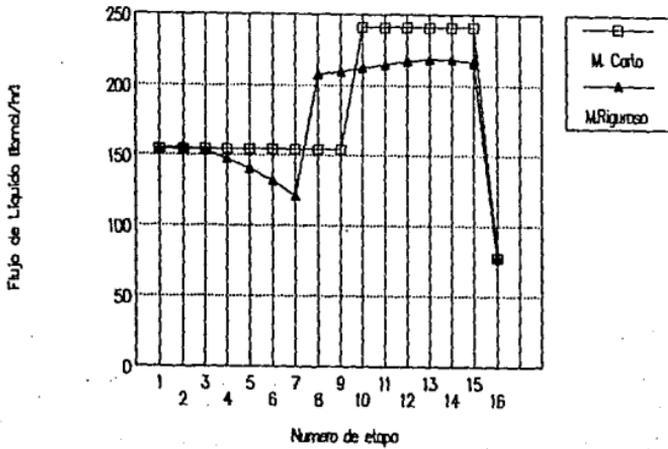
Flujo de Vapor

$q = 1$ y Condensador Total



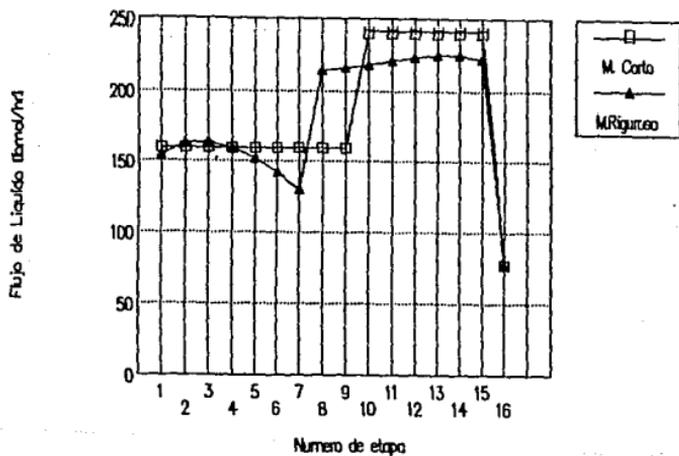
Flujo de Liquido

$q = 0.129$ y Condensador Parcial



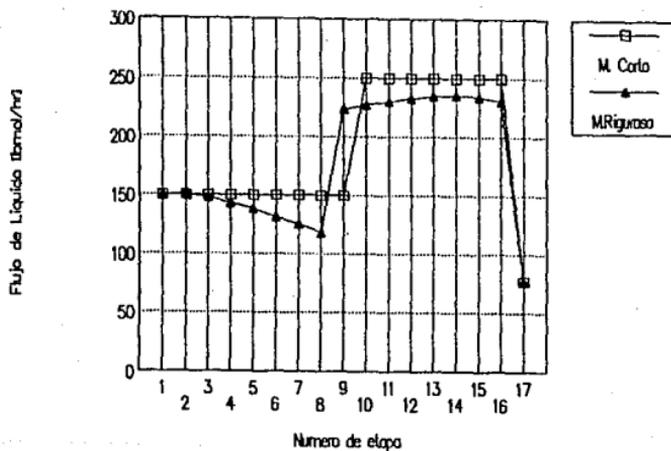
Flujo de Liquido

$q = 0.129$ y Condensador Total



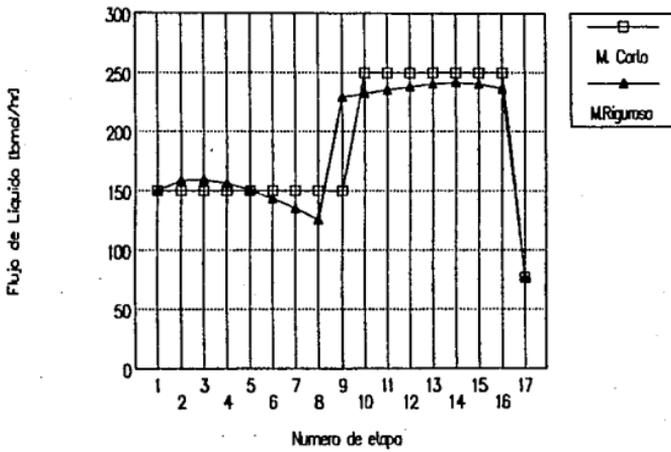
Flujo de Liquido

$q = 1$ y Condensador Parcial



Flujo de Liquido

$q = 1$ y Condensador Total



Solución problema 3:

Después de haber suministrado a la computadora los datos anteriores para este ejemplo, se obtuvieron los siguientes resultados:

Concepto	Cantidad:
Nc	11
NET	12
NI	5 (V.H.)
Presion	800 psia
Q	1
(V/F)	0
R	2
F	100
D	31.0

TABLA 4.20 Datos Generales

Concepto	Resultado	
	M. Corto:	M. Riguroso:
N rec C. L.	96.82	94.06
N rec C. F.	77.98	75.28
Temp. Plato		
Domo	570.140	572.005
Alimentac.	082.538	099.028
Fondos	025.187	029.877
Temp. Alimen.	024.442	024.442
Qc	088028.01	057589.78
Qr	022805.47	75944.71
Condensador.	Parcial	Parcial

TABLA 4.21 Resultados generales

Compuesto:	Destilado:		Fondos:	
	M. Corto	M. Riguroso	M. Corto	M. Riguroso
Metano	2.0000	2.0000	0.0000	0.0000
Etano	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Propileno	5.0191	5.8417	0.0809	0.1583
Propano	12.1024	11.8301	0.3975	0.0000
i-Butano	0.7729	0.8058	2.7277	2.0847
n-Butano	0.8024	1.0379	14.1977	13.0421
n-Pentano	0.0044	0.0072	15.1956	15.1928
n-Hexano	0.0000	0.0000	11.3000	11.3000
n-Heptano	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
n-Octano	0.0000	0.0000	8.5000	8.5000
400	0.0000	0.0000	7.0000	7.0000

TABLA 4.22 Distribución de componentes

Etapa:	Flujo de Vapor:		Flujo de Líquido:	
	M. Corto	M. Riguroso	M. Corto	M. Riguroso
1	81.40	81.40	68.30	68.30
2	84.80	84.80	68.30	66.02
3	84.80	88.32	68.30	58.82
4	84.80	84.02	68.30	52.04
5	84.80	84.54	68.30	184.18
6	84.80	85.78	103.20	128.04
7	84.80	80.24	103.20	125.02
8	84.80	57.32	103.20	124.80
9	84.80	55.00	103.20	123.40
10	84.80	55.05	103.20	121.40
11	84.80	58.06	103.20	122.01
12	84.80	84.51	68.40	68.40

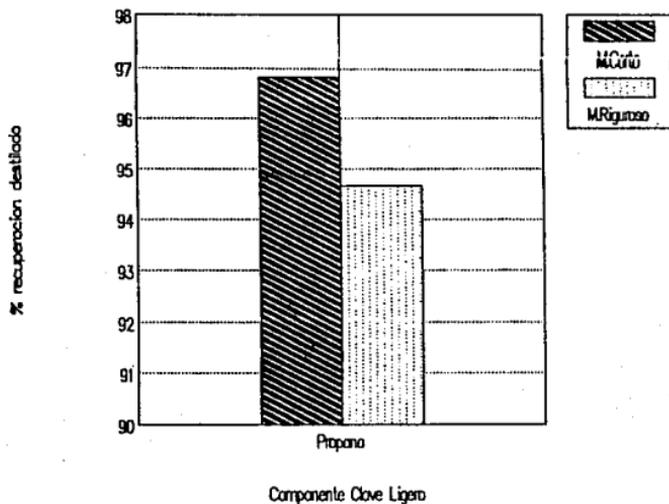
TABLA 4.23 Flujos de líquido y vapor

Etapa:	Temperatura (°R)	
	M. Corto	M. Riguroso
1	570.140	572.055
2	601.330	604.088
3	601.330	624.180
4	601.330	645.001
5	682.588	695.028
6	728.800	748.036
7	728.800	781.590
8	728.800	741.570
9	728.800	750.027
10	728.800	758.842
11	728.800	765.048
12	825.187	828.377

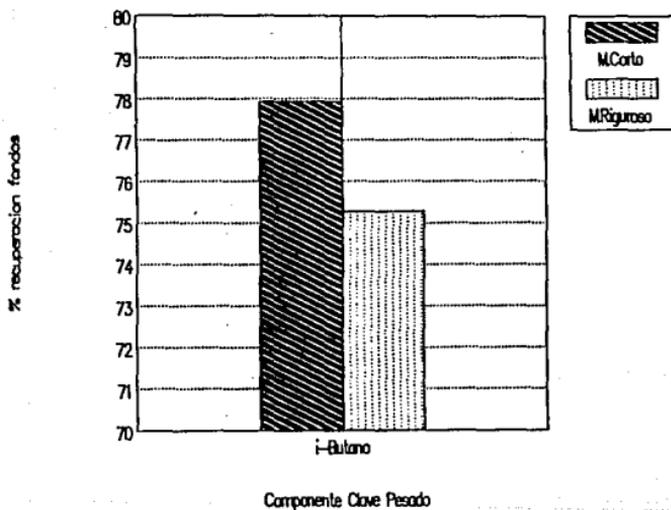
TABLA 4.24 Temperaturas por etapas.

Las gráficas de este problema se presentan a continuación.

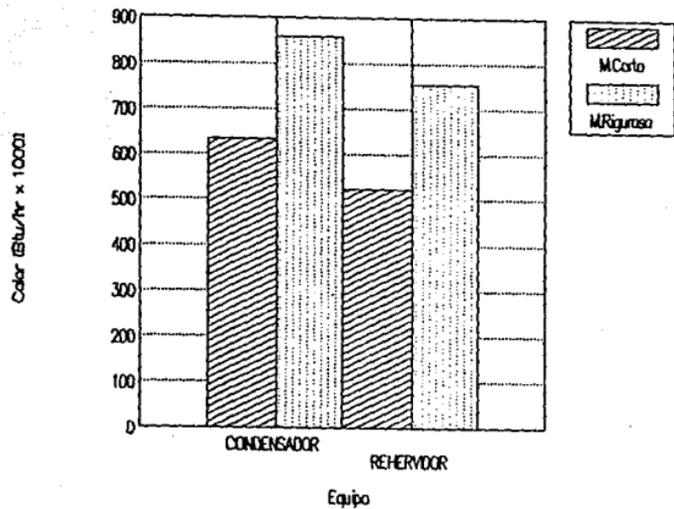
% Recuperacion Clave Ligero



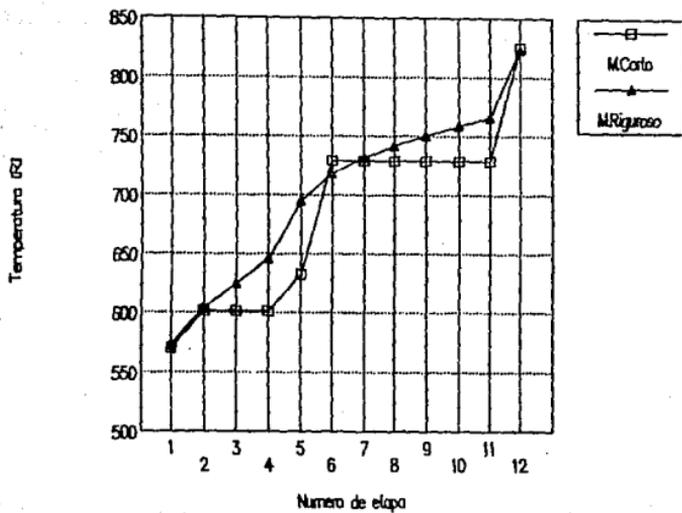
% Recuperacion Clave Pesado



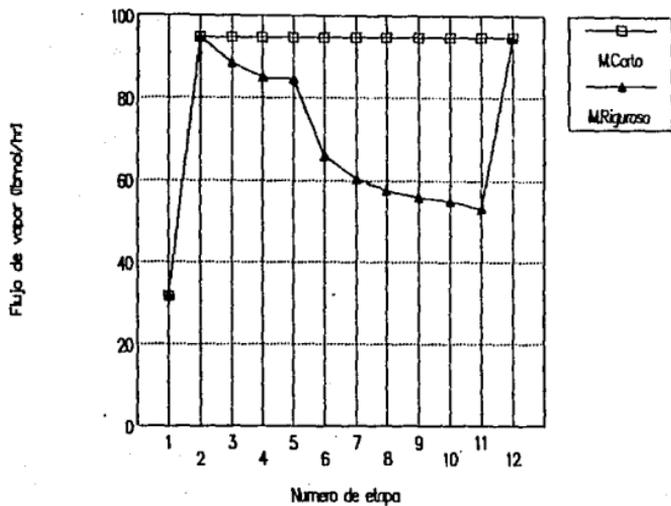
Cargas Termicas



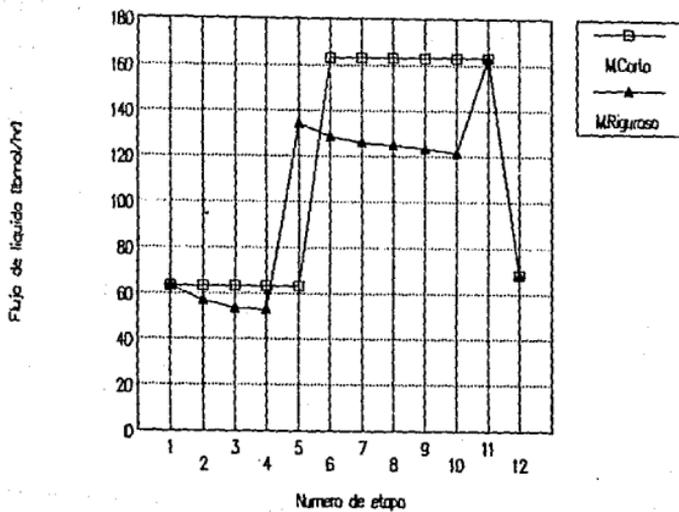
Temperatura por etapa



Flujos de vapor por etapa



Flujo de liquido por etapa



CAPITULO

5

ANALISIS DE RESULTADOS.

" Cuando me decido a algo voy directo
al blanco"

Cardenal Richeleau.

5.1 ANALISIS DE RESULTADOS.

La etapa óptima señalada por ambos métodos en base al criterio de máxima recuperación es diferente. Los perfiles de temperaturas y de flujos para cada etapa óptima en los respectivos métodos, es parecida. De lo cual se concluye que puede tomarse con reservas como una buena aproximación los métodos cortos.

Las temperaturas terminales calculadas por ambos métodos son prácticamente iguales e independientes del tipo de condensador, número, clase de componentes así como de la condición térmica de la alimentación. El error para las temperaturas terminales predichas por el método corto y el riguroso es poco, siendo más apreciable en la zona de alimentación, (3-13 %) y dando siempre una temperatura menor en el corto que el riguroso. Los porcentajes de recuperación de los clave tienen una ligera desviación especialmente en los fondos.

Los perfiles de flujos de vapor, líquido y temperatura del método corto son bastante parecidos en los primeros y últimos platos de la columna, siendo más en alimentaciones líquidas y con condensador total.

Para las cargas térmicas se tiene una variación considerable (3-30%), debido a diferencias en las fracciones mol y en los flujos internos.

Para el caso de un gran número de componentes, se tiene que los resultados de porcentajes de recuperación y temperaturas terminales tienen una leve diferencia, lo cual se debe a que las fracciones calculadas en el método corto para calcular temperaturas de burbuja, rocío y efectivas, se ven afectadas a medida que aumente el número de componentes en forma más apreciable. En la temperatura de alimentación se nota la misma tendencia que en los problemas anteriores, solo que la diferencia aumenta considerablemente.

En estos casos se observa el problema que causa la suposición de flujos molares constantes en las secciones de la columna y el no corregir por medio de un balance de energía.

Como se observa los cálculos realizados por el método corto son satisfactorios principalmente en zonas terminales, condiciones de alimentación de líquido saturado, condensador total y con número de componentes reducido. No es recomendable para cálculos precisos de temperatura de alimentación y cargas térmicas.

CONCLUSIONES.

Como se ha visto se pueden utilizar los métodos de grupo para obtener un aproximado de ciertos parámetros en las columnas de destilación, tal como temperaturas terminales y porcentajes de recuperación así como usarse con reservas en cargas térmicas y temperaturas de alimentación

Se puede utilizar el método general como base para los métodos rigurosos, puesto que presenta buenas suposiciones iniciales de temperaturas y perfiles de flujo terminales.

Para el estudiante ó el profesionista, se abre la posibilidad de usar estos métodos cortos, para entender la relación que existe entre algunas variables como son flujos molares constantes, temperatura de alimentación, condición térmica, etc. así como el de obtener resultados rápidos y satisfactorios que anudados a la experiencia que proporciona el uso de simuladores con información general, rápida, accesible y fácil de modificar dan una herramienta más

BIBLIOGRAFIA.

- [1] ADMUNSON NEAL R. & PONTINET J.A. "MULTICOMPONENT DISTILLATION CALCULATIONS ON A LARGE DIGITAL COMPUTER", Ind. Eng. Chem., 50 730 (1958)
- [2] ATKINSON L.V. & HARLEY "INTRODUCCION A LOS METODOS NUMERICOS CON PASCAL", 2a edicion, Ed. SITEGA, México, D.F. 1987.
- [3] BACKHURST J.R. et al. "PROBLEMAS SOBRE TRANSFERENCIA DE CALOR Y MASA", Ed, El Manual moderno, S.A., México, D.F. 1979.
- [4] BAZUA RUEDA ENRIQUE "APUNTES DE TERMODINAMICA", U.N.A.M. Facultad de Quimica, Mexico, D.F. 1986.
- [5] BRONSTEIN I "MANUAL DE MATEMATICAS PARA INGENIEROS Y ESTUDIANTES", 4a edicion. Ed. MIR Moscu, U.R.S.S. 1982.
- [6] CASTELLAN GILBERT W. "FISICOQUIMICA", Ed. F.E.I., México, D.F. 1985.
- [7] CHAVEZ CHAVARRIA AMBROSIO "UN NUEVO METODO PARA LA SIMULACION DE TORRES DE DESTILACION MULTICOMPONENTE", Tesis U.N.A.M. 1987
- [8] CHANG HUANG YANG "COMPUTER AIDS SHORT-CUT DISTILLATION DESIGN", Hydrocarbon Process. 79-82 (Aug 1980).
- [9] CHEMISINOFF NICHOLAR P. "HANDBOOK OF HEAT AND MASS TRANSFER", Vol. 2 "Mass transfer and Reactor design", pages 673-675
- [10] CURTIS F. GERALD "ANALISIS NUMERICO", Ed. RSI, 2ª edición, 1987, México, pages 11-15
- [11] ECKERT EGON, HLAVACEK VLADIMIR "CALCULATION OF MULTICOMPONENT DISTILLATION OF NO-IDEAL MIXTURES BY SHORT-CUT", Chem. Eng. Sc., 1978, vol 33, pages 78-91

[12] EDMISTER C. WAYNE "ABSORPTION AND STRIPPING FACTOR FUNCTIONS FOR DIGITAL CALCULATION BY MANUAL AND DIGITAL-COMPUTER METHODS", AIChE J, Vol 3, No 2, June 1957 pags 163-171

[13] ERIJ V. et al "QUIMICA Y TECNOLOGIA DEL PETROLEO Y DEL GAS", Ed. MIR Moscu, U.R.S.S. 1988.

[14] FENSKÉ M.N. "FRACTIONATION OF STRAIGHT-RUN PENNSYLVANIA GASOLINE", Industrial & Engineering Chemistry, May 1932, pags 482-485

[15] FOUST S. ALAN et. al. "PRINCIPIOS DE OPERACIONES UNITARIAS", 17a edicion, Ed. C.E.C.S.A. México, D.F. 1985.

[16] FRANK OTTO, Chemical Engineering March 14, 1977

[17] BILLIGAND E.R REED C.E. "DEGREES OF FREEDOM MULTICOMPONENT ABSORPTION AND RECTIFICATION", Industrial and Engineering Chemistry, May 1942 pags 551-557

[18] HENLEY & SEADER "EQUILIBRIUM STAGE SEPARATION OPERATIONS IN CHEMICAL ENGINEERING", Ed. Wiley, New York, 1981

[19] HENEFFELD JULIEN "TURBO PASCAL CON APLICACIONES 3.0 4.0 Y 5.0", Ed. Grupo Editorial Iberoamericana, México, D.F. 1989.

[20] HEWLETT PACKARD "MANUAL DEL USUARIO", Vectra MS-DOS 3.2 Vol I, 2a edition, Singapore, 1987.

[21] HINES L. ANTHONY & MADDOX N.R. "TRANSFERENCIA DE MASA. FUNDAMENTOS Y APLICACIONES", Ed. Prentice-Hall, México, D.F. 1987.

[22] HOLLAND D. C. "FUNDAMENTOS DE DESTILACION DE MEZCLAS MULTICOMPONENTES", Ed. Limusa, S.A. de C.V., México, D.F. 1988.

[23] HOLLAND D.C., HESS F.E. et. al "SOLVE MORE DISTILLATION PROBLEMS: PART VIII WHICH METHOD USED", Hydrocarbon Process. 54:181(1977).

[24] HOLLAND D.C. Y KUK M.S. "SOLVE MORE DISTILLATION PROBLEMS: PART IV EVALUATE EXISTING COLUMNS", Hydrocarbon Process. 54:121(1975)

[25] JOYANES AGUILAR LUIS "PROGRAMACION EN TURBO PASCAL VERSIONES 4.0 ,5.0 Y 5.5", Ed Mc Graw Hill, España, 1990.

[26] KING J. "SEPARATIONS PROCESS", 2a edition, Ed. Mc Graw Hill, New York, U.S.A. 1980.

[27] Mc CABE L.WARREN,et.al "UNIT OPERATIONS OF CHEMICAL ENGINEERING",4a ed., Ed. Mc Graw Hill, Singapore, 1988.

[28] Mc KETTA, JOHN "ENCYCLOPEDIA OF CHEMICAL PROCESSING AND DESIGN", Marcel Dekker Inc. (1977)

[30] MOORE, J.WALTER "FISICOQUIMICA BASICA", Ed. Prentice Hall, México, D.F. 1986.

[31] NELSON "PETROLEUM REFINERY DISTILLATION", 2a edición, (1979).

[32] O'BRIEN K. STEPHEN "TURBO PASCAL MANUAL DE REFERENCIA" , Ed. Borland-Osborne/Mc Graw Hill , Mexico. D.F. 1989.

[33] PERRY R.H "HANDBOOK OF CHEMICAL ENGINEERING", 6a edición, Ed. Mc Graw Hill, Japan (1990).

[34] REKLAITIS "BALANCES DE MATERIA Y ENERGIA", Ed. Interamericana, México, D.F. 1989..

[35] ROUSSEAU W.RONALD "HANDBOOK OF SEPARATIONS PROCESS TECH", Ed. Wiley International publish 1987, U.S.A.

[36] SCHAMETZER "HANDBOOK OF SEPARATIONS TECHNIQUES FOR CHEMICAL ENGINEERING" (1979).

[37] SMITH B.D. "DESIGN OF EQUILIBRIUM STAGE PROCESS", Mc Graw Hill, 1963

[38] SMITH & BRINKLEY "GENERAL SHORT-CUR EQUATION FOR EQUILIBRIUM STAGE PROCESS", A.I.Ch.E J. , 1960 (6) 446

[39] SMITH & VAN NESS "INTRODUCCION A LA TERMODINAMICA EN INGENIERIA QUIMICA". 3a edicion, Ed. Mc Graw Hill , México, D.F. 1981.

[40] TREYBAL, ROBERT "OPERACIONES DE TRANSFERENCIA DE MASA"; 2a edicion, Ed. Mc Graw Hill, México, 1988.

[41] URETA BARRON ERNESTO "FISICOQUIMICA. EL EQUILIBRIO QUIMICO" . 3a reimpression, México, D.F. 1984.

[42] VAN WINKLE "DISTILLATION", Ed. Mc Graw Hill 1967.

[43] WANG J.C. HENKE B.E. "TRIDIAGONAL MATRIX FOR DISTILLATION", Hydrocarbon Process. 1966 (155) (Agus. 1966).

[44] WILLIAMS MARK L. "AN EQUATION TO RELATE K-FACTORS TO PRESURE AND TEMPERATURE", Chemical Engineering, 1973, October 28, (138-140).

APENDICES

- Apéndice A : Dedución ecuación general Smith-Brinkley.
- Apéndice B : Datos de constantes de equilibrio y entalpia.
- Apéndice C : Programas del método de Wang-Henke y método de Smith-Brinkley.

APENDICE A

DEDUCCION ECUACION GENERAL SMITH-BRINKLEY

La deducción es de acuerdo a la figura 2.1., todas las ecuaciones estan referidas a un componente i, aunque se omite por simplicidad.

Escribiendo el balance de materiales alrededor de la etapa n+1 para obtener:

$$L_{n+2}x_{n+2} + V_n y_n = L_{n+1}x_{n+1} + V_{n+1}y_{n+1}$$

donde $y_n = K_n y_n$ y $y_{n+1} = K_{n+1} x_{n+1}$,

$$L_{n+2}x_{n+2} + V_n K_n x_n = L_{n+1}x_{n+1} + V_{n+1}K_{n+1}x_{n+1}$$

dividiendo entre L_{n+2} y reacomodando términos:

$$x_{n+2} - \left(\frac{K_{n+1}V_{n+1}}{L_{n+2}} + \frac{L_{n+1}}{L_{n+2}} \right) x_{n+1} + \frac{K_n V_n}{L_{n+2}} x_n = 0$$

considerando los flujos y las constantes de equilibrio en cada sección se asumen constantes, si se desea utilizar las diferencias finitas, donde la ecuación en forma de operador:

$$\left[E^2 - \left(\frac{KV}{L} + 1 \right) E + \frac{KV}{L} \right] x_n = 0$$

$$\text{o} \quad \left[E - \frac{KV}{L} \right] (E-1) x_n = 0$$

las dos raíces se representan por S_1 y S_2 :

$$S_1 = \frac{KV}{L} \quad \text{y} \quad S_2 = 1.0$$

la solución es:

$$x_n = c_1 (S_1)^n + c_2$$

donde el subíndice n se refiera a cualquier etapa arriba de la etapa intermedia de alimentación. Cambiando el subíndice n por 1 para denotar el factor de agotamiento en la sección superior para cualquier componente, se reescribe la ecuación como:

$$x_n = c_1(S_n)^n + c_2 \quad (A-1a)$$

y análogamente para la sección inferior:

$$x_m = c_3(S_m)^m + c_4 \quad (A-2a)$$

estas ecuaciones relacionan las concentraciones líquidas para cualquier componente con la etapa.

Para eliminar de (A-1a) las constantes, se tiene que para cualquier componente:

$$V_N y_N = D y_n + R D y_n = (1+R) D y_n$$

y por definición:

$$D y_n = (1-f) A$$

donde A la cantidad total del componente que entra a la columna. Entonces:

$$y_N = \frac{(1+R)(1-f)A}{V_N}$$

$$x_N = \frac{(1+R)(1-f)A}{K_N V_N}$$

substituyendo x_N en (A-1a) resulta:

$$\frac{(1+R)(1-f)A}{V_N} = c_1(S_n)^n + c_2 \quad (A-1b)$$

y una expresión para x_{N-1} se obtiene de un balance alrededor de la etapa N .

$$y_{N-1} = \frac{L_N x_N}{V_{N-1}} + \frac{V_N y_N}{V_{N-1}} - \frac{L_{N+1} x_{N+1}}{V_{N-1}}$$

donde: $L_{N+1} x_{N+1} = S x_n + R D y_n$

y $q_0 A = S x_n$

$$D = \frac{V_n}{1+R}$$

entonces:

$$L_{N+1} x_{N+1} = q_0 A + \frac{R}{1+R} V_N y_N$$

substituyendo por x_N , y_N y $L_{N+1}K_{N+1}$ en el balance alrededor de la etapa N y omitiendo los subíndices en los términos de flujo da:

$$y_{N-1} = \frac{(1-f)A}{V^2} \left[V(1+R) + \frac{L}{K} (1+R) - RV - \frac{Vq_s}{1-f} \right]$$

substituyendo por x_{N-1} en (A-1a), da:

$$x_{N-1} = \frac{(1-f)A}{KV^2} \left[V(1+R) + \frac{L}{K} (1+R) - RV - \frac{Vq_s}{1-f} \right] \quad (A-1c)$$

restando (A-1b) de (A-1c) y resolviendo para c_1 da:

$$c_1 = \frac{(1-f)A(L/K)(1+R) - RV - Vq_s/(1-f)}{KV^2(S_n^{N-1} - S_n^N)}$$

La constante c_2 se expresa en términos de c_1 y reorganizando (A-1b):

$$c_2 = \frac{(1+R)(1-f)A}{KV} - c_1 S_n^N$$

substituyendo c_2 y c_1 en (A-1a) da la ecuación para la sección superior de la columna:

$$x_n = \frac{(1-f)(L/K)(1+R) - RV - Vq_s/(1-f)}{KV^2(S_n^N - S_n^{N-1})} - (S_n^N - S_n^n) + \frac{(1+R)(1-f)A}{KV} \quad (A-3)$$

y usando un procedimiento similar para eliminar c_2 y c_1 de (A-2a), para un componente dado,

$$L_{1x1} = R'B_{1x1} + S_{1x1}E + B_{1x1}$$

y por definición:

$$fA = S_{1x1}E + B_{1x1}$$

entonces:

$$L_{1x1} = R'B_{1x1} + fA$$

definiendo

$$g = \frac{S_{1x1}E}{L_{1x1}}$$

y de un balance de materiales:

$$B_{1x1} = \frac{1-g}{1+R} L_{1x1}$$

y de esto:

$$x_1 = \frac{(1+R')/A}{(1+gR')L_1}$$

substituyendo por x_1 en (A-2a) y suponiendo derrame molar constante también en la zona de agotamiento (L'), da:

$$\frac{(1+R')/A}{(1+gR')L_1} = c_3 S_m + c_4 \quad (A-2b)$$

obteniendo una expresión para x_2 por medio de un balance alrededor de la etapa 1.

$$x_2 = \frac{V_1 y_1}{L_1} + \frac{L_1 x_1}{L_2} - \frac{V_0 y_0}{L_2}$$

donde

$$V_0 y_0 = F' y_f + R' B x_m = qR'A + \frac{R'(1-g)L_1 x_1}{1+R'}$$

$$y_1 = K_1 x_1 = \frac{K_1(1+R')/A}{(1+gR')L_1}$$

la siguiente expresión para x_2 se obtiene después de omitir los subíndices de la etapa:

$$x_{N-1} = \frac{(1-f)A}{L'^2(1+gR')} \left[K'V'(1+R) + L'(1+R) - \frac{L'(1+gR')qR'}{f} - L'R(1-g) \right]$$

substituyendo por x_2 en (A-2a), resulta:

$$\frac{(1-f)A}{L'^2(1+gR')} \left[K'V'(1+R) + L'(1+R) - \frac{L'(1+gR')qR'}{f} - L'R(1-g) \right] = c_3(S_m)^2 + c_4 \quad (A-2c)$$

restando (A-2b) de (A-2c) y resolviendo c_2 en términos de c_4 :

$$c_3 = \frac{fAK'V'(1+R) - L'R'(1-g) - L'(1+gR')qR'/f}{L'^2(S_m^2 - S_m)(1+gR')}$$

la ecuación (A-2b) se reorganiza para expresar c_4 en términos de c_3 :

$$c_4 = \frac{(1+R')/A}{(1+gR')L} - c_3 S_m$$

substituyendo c_4 en (A-2a)

$$x_m = c_4(S_m^m - S_m) + \frac{(1+R')/A}{(1+qR')L'}$$

substituyendo c_4 y cancelando S_m en el primer término para dar la siguiente ecuación para la zona de agotamiento:

$$x_m = \frac{fALK'V'(1+R) - L'R(1-q) - L'(1+qR')qR'/3}{L'^2(1+qR')(S_m-1)} (S_m^{m-1}-1) + \frac{(1+R')/A}{(1+qR')L'} \quad (A-4)$$

la ecuación para toda la columna se obtiene combinando (A-3) y (A-4) con un balance alrededor de la etapa de alimentación:

$$V_m y_m + L_{m+1} x_{m+1} + F y_r = V_{m+1} y_{m+1} + L_{m+1} x_{m+1}$$

donde se suponen constantes dentro de cada sección los flujos y además que $x_{m+1} = y_{m+1}/K_{m+1}$

$$V' y_m + L x_m + F y_r = V y_m + \frac{L' y_{m+1}}{K_{m+1}}$$

los subíndices en la etapa de alimentación K será retenido hasta que la decisión se realice de considerarla K ó K'

Las y_{m+1} pueden ser eliminadas por un balance en cada sección V_N, L_{N+1}, V_{N+1} y L_{N+2} y recordando que:

$$L_{N+1} x_{N+1} = q_0 A + \frac{R}{1+R} V_N y_N$$

$$y_N = \frac{(1+R)(1-f)A}{V_N}$$

cambiando por y_{m+1} en un balance en la etapa de alimentación y reemplazando $F y_r$ con $q_0 A$:

$$V' y_m + q_0 A = (1-f)A - q_0 A + \frac{L'(1-f)A}{K_{m+1}} + \frac{L' x_{m+2}}{K_{m+1} V} - \frac{L' q_0 A}{K_{m+1} V}$$

A5

Usando $y_m = K'x_m$ y (A-4), para substituir por y_m y (A-3), para cambiar por x_m da la siguiente ecuación para toda la columna:

$$\frac{K'V' / A [K'V'(1+R) - L'R(1-q) - qrL'(1+qR') / J]}{L'^2(1+qR')(S_m-1)} (S_m^{M-1}-1)$$

$$\frac{K'V'(1+R')/A}{L'(1+qR')} + qrA = (1-f)A - q_0A + \frac{L'(1-f)A}{K_{M+1}V} - \frac{L'q_0A}{K_{M+1}V}$$

$$- \frac{LL'(1-f)A [(L/K)(1+R) - RV - Vq_0 / (1-f)]}{K_{M+1}KV^2 (S_n^N - S_n^{N-1})} (S_n^N - S_n^{M+2})$$

$$\frac{LL'(1+R)(1-f)A}{K_{M+1}KV^2}$$

simplificando esta ecuación, se tiene la forma final de la ecuación (2.4):

$$\frac{(1 - S_n^{N-M}) + R(1 - S_n) + qr(S_n^{N-M} - S_n) + hg(S_n^{N-M} - S_n^{N-M}(1 - S_n^M))}{(1 - S_n^{N-M}) + R(1 - S_n) + hS_n^{N-M}(1 + S_n^{N-M}) + h\left(\frac{1+R}{1+qR'}\right)S_n^M S_n^{N-M}(1 - S_n^M)}$$

(2.4)

APENDICE B

DATOS DE CONSTANTES DE EQUILIBRIO Y ENTALPIA

A continuación se dan los datos de entalpia y de constantes de equilibrio utilizados, así como su forma polinomial y límites de uso. (Estos datos fueron tomados de la referencia [18] y [22])

$$K_i = a_i + \beta_i T + \gamma_i T^2 + \delta_i T^3$$

$$H_{vi} = A_i + B_i T + C_i T^2 \quad T [^\circ\text{F}]$$

$$H_{Li} = a_i + b_i T + c_i T^2 \quad H [\text{Jbtu/lb-mol}]$$

Presión : 400psia
 Temperatura : 0 °F a 300 °F

Especie	a_i	β_i	γ_i	δ_i
C ₁	4.35	2.542×10^{-2}	-2.0×10^{-5}	8.333×10^0
C ₂	0.65	8.183×10^{-3}	2.25×10^{-5}	-2.333×10^{-8}
C ₃	0.15	2.383×10^{-3}	2.35×10^{-5}	-2.333×10^{-10}
n-C ₄	0.0375	5.725×10^{-4}	1.075×10^{-5}	-2.5×10^{-10}
n-C ₅	0.0105	2.692×10^{-4}	2.55×10^{-5}	1.108×10^{-8}

Especie	A _i	B _i	C _i	a _i	b _i	c _i x 10 ⁸
C ₁	1604	9.375	1.782×10^{-3}	0	14.17	-1.782
C ₂	4661	15.54	3.341×10^{-3}	0	16.54	3.341
C ₃	5070	26.54	0	0	22.78	4.899
n-C ₄	5231	33.90	5.812×10^{-3}	0	31.97	5.812
n-C ₅	5411	42.09	8.017×10^{-3}	0	39.68	8.017

Presión : 250psia
 Temperatura : 50 °F a 350 °F

Especie	a_i	$\beta_i \times 10^4$	$\gamma_i \times 10^5$	$\delta_i \times 10^8$
C ₂	1.665	-1.50	73.5	-3.00
C ₃	0.840	-46.6	49.4	-3.033
n-C ₄	-0.177	49.50	-4.15	2.22
n-C ₅	-0.0879	17.70	0.2031	1.310
n-C ₆	0.0930	2.692	10.37	-0.1590

Especie	Ai	Bi	Ci x 10 ²	ai	bi	ci x 10 ²
C ₂	8310	13.20	0.602	6120	9.35	1.50
C ₃	11950	12.35	2.2.0	3620	40.5	-1.32
n-C ₄	16550	9.01	3.780	6280	25.0	4.65
n-C ₅	19200	29.50	0.720	6840	38.5	2.52
n-C ₆	22000	37.00	0	7920	43.5	3.02

forma polinomial:

$$(K_i/T)^{1/2} = a_i + b_i T + c_i T^2 + d_i T^3$$

$$(H_{v,i})^{1/2} = A_i + B_i T + C_i T^2$$

$$(H_{s,i})^{1/2} = a_i + b_i T + c_i T^2$$

$$T [=]^\circ R$$

$$H [=] \text{Btu/lb-mol}$$

Presión : 400psia

Temperatura : Reportados en Chem Eng Prog 44:37(1928)

Especie	a _i x 10 ²	β _i x 10 ³	γ _i x 10 ⁸	δ _i x 10 ¹²
CH ₄	32.718139	-9.6951405	6.9229334	-47.361298
C ₂ H ₆	-9.8400210	67.345943	-37.459290	-9.0732459
C ₃ H ₈	-25.098770	102.39287	-75.221710	153.84709
C ₄ H ₁₀	-14.512474	53.638924	-5.3051604	-173.58329
i-C ₄ H ₁₀	-18.967651	61.239667	-17.891649	-90.855512
n-C ₄ H ₁₀	-14.181715	36.866353	16.521412	-248.23843
n-C ₅ H ₁₂	-7.543390	2.0584231	59.138344	-413.12409
n-C ₆ H ₁₄	1.1506919	-33.885839	97.795401	-542.35941
n-C ₇ H ₁₆	5.5692758	-50.705967	112.17338	-574.89350
n-C ₈ H ₁₈	7.1714400	-52.608530	103.72034	-496.46551
400	2.5278960	-17.311330	33.502879	-126.25039

Especie	A	Bx10	Cx10 ²
CH ₄	-17.899210	1.7395763	-3.7596144
C ₂ H ₆	-8.4857000	1.6286636	-1.9498601
C ₃ H ₈	-12.427900	1.8834652	-2.4839140
C ₄ H ₁₀	-14.500060	1.9802223	-2.9048837
i-C ₄ H ₁₀	-16.5534050	2.1618650	-3.1476209
n-C ₄ H ₁₀	-20.298110	2.3005743	-3.8663417
n-C ₅ H ₁₂	-24.371540	2.5636200	-4.6499694
n-C ₆ H ₁₄	-23.870410	2.6768089	-4.4197793
n-C ₇ H ₁₆	-25.314530	2.8246389	-4.5418718
n-C ₈ H ₁₈	-22.235050	2.8478429	-3.8850819
400	-203.32192	6.3932857	-21.611909

Especie	a	bx10	cx10 ²
CH ₄	44.443874	501.04559	7.3207219
C ₂ H ₆	61.334520	588.75430	11.9486654
C ₃ H ₈	71.828480	658.55130	11.299585
C ₄ H ₁₀	81.795910	389.91919	36.470900
i-C ₄ H ₁₀	147.65414	-1185.2942	152.87778
n-C ₄ H ₁₀	152.66798	-1153.4842	146.64125
n-C ₅ H ₁₂	128.90152	2.0509603	64.501496
n-C ₆ H ₁₄	85.834950	1522.3917	-34.018595
n-C ₇ H ₁₆	94.682620	1479.5387	-19.105299
n-C ₈ H ₁₈	106.32806	1328.3949	1.6230737
400	72.328160	1893.3822	-59.003314

PROGRAM SMITH_BRAIN_LEV_VALUES;

USES

CR1, PPAPAS, PRINTER;

CONST

EF1 = 1E+02;
EC2 = 1E+01;
EK3 = 1E+01;
Enter = #13;

VAR

K, NC, NET, NF, NCF, NCL, I, J, N, IT, MAXIN, IEF, A : INTEREG;
DN, IR, F, F, F, SI, DI, VAF, VAV, SA, I, DE, errorp, In, D, C;
L1, L, V, LF, VP, I, PRP, Q, RCL, PF, SC, LSUB, VSC2, er, te;
OC, CR, R, FAL, THETA, TN, TR, PF : REAL;
SC, P, I : REAL;
M, L, I, I, I, I, AN, II, TR, TB, S, D, D, :
I, SI, I, P, RI, BI, NV, HL, :
CI, DI, I, FV, SN, FF : WARR(0,0,0,0) OF REAL;

STF, tes, ct, dl, TDND : string(10);
rso :
DA :
IDWP :
IBOOLEAN;

FUNCTION FA(T:REAL):REAL;

BEGIN
IF P=300 THEN
FOR I:=1 TO NC DO
K(I):=T*EIF(CALN(ALF(I))+BET(I))+GAM(I)+SOR(I)+DEL(I)+SOR**+I);
ELSE
FOR I:=1 TO NC DO
K(I):=ALF(I)+BET(I)+GAM(I)+SQF(I)+DEL(I)+SOR(I)+T
END;

FUNCTION DDK(T:REAL):REAL;

VAR
DU, DU, U1:REAL;
BEGIN
vars:=I(I);
IF P=300 THEN
FOR I:=1 TO NC DO
BEGIN
DU:=BET(I)+2*GAM(I)+T+C+DEL(I)+SOR(I);
U1:=SOR(ALF(I)+BET(I))+GAM(I)+SOR(I)+DEL(I)+SOR(I)+I;
U1:=ALF(I)+BET(I)+GAM(I)+SOR(I)+DEL(I)+SOR(I)+I;
DU(I):=DU*(3*DU+U1);
END
ELSE
FOR I:=1 TO NC DO
DU(I):=BET(I)+2*GAM(I)+T+DEL(I)+SOR(I);
END;

FUNCTION EV(T:REAL):REAL;

BEGIN
IF P=300 THEN
FOR I:=1 TO NC DO
NV(I):=SOR(DV(I))+BV(I)+T+CV(I)+SOR(I);
ELSE
FOR I:=1 TO NC DO
NV(I):=NV(I)+BV(I)+T+CV(I)+SOR(I);
END;

FUNCTION EL(T:REAL):REAL;

BEGIN
IF P=300 THEN
FOR I:=1 TO NC DO
NL(I):=SOR(ALC(I))+BL(I)+T+DL(I)+SQ- (I);
ELSE
FOR I:=1 TO NC DO
NL(I):=NL(I)+BL(I)+T+DL(I)+SOR(I);
END;

FUNCTION FTR(T:REAL):REAL;

begin
SI:=0;
:=0 (I+1)
FOR I:=1 TO NC DO
SI:=SI+I(I)/I(I);
FTR:=SI-;

```

END;

FUNCTION DT(T:REAL; AREA: REAL)
BEGIN
  DT:=0;
  FOR I:=1 TO NC DO
    DT:=DT+(X(I)/SQRT(I))*D(I);
  DT:=DT;
END;

FUNCTION FDT(B:REAL; AREA: REAL)
BEGIN
  ST:=0;
  V:=FK(I);
  FOR I:=1 TO NC DO
    ST:=ST+X(I)*D(I);
    FT:=ST-I;
  END;
END;

FUNCTION DTB(T:REAL; AREA: REAL)
BEGIN
  DT:=0;
  V:=DK(I);
  FOR I:=1 TO NC DO
    DT:=DT+(X(I)*D(I));
    DTB:=DT;
  END;
END;

FUNCTION FITE(REAL; REAL)
BEGIN
  T:=T*(I)/2;
  W:=X(I)*T;
  V:=FK(I);
  FOR I:=1 TO NC DO
    X(I):=X(I);
    V:=FK(I);
    FOR I:=1 TO NC DO
      X(I):=X(I);
    END;
  END;
  BEGIN
    S(I):=-X(I)/L;
    SN(I):=X(I)*V/LP;
    IF (S(I)=0) OR (SN(I)=0)
      OR (ABS(1-S(I))<E) OR (ABS(1-SN(I))<E) THEN
      BEGIN
        SA:=TRUE;
        A:=S(I);
      END;
    A(I):=1-EXP(-(N-I)*LN(S(I)));
    B(I):=1-S(I);
    C(I):=EXP(-(N-I)*LN(S(I)));
    D(I):=1-EXP(-(N-I)*LN(SN(I)));
  END;
  IF (I=1) OR (I=NC) THEN
    BEGIN
      FOR I:=1 TO NC DO
        H(I):=X(I)/A(I)*(1/S(I)+(1-S(I))/(1-S(I)));
      END;
    ELSE IF (I=1) OR (I=NC) THEN
      BEGIN
        FOR I:=1 TO NC DO
          H(I):=L/FP*(1-S(I))/(1-SN(I));
        END;
      ELSE IF (I) AND (I) THEN
        BEGIN
          FOR I:=1 TO NC DO
            H(I):=FP*(1-S(I))*L*(1-S(I))/(1-SN(I))*L/FP*(1-S(I))/(1-SN(I));
          END;
        END;
      END;
    FUNCTION FFF(T:REAL; REAL)
    BEGIN
      V:=T;
      FOR I:=1 TO NC DO
        FF(I):=A(I)*P(I)+B(I)*V+(A(I)+B(I)+H(I)+C(I))*S(I);
      END;
      BEGIN
        B(I):=FF(I)*M(I);
      END;
    END;
  END;

```



```

END;
PROCEDURE LECTURA;
BEGIN
  VENTANA(47,5,60,20);
  textcolor(2);
  READLN(MC);
  READLN(NE);
  READLN(NF);
  READ(P);
  IF (P=250) OR (P=300) OR (P=400) THEN WRITE
  ELSE AVISO1;
  readln(F);
  READLN(DR);
  READLN(R);
  READLN(QI);
  writeLn;
  writeLn;
  writeLn;
  writeLn;
  VENTANA(5,5,50,25);
  TEXTCOLOR(7);
  IF (QI=4) OR (QI=3) THEN
  BEGIN
    gotoy(5,13);
    writel' Temperatura alimentación (F):';
    TEXTCOLOR(2);
    read(t);
  END;
  VENTANA(47,18,60,20);
  textcolor(2);
  READLN(NEP);
  READLN(TCDDO);
  VENTANA(1,1,80,25);
  clrscr;
  titulo;
  ventana(5,5,25,25);
  TEXTCOLOR(7);
  IF P=400 THEN
  DATOS1
  ELSE IF P=250 THEN
  DATOS2
  ELSE IF P=300 THEN
  DATOS4;
  FOR I:=1 TO MC DO
  WRITELN' Moles de ',cadena(i),'';
  ventana(5,5,35,25);
  TEXTCOLOR(2);
  FOR I:=1 TO MC DO
  READLN(MR(I));
  FOR I:=1 TO MC DO
  I(I):=MR(I)/F;
  VENTANA(1,1,80,25);
  CORREC_DATOS
  END;
PROCEDURE ESPERA;
BEGIN
  CLASC;
  GOTCX(5,12);
  TEXTCOLOR(7);
  WRITELN' Error : ';
  GOTDY(34,12);
  WRITE(errores2i8);
END;
PROCEDURE TRACCIO;
BEGIN
  WHILE ABS(FTR(TRCJ))>=E1 DO
  TRCJ:=TRCJ-FTR(TRCJ)/DTR(TRCJ);
END;
PROCEDURE TIBURBIA;
BEGIN
  WHILE ABS(FTB(TBCJ))>=E1 DO
  TBCJ:=TBCJ-FTB(TBCJ)/DTB(TBCJ);
END;
PROCEDURE DTHETA;
BEGIN
  THETA:=0;
  WHILE ABS(THET(THETA))>=E1 DO

```

```

THEI1:=THETA-THETA*(THETA)/DIHET(1);
FOR I:=1 TO NC DO
  BEGIN
    D(I):=NH(I)/(1+THETA*(G(I)/D(I)));
    B(I):=NH(I)-D(I);
    XI(I):=D(I)/DR;
    XN(I):=B(I)/SR;
  END;
END;
END;

PROCEDURE PERFIL;
BEGIN
  J:=0;
  TR(J):=TF-TF/NET;
  T(I):=TF+IF*I;
  VA:=FF*(F);
  FOR I:=1 TO NC DO
    BEGIN
      B(I):=FF(I)+N(I);
      D(I):=NH(I)-B(I);
      IF D(I)<=0 THEN D(I):=-E-5;
    END;
  DIHETA;
  FOR I:=1 TO NC DO
    BEGIN
      XI(I):=D(I)/DR;
      XN(I):=B(I)/SR;
    END;
  TROC I;
  TBRBUJA;
END;

```

```

PROCEDURE CALCOGENERALES;
BEGIN
  IF Q1='1' THEN
    BEGIN
      IF P=300 THEN
        TF:=600;
      ELSE
        TF:=210;
        FOR I:=1 TO NC DO
          XN(I):=Z(I);
          J:=0;
          T(I):=TF;
          TBRBUJA;
          TF:=T(I);
          Q:=1;
          VA:=EL*(F);
          FOR I:=1 TO NC DO
            HF:=F+XN(I)*Z(I);
            LIQ:=F;
            VPI:=0;
          END;
        END;
      ELSE IF Q1='2' THEN
        BEGIN
          IF P=300 THEN
            TF:=600;
          ELSE
            TF:=210;
            FOR I:=1 TO NC DO
              XI(I):=Z(I);
              J:=0;
              TR(I):=TF;
              TROC I;
              TF:=TR(I);
              Q:=0;
              VAX:=E*TF;
              FOR I:=1 TO NC DO
                HF:=F+XN(I)*Z(I);
                VPI:=F;
                LIQ:=0;
              END;
            HF:=F*F;
          END;
        END;
      END;
    END;

```

```

PROCEDURE CLASH;
BEGIN
  VA:=0;
  VAX:=F*(F);
  VPI:=0;
  PHI:=0.0;

```

```

VAR:AC;
LSUB:=FLASH*(PHI);
PHI:=1;
VSCB:=FLASH*(PHI);
IF LSUB=0 THEN
  BEGIN
    VAR:=EL(TF);
    FOR I:=1 TO NC DO
      HF:=HF+HV(I)*Z(I);
      HF:=HF*F;
    END
  ELSE IF VSCB=0 THEN
    BEGIN
      VAR:=EV(TF);
      FOR I:=1 TO NC DO
        HF:=HF+HV(I)*Z(I);
        HF:=HF*F;
      END;
END;

PROCEDURE FLASH;
VAR
  JV,IV :ARRAY [1..11] OF REAL;
BEGIN
  PHI:=1;
  WHILE ABS((FLASH*(PHI)))/MERQ DO
    PHI:=PHI*(FLASH*(PHI)/FLASH*(PHI));
    VAR:=EL(TF);
    FOR I:=1 TO NC DO
      BEGIN
        X(I):=Z(I)/(1+PHI*(K(I)-1));
        Y(I):=X(I)*K(I);
      END;
    DH1:=0;
    DH2:=0;
    FOR I:=1 TO NC DO
      BEGIN
        SH1:=DH1+X(I)+Y(I);
        DH2:=DH2+X(I)+Y(I);
      END;
    VAP:=VAP;
    LIQ:=VAP;
    HF:=DH1+VAP*(DH2*LIQ);
    Q:=IF-VAP/F;
  END;

PROCEDURE CALCULAD;
VAR
  TL,MLS,M,S,MY,REAL;
BEGIN
  VAR:=0;
  J:=1;
  TX:=TF;
  IF LSUB=0 THEN
    MY:=HF
  ELSE IF VSCB=0 THEN
    MY:=HF;
    FOR I:=1 TO NC DO
      BEGIN
        XN(I):=Z(I);
        XI(I):=Z(I);
      END;
      TBK(J):=TF;
      TBLRBJ(J);
      TF:=TBK(J);
      VAR:=EL(TF);
      VAR:=0;
      FOR I:=1 TO NC DO
        VAR:=VAR+XN(I)+XI(I);
        #S:=0;
        TR(J):=TF;
        TROC(I);
        TF:=TR(J);
      VAR:=0;
      VAR:=EV(TF);
      FOR I:=1 TO NC DO
        VAR:=VAR+X(I)+Y(I);
        #MS:=VAR*F;
        Q:=(MS-MY)/(MS-MLS);
        VAR:=0;
      TF:=TX;

```

```

IF LSUB>0 THEN
  BEGIN
    VAP:=0;
    LIQ:=F;
  END
ELSE IF VSUB<0 THEN
  BEGIN
    VAP:=F;
    LIQ:=0;
  END;
END;

```

```

procedure generales;

```

```

begin
  NF:=0;
  IF (Q1='1') OR (Q1='2') THEN
    CALCDENSALES
  ELSE IF (Q1='3') OR (Q1='4') THEN
    BEGIN
      CFLASH;
      IF (LSUB>0) OR (V>CB(0)) THEN
        CALCULAQ
      ELSE
        CFLASH;
    END;

```

```

IF TCOND='1' then
  N:=NETP;
  else n:=net;
  NCL:=NC-1;
  DR:=F-DR;
  L:=DR+R;
  V:=L+DR;
  LP:=L+QNF;
  VP:=V-11-Q)*F;
END;

```

```

procedure factorf;

```

```

var
  te0,TE1,TE2:real;
begin
  TE0:=TF;
  TE1:=TF+5;
  TE2:=(TE0+FFF(TE1)-TE1+FFF(TE0))/(FFF(TE1)-FFF(TE0));
  WHILE ABS(FFF(TE2))-ER1 DO
    BEGIN
      IF FFF(TE0)+FFF(TE2)>0 THEN
        TE0:=TE2
      ELSE
        TE1:=TE2;
      TE2:=(TE0+FFF(TE1)-TE1+FFF(TE0))/(FFF(TE1)-FFF(TE0));
    END;
  TE1:=TE2;
end;

```

```

PROCEDURE COMPOSICIONES;

```

```

BEGIN
  FOR J:=1 TO NC DO
    BEGIN
      IN(I):=0*(1)/TC;
      IN(J):=811/8C;
    END;
  TR(J):=TR(J-1);
  TC(J):=TC(J-1)
END;

```

```

PROCEDURE TECLA;

```

```

BEGIN
  VENTANA(1,1,80,25);
  GOTO(Y(22,25));
  textcolor(12);
  WRITELN('Primera cualquier tecla para continuar...');
  TC:=READKEY;
END;

```

```

PROCEDURE AVISO;

```

```

VAR
  AK:STATUS(2);
BEGIN
  VENTANA(1,1,80,25);
  CLS;
  GOTO(Y(20,12));
  TEXTCOLOR(2);

```

```

IF (MAXITERA) > 50 OR (TE(TL)) OR (TE(TL)) THEN
    OK:=No
ELSE
    OK:=Si;
WRITE El estado .ok, converge despues de: ,MAXITERA, iteraciones.,'G);
TECLA;
END;

```

```

PROCEDURE impresion;
BEGIN
    AVISO;
    CLASCR;
    VENTANA(1,1,80,25);
    TITULO;
    TEXTCOLOR(7);
    VENTANA(1,3,36,15);
    WRITELN('
    textcolor(2);
    WRITELN( Ligero Clave          : ,cadena(ncp)l2);
    WRITELN( Pesado Clave         : ,cadena(ncp)l2);
    WRITELN( Alimentacion [l:bol/hr] : ,f1l3);
    WRITELN( Destilado           : ,dr1l2);
    WRITELN( Fondos              : ,dr1l3);
    WRITELN( Condensador         : ,tcs2);
    WRITELN( Temperatura (R)     : ,t;
    WRITELN( Como                : ,tr1j3);
    if (te(tl)) OR (TE(TL)) then
        begin
            textcolor(12);
            WRITELN( Plato alimentacion : ,tE1l3);
        end
    else
        begin
            WRITELN( Plato alimentacion : ,tE1l3);
        end;
    end;
    textcolor(2);
    WRITELN( Fondos              : ,tb1j3);
    WRITELN( Tempo alimentacion : ,tfl3);
    VENTANA(36,4,80,15);
    TEXTCOLOR(2);
    WRITELN( Condición térmica alaa. : ,ctr2);
    IF (Cl='Liq.Sub') OR (Cl='Vap.Sob') THEN
        WRITELN( 'W/F' ) : ,Indet'
    else
        WRITELN( 'W/F' ) : ,PH1l3);
    WRITELN( Presion (Psta)       : ,p1l2);
    WRITELN( Recuperacion C.L. X : ,RCL2);
    WRITELN( Recuperacion C.P. Z : ,RCP2);
    WRITELN( Relación de Reflujo : ,Rr2);
    WRITELN( Etapas Teóricas     : ,net2);
    WRITELN( Etapa de alimentación : ,NE12);
    WRITELN( Qc [Btu/hr] : ,ABS(qc)l3);
    WRITELN( Qr [Btu/hr] : ,ABS(qr)l3);
    if abs(ter*100)=1E-5 THEN
        WRITELN( 'Error %' : ,ABS(ter*100)l2);
    ELSE
        WRITELN( 'Error %' : ,<1E-5');
    TECLA;
    VENTANA(1,1,80,25);
    CLASCR;
    TITULO;
    TEXTCOLOR(7);
    WRITELN('
    VENTANA(1,5,80,13);
    textcolor(2);
    WRITELN( Flujo Vapor enriquecedor [W1] : ,Vr2);
    WRITELN( Flujo Vapor alimentacion [Wn+1] : ,VWP2);
    WRITELN( Flujo Vapor agotador [Wo] : ,VP2);
    WRITELN(
    WRITELN( Flujo Líquido enriquecedor [L1] : ,Lr2);
    WRITELN( Flujo Líquido alimentación [Ln+1] : ,Llq2);
    WRITELN( Flujo Líquido agotador [Lo] : ,LP2);
    TECLA;
    CLASCR;
    TITULO;
    VENTANA(1,3,80,6);
    textcolor(7);
    WRITELN('
    WRITELN( Componentes:          Distribución de Componentes. ');
    WRITELN( Alimentación:        Destilado:          Residual: ');

```

```

WRITELN:
  ventana(1,7,10,nc*7);
  textcolor(2);
  FOR I:=1 TO NC DO
    WRITELN(cadema(i));
  textcolor(2);
  ventana(1,1,80,25);
  VENTANA(18,7,26,NC*7);
  FOR I:=1 TO NC DO
    WRITELN(F(I));
  VENTANA(28,7,34,7*NC);
  FOR I:=1 TO NC DO
    WRITELN(Z(I));
  VENTANA(38,7,54,7*NC);
  FOR I:=1 TO NC DO
    WRITELN(D(I));
  VENTANA(48,7,54,7*NC);
  FOR I:=1 TO NC DO
    WRITELN(X(I));
  VENTANA(57,7,65,NC*7);
  FOR I:=1 TO NC DO
    WRITELN(B(I));
  VENTANA(64,7,75,7*NC);
  FOR I:=1 TO NC DO
    WRITELN(Inc(I));
  VENTANA(1,7*NC,80,25);
  writeLn;
  WRITE('Totales: ',f1:4,D:20;f4,B:19;4);
  VENTANA(1,1,80,25);
  GOTO(Y(22,25));
WRITE('Dorima ');TEXTCOLOR(127);WRITE('Enter ');TEXTCOLOR(2);WRITE(' para terminar. ');
T:=READKEY;
RSP:=UPCASE(READKEY);
textcolor(2);
end;

```

PROCEDURE GENERAL;

BEGIN

MAXITERA:=0;

KX:=KK*1;

REPEAT

MAXITERA:=MAXITERA+1;

FACTORF;

J:=J+1;

COMPOSICIONES;

TREJIO;

TBURBLLA;

ERRORP:=SQRT((TR(J)-TREJ-1)+(TB(J)-TBJ-1));

ESPERA

UNTIL (ABS((TR(J)-TREJ-1))<=ER3) AND (ABS((TB(J)-TBJ-1))<=ER3) OR (MAXITERA>3);

END;

PROCEDURE CARBAS_TERMINAS;

VAR

HVC,HLC,TAC;

TVI,HVI,HLF :REAL;

VVC,VVI :ARRAY[1..11] OF REAL;

BEGIN

HVC:=0;

HVI:=0;

HLF:=0;

IF TCOND=2 THEN

BEGIN

VAI:=EL(TR(J));

VAV:=EV(TREJ);

FOR I:=1 TO NC DO

BEGIN

HVC:=HVC+VVC(I)*I(I);

HVI:=HVI+VVI(I)*I(I);

END;

GC:=VAV*(HVC-HLC);

END

ELSE IF TCOND=1 THEN

BEGIN

VAV:=FA(TREJ);

FOR I:=1 TO NC DO

VVI(I):=EVI(I)*(DR+L/K(I))/V;

FOR I:=1 TO NC DO

BEGIN

VVC(I):=VVI(I);

```

                XI(I):=VVI(I);
                END;
                TAC:=TR(J);
                TROC(I):
                TVI:=TR(J);
                VAI:=EV(TVI);
                FOR I:=1 TO NC DO
                PVI:=WVI+WVI(I)+VVI(I);
                TR(J):=TAC;
                FOR I:=1 TO NC DO
                XI(I):=WCI(I);
                WAI:=EV(TR(J));
                FOR I:=1 TO NC DO
                WVC:=WVC+WVI(I)+XI(I);
                VAI:=EL(TR(J));
                FOR I:=1 TO NC DO
                HLC:=HLC+WVI(I)+XI(I)/K(I);
                QC:=WVI+W-HLC-W-HVC+DR;
                END;
                VAI:=EL(TB(J));
                FOR I:=1 TO NC DO
                HLF:=HLF+H(I)*X(I);
                IF TCOND='2' THEN
                WR:=QC+HLC+DR+HLF+BR+HF
                ELSE IF TCOND='1' THEN
                BR:=QC+HVC+DR+HLF+BR+HF;
                END;
                PROCEDURE CFINAL;
                VAR
                TIB,TIR:REAL;
                VAB :ARRAY(1..11) OF REAL;
                BEGIN
                rcp:=tb(nc)/na(nc)*100;
                rcl:=d(nc)/na(nc)*100;
                IF QI='1' THEN
                begin
                CT:='Liq.Sat.';
                phi:=0;
                end
                else IF QI='2' THEN
                begin
                CT:='Vap.Sat.';
                phi:=1;
                end
                ELSE IF (LSUB>0) THEN
                CT:='Liq.Sub'
                ELSE IF (VSOB<0) THEN
                CT:='Vap.Sob'
                else IF (QI='3') or ((I)phi) AND (phi>0) THEN
                CT:='Mezcla L-V';
                IF TCOND='1' THEN
                TCS:='Parcial'
                ELSE
                BEGIN
                TCS:='Total';
                FOR I:=1 TO NC DO
                VAB(I):=X(I);
                FOR I:=1 TO NC DO
                X(I):=XI(I);
                TIB:=TB(J);
                TIR:=TR(J);
                TBURSA:
                TR(J):=TB(J);
                TB(J):=TIB;
                FOR I:=1 TO NC DO
                X(I):=VAB(I);
                END;
                FOR I:=1 TO NC DO
                BEGIN
                D(I):=WM(I)-FF(I)*WM(I);
                B(I):=WM(I)-D(I);
                END;
                CARBAS_TERMICAS;
                END;
                PROCEDURE PRINCIPAL;
                BEGIN
                GENERALES;
                PERFIL;
                GENERAL;
                END;

```

```
PROCEDURE PRINC1;  
BEGIN  
  REPEAT  
    ENTRADA;  
    LECTURA;  
    UNTIL UPCASE(RSP)='S';  
  CLSORA;  
  GOTOFY(25,12);  
  textcolor(7);  
  WRITE('Iniciando calculos...');  
END;
```

```
BEGIN  
  REPEAT  
    PRINC1;  
    CFINL;  
    IMPRESION;  
  UNTIL (READKEY=#13);  
END.
```

PROGRAM MANW_HEHE_V11

USES

CR1,PFAPAS;

CONST

EPSILON =1E-5;
EPSILON1=0.0001;
ENTER =#11;

VAR

NET,NF,NC,1,J,K,II,NCL,NCP,N,MAXITERA :INTEGER;
ST,DT,R,GA,TR,TO,THEIA,DH1,DH2,RL,RCP, :real;
DSUM,ER,VAT,SM,SS,PHI,VM1,VM2,LSUB,VSUB :real;
TDF,TO,TU,ORDENOR,ORDENORI,PENDIENTE,PENDIENTE1 :real;
DN1,J1,J2,II,J3,VI,MM,1,D,B :ARRAY[1..11,1..27] OF REAL;
FE,IF,PF,U,N,G,L1,Q,VAP,SQR,ALJ, :
HL,N,1,2,3,GA,NF,TR,TS,CTA,ANT,DNT, :
TE,CE,BE,CE,DE :ARRAY[1..20] OF REAL;
DNT,DNT,PP,QQ :ARRAY[1..20] OF REAL;
ICE :ARRAY[1..27,1..50] OF real;
FMO,IC :DUMF;
TCS,TCIND,CT,ql :STRING[10];
hvap,hliq :array[0..20] of real;

FUNCTION KER(T:real):real;

BEGIN

IF PF(NF)=300 THEN

FOR I:=1 TO NC DO

K1J1(I,J):=T*EXP(3*LN(ALF(I)*BET(I))+GM(I)*SQR(T)+DEL(I)*SQR(T)*T)

ELSE

FOR I:=1 TO NC DO

K1J1(I,J):=ALF(I)*BET(I)+GM(I)*SQR(T)+DEL(I)*SQR(T)*T

END;

FUNCTION DKER(T:real):real;

VAR

DU,UU,UI:ARRAY[1..11] OF REAL;

BEGIN

IF PF(NF)=300 THEN

FOR I:=1 TO NC DO

BEGIN

DU(I):=BET(I)*2*GM(I)*T+3*DEL(I)*SQR(T);

UU(I):=SQR(ALF(I)*BET(I))+GM(I)*SQR(T)+DEL(I)*SQR(T)*T;

UI(I):=ALF(I)*BET(I)+GM(I)*SQR(T)+DEL(I)*SQR(T)*T;

DK1J1(I,J):=UI(I)*3*DU(I)*T*U1(I);

END

ELSE

FOR I:=1 TO NC DO

DK1J1(I,J):=BET(I)*2*GM(I)*T+3*DEL(I)*SQR(T)

END;

FUNCTION EV(T:REAL):REAL;

BEGIN

IF PF(NF)=300 THEN

FOR I:=1 TO NC DO

HV(I):=SQR(V(I))+BV(I)*T+CV(I)*SQR(T)

ELSE

FOR I:=1 TO NC DO

HV(I):=HV(I)+BV(I)*T+CV(I)*SQR(T)

END;

FUNCTION EL(T:REAL):REAL;

BEGIN

IF PF(NF)=300 THEN

FOR I:=1 TO NC DO

HL(I):=SQR(ALF(I)*BL(I)+CL(I)*SQR(T)

ELSE

FOR I:=1 TO NC DO

HL(I):=ALF(I)+BL(I)*T+CL(I)*SQR(T)

END;

FUNCTION FTR(T:REAL):REAL;

BEGIN

ST:=0;

VM:=RED(T);

FOR I:=1 TO NC DO

ST:=ST+J1(I,J)/K1J1(I,J);

FTR:=ST-1;

END;

```

FUNCTION DTR(Tr:REAL):REAL;
BEGIN
  Dt:=0;
  Vt:=kEQ(Tr);
  FOR I:=1 TO NC DO
    Dt:=Dt+(VtJ(I,J)/SQR(KIJ(I,J)+DKIJ(I,J)));
  DTr:=-Dt;
END;

FUNCTION FTB(TB:REAL):REAL;
BEGIN
  St:=0;
  Vt:=kEQ(TB);
  FOR I:=1 TO NC DO
    St:=St+(VtJ(I,J)+KIJ(I,J));
  FTB:=St-1;
END;

FUNCTION DTB(TB:REAL):REAL;
BEGIN
  Dt:=0;
  Vt:=kEQ(TB);
  FOR I:=1 TO NC DO
    Dt:=Dt+(VtJ(I,J)+DKIJ(I,J));
  DTB:=Dt;
END;

FUNCTION FFLASH(PH:REAL):REAL;
VAR
  FFLA:REAL;
BEGIN
  FFLA:=0;
  FOR I:=1 TO NC DO
    FFLA:=FFLA+(Z(I,J)*(1-KIJ(I,J)))/(1+PH*(KIJ(I,J)-1));
  FFLASH:=FFLA;
END;

FUNCTION DFLASH(PH:REAL):REAL;
VAR
  DFLA:REAL;
BEGIN
  DFLA:=0;
  FOR I:=1 TO NC DO
    DFLA:=DFLA+(Z(I,J)*SQR(1-KIJ(I,J)))/SQR(1+PH*(KIJ(I,J)-1));
  DFLASH:=DFLA;
END;

FUNCTION FHETA(THETA:REAL):REAL;
VAR
  STT:REAL;
BEGIN
  STT:=0;
  FOR I:=1 TO NC DO
    STT:=STT+(MLI,NF)/(1+THETA*(BLI,NET)/DCI,I));
  FHETA:=STT-DR;
END;

FUNCTION DTHETA(THETA:REAL):REAL;
VAR
  DTT:REAL;
BEGIN
  DTT:=0;
  FOR I:=1 TO NC DO
    DTT:=DTT+(MNL,NF)*(BLI,NET)/(DCI,I))/SQR(1+THETA*(BLI,NET)/DCI,I));
  DTHETA:=-DTT;
END;

PROCEDURE VENTANA(X1,Y1,X2,Y2:WORD);
BEGIN
  WINDOW(X1,Y1,X2,Y2);
END;

PROCEDURE TITULO;
BEGIN
  CLSCR;
  TEXTCOLOR(7);
  GOTO(Y/25,1);
  WRITELN('Metodo de Wang-Hente, 1');
  TEXTCOLOR(2);
  FOR I:=0 TO 79 DO

```

```

WRITE(' ')
END;

PROCEDURE ESPERA;
BEGIN
  VENTANA(1,1,80,25);
  CLSCLR;
  TEXTCOLOR(7);
  CLMCR;
  GOTDY(25,12);
  WRITE('Error: ',err2:3);
END;

PROCEDURE TECLA;
BEGIN
  VENTANA(1,1,80,25);
  gotoxy(22,25);
  textcolor(127);
  WRITE('Oprima cualquier tecla para continuar...');
  tci:=readkey;
END;

PROCEDURE AVISO;
VAR
  AK:STRING(2);
BEGIN
  CLSCLR;
  VENTANA(1,1,80,25);
  textcolor(12);
  GOTDY(22,12);
  if maxiaiter=150 then
    AK:='No'
  ELSE
    AK:='Si';
  WRITE('El metodo ');WRITE(AK);WRITE(' converge despues de ',maxiaiter,' iteraciones');
  TECLA;
END;

PROCEDURE ENTRADA;
BEGIN
  TITULO;
  VENTANA(5,5,50,25);
  TEXTCOLOR(7);
  WRITELN('Numero de componentes      ');
  WRITELN('Etapas Teoricas                    ');
  WRITELN('Preston de operacion                [Psia] ');
  WRITELN('Cantidad alimentada.                [lbmol/hr] ');
  WRITELN('Cantidad destilada.                 ');
  WRITELN('Ratido de operacion                  ');
  WRITELN('Condicion termica de la alimentacion ');
  WRITELN('    1.-Liquido Saturado.              ');
  WRITELN('    2.-Vapor Saturado.                ');
  WRITELN('    3.-Mezcla Liquido-Vapor.         ');
  WRITELN('    4.-Temperatura.                  ');
  WRITELN('Numero componente clave pesado      ');
  WRITELN('Condensador                          ');
  WRITELN('    1.- Parcial.                      ');
  WRITELN('    2.- Total.                        ');
END;

PROCEDURE IMPRESION_FLUJOS;
BEGIN
  VENTANA(1,1,80,25);
  CLSCLR;
  TITULO;
  TEXTCOLOR(7);
  WRITE('Eto: ');
  WRITE('Temp: ');
  IF NC<=5 THEN
    BEGIN
      FOR j:=1 TO NC DO
        WRITE(CADENA(1):2);
        WRITE(' E1j:');
        textcolor(12);
        VENTANA(1,5,4,25);
        FOR j:=1 TO NET DO
          WRITELN(j);
        VENTANA(5,5,11,25);
    END;
  END;

```

```

FOR J:=1 TO NET DO
  Writeln(CCL:1,K:1:3:2);
  VENTANA(15,5,60,25);
  M:=15;
FOR I:=1 TO NC DO
  BEGIN
    VENTANA(M,5,M+5,25);
    FOR J:=1 TO NET DO
      WRITE(I:J:1,J:1:2:4);
    M:=M+9;
    END;
  M:=M+3;
  VENTANA(M,5,M+5,25);
  FOR J:=1 TO NET DO
    WRITE(1.0:2:4);
TECLA;
END;
ELSE IF NC>5 THEN
  BEGIN
    FOR J:=1 TO NET DO
      BEGIN
        VENTANA(1,1,80,25);
        TITULO;
        textcolor(7);
        Writeln('Etapas');
        Writeln('Temperatura 1',TCEL:K:2:3);
        Writeln;
        FOR I:=1 TO NC DO
          Writeln(Cadena:1:3:2);
        VENTANA(15,6,60,25);
        textcolor(2);
        FOR I:=1 TO NC DO
          Writeln(I:J:1,J:1:2:4);
        TECLA;
      END;
    END;
  END;

```

```

VENTANA(1,1,80,25);
CLSCR;
TITULO;
IF NET<=17 THEN
  BEGIN
    textcolor(7);
    Writeln('Etapas');
    Writeln('Flujo Vapor:');
    Writeln('Flujo Liquido:');
    textcolor(2);
    VENTANA(1,5,4,25);
    FOR J:=1 TO NET DO
      Writeln(J);
    VENTANA(8,5,27,25);
    CLSCR;
    FOR J:=1 TO NET DO
      Writeln(VAP:J:3:3);
    VENTANA(28,5,46,25);
    FOR J:=1 TO NET DO
      Writeln(LIQ:J:3:2);
    END;
  ELSE
    BEGIN
      FOR J:=1 TO NET DO
        BEGIN
          TITULO;
          textcolor(7);
          Writeln('Etapas');
          Writeln('Flujo de Vapor',VAP:J:3);
          Writeln('Flujo de Liquido',LIQ:J:3);
        END;
      END;
    END;
  END;
VENTANA(1,1,80,25);
END;

```

```

PROCEDURE IMPRESION;
BEGIN
  av:=0;
  clscr;
  TITULO;
  TEXTCOLOR(7);
  VENTANA(1,3,36,15);
  Writeln('Resultados Finales. ');
  textcolor(2);
  Writeln('Ligero Clave',CADENA:incl:2);
  Writeln('Pesado Clave',CADENA:incl:2);
  Writeln('Alimentacion (l/mol/hr)',FENF:3);

```

```

WRITELN('Destilado' ' ',dr1:13);
WRITELN(' Fondos' ' ',br1:13);
WRITELN(' Condensador' ' ',tcr:2);
IF PF(INF)=300 THEN
WRITELN(' Temperatura (R)' ' ');
ELSE
WRITELN(' Temperatura (F)' ' ');
WRITELN(' Domo' ' ',TCE(1,4):13);
WRITELN(' Plato alimentacion' ' ',tCE(4F,3):13);
WRITELN(' Fondos' ' ',tCE(NET,4):13);
WRITELN(' Temp. alimentacion' ' ',t(INF):13);
VENTANA(36,4,80,15);
WRITELN(' Condicion termica alim.'@1:2);
if (ctafnf)>0 or (ctafnf)<0 then
WRITELN(' (V/F)' ' 'Indet')
else
WRITELN(' (V/F)' ' ',PH:13);
WRITELN(' Presion (Psia)' ' ',PF(INF):12);
WRITELN(' Recuperacion C.L. %' ' ',RCL:12);
WRITELN(' recuperacion C.P. %' ' ',RCF:12);
WRITELN(' Relacion de Reflujo' ' ',Rr:2);
WRITELN(' Etapas Teóricas' ' ',net:2);
WRITELN(' Etapa de alimentacion' ' ',nf:2);
WRITELN(' Dc' '(btu/hr) ',ABS(DC):3);
WRITELN(' Or' '(btu/hr) ',ABS(ORNET):2);
IF ER<=0.01*NET THEN
WRITELN(' Error ((E+I)-Tn)^2' ' ',err:4)
ELSE
BEGIN
TEXTCOLOR(127);
WRITELN(' Error ((E+I)-Tn)^2' ' ',err:4);
END;
textcolor(127);
TECLA;
CURSOR;
TITULO;
VENTANA(1,3,80,6);
TEXTCOLOR(7);
WRITELN(' Distribución de Componentes. ');
textcolor(2);
WRITELN(' Componente: Alimentación: Destilado: Residuo: ');
WRITELN(' ' ' ' ' ' ' ');
WRITELN(' ' ' ' ' ' ' ');
VENTANA(1,7,10,nc+7);
textcolor(7);
FOR i:=1 TO NC DO
WRITELN(cadama(i));
VENTANA(1,1,80,25);
textcolor(2);
VENTANA(18,7,26,nc+7);
FOR i:=1 TO NC DO
WRITELN(NW(1,WF):3:4);
VENTANA(28,7,34,7*NC);
FOR i:=1 TO NC DO
WRITELN(z(i,WF):1:4);
VENTANA(38,7,54,7*NC);
FOR i:=1 TO NC DO
WRITELN(O(1,1):3:4);
VENTANA(48,7,54,7*NC);
IF TOOND=1 THEN
BEGIN
FOR i:=1 TO NC DO
WRITELN(XIJ(1,1):1:4);
END
ELSE
FOR i:=1 TO NC DO
WRITELN(YIJ(1,1):1:4);
VENTANA(57,7,65,nc+7);
FOR i:=1 TO NC DO
WRITELN(z(i,WF):3:4);
VENTANA(66,7,75,7*NC);
FOR i:=1 TO NC DO
WRITELN(XIJ(1,1,NET):1:4);
VENTANA(1,7,nc,80,25);
WRITELN(' Total: ',t(INF):16:4,Dr:20:4,Br:19:4);
TECLA;
IMPRESION FLLJOS;
textcolor(7);

```

```

        GOTO Y(22,25);
        WRITE('Opraa ');TEXTCOLOR(127);WRITE('Enter');TEXTCOLOR(2);WRITE(' para terminar. ');
        TC:=READKEY;
        RSP:=UPCASE(READKEY);
        textcolor(2);
    END;

PROCEDURE LECTURA;
BEGIN
    VENTANA(47,5,60,20);
    TEXTCOLOR(2);
    READLN(NC);
    READLN(NET);
    READLN(NF);
    READLN(NF);
    IF (PF(NF)=250) OR (PF(NF)=300) OR (PF(NF)=400) THEN
        WRITE
    ELSE
        AVISO1;
        READLN(FE(NF));
        READLN(DR);
        READLN(DI);
        READLN(CT);
        WRITELN;
        WRITELN;
        WRITELN;
        WRITELN;
        VENTANA(5,5,50,25);
        TEXTCOLOR(2);
        IF (CT='4') OR (CT='3') THEN
            BEGIN
                textcolor(7);
                GOTO Y(5,13);
                WRITE('Temperatura alimentación (F):');
                READLN(FI);
            END;
            VENTANA(47,16,60,20);
            TEXTCOLOR(2);
            READLN(NCF);
            READLN(TCND);
            VENTANA(1,1,80,25);
            CLRSCL;
            TITULO;
            VENTANA(5,5,35,25);
            CLRSCL;
            TEXTCOLOR(7);
            WriteLn('Temperaturas del método corto:');
            WriteLn('Destilado :');
            WriteLn('Alimentación:');
            WriteLn('Fondos :');
            VENTANA(20,6,35,25);
            TEXTCOLOR(2);
            READLN(I0);
            READLN(DF);
            READLN(TU);
            VENTANA(1,1,80,25);
            CLRSCL;
            TITULO;
            VENTANA(5,5,25,25);
            TEXTCOLOR(7);
            IF PF(NF)=400 THEN
                DATOS1
            ELSE IF PF(NF)=300 THEN
                DATOS4
            ELSE IF PF(NF)=250 THEN
                DATOS2;
            FOR I:=1 TO NC DO
                WRITELN('Moles de ',cadena1,I,'');
            VENTANA(5,5,35,25);
            TEXTCOLOR(2);
            FOR I:=1 TO NC DO
                READLN(NC(I,NF));
            FOR I:=1 TO NC DO
                Z(I,NF):=NC(I,NF)/FE(NF);
                VENTANA(1,1,80,25);
                NCL:=NCF-1;
                COFREC_DATOS;
            END;
        END;
    PROCEDURE PROCIO;
    VAR

```

```

CONTADOR: INTEGER;
BEGIN
  CONTADOR:=1;
  WHILE (ABS(FTR(TR(J)))>EPSILON) OR (CONTADOR>30) DO
  BEGIN
    TR(J):=TR(J)-FTR(TR(J))/DTR(TR(J));
    CONTADOR:=CONTADOR+1;
  END;
END;

```

```

PROCEDURE FBURBUJA;
VAR
  CONTADOR: INTEGER;
BEGIN
  CONTADOR:=1;
  WHILE (ABS(FB(TB(J)))>EPSILON) OR (CONTADOR>30) DO
  BEGIN
    TB(J):=TB(J)-FB(TB(J))/DTB(TB(J));
    CONTADOR:=CONTADOR+1;
  END;
END;

```

```

PROCEDURE TETA;
BEGIN
  THETA:=0;
  WHILE ABS(FTHETA(THETA))>EPSILON DO
  THETA:=THETA-FTHETA(THETA)/DTHETA(THETA);
  FOR I:=1 TO NC DO
  BEGIN
    D[I,1]:=NM[I,NF]/(1+THETA*(BCI,NET3/D(I,1)));
    B[I,NET3]:=NM[I,NF]-D(I,1);
  END;
END;

```

```

PROCEDURE CFLASH;
BEGIN
  J:=NF;
  VAX:=EQ(TF(J));
  PHI:=0.0;
  LSUB:=FFLASH(PHI);
  PHI:=1;
  VSQB:=FFLASH(PHI);
  IF (LSUB>0) OR (VSQB<0) THEN
  BEGIN
    IF LSUB>0 THEN
    begin
      VAX:=EL(TF(J));
      FOR I:=1 TO NC DO
        HF(I):=HF(I)+VAX*(1)+Z(I,J);
        HF(J):=HF(J)+FEC(J);
      end
    else IF VSQB<0 THEN
    begin
      VAX:=EV(TF(J));
      for i:=1 to nc do
        HF(I):=HF(I)+VAX*(1)+VH(I);
        h(I,J):=HF(I)+FEC(J);
      end;
    end;
  END;

```

```

PROCEDURE CFLASH;
VAR
  VAF,LAF : REAL;
  XV,YV : ARRAY [1..5] OF REAL;
BEGIN
  PHI:=1;
  WHILE ABS(FFLASH(PHI))>EPSILON DO
    FPH:=PHI-FFLASH(PHI)/DFLASH(PHI);
  VAF:=EL(1FNF3);
  VAF:=EV(1FNF3);
  FOR I:=1 TO NC DO
  BEGIN
    XV(I):=Z(I,NF)/(1+PHI*(KIJ(I,NF)-1));
    YV(I):=XV(I)*KIJ(I,NF);
  END;
  DM1:=0;
  DM2:=0;
  FOR I:=1 TO NC DO
  BEGIN
    DM1:=DM1+MV(I)*V(I);
    DM2:=DM2+ML(I)*V(I);
  END;

```

```

      END;
      VAF:=PVI*FE(NF);
      LAF:=FE(NF)-VAF;
      CTA(NF):=(FE(NF)-VAF)/FE(NF);
      DH1:=DH1+VAF;
      DH2:=DH2+LAF;
END;

PROCEDURE CALCULAI;
VAR
  EX,HLS,MVS,MPI,REAL;
BEGIN
  VARI:=0;
  I:=1;
  TX:=T(I);
  IF LSUB>0 THEN
    VARI:=EL(T(I));
  ELSE IF VSUB<0 THEN
    VARI:=EV(T(I));
  VARI:=0;
  IF Isub>0 then
    MPI:=F(NF);
  IF VSUB<0 then
    MPI:=F(NF);
    FOR I:=1 TO NC DO
      BEGIN
        XI(J,I,1):=Z(I,1);
        YI(J,I,1):=Z(I,1);
      END;
      TB(J):=T(I);
      pBURBUJA;
      T(I):=TB(J);
      VARI:=EL(T(I));
      VARI:=0;
      FOR I:=1 TO NC DO
        VARI:=VARI+I(J(I,1))%HL(I);
        HLS:=VARI+FE(I);
      TR(I):=T(I);
    PROCID;
      T(I):=TR(I);
      VARI:=0;
      VARI:=EV(T(I));
      VARI:=0;
      FOR I:=1 TO NC DO
        VARI:=VARI+I(J(I,1))%H(I);
        MVS:=VARI+FE(I);
      CTA(NF):=(MVS-MPI)/(MVS-HLS);
      T(I):=TX;
    END;
PROCEDURE KQ;
BEGIN
  FOR J:=1 TO NET DO
    VARI:=KQ(TCE(I,K));
  END;
PROCEDURE ALIMENTACION;
BEGIN
  J:=NF;
  IF CT='1' THEN
    BEGIN
      IF PFI(NF)<300 THEN
        TF(NF):=600
      ELSE
        TF(NF):=210.0;
      TB(J):=TF(NF);
      FOR I:=1 TO NC DO
        XI(I,NF):=I(I,NF);
        pBURBUJA;
        T(NF):=TB(J);
        CTA(NF):=1;
      END
    ELSE IF CT='2' THEN
      BEGIN
        IF PFI(NF)<300 THEN
          TF(NF):=600
        ELSE
          TF(NF):=210;
        FOR I:=1 TO NC DO
          YI(J,I,NF):=Z(I,NF);
          TR(J):=TF(NF);
          PROCID;
          T(NF):=TR(J);

```

```

                                END;          CTAINF J:=0;
END;
PROCEDURE GENERAL;
VAR
  AUF:REAL;
BEGIN
  DR:=FE(NF)-DR;
  AUF:=0;
  AUF:=FE(NF);
  FOR J:=1 TO NET DO
    FELJ:=0;
    FE(NF):=AUF;
    FOR J:=1 TO NET DO
      MF(J):=0;
      VAP(NET+1):=0;
      IF TCOMD= 2 THEN
        BEGIN
          U(1):=DR;
          VAP(1):=0;
          LIQ(1):=R*U(1);
          LIQ(NET):=FE(NF)-U(1);
        END
      ELSE
        BEGIN
          U(1):=0;
          VAP(1):=DR;
          LIQ(1):=R*VAP(1);
          LIQ(NET):=FE(NF)-VAP(1);
        END;
      FOR J:=2 TO NET DO
        U(J):=0;
      FOR J:=1 TO NET DO
        BEGIN
          M(J):=0;
          SUM(J):=0;
        END;
        VAP(2):=VAP(1)+LIQ(1)+U(1)-FEL(1);
      END;
END;
PROCEDURE PERFIL;
VAR
  DM,STP:REAL;
BEGIN
  IF (CT= 3) OR (CT= 4) THEN
    BEGIN
      CFLASH;
      IF (LSUB) OR (VSOB) THEN
        CALOJAR
      ELSE
        CFLASH;
    END
  ELSE
    ALIMENTACION;
    ORDENADA:=(TF-NF+1)/(1-NF);
    PENDIENTE:=10-ORDENADA;
    FOR J:=1 TO NF DO
      TCE(J,K):=PENDIENTE*J+ORDENADA;
      PENDIENTE1:=(10-TF)/(NET-MF);
      ORDENADA1:=(TF-PENDIENTE1)*NF;
      FOR J:=NF TO NET DO
        TCE(J,K):=PENDIENTE1*J+ORDENADA1;
        FOR J:=3 TO NF DO
          VAP(1):=VAP(2);
          FOR J:=NF+1 TO NET DO
            VAP(J):=VAP(2)-(1-CTAINF)*FE(NF);
          DSUM:=0;
          FOR J:=1 TO NET DO
            BEGIN
              FOR M:=1 TO J DO
                DSUM:=DSUM+FE(M)-M*(M)-U(M);
                LIQ(J):=DSUM+VAP(J+1)-VAP(1);
              DSUM:=0;
            END;
            DM:=0;
            IF CT= 1 THEN
              BEGIN
                VAI:=ELIF(NF);
                FOR I:=1 TO NC DO
                  DM:=DM+LL(I)*Z(I,NF);
                  HF(NF):=DM+FE(NF);
                END;
              END;
            END;

```

```

      END
      ELSE IF (C1*2) THEN
        BEGIN
          VAX:=EV(TF(NF));
          FOR I:=1 TO MC DO
            DH:=DH+V(I)*Z(I,NF);
            HF(NF):=DH+FC(NF);
          END
          ELSE IF (L>FH) AND (PH)=0 THEN
            BEGIN
              DH:=DH+DH*2;
              HF(NF):=DH;
            END
          END;
END;

PROCEDURE THOMAS;
BEGIN
  for j:=1 to net do
    sum[j]:=0;
    DSUM:=0;
    M:=0;
    FOR J:=2 TO NET DO
      BEGIN
        FOR M:=1 TO J-1 DO
          DSUM:=DSUM+(FE[M]-M(N)-U(M));
          SM(J):=VAP(J)*DSUM-VAP(1);
          DSUM:=0;
        END;
        M:=0;
        FOR I:=1 TO MC DO
          BEGIN
            FOR J:=1 TO NET DO
              BEGIN
                FOR M:=1 TO J DO
                  DSUM:=DSUM+(FE[M]-M(N)-U(M));
                  SM(I,J):=(VAP(J)+1)*DSUM-VAP(1)+U(J)*(VAP(J)+M(J))*K(I,J,J);
                  DSUM:=0;
                END;
                FOR J:=1 TO NET-1 DO
                  CNT(J):=VAP(J)+K(I,I,J+1);
                FOR J:=1 TO NET DO
                  DMT(J):=FC(J)*Z(I,J);
                  PP(I):=DMT(I)/SM(I);
                  QQ(I):=DMT(I)/DMT(I);
                FOR J:=2 TO NET-1 DO
                  BEGIN
                    PP(J):=CNT(J)/(DMT(J)-DMT(J)+PP(J-1));
                    QQ(J):=(DMT(J)-DMT(J)+QQ(J-1))/(DMT(J)-DMT(J)+FC(J-1));
                  END;
                  QR(NET):=(DMT(NET)-DMT(NET)+QR(NET-1))/(DMT(NET)-DMT(NET)+FC(NET-1));
                  SUM(NET):=SUM(NET)+X(I,NET);
                FOR J:=NET-1 DOWNTO 1 DO
                  BEGIN
                    X(I,J):=QR(J)-PP(J)+X(I,J+1);
                    SUM(J):=SUM(J)+X(I,J);
                  END;
                END;
              END;
            FOR J:=1 TO NET DO
              FOR I:=1 TO MC DO
                BEGIN
                  IF (X(I,J)>1) THEN
                    X(I,J):=(X(I,J)+1)/2
                  ELSE IF (0>X(I,J)) THEN
                    X(I,J):=(X(I,J)+0)/2;
                  END;
                FOR J:=1 TO NET DO
                  BEGIN
                    SUM(J):=0;
                    FOR I:=1 TO MC DO
                      SUM(J):=SUM(J)+X(I,J);
                    END;
                  END;
                PROCEDURE NORMALIZATION;
                BEGIN
                  FOR J:=1 TO NET DO
                    FOR I:=1 TO MC DO
                      X(I,J):=X(I,J)/SUM(J);
                    END;
                  END;
                PROCEDURE MILLER;
                VAR

```

```

ERROR:REAL;
BEGIN
  ERROR:=N*EPSILON;
  FOR J:=1 TO NET DO
    BEGIN
      IT:=1;
      TE(I):=TCE(J,K-1);
      IT:=IT+1;
      TE(IT):=TCE(J,K-1)*S;
      IT:=IT+1;
      TE(IT):=(TE(IT-2)+TE(IT-1))/2;
      DE(IT):=(TE(IT)-TE(IT-1))/(TE(IT)-TE(IT-2));
    REPEAT
      IT:=IT+1;
      DE(IT):=F*TB(TE(IT-2))+SOR(DE(IT-1))-F*TB(TE(IT-2))+SOR((1+DE(IT-1))+F*TB(TE(IT-1))+(1+2*DE(IT-1)));
      CE(IT):=F*TB(TE(IT-3))+DE(IT-1)-F*TB(TE(IT-2))+(1+DE(IT-1))-F*TB(TE(IT-1));
    IF DE(IT) <= THEN
      BEGIN
        VM1:=2*F*TB(TE(IT-1))+(1+DE(IT-1));
        VM2:=DE(IT)-SOR(SOR(DE(IT))-4*F*TB(TE(IT-1))+DE(IT-1)+(1+DE(IT-1))*CE(IT));
        DE(IT):=VM1/VM2;
      END
    ELSE
      BEGIN
        VM1:=2*F*TB(TE(IT-1))+(1+DE(IT-1));
        VM2:=DE(IT)+SOR(SOR(DE(IT))-4*F*TB(TE(IT-1))+DE(IT-1)+(1+DE(IT-1))*CE(IT));
        DE(IT):=VM1/VM2;
      END
    UNTIL (ABS(F*TB(TE(IT))) <= ERROR) OR (IT) > 15;
    TCE(J,K):=TE(IT);
  END;
END;

PROCEDURE CALCYES;
BEGIN
  FOR J:=1 TO NET DO
    VAR I:=0;
    FOR I:=1 TO NC DO
      FOR J1:=1 TO NC DO
        Y(I,J1):=X(I,J1,J1);
      END;
    END;

PROCEDURE CARGSTERM(CAS;
VAR
  DMV,DML,VAX:REAL;
BEGIN
  HLQ(0):=0;
  HWAP(NET+1):=0;
  FOR J:=1 TO NET DO
    Q(J):=0;
    FOR J1:=1 TO NET DO
      BEGIN
        DMV:=0;
        DML:=0;
        VAX:=E(TCE(J,K));
        VAX:=E(V(TCE(J,K)));
        FOR J1:=1 TO NC DO
          BEGIN
            DMV:=DMV+V(I)*Y(J1,J1);
            DML:=DML+X(I)*X(J1,J1);
          END;
          HWAP(J1):=DMV;
          HLQ(J1):=DML;
        END;
      Q(I):=HWAP(J1)*HWAP(2)+HF(1)-(L(Q(I)+U(I))+HLQ(I)-(VAP(I)+H(I))+HWAP(I));
      DSUM:=0;
      FOR J:=1 TO NET DO
        DSUM:=DSUM+(HF(J)-U(J)+HLQ(J)-W(J)+HWAP(J));
      SM:=0;
      FOR J:=1 TO NET-1 DO
        SM:=SM+Q(J);
      Q(NET):=DSUM-SM-VAP(1)+HWAP(1)-L(Q(NET)+HLQ(NET));
    FOR J:=1 TO NET DO
      BEGIN
        HL(J):=HLQ(J)-1+HWAP(J);
        WL(J):=HWAP(J)+1-HLQ(J);
        SS:=0;
        FOR M=1 TO J-1 DO
          SS:=SS+FE(M)-W(M)-U(M);
        SS:=SS-VAP(1);
      END;
    END;
  END;

```

```

      GALJJ:=SS*(HL(IQJJ)-HL(IQ(J-1)))+FE(J)+HL(IQ(J))+HF(J)+MCJJ+(HW*P(J)-HL(IQJJ))+RE(J);
      IF J>2 THEN VAP(J):=(GAL(J-1)-AL(IQ(J-1))+VAP(J-1))/BL(IQ(J-1));
      IF VAP(J)>0 THEN
        VAP(J):=0.01;
      END;
      DSUM:=0;
      VAP(NET):=0;
      FOR J:=1 TO NET DO
        BEGIN
          FOR M:=1 TO J DO
            DSUM:=DSUM+(FE(M)-W(M)-U(M));
            LIQ(J):=DSUM+VAP(J-1)-VAP(J);
            DSUM:=0;
          END;
        END;
      END;
      PROCEDURE CONVERGENCIA;
      BEGIN
        ER:=0;
        FOR J:=1 TO NET DO
          ER:=ER+SR(TCE(L,K)-TCE(J,K-1));
        END;
      PROCEDURE PCOM;
      BEGIN
        FOR I:=1 TO NC DO
          BEGIN
            BEI(NET):=X(I)(I,NET)*BR;
            IF TCOM=2 THEN
              DCI(I):=X(I)(I,1)*DR
            ELSE
              DCI(I):=Y(I)(I,1)*DR;
            END;
          END;
        END;
      PROCEDURE CFINAL;
      BEGIN
        RCP:=(D(NCP,NET)/M(NCP,NF))*100;
        RCL:=(D(NCL,1)/M(NCL,NF))*100;
        IF CT='1' THEN
          BEGIN
            QI='Liq.Sat.';
            PHI:=0;
          END
        ELSE IF CT='2' THEN
          BEGIN
            QI='Vap.Sat.';
            PHI:=1;
          END;
        IF (CTA(NF)>1) THEN
          QI='Liq.Sub.';
        ELSE IF (CTA(NF)<0) THEN
          QI='Vap.Sub.';
        ELSE IF (CT='3') OR ((I>PHI) AND (PHI>0)) THEN
          QI='Mezcla L-V';
        IF TCOM='1' THEN
          tcsi='Parcial';
        else tcsi='Total';
        IF TCOM='1' THEN
          BEGIN
            J:=1;
            TR(J):=TCE(I,K);
            PROCIO;
          END
        ELSE
          TR(I):=TCE(I,K);
        END;
      END;
      PROCEDURE COLORES;
      BEGIN
        TEXTBACKGROUND(0);
      END;
      PROCEDURE PRINCIPAL;
      BEGIN
        GENERAL;
        K:=1;
        PERFIL;
        LQ;
        MAXIMATERA:=1;
        REPEAT
          IF K>1 THEN
            LQ;
          END;
    
```

```

THONS;
NORMALIZACION;
CALCYES;
K:=1;
MALLER;
CARGASTERMIDAS;
CONVERGENCIA;
MAXITERA:=MAXITERA+1;
ESPERA;
UNTIL (ABS(ER) <= 0.01 * NET) OR (MAXITERA > 150);
PCOM;
END;

PROCEDURE PRINC1;
BEGIN
  CLSCR;
  REPEAT
    CLSCR;
    ENTRADA;
    LECTURA;
    UNTIL UPCASE(RSP) = 'S';
  CLSCR;
  GOTO Y(23, 12);
  textcolor(7);
  WRITE('Iniciando calculos. ');
END;

BEGIN
  COLPRES;
  REPEAT
    PRINC1;
    PRINCPAL;
    CLSCR;
    TETA;
    CFINAL;
    IMPRESION;
  UNTIL RSP = 'N';
END.

```

Unit PFRAS;

Interface

Uses CrT;

Var;

```

alf,bet,gam,delta,
av,bv,cv,al,bl,
cl :Array[1..11] of real;
cadena :Array[1..11] of string [10];
tc,RSP :char;

```

```

PROCEDURE datos1;
PROCEDURE datos2;
PROCEDURE DATOS4;
PROCEDURE VENTANA(X1,Y1,X2,Y2:WORD);
PROCEDURE AVISO1;
PROCEDURE CORREC_DATOS;

```

Implementation

```

(Presion : 400 psia
Temperatura : 0 a 300 F
K : alf+bet+gam+delta+eta
Hliq : al+bl+cl+tl
Hvap : av+bv+cv+al)

```

PROCEDURE DATOS1;

BEGIN

```

ALF(1):=4.35; BET(1):=2.542E-2; GAM(1):=-2.0E-5; DEL(1):=0.33E-9;
ALF(2):=0.65; BET(2):=8.16E-3; GAM(2):=2.25E-5; DEL(2):=-2.33E-8;
ALF(3):=0.15; BET(3):=2.38E-3; GAM(3):=2.35E-5; DEL(3):=-2.33E-8;
ALF(4):=0.075; BET(4):=5.72E-4; GAM(4):=1.07E-5; DEL(4):=-2.5E-10;
ALF(5):=0.0105; BET(5):=2.69E-4; GAM(5):=2.55E-6; DEL(5):=1.106E-8;

AV(1):=1604.0; BV(1):=9.357; CV(1):=1.782E-3; AL(1):=0.0; BL(1):=14.17; CL(1):=-1.782E-3;
AV(2):=4661.0; BV(2):=15.94; CV(2):=3.341E-3; AL(2):=0.0; BL(2):=16.94; CL(2):=3.341E-3;
AV(3):=5070.0; BV(3):=26.45; CV(3):=0.0; AL(3):=0.0; BL(3):=22.78; CL(3):=-6.899E-3;
AV(4):=5231.0; BV(4):=35.80; CV(4):=5.812E-3; AL(4):=0.0; BL(4):=33.97; CL(4):=5.81E-3;
AV(5):=5411.0; BV(5):=42.09; CV(5):=8.017E-3; AL(5):=0.0; BL(5):=39.68; CL(5):=8.017E-3;

cadena(1):='Metano';
cadena(2):='Etano';
cadena(3):='Propano';
cadena(4):='n-Butano';
cadena(5):='n-Pentano';

END;

```

```

(Presion : 250 psia
Temperatura : 50 a 350 F
K : alf+bet+gam+delta+eta+thi
Hliq : al+bl+cl+tl+thi
Hvap : av+bv+cv+al)

```

PROCEDURE DATOS2;

BEGIN

```

ALF(1):=1.445; BET(1):=-1.5E-4; GAM(1):=73.5E-6; DEL(1):=-3.00E-6;
ALF(2):=0.840; BET(2):=-46.6E-4; GAM(2):=49.4E-6; DEL(2):=-3.03E-6;
ALF(3):=-0.177; BET(3):=49.5E-4; GAM(3):=-4.15E-6; DEL(3):=2.22E-6;
ALF(4):=-0.087; BET(4):=17.7E-4; GAM(4):=0.2031E-6; DEL(4):=1.310E-6;
ALF(5):=0.0930; BET(5):=-13.39E-4; GAM(5):=10.37E-6; DEL(5):=-0.1590E-6;

AV(1):=8310.0; BV(1):=13.20; CV(1):=0.602E-2; AL(1):=6120.0; BL(1):=9.35; CL(1):=1.5E-2;
AV(2):=11920.0; BV(2):=12.35; CV(2):=2.21E-2; AL(2):=3620.0; BL(2):=40.5; CL(2):=-1.32E-2;
AV(3):=13550.0; BV(3):=9.01; CV(3):=3.75E-2; AL(3):=4260.0; BL(3):=25.0; CL(3):=-4.65E-2;
AV(4):=19200.0; BV(4):=29.50; CV(4):=0.720E-2; AL(4):=4840.0; BL(4):=28.5; CL(4):=2.53E-2;
AV(5):=22000.0; BV(5):=37.00; CV(5):=0.0; AL(5):=7720.0; BL(5):=43.5; CL(5):=3.02E-2;

cadena(1):='Etano';
cadena(2):='Propano';
cadena(3):='n-Butano';
cadena(4):='n-Pentano';
cadena(5):='n-Hexano';

END;

```

```

PROCEDURE VENTANA(I1,I2,Y2:WORD);
BEGIN
  WINDOW(I1,I2,Y2);
END;

PROCEDURE AVISO1;
BEGIN
  VENTANA(1,1,80,25);
  CLS;
  TEXTCOLOR(14);
  GOTO(Y10,10);
  WRITELN('Terminacion anormal del programa...revisa tus datos. ');
  IC:=READKEY;
  HL(1);
END;

PROCEDURE CORREC_DATOS;
BEGIN
  GOTO(Y22,24);
  TEXTCOLOR(2);
  WRITE('¿Están correctos los datos (S/N)? ');
  RSP1:=READKEY;
END;

(Presion      : 300 psia
Temperatura   : (=) R
K(1/3)        : a1f@bet@t@p@n@t@e@l@e@l@e@t
H1@1(1/2)    : a1@b1@c1@f1
Hvap(1/2)    : av@bv@cvc@t@ BTU/LB@DL)

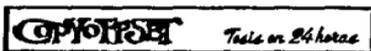
PROCEDURE DATOS4;
BEGIN
  ALF(1):=32.718139E-2; BET(1):=-9.4951405E-5; GAW(1):=6.9229334E-8; DEL(1):=-47.361299E-12;
  ALF(2):=-9.8400210E-2; BET(2):=67.545943E-5; GAW(2):=-37.459290E-8; DEL(2):=-9.0732459E-12;
  ALF(3):=-25.098770E-2; BET(3):=102.39287E-5; GAW(3):=-75.221710E-8; DEL(3):=-153.84799E-12;
  ALF(4):=-14.512474E-2; BET(4):=53.638924E-5; GAW(4):=-5.305164E-8; DEL(4):=-173.56537E-12;
  ALF(5):=-18.987631E-2; BET(5):=61.239657E-5; GAW(5):=-17.891649E-8; DEL(5):=-90.853517E-12;
  ALF(6):=-14.181719E-2; BET(6):=36.866333E-5; GAW(6):=16.321413E-8; DEL(6):=-248.23843E-12;
  ALF(7):=-7.5433390E-2; BET(7):=-2.0584231E-5; GAW(7):=97.136344E-8; DEL(7):=-413.12409E-12;
  ALF(8):=-1.506919E-2; BET(8):=-33.885839E-5; GAW(8):=97.795401E-8; DEL(8):=-542.35949E-12;
  ALF(9):=-5.5692758E-2; BET(9):=-50.705767E-5; GAW(9):=112.17338E-8; DEL(9):=-974.89350E-12;
  ALF(10):=7.171446E-2; BET(10):=-51.602530E-5; GAW(10):=163.72034E-8; DEL(10):=-879.46351E-12;
  ALF(11):=2.5278960E-2; BET(11):=-17.311330E-5; GAW(11):=33.502879E-8; DEL(11):=-126.25039E-12;

  AV(1):=-17.899210; BV(1):=1.7295763E-1; CV(1):=-3.7598114E-4; AL(1):=44.445874; BL(1):=501.04559E-4; CL(1):=7.3202719E-6;
  AV(2):=-9.4287000; BV(2):=1.6258636E-1; CV(2):=-1.9498601E-4; AL(2):=61.334520; BL(2):=588.75432E-4; CL(2):=11.94654E-6;
  AV(3):=-12.427900; BV(3):=1.8634657E-1; CV(3):=-2.4839146E-4; AL(3):=71.829480; BL(3):=658.55130E-4; CL(3):=11.299562E-6;
  AV(4):=-14.500600; BV(4):=1.9802223E-1; CV(4):=-2.9048837E-4; AL(4):=81.795910; BL(4):=739.81919E-4; CL(4):=36.470900E-6;
  AV(5):=-16.5534000; BV(5):=2.1616650E-1; CV(5):=-3.1476209E-4; AL(5):=147.65414; BL(5):=-1185.2942E-4; CL(5):=152.87779E-6;
  AV(6):=-20.298110; BV(6):=2.3005745E-1; CV(6):=-3.8663417E-4; AL(6):=152.66798; BL(6):=-1132.4842E-4; CL(6):=146.84125E-6;
  AV(7):=-24.371540; BV(7):=2.5626206E-1; CV(7):=-4.6499494E-4; AL(7):=128.90152; BL(7):=2.050963E-4; CL(7):=64.501494E-6;
  AV(8):=-27.870410; BV(8):=2.6768809E-1; CV(8):=-4.4197792E-4; AL(8):=85.834920; BL(8):=1522.3917E-4; CL(8):=34.01892E-6;
  AV(9):=-25.314530; BV(9):=2.8246389E-1; CV(9):=-4.5418718E-4; AL(9):=94.682620; BL(9):=1479.5387E-4; CL(9):=19.105299E-6;
  AV(10):=-22.235050; BV(10):=2.8478429E-1; CV(10):=-3.8890819E-4; AL(10):=106.32806; BL(10):=1328.3949E-4; CL(10):=11.6230737E-6;
  AV(11):=-20.332192; BV(11):=6.3932657E-1; CV(11):=-21.611909E-4; AL(11):=72.528160; BL(11):=1893.3822E-4; CL(11):=-59.003314E-6;

  cadena1):='Metano';
  cadena2):='Etano';
  cadena3):='Propano';
  cadena4):='Butano';

```

```
cadena[5]='1-Butano';
cadena[6]='n-Butano';
cadena[7]='n-Pentano';
cadena[8]='n-Hexano';
cadena[9]='n-Heptano';
cadena[10]='n-Octano';
cadena[11]=400;
END;
END.
```



LIBROS, FOLLETOS Y MECANOGRAFIA EN IBM
MACUILA EN OFFSET, MASTERS
CALIDAD, CUMPLIMIENTO Y PRECIO

Agustín Quijano Pérez

Cuba 99 Desp. 22
México, D. F. 06010

Tel. 518-4038