

30021

7

2ej



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORESUDIOS "ZARAGOZA"

DESARROLLO DE UN PROGRAMA DE SIMULACIÓN PARA COLUMNAS COMPLEJAS

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE

INGENIERO QUÍMICO

P R E S E N T A

JAIME DIAZ TORRES

UNAM FES ZARAGOZA

ASESOR: I.Q. CELESTINO MONTIEL MALDONADO.

ZZ

ZZ

MÉXICO, D.F.

1998.

TESIS CON FALLA DE ORIGEN

268327



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 esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

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



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

JEFATURA DE CARRERA
DE INGENIERIA QUIMICA

OFICIO: FESZ/JCIQ/0017/98

ASUNTO: Asignación de Jurado

C. Jaime Díaz Torres
Presente

En respuesta a su solicitud de asignación de jurado para el Examen Profesional, le comunico que la Jefatura a mi cargo ha propuesto la siguiente designación:

Presidente: I.Q. Alejandro Rogel Ramírez
Vocal: I.Q. Celestino Montiel Maldonado
Secretario: I.Q. Antonio Avalos Ramírez
Suplente: I.Q. Roberto Ramírez Torres
Suplente: I.Q. Esteban Minor Pérez

Atentamente
"POR MI RAZA HABLARA EL ESPIRITU"
México, D.F., 21 de Mayo de 1998

EL JEFE DE LA CARRERA

I.Q. Magín Enrique Juárez Villar

Irm

Agradecimientos

A mis hermanas:

Araceli, Irene, Eglá, Emma, Rosa María, Hilda y Carmen.

Por su atención y afecto.

A mis hermanos:

Ismael, Dionisio, Roberto, Obed y Carlos.

Por su apoyo y comprensión.

A mis padres:

Rigoberto y Senorina.

Por su cariño y paciencia que me brindaron durante toda la carrera.

INDICE

1)	Introducción.....	1
2)	Generalidades.....	4
2.1)	Las Ecuaciones MESH.....	4
2.2)	Métodos Aproximados.....	9
2.3)	Procedimientos de Etapa por Etapa.....	9
2.4)	Algoritmos de Descomposición.....	10
2.5)	Métodos de Modelos Locales.....	11
2.6)	Métodos de Corrección Simultánea.....	16
2.7)	Columnas Interconectadas y Especificaciones.....	18
2.9)	Destilación Multicomponente a Tres Fases.....	20
2.10)	Columnas de Destilación de Crudo.....	26
3)	Modelos Matemáticos.....	28
3.1)	Ecuaciones de Diseño y Operación de la Columna.....	28
3.2)	Ecuaciones para Calcular las Propiedades Termodinámicas.....	39
4)	Algoritmo de Solución.....	43
5)	Modelos Termodinámicos.....	50
5.1)	Ecuaciones de Estado.....	50
5.2)	Caracterización de Fracciones de Crudo.....	55
6)	Análisis de Resultados.....	60

7) Conclusiones.....	72
8) Bibliografía.....	74
Apéndice A : Ecuaciones del Modelo.....	78
Balance de Materia.....	78
Balance de Energía.....	84
Apéndice B : Equilibrio Líquido - Líquido.....	89
Apéndice C : Problema No. 1 : Columna Depropanizadora.....	91
Apéndice D : Problema No. 2 : Columna con Bomba de Calor.....	93
Apéndice E : Problema No. 3 : Columna de Destilación Atmosférica de Crudo.....	94
Apéndice F : Manual del Usuario.....	100
Apéndice G : Nomenclatura.....	115

INDICE DE TABLAS

Tabla		
I	Grados de libertad por unidad.....	34
II	Variables de especificación para un separador.....	35
III	Resumen del algoritmo.....	44
IV	Relación de componentes incluidos en la base de datos.....	54
V	Constantes del método de Cavett.....	59
VI	Problema 1 : Composición de la alimentación y especificaciones de la columna depropanizadora.....	61
VII	Problema 2: Composición de la alimentación y especificaciones de la columna.....	63
VIII	Problema 3: Especificaciones de la columna análoga.....	68
C1	Resultados de la simulación para el problema 1.....	91
C2	Reporte de productos para el problema 1.....	92
D1	Resultados de la simulación para el problema 2.....	93
D2	Reporte de productos para el problema 2.....	93
E1	Caracterización del crudo.....	94
E2	Resultados de la simulación para el problema 3.....	95
E3	Composición de productos procedentes de las etapas 1 y 8.....	96
E4	Composición de productos procedentes de las etapas 31 y 33.....	97
E5	Composición de productos procedentes de las etapas 35 y 37.....	98
E6	Composición de productos procedentes de las etapas 1.....	99
F1	Composición de las alimentaciones y especificaciones de la columna ejemplo.....	102

INDICE DE FIGURAS

Figura		
2.1	Modelo de etapa en equilibrio.....	5
2.2	Diagrama de una columna simple.....	6
3.1	Modelo de una etapa considerando dos fases en equilibrio.....	29
3.2	Esquema de una unidad de destilación atmosférica con agotadores laterales y bombas de calor.....	31
6.1	Perfil de flujos del problema 1.....	62
6.2	Perfil de Temperaturas del problema 1.....	62
6.3	Perfil de flujos del problema 2.....	65
6.4	Perfil de Temperaturas del problema 2.....	65
6.5	Esquema de la torre de crudo modelo Exxon.....	67
6.6	Esquema de la torre teórica análoga.....	69
6.7	Perfil de flujos del problema 3.....	71
6.8	Perfil de Temperaturas del problema 3.....	71
A1	Bloque de definición de M_i	85
F1	Esquema del fraccionador ejemplo.....	101

Universidad Nacional Autónoma de México

Facultad de Estudios Superiores Zaragoza

Desarrollo de un programa de simulación para columnas complejas

Por : Jaime Díaz Torres

Asesor : I.Q. Celestino Montiel Maldonado.

Resumen

Desde la aparición de los primeros métodos de cálculo para columnas de destilación, se han desarrollado una gran variedad de algoritmos de cálculo encaminados a resolver problemas particulares de destilación o simplemente han aparecido algoritmos más rápidos y eficientes. De la mano con esto, la simulación ha evolucionado a pasos agigantados proveyendo en la actualidad paquetes de software cada vez más fáciles de entender, más fáciles de manejar y cada vez más caros. Desgraciadamente en nuestro país la investigación y desarrollo en el campo de la simulación se puede encontrar en muy pocos lugares. Muchas veces no basta con dominar los grados de libertad, para simular correctamente una unidad o un proceso en un simulador comercial, también es importante conocer el algoritmo de cálculo con el cual se resuelve el problema. En este trabajo se realizó un estudio de los diferentes métodos de cálculo existentes para la solución de una columna de destilación, en particular se empleo un método de modelos locales para resolver desde la columna de destilación más sencilla hasta una unidad de destilación atmosférica. La adaptación de este método a los problemas que se presentan al manejar una columna de destilación atmosférica como son la inclusión de agotadores laterales y la determinación de dos fases líquidas se presentan en este trabajo. La validación del método se llevo a cabo realizando su programación en el lenguaje Fortran 77, los resultados obtenidos con el programa validan el método de cálculo con resultados reportados en literatura.

CAPITULO 1 INTRODUCCION.

La destilación es una de las operaciones más importantes en la industria y por lo tanto su diseño ocupa un lugar preponderante en los cursos de ingeniería química, como se sabe en los cursos de diseño de equipo de separación se revisa el diseño de columnas de destilación partiendo de los métodos más sencillos hasta los más complejos, el orden de estudio de estos métodos es :

- * Método de McCabe- Thiele
- * Método de Ponchon - Savarit
- * Métodos de Fenske-Under Wood-Gilliland

Como es de esperarse a medida que se va pasando de un método a otro se va incrementando con ello la dificultad de éste, sin embargo como es también de esperar la exactitud y concordancia de los resultados obtenidos también aumentan con la dificultad. Antes de 1950 los cálculos de diseño de las columnas de separación se realizaban por medio de métodos cortos, aunque en ese tiempo ya existían algunos métodos rigurosos de diseño, no se utilizaban estos porque requerían de gran cantidad de cálculos y con ello gran cantidad de tiempo invertido. Con la llegada de las primeras computadoras estas dos limitaciones que impedían el uso de los métodos rigurosos se han eliminado. En la actualidad los métodos rigurosos son los más utilizados en los cálculos de diseño de separadores, una gran cantidad de métodos rigurosos nuevos han aparecido, de estos se pueden encontrar algunos muy especializados para ciertas situaciones de diseño u otros que han alcanzado gran exactitud en los resultados obtenidos, sin embargo la llegada de las computadoras tuvo su mayor impacto en el desarrollo de los métodos o algoritmos de cálculo para resolver las ecuaciones MESH, la posibilidad de llevar a cabo la programación de extensos algoritmos y con ello llevar a cabo gran cantidad de cálculos estimuló la aparición de una gran cantidad de algoritmos más rápidos y eficientes.

Por lo anterior se hace necesario el conocimiento de los diferentes métodos de cálculo existentes, así como de la forma en que representan el problema. La capacidad de desarrollar un modelo matemático que represente el proceso de destilación conlleva también a conocer su comportamiento a determinadas condiciones, lo cual es el principio de otro gran campo de aplicación " la simulación " .

La simulación de columnas de destilación adquiere especial importancia cuando se trata de analizar el comportamiento de columnas de destilación complejas, como lo son las unidades de destilación atmosférica, las cuáles consumen la mayor parte de la energía de cualquier industria, por esta razón la optimización de dichas unidades será siempre un problema fundamental a resolver.

Todo sistema de simulación debe estar conformado por una serie de elementos específicos que se enfocan a la solución de un problema particular a resolver, todos estos elementos o módulos se engloban en un algoritmo principal con el que se obtiene la solución del problema general. Para la solución de una columna de destilación sencilla el programa de cálculo se divide fundamentalmente en dos módulos perfectamente determinados :

* Método de cálculo : Este se refiere al algoritmo utilizado para resolver las ecuaciones que describen el proceso de destilación : balance de materia, balance de energía ,ecuaciones de equilibrio y ecuaciones de restricción (Ecuaciones MESH). El algoritmo de cálculo depende de las características y especificaciones de la columna y sobre todo del tiempo de cálculo y memoria de máquina requerida para la implementación de éste. En el capítulo II de este trabajo se realiza una revisión de los algoritmos de cálculo existentes para resolver el conjunto de las ecuaciones MESH.

*Modelos Termodinámicos : Los modelos termodinámicos representa el corazón de todo sistema de simulación, la exactitud lograda en los resultados no es mayor a la exactitud con la cual los modelos termodinámicos predicen los valores del coeficiente de distribución (K_{ij}) y de las entalpías de las corrientes. Así mismo, la mayor parte del tiempo de cálculo empleado en la solución, se utiliza en la determinación de las propiedades termodinámicas.

Cuando se requiere que un sistema de simulación pueda manejar columnas de destilación de crudo, son necesarios dos módulos más que resuelvan los problemas que se presentan cuando se manejan columnas de este tipo :

1) Determinación de la formación de tres fases : Una de las principales características de una unidad de destilación de crudo es la utilización de vapor como medio de calentamiento en los fondos de la columna. Al condensar el vapor de agua en el domo de la columna se generan dos fases líquidas. La detección y determinación de la composición de ambas fases requiere de nuevos métodos termodinámicos adecuados para este propósito.

2) Caracterización del Crudo : El crudo es una mezcla compleja de hidrocarburos que es difícil de separar, por lo cual, se divide en fracciones determinadas a partir del punto de ebullición. La determinación de las propiedades físicas de dichas fracciones ó pseudocomponentes (temperatura crítica, presión crítica, peso molecular, capacidad calorífica, factor acéntrico etc.) se le conoce como caracterización. De la determinación de estas propiedades dependen directamente los valores de las propiedades termodinámicas, por lo cual, los modelos para la caracterización son una parte importante de un sistema de simulación.

Además de poseer los modelos adecuados de cálculo, un sistema de simulación debe poseer algunas características más para considerarse realmente útil para el usuario, estas son :

1) Flexibilidad de configuraciones y especificaciones : El sistema de simulación para columnas de destilación debe poseer una amplia flexibilidad para manejar satisfactoriamente columnas sencillas y columnas interconectadas con bombas de calor y/o agotadores laterales.

2) Alto dimensionamiento : La simulación de una unidad de destilación atmosférica requiere de una gran cantidad de memoria de máquina. El número de ecuaciones a resolver es de cientos y son altamente no lineales; un buen sistema de simulación debe poseer la característica de poder manejar una gran cantidad de etapas y componentes.

El objetivo de este trabajo es llevar a cabo una revisión de los métodos existentes para el cálculo de columnas de destilación, así como el desarrollo de un programa de simulación capaz de incorporar todas las características mencionadas anteriormente. En el capítulo II de esta tesis se presenta una revisión de los métodos de cálculo más importantes para una columna de destilación con dos y tres fases. Además, se realiza una revisión de los métodos publicados para resolver columnas de destilación atmosférica de crudo. En el capítulo III se plantean las ecuaciones que representan el modelo de una columna de destilación : balance de materia, balance de energía, ecuaciones de equilibrio, ecuaciones sumatoria, en especial se presentan las modificaciones que se realizan a estas debido a la inclusión de bombas de calor y agotadores, así como, la forma de manejar la presencia de dos fases líquidas en cualquier etapa de la columna.

El algoritmo de solución elegido para este trabajo se expone en el capítulo IV, en el se encuentran las modificaciones realizadas para manejar columnas interconectadas con agotadores laterales y con bombas de calor. En el capítulo V se describen las ecuaciones de estado utilizadas para determinar las propiedades termodinámicas y los modelos de caracterización de crudo. La aplicación del programa de simulación se presenta en el capítulo VI, donde se exponen los resultados de la simulación de tres columnas de diferente grado de dificultad. En el capítulo VII se presentan las conclusiones de este trabajo.

CAPITULO 2 GENERALIDADES.

En este capítulo se realiza una revisión de los métodos existentes en la actualidad , para predecir el comportamiento de columnas de destilación. Se parte de la definición de las ecuaciones MESH, estas ecuaciones definen el modelo matemático que representa la operación de destilación. En seguida se presenta un resumen de los diferentes algoritmos de cálculo para la solución de estas ecuaciones, comenzando con los métodos para columnas de destilación sencillas, seguido por aquellos métodos enfocados a resolver el problema que genera la formación de tres fases y por último los métodos desarrollados para manejar columnas complejas. Se presenta una revisión detallada del método de Boston y Sullivan para columnas sencillas y para destilación a tres fases, debido fundamentalmente a que el método desarrollado en este trabajo es una variación de éste.

2.1 Las Ecuaciones MESH.

Una columna de destilación convencional se describe como aquella que tiene una alimentación y dos corrientes de producto, el destilado (D) y el producto de fondos (B). Sin embargo, en la realidad las columnas de destilación convencionales pueden tener más de una corriente de productos y corrientes de alimentación, así como interenfriadores o intercalentadores . El conjunto de ecuaciones necesarias para representar este sistema se conocen como ecuaciones MESH .

En la figura 2.1 se presenta el modelo de una etapa en equilibrio, la cual forma parte de una columna de destilación como la presentada en la figura 2.2. Todas las ecuaciones derivadas a continuación están referidas al modelo de esta etapa.

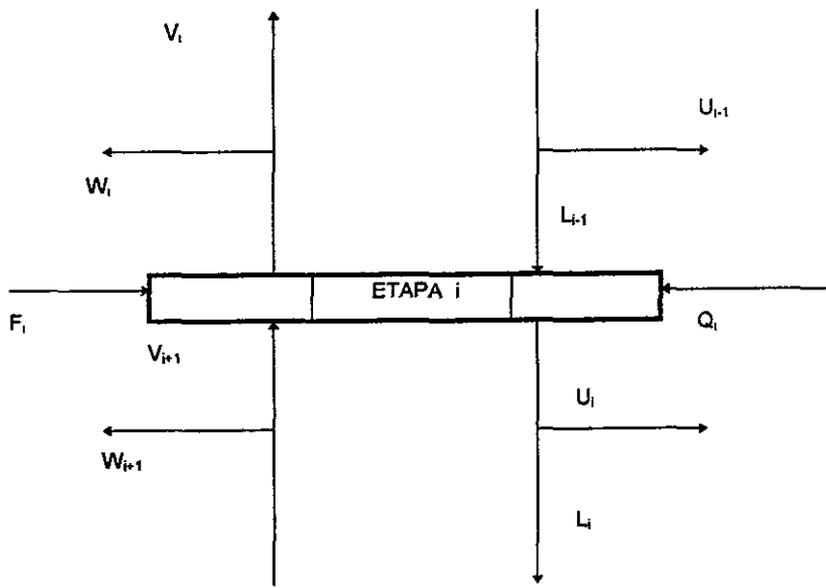


Figura 2.1 : Modelo de Etapa en Equilibrio

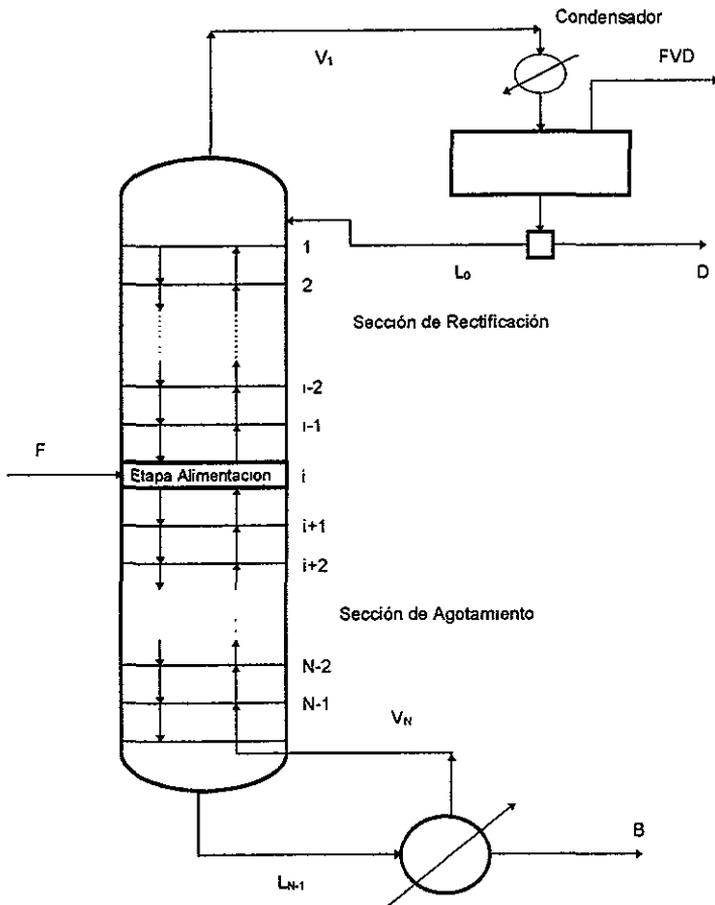


Figura : 2.2 Diagrama de una Columna Simple.

Balance de Materia por Componente

entradas - salidas = 0

$$v_{i,j} \left(1 + \frac{W_i}{V_i} \right) + l_{i,j} \left(1 + \frac{U_i}{L_i} \right) - l_{i-1,j} - v_{i+1,j} - f_{i,j} = 0 \quad (2.1)$$

Este tipo de balance puede aplicarse a una etapa, a una sección de la columna o a toda la columna sin que con ello cambie la definición anterior. La nomenclatura para ésta y todas las ecuaciones se puede consultar en el apéndice G.

Balance de masa total.

$$L_{i-1} + V_{i+1} - V_i - W_i - L_i - U_i + F_i = 0 \quad (2.2)$$

Balance de energía.

$$L_{i-1}h_{i-1} + V_{i+1}H_{i+1} - (V_i + W_i)H_i - (L_i + U_i)h_i + F_iH_{f,i} + Q_i = 0 \quad (2.3)$$

Ecuaciones de equilibrio.

Para la etapa de la figura 2.1, se tiene la suposición de que todas las corrientes de líquido y de vapor que abandonan una misma etapa de separación se encuentran en equilibrio.

$$y_{i,j} = K_{i,j}x_{i,j} \quad (2.4)$$

El coeficiente de distribución puede ser función de T_i , P_i , x_{ij} , y_{ij} de cada etapa y muy frecuentemente puede estar implícito en el "factor de absorción" o en el "factor de agotamiento".

$$v_{i,j} = \eta_i \left(\frac{K_{i,j} V_i}{L_i} \right) l_{i,j} \quad (2.5)$$

$$l_{i,j} = \left(\frac{L_i}{K_{i,j} V_i} \right) \frac{v_{i,j}}{\eta_i} \quad (2.6)$$

Ecuaciones de eficiencia.

Las ecuaciones de eficiencia son ecuaciones que pueden agregarse a las ecuaciones MESH sin que sean parte de ellas. La eficiencia de una etapa es una medida de que tanto se desvía una etapa real de la idealidad. La gran mayoría de los simuladores de columnas de destilación trabajan con etapas ideales, el incluir la eficiencia de una etapa puede traer algunas complicaciones en los cálculos de la columna, es por ello que muchas veces no se toman en cuenta. La expresión de eficiencia más común es la desarrollada por Murphree(1925):

$$\eta_i = \frac{y_{i,j} - y_{i+1,j}}{y_{i,j}^* - y_{i+1,j}^*} \quad (2.7)$$

Ecuaciones sumatoria.

$$\sum_{j=1}^{NC} x_{i,j} - 1 = 0 \quad (2.8)$$

$$\sum_{j=1}^{NC} y_{i,j} - 1 = 0 \quad (2.9)$$

2.2 Métodos Aproximados.

En la actualidad el número y variedad de métodos existentes para la solución de las ecuaciones MESH puede parecer grande. Sin embargo, el estudio de la operación de destilación comenzó con el análisis de la destilación de los sistemas binarios más simples, en los cuales se asumen volatilidades relativas constantes. En el estudio de la operación de destilación los métodos de diseño fueron los primeros en aparecer, posteriormente se desarrollaron con más intensidad los métodos de solución de las ecuaciones MESH. Fueron Underwood (1948), Fenske (1932) y Gilliland (1940), los primeros en crear una correlación empírica para estimar una relación de reflujo para dado número de etapas o viceversa. En 1957 Edmister basado también en el modelo simple de volatilidades relativas y relaciones de reflujo constantes desarrollo un grupo de ecuaciones las cuales son resueltas simultáneamente para las composiciones de fondos y domos de la columna, con este método Edmister obtuvo mejores resultados que los obtenidos con la correlación de Gilliland.

El método de McCabe-Thiele (1925) fue el primer método riguroso para el diseño de columnas de destilación binarias. Sin embargo, este método también requiere la suposición de relaciones de flujos líquido-vapor constantes, lo cual trae como consecuencia errores de exactitud por ignorar los efectos del calor de mezclado y del calor sensible comparados con el calor latente de vaporización, en este aspecto el procedimiento de Ponchon-Savarit representa un método más general, el cual si toma en cuenta dichos cambios de entalpia.

2.3 Procedimientos de Etapa por Etapa.

Los primeros métodos creados para la solución de las ecuaciones MESH fueron los procedimientos de etapa por etapa, estos métodos consisten en el agrupamiento por etapa de las ecuaciones MESH para luego resolverse desde el fondo y domo de la columna. Los métodos clásicos de Lewis-Matheson (1922) y Thiele-Geddes (1933) son de este tipo.

El algoritmo de Lewis - Matheson (1922), parte de un grupo de composiciones de producto conocidas, tanto de domos como de fondos, a partir de los cuales se calculan los flujos y composiciones de las corrientes que interconectan dichas etapas con una etapa intermedia predeterminada (no necesariamente la de alimentación). De esta forma el procedimiento se continúa hasta que se cubre la totalidad de etapas de la columna. En este método una regla heurística se utiliza para localizar la etapa de alimentación; esta etapa, según el método, es aquella en la cual la fracción mol del componente clave es igual a la fracción mol de este componente en la corriente de alimentación, sin embargo esta regla no siempre resulta cierta. El objetivo final del algoritmo de Lewis-Matheson (1922), es el de eliminar el error entre las fracciones mol determinadas a partir de el domo de la columna con las determinadas a partir del fondo de la misma.

El método de Thiele-Geddes (1933) al igual que el método de Lewis-Matheson (1922) comienza con los cálculos en los extremos de la columna, sólo que en este procedimiento se evita la necesidad de requerir buenos estimados para la composición de productos, usando un estimado inicial de flujos y temperaturas calculado a partir de un perfil lineal de temperaturas y una relación de flujo de líquido y vapor constante. En 1963 Holland desarrolló el método theta, en el cual se mejora significativamente la convergencia de los métodos de etapa por etapa, por medio de una regla de iteración.

2.4 Algoritmos de Descomposición.

Amudson y Pontinen (1958) fueron los primeros en proponer un procedimiento en el cual las ecuaciones del balance de materia para cada componente, las relaciones de equilibrio y el balance de materia total se combinan y resuelven componente por componente a partir de un conjunto de ecuaciones lineales simultáneas para N etapas. Sin embargo, el mejor ejemplo de este tipo de procedimientos es el método de Wang-Henke (1966) también llamado método de punto de burbuja dado que en cada iteración se calcula un nuevo conjunto de temperaturas de las etapas a partir de las ecuaciones del punto de burbuja. En este método las principales variables de iteración son las temperaturas de las etapas y los flujos molares. El método comienza calculando las fracciones molares de líquido $x_{i,j}$ a partir de la combinación del balance de masa por componente con las relaciones de equilibrio, a continuación se calculan los nuevos valores de las temperaturas a partir de la ecuación del punto de burbuja, en seguida se resuelve la combinación del balance de energía y el balance de masa total para obtener los nuevos flujos de vapor, de esta manera se comienza un nuevo ciclo de iteración hasta que se consiga la convergencia.

Desafortunadamente este método frecuentemente falla para sistemas con un amplio intervalo de puntos de ebullición debido a que el cálculo del punto de burbuja es demasiado sensible a la composición de la fase líquida.

Para superar las limitaciones del método punto de burbuja, Sujata (1961) ideó un método llamado método de suma de flujos, este método fue desarrollado con posterioridad por Burningham y Otto (1967). Este método usa las mismas variables de iteración que el anterior método, pero en este caso las temperaturas se obtienen a partir de la solución de los balances de entalpía. El algoritmo comienza resolviendo el balance de masa y las relaciones de equilibrio para las fracciones molares de líquido, estas fracciones se utilizan para obtener los nuevos valores de L_i mediante la siguiente ecuación denominada ecuación de suma de flujos:

$$L_i^{(k+1)} = L_i^{(k)} \sum_{j=1}^{NC} x_{i,j} \quad (2.10)$$

Los valores correspondientes de $V_i^{(k+1)}$ se determinan a partir de un balance global de materia, a continuación se normalizan los valores de $x_{i,j}$ y se calculan los valores de $y_{i,j}$ a partir de la relación de equilibrio. En seguida se usa el algoritmo de Newton-Raphson para resolver las ecuaciones del balance de energía (2.3) para las temperaturas T_{i-1} , T_i , y T_{i+1} . Los nuevos valores de la temperatura y los flujos de vapor y líquido (V_i , L_i) se usan como nuevos valores de cálculo para iniciar el nuevo ciclo hasta conseguir la convergencia.

Los métodos de punto de burbuja no convergen para sistemas con un amplio rango de volatilidades, por otro lado, los métodos de suma de flujos no convergen cuando las especies poseen volatilidades similares de aquí que ninguna clase de método de descomposición puede usarse satisfactoriamente para casos intermedios, bajo estas circunstancias Friday y Smith (1964) desarrollaron un algoritmo para mejorar las propiedades de convergencia, en este algoritmo las ecuaciones sumatoria y las relaciones de fase se resuelven simultáneamente con los balances de masa y energía, usando el algoritmo Newton-Raphson para obtener nuevos valores de los flujos de vapor y de las temperaturas. El jacobiano de este sistema es calculado usando diferencias finitas, lo que consume una gran cantidad de tiempo de cálculo, pensando es esto Tomich (1970) remplazo el algoritmo Newton-Raphson por el método de Broyden (1965) el cual elimina la necesidad de calcular las derivadas parciales y la inversión de la matriz jacobiana en cada iteración.

El algoritmo de Tomich (1970) comienza suponiendo los valores de la temperatura y los flujos de vapor en las etapas, los flujos de líquido se calculan usando el balance de materia total, las fracciones de líquido se obtienen resolviendo la combinación del balance de materia y las relaciones de equilibrio para cada etapa. En seguida los residuales de las ecuaciones del punto de burbuja y el balance de energía se evalúan y el método de Broyden se usa para resolver estas ecuaciones, de esta forma se obtienen los nuevos valores de las temperaturas y los flujos molares.

2.5 Métodos de Modelos Locales

En todos los métodos anteriores un considerable porcentaje del tiempo requerido para la simulación de una columna de destilación, se ocupa para la evaluación de las propiedades termodinámicas ($K_{i,j}$, H_i y h_i) y de sus derivadas. El principal propósito de los métodos de modelos locales es utilizar modelos de aproximación simples para calcular las propiedades termodinámicas y reestructurar el procedimiento de cálculo en función de estos modelos simples. La segunda característica principal de los métodos de modelos locales es los dos niveles de cálculo que resultan: En un ciclo o nivel externo se determinan los parámetros de los modelos locales para el coeficiente de distribución $K_{i,j}$ y para las entalpías de líquido y vapor. En el ciclo interno las ecuaciones MESH se resuelven utilizando los modelos aproximados; como consecuencia de lo anterior se obtienen dos niveles de convergencia para ambos ciclos del algoritmo principal.

El primer método de modelos locales, del cual parten la mayoría de ellos, fue el realizado por Boston y Sullivan (1974) . En este método los parámetros de los modelos locales de la volatilidad relativa (valores de $K_{i,j}$) se aproximan a los reales en cada iteración del ciclo externo. Esto último representa una de las grandes ventajas del algoritmo que se traduce en una convergencia más rápida .

Para obtener una buena aproximación, con los modelos locales, Boston y Sullivan seleccionaron constantes empíricas poco dependientes de las condiciones de la columna, por ejemplo para el modelo del valor de $K_{i,j}$, los autores seleccionaron volatilidades relativas (las cuales usualmente varían poco con la temperatura y la composición , excepto para soluciones altamente no ideales) .Los valores de $K_{i,j}$ se representan como :

$$K_{i,j} = \alpha_{i,j} K_{b,i} \quad (2.11)$$

Donde $K_{b,i}$ es un promedio del valor de $K_{i,j}$ para la etapa i , $\alpha_{i,j}$ es la volatilidad relativa de la especie j en la etapa i . Cuando se resuelven las ecuaciones MESH $\alpha_{i,j}$ se mantiene constante para todo el ciclo interno de cálculo , mientras $K_{b,i}$ es independiente de la composición , siendo calculada por :

$$\ln K_{b,i} = A_i - \frac{B_i}{T_i} \quad (2.12)$$

donde A_i y B_i son los parámetros del modelo local para $K_{i,j}$ que son calculados en el ciclo externo del algoritmo por las siguientes expresiones :

$$B_i = -\frac{d(\ln K_{b,i})}{d(1/T_i)} = -\sum_{j=1}^{Nc} y_{i,j} \left(\frac{\partial \ln K_{i,j}}{\partial (1/T_i)} \right)_{x,y} \quad (2.13)$$

$$A_i = \ln K_{b,i} + \frac{B_i}{T_i} \quad (2.14)$$

En estas ecuaciones $K_{i,j}$ se calcula por métodos rigurosos , mientras A_i tiene la propiedad de servir como un factor de escalamiento para la volatilidad relativa cuyo valor inicial puede calcularse mediante la siguiente ecuación :

$$A_i = \sum_{j=1}^{N.C} y_{i,j} \cdot \ln K_{i,j} + \frac{B_i}{T_i} \quad (2.15)$$

En el método de Boston y Sullivan, el modelo aproximado para representar la entalpia de líquido y vapor esta dado por :

$$h_i^v = (T_i - T_b) \theta_{b,i} \theta_{R,i} + h_{b,i}^v + \Phi_{y,i} + \Phi_{T_i} (T_i - T_i^*) \quad (2.16)$$

$$h_i^L = (T_i - T_b) \theta_{b,i} \theta_{R,i} + h_{b,i}^L + h_i^E \quad (2.17)$$

donde T_i^* es un estimado inicial de la temperatura en la etapa i , T_b es un promedio de T_i^* , $h_{b,i}^v$ es la entalpia del gas ideal en la etapa i a la temperatura T_b y $h_{b,i}^L$ es la entalpia ideal de líquido en la etapa i a la temperatura T_b . Ambas entalpias son promedios molares calculados por :

$$h_{b,i}^v = \sum_{j=1}^{N.C} y_{i,j} \cdot h_{b,j}^v \quad (2.18)$$

$$h_{b,i}^L = \sum_{j=1}^{N.C} x_{i,j} \cdot h_{b,j}^L \quad (2.19)$$

El producto $\theta_{b,i} \theta_{R,i}$ representa el promedio del calor específico entre T_b y T_i , donde $\theta_{R,i}$ se calcula de la siguiente manera :

$\phi_{i,j}$ = calor específico promedio de gas ideal de las especies j en la etapa i entre las temperaturas T_b y T_i

$$\phi_{b,i,j} = \lim_{T_i \rightarrow T_b} \phi_{i,j} \quad (2.20)$$

$$\phi_{r,i,j} = \frac{\phi_{i,j}}{\phi_{b,i,j}} \quad (2.21)$$

$$y_{r,i,j} = \frac{y_{i,j} \phi_{b i,j}}{\sum_{j=1}^{NC} y_{i,j} \phi_{b i,j}} \quad (2.22)$$

$$\theta_{r,j} = \sum_{j=1}^{NC} y_{r,i,j} \phi_{r i,j} \quad (2.23)$$

$$\theta_{b,j} = \sum_{j=1}^{NC} y_{r,i,j} \phi_{b i,j} \quad (2.24)$$

Los dos últimos términos de la ecuación (2.16) representa la desviación de la entalpia del estado ideal, donde $\phi_{y,i}$ y $\phi_{T,i}$ son evaluadas por :

$$\phi_{y,i} = \Delta H(P_i, T_i, y_i^*) + \Delta H(P_i, T_i, y_i) - \Delta H(P_i, T_i, y_i^*) \quad (2.25)$$

$$\phi_{T,i} = \frac{\Delta H(P_i, T_i, y_i^*) - \Delta H(P_i, T_i, y_i^*)}{T_i - T_i^*} \quad (2.26)$$

donde y_i representa las composiciones para las cuales los modelos son determinados, y_i^* son las composiciones de referencia. Por su parte ΔH es la variación de la entalpia del estado ideal a la temperatura T_i , siendo calculada por métodos rigurosos.

El último termino de la ecuación (2.17) representa el calor de mezclado de una mezcla de líquido, calculada por :

$$h_i^E = R \sum_{j=1}^{NC} x_{i,j} \left(\frac{\partial \ln \gamma_{i,j}}{\partial (1/T_i)} \right)_{p,x} \quad (2.27)$$

donde $\gamma_{i,j}$ se calcula usando alguna correlación rigurosa como la ecuación de NRTL.

Cuando se resuelven las ecuaciones MESH tanto $\phi_{y,i}$, $\phi_{T,i}$ y $h_{i,j}^E$ se mantienen fijas, por otra parte, las desviaciones de la entalpia de el estado ideal y el calor de mezclado de líquido representan valores pequeños, en comparación con el valor de la entalpia generado por los dos primeros términos de la ecuación (2.17), por lo que muchos programas de simulación que usan el método de Boston y Sullivan, incluidos en ellos el que se maneja en este trabajo, no consideran tales contribuciones en el valor total de la entalpia de vapor y líquido.

Las ecuaciones MESH se resuelven usando los modelos aproximados para las entalpías y los valores de $K_{i,j}$, a partir de la siguiente forma :

1) La combinación de las ecuaciones del balance de materia por componente y las ecuaciones de equilibrio (2.5) se resuelven para los flujos molares de líquido por especie ($L_{i,j}$) manteniendo los flujos totales de líquido y vapor constantes.

2) Los valores de $K_{b,i}$ se calculan a partir de las ecuaciones de punto de burbuja :

$$K_{b,i} \sum_{j=1}^{NC} \alpha_{i,j} x_{i,j} = 1 \quad (2.28)$$

3) Dados los valores de $K_{b,i}$, las temperaturas pueden calcularse a partir de la ecuación (2.12.)

4) Una vez obtenidas las composiciones y las temperaturas, las entalpías pueden calcularse a partir de las ecuaciones (2.16) y (2.17).

5) Dadas las entalpías de líquido y vapor el balance de energía se resuelve para los flujos de líquido totales de las corrientes (L_i), mientras los flujos molares totales de vapor se calculan a partir de un balance de materia total.

6) Se compara el valor calculado de los flujos totales de líquido con su valor anterior a la iteración; si la diferencia es menor a una determinada tolerancia se termina con el ciclo interno del algoritmo, si no es así los nuevos valores de iteración se calculan usando el método de Broyden regresando con estos valores al punto 1.

Los puntos del 1 al 6 representan el ciclo interno de el algoritmo de Boston y Sullivan, en si este ciclo es similar a un ciclo de iteración completo de cualquier método de descomposición. En el ciclo externo del procedimiento se utilizan las composiciones y las temperaturas calculadas para mejorar los parámetros de los modelos aproximados que calculan las entalpías y los valores de $K_{i,j}$, precisamente son estos parámetros las variables de iteración para el ciclo externo del algoritmo, es decir cuando dichos valores no varían demasiado entre cada ciclo externo el programa ha convergido.

En realidad el ciclo interno del algoritmo (1-6) requiere de un número de iteraciones similares a aquellas requeridas por cualquier método de descomposición, como el algoritmo de Tomich. Sin embargo, el algoritmo de Boston y Sullivan requiere de un tiempo de cálculo menor que estos métodos, debido al ahorro de cálculo realizado por los modelos aproximados para evaluar los valores de $K_{i,j}$ y de la entalpia.

2.6 Métodos de Corrección Simultánea.

En estos métodos, las ecuaciones MESH se linealizan y resuelven simultáneamente usando el algoritmo Newton-Raphson. El sistema resultante de ecuaciones lineales se resuelve para un grupo de variables de corrección, las cuales se usan para obtener los nuevos estimados. El procedimiento se repite hasta que la magnitud de las variables de corrección es suficientemente pequeña.

Organización de la matriz jacobiana.

Dado el gran número de ecuaciones uno de los pasos que consume más tiempo es la inversión del jacobiano del sistema. Para simplificar esta inversión, las ecuaciones MESH son agrupadas para formar submatrices que puedan ser tratadas más fácilmente, la forma de estas submatrices y del jacobiano total dependen de la manera en que son agrupadas las ecuaciones.

En el método de Naphtali-Sandholm (1971), las ecuaciones y variables se agrupan por etapa. Debido a que las corrientes que entran y salen de una etapa son funciones de las condiciones en las etapas adyacentes, esto causa que la matriz jacobiana posea una estructura tridiagonal lo que facilita su inversión.

Los métodos de Goldstein-Stanfield (1970) y Ishii y Otto (1973) agrupan las ecuaciones por tipo, es decir se clasifican las ecuaciones de acuerdo a la variación que representan. Así se forman grupos de ecuaciones que representan los balances de materia, los balances de energía, las ecuaciones sumatoria y las ecuaciones de equilibrio. Las submatrices de la matriz jacobiana producida por el algoritmo de Goldstein-Stanfield (1970) son tridiagonales lo que hace la inversión de estas relativamente más simple.

De acuerdo con Goldstein-Stanfield (1970), el agrupamiento de las ecuaciones y variables por etapa es más eficiente para sistemas con un gran número de etapas pero con pocos componentes, mientras el agrupamiento por tipo es más eficiente para columnas con pocas etapas y numerosos componentes.

Elección de Variables y Ecuaciones.

Naphtali y Sandholm (1971) colocaron las relaciones de equilibrio aparte de los balance de materia por componente en cambio Goldstein-Stanfield (1970) y Ishii y Otto (1973), sustituyeron las relaciones de equilibrio dentro del balance de materia, lo cual reduce el número de ecuaciones. El método de Naphtali y Sandholm (1971) usa a los flujos molares de las especies y las temperaturas de las etapas como variables de iteración, evitando de este modo los efectos de los cambios de las fracciones molares, los otros métodos en cambio usan las temperaturas, los flujos molares y las fracciones molares como variables de iteración, sin embargo, en estos métodos el número total de ecuaciones se reduce combinando las relaciones de equilibrio y los balances de materia.

Una ventaja adicional de los métodos de corrección simultánea es poder incorporar en su algoritmo los métodos numéricos con homotopia. Los métodos de homotopia se pueden aplicar para resolver el sistema de ecuaciones MESH linealizadas. A pesar de que este método genera una convergencia no cuadrática, posee las ventajas de no depender demasiado de los estimados iniciales y la capacidad de encontrar más de una solución al sistema, con lo cual se genera un conjunto de soluciones que ayuda a descartar aquellas que producen resultados no reales físicamente.

Los métodos de continuación consisten en un conjunto continuo de problemas que parten de un problema inicial ($G(X) = 0$) hasta la solución del problema original ($F(X) = 0$).

La trayectoria que existe entre la solución del problema inicial y la solución del problema original se conoce como ruta de homotopia. La posición que guarda un problema dado se determina mediante un parámetro adicional conocido como parámetro de homotopia.

$$\chi(x, t) = 0. \quad (2.29)$$

Este parámetro puede estar implícito en el problema original, en este caso se dice que el parámetro de homotopia es un parámetro natural, lo cual implica que tenga un significado físico que trae consigo tanto ventajas como desventajas. En el caso de que el parámetro de homotopia no forme parte del problema original, es decir es un parámetro que se adiciona al sistema y carece de significado físico entonces se habla de un parámetro de homotopia artificial. En general, según algunos autores (Aspron 1991), se puede considerar que un parámetro artificial es mucho menos restringido que un parámetro natural, el primero al agregarse al sistema pueden dar aquellas características que son deseables para el manejo numérico del sistema, lo cual da propiedades deseadas en el comportamiento de la trayectoria homotópica.

En la construcción de la función de homotopia que lleve a la solución del problema, se deben especificar tres pasos importantes:

1) Forma del sistema inicial $G(X)$: la forma del sistema inicial $G(X)$ más utilizada es la homotopia de Newton, la cual se especifica por la fórmula de recurrencia siguiente:

$$G(X) = F(X) - F(X_0) \quad (2.30)$$

aunque es la más utilizada por su rápida convergencia, $G(X)$ suele conservar la naturaleza no-lineal del sistema original, lo cual puede generar bifurcaciones o puntos de retorno en la trayectoria de homotopia.

2) Funcionalidad existente con respecto al parámetro de homotopia: Esta puede ser lineal o no lineal. Una forma lineal utilizada es:

$$\chi(x, t) = \frac{t - t_0}{t - t_0} F(x) + \frac{t_f - t}{t_f - t} G(x) \quad (2.31)$$

para $t_f = 1$ y $t_0 = 0$

$$\chi(x, t) = tF(x) + (1 - t)G(x) \quad (2.32)$$

introduciendo (2.32) en (2.30) se obtiene :

$$\chi(x, t) = F(x) - (1 - t)F(x^0) \quad (2.33)$$

3) Especificación del tipo de parametro de homotopia natural o artificial

En años recientes los métodos de homotopia y continuación se han usado para resolver problemas complejos de destilación, incluido el modelo de etapa en No-Equilibrio, lo cual implica el tomar en cuenta las funciones de transferencia de masa y energía (ecuaciones MERQ), dentro de una etapa teórica. Detalles de esta discusión pueden consultarse en los artículos de Wayburn y Seader (1984), Havacek y Rompay (1985) y en la tesis realizada por Aspron (1991).

2.7 Columnas Interconectadas y especificaciones.

La utilidad y eficiencia de un sistema de simulación no sólo se mide por el tamaño del error obtenido, en los resultados y en el tiempo de convergencia, también se puede valorar su utilidad a partir de la flexibilidad que debe poseer para elegir diferentes especificaciones de la columna, por ejemplo la corriente de fondos de la columna puede ser especificada por el flujo de líquido saturado que proviene del rehervidor, por su temperatura de salida, por el servicio de calentamiento o por la fracción molar de un determinado componente. Por otro lado, una columna de destilación generalmente puede estar conectada con agotadores y con bombas de calor o interenfriadores, es deseable que todas las alternativas anteriores de especificación puedan estar incluidas en un sistema de simulación, sin embargo el tomar en cuenta dichos casos en un modelo genera una complejidad extra en las ecuaciones que describen el sistema, lo cual afecta el tiempo de cálculo, la convergencia e incrementa la capacidad de memoria requerida para su cálculo. A continuación se presenta una revisión de las estrategias de cálculo para tratar este problema en sistemas de simulación.

Una de las estrategias que muchos investigadores han usado para generar programas que ofrecen una gran variedad de especificaciones ha sido generar un grupo de ecuaciones para cada tipo de especificación como lo explica Hutchison y Shewchuk (1974), otros investigadores han preferido la técnica de adicionar a las ecuaciones MESH, términos adicionales para cada tipo de especificación.

Los métodos de corrección simultánea particularmente los de Naphtali-Shadholm(1971) e Isii y Otto(1977) fueron uno de los primeros en presentarse en este análisis Seader (1977), estudio el método de Naphtali - Shadholm (1971) para columnas interconectadas explotando la estructura matricial que genera el arreglo típico de este método, aunque los métodos para invertir el jacobiano de la matriz generada, requieren procedimientos numéricos más complicados afortunadamente el tiempo de cálculo no sufre una variación importante como para hacer inviable dicho método

Otra aproximación para manejar especificaciones en un programa de simulación es el de satisfacer un grupo de funciones objetivo. En este caso, las funciones objetivo deseadas son definidas como funciones de los parámetros de la torre, por ejemplo las composiciones de producto son funciones de las composiciones de la corriente de alimentación y de la temperatura a lo largo de la columna.

Hay muchos métodos para calcular los valores que satisfagan las especificaciones, uno de estos procedimientos es la *sustitución directa*, la cual puede ser usada para corrientes de interconexión entre columnas pero no para ajustar las cargas térmicas para conseguir una temperatura determinada en un interenfriador. Para salvar dichas limitaciones los métodos de Wegstein y Broyden pueden usarse eficientemente. El método de Newton-Rapson puede utilizarse por tener mejores propiedades de convergencia, desafortunadamente se debe tomar en cuenta el incremento del tiempo de cálculo requerido para la ejecución de dicho método.

Un método alternativo para simular columnas de destilación interconectadas en la técnica modular simultánea (Westerberg 1977) . Esta técnica consiste en ajustar los parámetros de conexión entre varias unidades mediante la resolución de un modelo lineal para cada unidad expresando las variables de salida como funciones de las variables de entrada. Estos grupos de ecuación lineales pueden resolverse usando algoritmos simples de cálculo que generan los nuevos valores para resolver con ellos el grupo de ecuaciones no lineales que explican el comportamiento del sistema, este procedimiento se repite hasta conseguir la convergencia

2.8 Destilación Multicomponente a Tres Fases.

Cálculos de equilibrio líquido-líquido son necesarios durante la simulación de columnas de destilación en tres fases. Sin embargo, estos cálculos son complicados por el hecho de existir múltiples soluciones para el grupo de ecuaciones que describen este problema. Existen básicamente tres aproximaciones para resolver el problema del flash multicomponente. El procedimiento convencional presentado en el libro de Henley y Rosen(1969), es el de resolver el grupo de ecuaciones que describen el problema a partir de los estimados iniciales que toman en cuenta la existencia de tres fases. Si una solución trivial es encontrada a partir de estos valores iniciales, la mezcla se considera homogénea. El segundo procedimiento consiste en la formulación de equilibrio a tres fases como un problema de minimización de la energía libre de Gibbs .

Dluzniewski y Alder (1973) usan el método de Rand para la minimización de la energía libre de Gibbs para determinar la composición de las " P " fases en equilibrio, donde P en menor que la P_{max} dada por la reglas de fases de Gibbs. Gautam y Seider (1978) expusieron que el algoritmo de Rand es competitivo con el de Rosen y Henley (1969) para sistemas donde la distribución de fases es conocida en el equilibrio. Sin embargo, para estimados pobres en la composición de fases el método falla. Gautam y Seider (1978) también extendieron el algoritmo de Rand para aplicarlo al método de Boston y Fournier (1978). En este método asumen solamente una fase líquida presente en el equilibrio, como en el algoritmo de Rand minimizan la energía libre de Gibbs, si la energía libre de Gibbs es lo suficientemente pequeña se considera posible la existencia tres fases, de otra forma la prueba se descarta.

El tercer procedimiento involucra un prueba previa de estabilidad de fases para decidir si una mezcla es capaz de formar a determinadas condiciones dos fases líquidas antes de llevar a cabo los cálculos que resuelven el equilibrio líquido-líquido. Estos métodos fueron propuestos por Boston y Shah (1979), y Michelsen (1982).

En el método de Boston y Shah (1979) la fase líquida inicial es dividida en dos fases líquidas teóricas calculadas por un algoritmo inicial. Entonces se calcula la energía libre de Gibbs para el sistema dividido en dos fases líquidas y para el sistema homogéneo original. Si después de 10 iteraciones la energía libre de Gibbs del sistema multifase teórico no se reduce respecto a la energía de Gibbs del sistema original, la mezcla es considerada estable, es decir se considera que la mezcla estudiada no puede formar dos fases líquidas.

A partir de los desarrollos anteriores surgieron los primeros métodos para simular columnas de destilación multicomponente a tres fases. Los primeros métodos fueron básicamente una serie de flash a tres fases, a partir de entonces han surgido una amplia gama de métodos.

2.8.1 Métodos de Flash Sucesivos.

Ferraris y Morbidelli (1981) y posteriormente Pucci (1986), basaron sus algoritmos de simulación en la consideración de manejar una columna de destilación como una serie de tres flash sucesivos. La secuencia de cálculo de estos tres flash sucesivos presenta una gran flexibilidad, lo cual permite la creación de más de un método cambiando dicha secuencia.

Por su parte el algoritmo de Pucci(1986) consiste en calcular una serie de flash a lo largo de toda la columna de destilación, comenzando por el rehervidor y finalizando con el condensador hasta que la convergencia sea satisfecha, en este método se practica una prueba de estabilidad partiendo del cálculo de un flash a dos fases, para luego resolver el criterio de isoactividad. Si se encuentra la solución la mezcla se considera a tres fases, de otra manera solo se consideran las fases de líquido y vapor.

2.8.2 Métodos de Descomposición de Ecuaciones.

El primer método de descomposición de ecuaciones fue propuesto por Block y Hegner(1977), este procedimiento es una continuación del método de punto de burbuja en el cual los flujos totales de líquido son tomados como variables de iteración. En seguida se da un pequeño resumen de este método :

1) Se asumen estimados iniciales para las fracciones de líquido promedio, para cada especie y para la temperatura de cada etapa.

2) La relación $\beta_i = L_i / L''_i$ se calcula, si la solución no se encuentra la mezcla es considerada estable y solo se asume la existencia de dos fases.

3) Se calculan las T_i y las presiones de vapor para cada etapa, a partir de la ecuación de punto de burbuja.

4) Los balances de Energía y materia totales se resuelven para V_i, L_i, L''_i .

5) Se usan los residuales resultantes del balance de masa y energía para generar una corrección por medio de el procedimiento Newton-Rapson, calculando así las nuevas variables de iteración, hasta que la convergencia sea obtenida.

Ferraris y Morbidelli (1981) también desarrollaron un algoritmo de este tipo en el cual las variables de iteración son las composiciones de líquido. A continuación se presenta dicho algoritmo :

- 1) Se asumen estimados iniciales de las fracciones molares ($x_{i,j}$) de la fase líquida.
- 2) Se resuelven las ecuaciones de equilibrio para la temperatura de las etapas T_i y para $x_{i,j}$, $x''_{i,j}$.
- 3) Se resuelven los balances de Masa y Energía totales para V_i , L_i , L''_i .
- 4) Se resuelven los balances de masa por componente por un método similar al expuesto en la sección (2.5) por Boston y Sullivan.
- 5) Si la diferencia entre las composiciones encontradas en las etapas con los estimados iniciales, es menor a una tolerancia, el algoritmo es terminado si no, regresar al paso (2) calculando los nuevos estimados iniciales con un método de convergencia como el de Broyden

La principal desventaja del método de Ferraris y Morbilli (1981) es la necesidad de tener un conocimiento previo de la separación de fases, por lo que estos autores han acoplado a este algoritmo su método de falsh sucesivos para determinar una separación inicial. Otra desventaja de este método también compartida por el procedimiento de Block y Hegner (1977), es la incapacidad de manejar otros tipos de especificaciones como agotadores externos e interenfriadores, por lo cual no pueden utilizarse para columnas de destilación atmosféricas.

2.8.3 Métodos de Corrección Simultánea.

Como se expuso en la sección (2.6), la característica principal de los métodos de corrección simultánea, la constituye la matriz generada con la totalidad de las ecuaciones MESH. Para adecuar este método al análisis de la destilación a tres fases Niedzwiecki (1980) y también Schuil y Bool (1985) desarrollaron una técnica para modificar los valores de $K_{i,j}$ en las expresiones de equilibrio líquido-líquido. La idea principal de estos métodos es manejar solo un valor de $K_{i,j}$ que represente tanto el equilibrio líquido - líquido como el equilibrio líquido-vapor, a este valor de $K_{i,j}$ se le ha llamado $K^m_{i,j}$ de mezclado. La ventaja principal de tener solo una especie de $K_{i,j}$ es poder utilizar en su integridad los métodos de corrección simultánea explicados en la sección (2.6).

La diferencia primordial entre el análisis de Niedzwiecki(1980) y el de Schuil y Bool (1985), lo constituye el hecho de que estos últimos extendieron su análisis para aquellos sistemas en los cuales existe una distribución de todos los componentes en ambas fases líquidas.

para un componente j el coeficiente de distribución ($K_{i,j}$) ésta dado por :

$$K_{i,j} = \frac{y_{i,j}}{x_{i,j}} \quad (2.34)$$

mientras que para un componente distribuido en ambas fases líquidas ésta dado por :

$$K_{i,j}^m = \frac{K_{i,j} K_{i,j}^*}{\alpha K_{i,j}^* + (1-\alpha) K_{i,j}} \quad (2.35)$$

$$\alpha = \frac{L_{i,j}}{L_i + L_j} \quad (2.36)$$

$$K_{i,j}^* = \frac{y_{i,j}}{x_{i,j}} \quad (2.37)$$

Los métodos de corrección simultánea que han sido adaptados para su implementación en destilación a tres fases son :

Método de Naphtali-Sandholm : Este método fue ampliado para su uso por Baden y Michelson (1987) y por Cairns y Furzer (1990) , estos autores sólo agregaron al método original un análisis de estabilidad de fases y el módulo termodinámico para calcular las propiedades de la segunda fase líquida, por otro lado Cairns y Furzer (1990) asumen flujo molar constante con lo que el balance de energía no es considerado en los cálculos.

Método de Homotopia y Continuación : Kovach y Seader (1987) emplearon los métodos de Homotopia y continuación para la destilación a tres fases. Este algoritmo de cálculo, realiza los cálculos de equilibrio considerando expresiones separadas para la $K_{i,j}$ de la primera fase líquida como para la segunda fase líquida. El sistema formado se resuelve siguiendo cuidadosamente la trayectoria de la función de homotopia, ya que la localización de la solución se encuentra muy cerca de los puntos límites de dicha trayectoria. La forma general de este algoritmo se bosqueja a continuación :

- 1) Se resuelve por el método Newton-Rapson las ecuaciones MESH ordenadas por tipo de ecuación .
- 2) Se calculan las variables de iteración v_{ij} , l_{ij} , T_i por medio del método predictor-corrector Euler-Newton.
- 3) Se calculan las entalpías de las corrientes .
- 4) Checar la estabilidad de las fases líquidas para seguir con el procedimiento.

Generalmente este tipo de algoritmo suele representar buenas aproximaciones dentro de la región binodal del esquema de homotopia, sin embargo puede dar soluciones irreales fuera de ella , recordemos que una de las características primordiales de las rutas de Homotopia de continuación es la propiedad de encontrar más de una solución al sistema, con lo cual debe esperarse la detección de dichas soluciones.

2.9.4 Métodos de Modelos Locales.

Boston y Shah (1979) ampliaron el algoritmo de Boston y Sullivan (1974) para la simulación de columnas de destilación heterogéneas. En este método las variables de iteración siguen siendo los parámetros de los modelos aproximados para calcular las propiedades físico-químicas , donde el valor promedio de (K_{bi}) y la relación :

$$S_i = \frac{K_{bi} L_i'}{V_i} \quad (2.38)$$

constituyen los principales parámetros, los autores agregaron a estos un nuevo parámetro de iteración representado por $\beta_i = L_i'' / L_i'$ que a su vez genera un nuevo ciclo de iteración.

La innovación más importante de este algoritmo la constituye el desarrollo de una prueba de estabilidad de fases para detectar la existencia de dos fases en la columna. Como se dijo anteriormente esta prueba consiste en la minimización de la energía libre de Gibbs. El algoritmo completo de este método se presenta a continuación :

1) Se suponen los estimados iniciales del perfil de flujos, temperaturas, presiones para calcular los parámetros de los modelos aproximados para S_i , β_i y K_{bi}

2) Se resuelve el balance de materia para las composiciones de líquido y vapor, asumiendo a S_i , β_i y K_{bi} como constantes.

3) Se obtienen los nuevos valores de K_{bi} y T_i a partir de las ecuaciones del punto de burbuja. Si la diferencia de estos valores con los valores provenientes del paso (1) es menor a una tolerancia predeterminada (Tol_1), ir al paso 4, si no volver al paso (2), hasta llegar a la convergencia.

4) Se calcula la composición de las dos fases líquidas, manteniendo fijos los parámetros de los modelos para la predicción de las fases líquidas. Si la diferencia entre el valor de β_i calculado con el valor de β_i supuesto en el paso (1) es menor a Tol_2 seguir con el procedimiento, si no ir al paso 2.

5) Se calcula S_i resolviendo los balances de materia y energía para los flujos de vapor y líquido. Si el valor de S_i no converge regresar al paso (2).

6) Se calculan las composiciones de las dos fases líquidas en cada etapa. Se calculan los nuevos parámetros de los modelos aproximados. Si la diferencia entre los supuestos y los calculados es menor a una determinada tolerancia finalizar, si no regresar al paso (2).

Otro algoritmo de simulación similar al anterior fue propuesto por Ross y Seader (1981) la diferencia particular entre ambos métodos, son las variables de iteración utilizadas por cada uno de ellos. Ross y Seader utilizaron para su algoritmo a T_i , $x_{i,j}$, L_i , y V_i como variables de iteración. Así mismo Ross y Seader cambiaron la utilización de los factores S_i por factores de amortiguamiento para la composición de líquido.

2.10 Columnas de Destilación de Crudo.

Con la aparición del libro de Watkins (1973) " Petroleum Refining Distillation " , el diseño de columnas de destilación de crudo sentó sus bases teóricas para su desarrollo, por otro lado, los métodos de cálculo para este tipo de columnas evolucionaron a lo largo de cuatro décadas desde el modelo de Amudson (1959) hasta el modelo de Lang (1991). A continuación se presenta una revisión histórica de los desarrollos emprendidos sobre este tema hasta nuestros días.

Amudson (1959) fue el primer investigador en modelar una columna interconectada con un agotador lateral, usando un algoritmo de punto de burbuja, este procedimiento contempla la convergencia separada de la columna principal con los agotadores laterales, siendo la variable de iteración los flujos de vapor provenientes de estos últimos.

Cechetti (1963) desarrollo el primer algoritmo de simulación capaz de manejar la columna de destilación y sus agotadores laterales como una unidad, resolviéndolos simultáneamente por el método theta de Holland. Tanto Amudson como Cechetti, no tomaron en consideración el análisis de la formación de tres fases a lo largo de la columna excepto para el condensador.

Hess (1970) desarrollo un método de simulación para columnas de destilación, tomando como base el algoritmo de Tomich. Este autor maneja el problema de la presencia de dos fases liquidas, considerando que en la columna no se forman tres fases excepto para el condensador, donde el agua se considera como el líquido miscible, desgraciadamente este algoritmo es excesivamente sensible a los estimados iniciales y requiere un excesivo tiempo de cálculo para invertir el jacobiano del sistema cuando el número de etapas es mayor a 30.

Russel (1983) partió del método de Boston y Sullivan para desarrollar un método para simular columnas de destilación de crudo, al parecer manejo el problema de las tres fases de una forma similar al método presentado por Boston y Shad (1979) donde cuatro ciclos de convergencia son construidos uno por cada variable de iteración (Kbi, Si, B y los parámetros de los modelos locales).

Morris (1988) realizó una investigación comparativa entre el método presentado por Russel y el presentado por Ishii y Otto . Su trabajo de comparación tuvo como base la implementación de estos métodos en la PC. Como resultado este autor implemento el método de Russel en el simulador HYSIM desarrollado por la empresa Hyprotec Ltd. del Canadá , argumentando el excesivo espacio de memoria requerido por el método de Ishii y Otto .

Lang (1991) partió de una combinación del método de descomposición de ecuaciones para la simulación de columnas de crudo. La idea básica de este procedimiento es la de simular partes de la unidad de destilación por métodos diferentes. Para la simulación de la sección de rectificación de la columna principal, usa el método de Wang-Henke (1966), mientras que la sección de agotamiento de la columna principal y los agotadores laterales se resuelven por medio del método de suma de flujos de Burnigham y Otto (1967). En este algoritmo el problema de la aparición de tres fases en la columna es ignorado, lo cual representa una limitación del método, además de las desventajas implícitas correspondientes a los métodos de descomposición de ecuaciones, como son los grandes requerimientos de memoria y la poca flexibilidad para considerar especificaciones especiales.

López (1991) amplió el algoritmo original de Boston y Sullivan para columnas de destilación de crudo. El resultado de su trabajo es el simulador Crudesim desarrollado en la Universidad de Oklahoma. El algoritmo empleado por López es similar al creado por Boston y Shah (1979) con la diferencia de incorporar el algoritmo de Michelsen (1982) para la determinación y detección de una segunda fase líquida.

CAPITULO 3 MODELOS MATEMATICOS.

En este capítulo se hace una revisión de los modelos matemáticos que describen el comportamiento de una columna de destilación típica y en particular los empleados en este trabajo. El grupo de ecuaciones que caracterizan una columna de destilación están formadas por las ecuaciones MESH (Balance de Materia, Balance de energía, Ecuaciones de equilibrio y ecuaciones sumatorias) y las ecuaciones de los modelos locales para calcular de forma aproximada los valores de el coeficiente de distribución ($K_{i,j}$) y de las entalpias de líquido y vapor. Primeramente se presenta el modelo de etapa en equilibrio del cual se derivan las ecuaciones MESH manejadas para este trabajo; este modelo de etapa, a diferencia de la presentada en la sección 2.1, considera la formación de dos fases líquidas en equilibrio. En seguida se presenta la forma de manejar matemáticamente la especificación de bombas de calor y agotadores. Parte importante de este capítulo es la presentación de los modelos locales para calcular los valores de $K_{i,j}$ y los valores de las entalpias de líquido y vapor, también se incluye el análisis de grados de libertad para el sistema y las variables que se deben de especificar para satisfacerlo.

3.1 Ecuaciones de Diseño y Operación de la Columna.

3.1.1 Modelo de Etapa en Equilibrio.

La figura (3.1) muestra esquemáticamente el modelo de etapa que se usará en este trabajo, la nomenclatura de todas las variables se encuentra definida en el apéndice G. La cantidad total de líquido y vapor que salen de la etapa i está dada por :

$$L_T = L_i + L_i^* + U_i \quad (3.1)$$

$$V_T = V_i + W_i \quad (3.2)$$

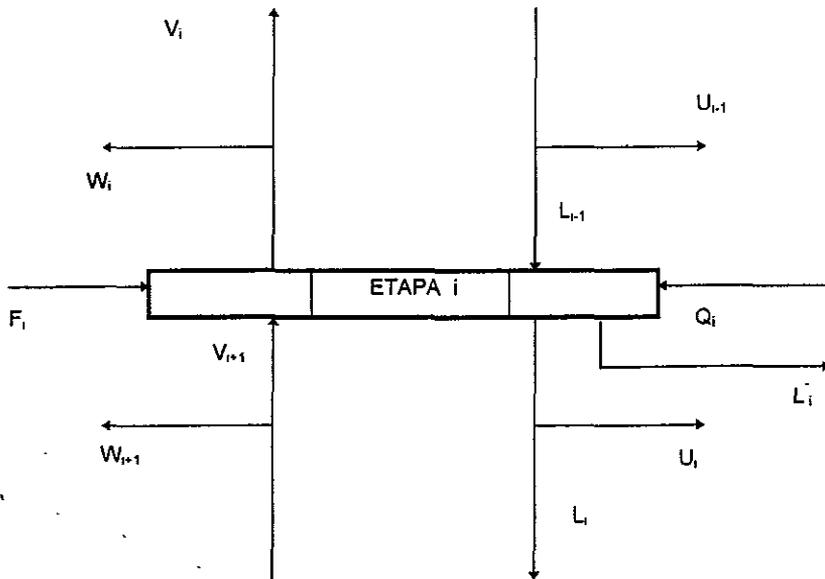


Figura 3.1 : Modelo de Etapa en Equilibrio Considerando dos Fases Líquidas en Equilibrio

Aunque la nomenclatura se presenta al final del trabajo es importante subrayar la nomenclatura empleada para el manejo de dos fases líquidas L_i es el flujo de la primera fase líquida entendiéndose por primera fase aquella donde la fracción de hidrocarburos es más alta y L_{i+1} es el flujo de la segunda fase líquida donde la fracción acuosa es más alta. A partir de este capítulo el superíndice "i" indicará las variables concernientes a la segunda fase líquida. Es importante hacer notar que la corriente lateral de líquido solo proviene de la primera fase líquida, el subíndice $i-1$ es usado para especificar el flujo de la etapa inmediata superior a la etapa i mientras $i+1$ se usa para especificar el flujo de la etapa inmediata inferior a la etapa i .

Tanto la temperatura como la presión se asumen iguales para las dos posibles fases líquidas y el vapor que salen de una etapa determinada, en cambio la presión y la temperatura de las corrientes de alimentación que entran en determinadas etapas de la columna no se consideran iguales a la presión y temperatura existentes en las etapas donde entran.

3.1.2 Esquema de la Columna y Grados de Libertad.

Una columna de destilación, resulta de la conjunción de un grupo de etapas como las mostradas en la figura (3.1). Una unidad de destilación atmosférica de crudo no sólo está formada por la columna de fraccionamiento principal, si no también por una serie de aditamentos que tienen la función de lograr el uso más eficiente de la energía empleada en el proceso. La figura (3.2) muestra un esquema de una unidad de destilación atmosférica, conformada por un fraccionador principal, un agotador lateral y una bomba de calor (interenfriador si extrae calor del sistema).

En el sistema expuesto en la figura (3.2) la columna 1 es representada por las etapas 1 al RE mientras que la columna 2 es fijada por las etapas RE+1 a N(total). En este diagrama se puede observar las variables adicionales generadas por la existencia de agotadores laterales, donde SS_{SMF} representa la corriente de flujo de líquido que sale de la etapa conectada al agotador lateral, mientras V_{TSS} representa el flujo de vapor que sale del domo del agotador hacia la etapa de la columna principal que recibirá dicho flujo. En el caso de bombas de calor G_S representa el flujo de líquido que será calentado o enfriado.

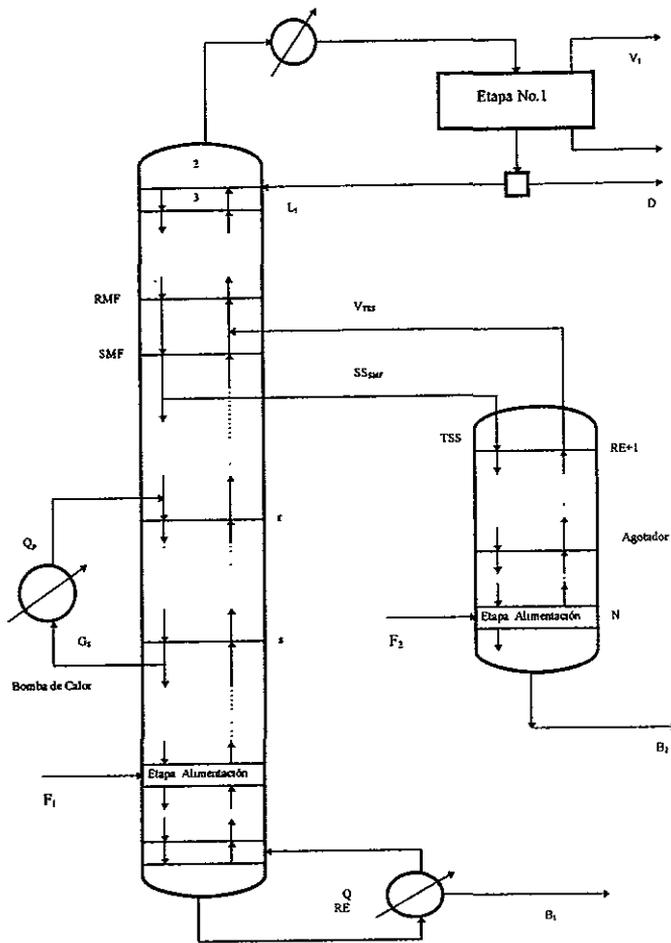


Figura 3.2 : Esquema de una unidad de destilación atmosférica con agotadores laterales y bomba de calor

Grados de Libertad

Los grados de libertad de un sistema representan el número de variables del proceso que deben ser fijadas para describirlo. Es una regla general que el primer paso para modelar matemáticamente un sistema sea el desarrollo de un análisis de grados de libertad, es este tipo de procedimiento el que le dirá al investigador las variables manipulables para resolver el modelo. Existen dos procedimientos para encontrar los grados de libertad de un proceso, cada uno de estos métodos solo varían en la rapidez con la que se puede llegar a la determinación de los grados de libertad. El primer método consiste en analizar detalladamente cada etapa del sistema, para llevar a cabo este análisis es necesario conocer con exactitud el modelo. El segundo método consiste en ensamblar por bloques los grados de libertad previamente conocidos, por ejemplo para una columna de destilación sencilla tenemos N número de etapas, NC número de componentes, 1 condensador total (opcional), una etapa de alimentación, un reboiler y un divisor para el reflujo. Cada uno de estos subbloques en que se ha dividido el fraccionador, poseen un número previamente conocido de variables y un número de ecuaciones que describen sus grados de libertad, por lo cual sólo se adicionan dichos datos para obtener los grados de libertad totales. Una revisión detallada de análisis de grados de libertad se puede encontrar en el capítulo 6 del libro de Henley y Seader (1981) o en el artículo de Erbar (1983).

Los grados de libertad se obtienen por la siguiente expresión general :

$$N_D = N_v - N_e \quad (3.3)$$

donde :

- N_D = Grados de libertad.
- N_v = Número total de variables .
- N_e = Número total de ecuaciones

Aplicando este procedimiento para la etapa de la figura 2.1 :

Número de Variables.

El número de variables que caracterizan una corriente de una sola fase es $C+3$, para el número de corrientes de la etapa expuesta en la fig 2.1, sumando el flujo de calor se tiene

$$N_v = 7(C+3)+1 = 7C+22 \quad (3.4)$$

Número de Ecuaciones.

Igualdad de presiones	$P^V = P^L$	3
Igualdad de temperaturas	$T^V = T^L$	3
Relaciones de Equilibrio	$y_i = K_i x_i$	C
Balance de materia por componentes		C-1
Balance de materia total		1
Balance de energía		1
Sumatorias fracciones molares		7
Igualdad de fracciones molares para las salidas laterales	$x_i = x_U$	C-1
	$y_i = y_w$	C-1
Total		$N_e = 4C + 12$

Por lo tanto los grados de libertad para una etapa simple es :

$$N_D = 7C + 22 - (4C + 12) = 3C + 10 \quad (3.5)$$

De forma similar se realiza el análisis de grados de libertad para diferentes tipos de etapas, para diferentes tipos de condensadores, para divisores y para válvulas, de esta forma se puede calcular los grados de libertad para cualquier unidad de proceso, solo sumando los grados de libertad de cada unidad. De esta forma los grados de libertad para una unidad de proceso se obtienen a partir de las siguientes ecuaciones :

$$N_{v,T} = \sum_{U=1}^{NU} N_{v,U} - N_R(C+3) + N_A \quad (3.6)$$

$$N_{e,T} = \sum_{U=1}^{NU} N_{e,U} - N_R \quad (3.7)$$

donde : $N_{v,T}$ número de variables totales para la unidad de proceso.
 $N_{e,T}$ número de ecuaciones totales para la unidad de proceso.
 N_R número de corrientes de interconexión redundantes
 N_A número de unidades repetidas en la unidad de proceso.

sustituyendo las ecuaciones (3.6) y (3.7) en la ecuación (3.3) el número de grados de libertad para una unidad de proceso está dado por la siguiente expresión.

$$N_D = \sum_{U=1}^{NU} N_{D,U} - N_R(C+2) + N_A \quad (3.8)$$

De este modo, para una unidad de destilación como la mostrada en la figura (3.2), los grados de libertad se calculan de la siguiente forma :

Tabla I : Grados de libertad por unidad .

Modulo	Grados de libertad
etapa No.1(condensador parcial y divisor)	C+5
etapa No 2	2C+6
etapas 3 a RMF - 1	(RMF-3)(2C+6)
etapa RMF	3C+8
etapa SMF	C+5
etapas SMF+1 a r-1	(r-SMF-1)(2C+6)
etapa r	3C+8
etapa s	C+5
etapas s+1 a F ₁ -1	(F ₁ -S-1)(2C+6)
etapa F ₁	2C+8
etapa F ₁ +1 a RE - 1	(RE-F ₁ -1)(2C+6)
etapa RE	C+4
etapa TSS	2C+6
etapas TSS+1 a F ₂	(F ₂ -TSS)(2C+6)
bomba de calor	C+4
TOTAL	(RMF+r-SMF-S+RE+F ₂ -TSS-6)(2C+6)+ 16C+59
	= (N-9)(2C+6)+16C+59
	N _{e,r} =2NC+6N-2C+4

Número de corrientes de interconexión :

Unidad	Número de corrientes de interconexión
columna principal y agotador	2(N-1-2) = 2N-6
bomba de calor	2
rehervidor	2
Total	N _R = 2N-4

sustituyendo ambos valores en la ecuación (3.8), los grados de libertad para una unidad de destilación son :

$$N_D = 2NC + 6N - 2C + 4 - (2N - 4)(C + 2) = 2N + 2C + 12 \quad (3.9)$$

Las variables remanentes son el número de variables que deben especificarse para poder resolver el problema . En el caso la columna de la figura 3.2, el número de especificaciones necesarias es $N_{sp} = (2N+2C+12)-(2C+2N+9) = 3$, las cuales deben ser elegidas de la siguiente lista. :

- 1: Flujo total de Destilado.
- 2 : Relación de reflujo.
- 3 : Relación de destilado vapor y destilado líquido.
- 4 : Servicio de enfriamiento del condensador.
- 5 : Servicio de calentamiento del rehervidor.
- 6 : Especificación de la fracción mol de un componente en la corriente de fondos.
- 7 : Especificación de la fracción mol de un componente en la corriente de domos.

Tabla II Variables que generalmente se especifican para un separador

Flujos de los componentes en las alimentaciones	$f_{i,j}$	2C (dos alimentaciones)
Presión de las Alimentaciones	$P_{F,i}$	2
Temperatura de las Alimentaciones	$T_{F,i}$	2
Presión de la Etapas	P_i	N.
Calor de las Etapas	Q_i	N
Número de Etapas		1
Presión en el Divisor de Flujo		1
Calor del Divisor		1
Flujo de la bomba de calor		1
Flujo que va hacia el agotador		1
Total		$2C + 2N + 9$

3.1.3. Ecuaciones del Modelo.

A continuación se presentan las ecuaciones utilizadas en este trabajo para la simulación de una columna de destilación atmosférica. Los detalles de la derivación de todas ellas están dados en los apéndice A .

Balances de Materia y Energía.

A estado estacionario el balance de materia para la especie j en la etapa i es :

$$-l_{i,j} + \left(RL_i + E_i K_{i,j} RV_i \frac{V_i}{L_i} + \frac{L'_i K'_{i,j}}{L'_i K'_{i,j}} \right) l_{i,j} - \left(E_{i+1} K_{i,j} \frac{V_{i+1}}{L_{i+1}} \right) l_{i+1,j} = f_{i,j} \quad (3.10)$$

el balance de energía esta dado por :

$$(\hat{h}_{i-1} - H_i) L_{i-1} + (H_{i+1} - \hat{h}_i - \beta_i \hat{h}_i) L_i + M_{i+1} H_{i+1} - (M_i + W_i) H_i - U_i \hat{h}_i + F_i H_{f_i} + Q_i = 0 \quad (3.11)$$

donde el parámetro M_i se encuentra definido en el apéndice A.

Bombas de Calor.

La consideración de bombas de calor, afecta el balance de Materia y Energía de dos etapas en la columna, la etapa de la cual sale el flujo hacia el intercambiador y la etapa que recibe dicho flujo. Para la etapa que recibe el flujo , los balances de masa y energía son respectivamente :

$$-l_{i,j} + \left(RL_i + E_i K_{i,j} RV_i \frac{V_i}{L_i} + \frac{L'_i K'_{i,j}}{L'_i K'_{i,j}} \right) l_{i,j} - \left(E_{i+1} K_{i,j} \frac{V_{i+1}}{L_{i+1}} \right) l_{i+1,j} - \left(\frac{G_s}{L'_s} \right) l_{s,j} = f_{i,j} \quad (3.12)$$

$$(\hat{h}_{i-1} - H_i) L_{i-1} + (H_{i+1} - \hat{h}_i - \beta_i \hat{h}_i) L_i + M_{i+1} H_{i+1} - (M_i + W_i) H_i - U_i \hat{h}_i + F_i H_{f_i} + Q_i + G_s \hat{h}_s = 0 \quad (3.13)$$

donde G_s es el flujo de líquido que sale de la etapa s .

Para la etapa de la cual sale el flujo hacia el intercambiador (etapa "s ")

$$-l_{i,j} + \left(RL_i + E_i K_{i,j} RV_i \frac{V_i}{L_i} + \frac{L'_i K'_{i,j}}{L'_i K'_{i,j}} + \frac{G_i}{L'_i} \right) l_{i,j} - \left(E_{i+1} K'_{i,j} \frac{V_{i+1}}{L_{i+1}} \right) l_{i+1,j} = f_{i,j} \quad (3.14)$$

$$(h'_{i-1} - H_i) L'_{i-1} + (H_{i+1} - h_i - \beta_i h'_i) L_i + M_{i+1} H_{i+1} - (M_i + W_i) H_i - U_i h'_i + F_i H_{f_i} + Q_i - G_i h'_i = 0 \quad (3.15)$$

donde G_i es el flujo de líquido que sale de la etapa hacia el intercambiador o interenfriador, siendo $s = i$.

Agotadores Laterales.

La presencia de agotadores laterales adiciona más etapas al modelo, además afecta tres etapas más, dos en la columna principal (la etapa de donde proviene el flujo que va hacia el agotador y la etapa que recibe el flujo proveniente del mismo) y la etapa de domos de cada agotador lateral existente.

Para la etapa de donde proviene el flujo que va hacia el agotador lateral (etapa SMF) los balances de Masa y Energía son :

$$-l_{i,j} + \left(RL_i + E_i K_{i,j} RV_i \frac{V_i}{L_i} + \frac{L'_i K'_{i,j}}{L'_i K'_{i,j}} + \frac{SS_i}{L'_i} \right) l_{i,j} - \left(E_{i+1} K'_{i,j} \frac{V_{i+1}}{L_{i+1}} \right) l_{i+1,j} = f_{i,j} \quad (3.16)$$

$$(h'_{i-1} - H_i) L'_{i-1} + (H_{i+1} - h_i - \beta_i h'_i) L_i + M_{i+1} H_{i+1} - (M_i + W_i) H_i - U_i h'_i + F_i H_{f_i} + Q_i - SS_i h'_i = 0 \quad (3.17)$$

donde SS_i es el flujo de líquido que sale de la etapa hacia el agotador.

Para la etapa del agotador lateral que recibe el flujo proveniente de la columna principal (etapa TSS) :

$$\left(RL_i + E_i K_{i,j} RV_i \frac{V_i}{L_i} + \frac{L'_i K'_{i,j}}{L'_i K'_{i,j}} \right) l_{i,j} - \left(E_{i+1} K'_{i,j} \frac{V_{i+1}}{L_{i+1}} \right) l_{i+1,j} - \left(\frac{SS_{SMF}}{L'_{SMF}} \right) l_{SMF,j} = f_{i,j} \quad (3.18)$$

$$(H_{i+1} - h'_i - \beta_i h'_i) L_i + M_{i+1} H_{i+1} - (M_i + W_i) H_i - U_i h'_i + F_i H_{f_i} + Q_i + SS_i h'_{SMF} = 0 \quad (3.19)$$

donde SS es el flujo de líquido que proviene de la etapa SMF.

Para la etapa que recibe el flujo proveniente del agotador lateral el balance de masa y energía esta dado por :

$$-l_{i,j} + \left(RL_i + E_i K_{i,j} R V_i \frac{V_i}{L_i} + \frac{L_i K'_{i,j}}{L_i K'_{i,j}} \right) l_{i,j} - \left(E_{i+1} K'_{i,j} \frac{V_{i+1}}{L_{i+1}} \right) l_{i+1,j} - \left(E_{TSS} K'_{TSS,j} \frac{V_{TSS}}{L_{TSS}} \right) l_{TSS,j} = f_{i,j} \quad (3.20)$$

$$(h'_{i-1} - H_i) L_{i-1} + (H_{i+1} - h'_i - \beta_i h'_i) L_i + M_{i+1} H_{i+1} - (M_i + W_i) H_i - U_i h'_i + F_i H_{f,i} + Q_i + M_{TSS} H_i = 0 \quad (3.21)$$

donde el subíndice TSS indica la etapa de domos del agotador lateral del cual proviene.

Para etapas que involucran grandes flujos de calor como rehervidores, condensadores e interenfriadores los flujos de calor son altamente dependientes de las composiciones y de los flujos en la columna, por esta razón los balances de energía para estas etapas son usualmente remplazados por otras expresiones de dependencia que no incluyen la especificación de Q_i . Para el rehervidor la especificación típica es remplazar el balance de energía por el flujo de fondos de la columna. Para el condensador el balance de energía es reemplazado por la especificación de la relación de reflujo.

El uso de otro tipo de especificaciones como las usadas para remplazar el balance de energía en las etapas afectados por intercalentadores o interenfriadores, está limitada por el algoritmo usado para resolver los ecuaciones MESH debido a la configuración particular de los sistemas matriciales generados para cada método.

3.2 Ecuaciones para Calcular Las Propiedades Termodinámicas de los Componentes.

El cálculo de las propiedades Termodinámicas de las especies cuya separación por destilación se desea simular, representa el corazón de cualquier procedimiento de simulación. De la exactitud de los métodos usados para calcular los valores de $K_{i,j}$ y las entalpías de líquido y vapor dependen en un 90% la obtención de resultados apegados a la realidad. Sin embargo son también este tipo de cálculos los que consumen más de la mitad del tiempo de máquina usado para alcanzar la convergencia, es por ello que muchos investigadores se han dado a la tarea de tratar de disminuir el tiempo usado para calcular las propiedades termodinámicas, sin que por ello se pierda la precisión requerida para obtener buenos resultados en una simulación.

Generalmente en las columnas de destilación la fase vapor tiene un comportamiento aproximado al ideal, excepto para altas presiones y temperaturas criogénicas. Por otro lado las fases líquidas se desvían de la idealidad debido a la fuerte interacción molecular que poseen los líquidos, más aún, sistemas con múltiples fases líquidas, como es el caso tratado por este trabajo, exponen grandes desviaciones de la idealidad debidas a que la fuerza de interacción entre moléculas se incrementa por la interfase existente entre las fases líquidas. El uso de los modelos rigurosos para calcular dichas desviaciones muchas veces hace prohibitivo el implementar dichos programas en PC's, es por esta razón que muchos simuladores comerciales como el ASPEN utilizan métodos de modelos locales para sus algoritmo de cálculo.

3.2.1 Determinación de los Valores de $K_{i,j}$.

Como los valores de los parámetros del modelo aproximado para calcular $K_{i,j}$, son calculados en el ciclo externo del algoritmo, a partir de valores de $K_{i,j}$ obtenidos por métodos rigurosos, en esta sección primero se expondrá como se calculan los valores de $K_{i,j}$ en forma rigurosa y posteriormente se explica la forma en que lo hace el modelo aproximado.

Cálculo de $K_{i,j}$ de Forma Rigurosa.

Los valores de $K_{i,j}$ son calculados teniendo como base la fugacidad de líquido y la fugacidad de vapor. La fugacidad de la especie j en la fase vapor en la etapa i esta dada por :

$$f_{i,j}^v = y_{i,j} \phi_{i,j}^v P_i \quad (3.22)$$

donde $\phi_{i,j}^v$ es el coeficiente de fugacidad determinado por una ecuación de estado. La fugacidad de líquido de la especie j en la etapa i esta dada por :

$$f_{i,j}^L = x_{i,j} \gamma_{i,j} f_{i,j}^{L*} \quad (3.23)$$

donde $f_{i,j}^{L*}$ es la fugacidad de líquido de la especie j a la presión y temperatura del sistema y $\gamma_{i,j}$ es el coeficiente de actividad determinado por alguna correlación empírica como la ecuación de Margules, UNIQUAC o la correlación NRTL. Debido a que no existen datos experimentales de la fugacidad de líquido de especies puras ($f_{i,j}^{L*}$), se debe encontrar una expresión que reemplace dicho termino de la ecuación de fugacidad de líquido. Esta expresión es la fugacidad de vapor de la especie j a la presión de vapor y temperatura deseada ($f_{i,j}^{vp}$), por lo que la expresión del valor de $K_{i,j}$ queda como :

$$K_{i,j} = \frac{y_{i,j}}{x_{i,j}} = \frac{\gamma_{i,j} f_{i,j}^{vp}}{\phi_{i,j}^v P_i} \quad (3.24)$$

Cuando la temperatura o la presión de una etapa es mayor al punto crítico de una especie, la presión de vapor de ésta se vuelve indefinida, con lo cual no se puede calcular $f_{i,j}^{vp}$, en estos casos algunos autores han obtenido buenos resultados extrapolando la curva de presión de vapor dentro de la región crítica. La correlación de Chao-Seader es otra alternativa para calcular $f_{i,j}^{vp}$.

Cálculo de $K_{i,j}$ a partir de modelos aproximados.

Los parámetros del modelo aproximado para los valores de $K_{i,j}$, utilizados en este trabajo son los modelos originales dados por Boston y Sullivan (1974), en los cuales la constante de equilibrio $K_{i,j}$ está dada por las ecuaciones 2.11 a 2.15

3.2.2 Determinación de los Valores de Entalpías de Líquido y Vapor.

La determinación rigurosa de la entalpia de líquido y vapor requiere del cálculo de las fugacidades a partir de una ecuación de estado, para lo cual se tiene la siguiente ecuación :

$$\left(\frac{\partial H}{\partial P} \right)_T = V - T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P \quad (3.25)$$

integrando la ecuación 3.25, obtenemos en las siguientes ecuaciones :

$$H_i = H_i^\circ - \Delta H_i \quad (3.26)$$

$$h_i = h_i^\circ - \Delta h_i \quad (3.27)$$

donde H_i y h_i son las entalpias por mol de mezcla para el flujo de vapor y líquido respectivamente; H° , h° son las entalpias de la fase líquida y vapor cuando estas se comportan idealmente. Estas entalpias pueden ser calculadas como el promedio de las entalpias de las especies puras que conforman la mezcla.:

$$H_i^\circ = \sum_{j=1}^{NC} y_{i,j} H_{i,j}^\circ \quad (3.28)$$

$$h_i^\circ = \sum_{j=1}^{NC} x_{i,j} h_{i,j}^\circ \quad (3.29)$$

Para soluciones ideales también se debe calcular la entalpía de mezclado mediante la ecuación de Gibbs-Helmholtz.

$$\Delta h_i^m = -T_i^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\Delta G_i^e}{T} \right) \quad (3.30)$$

donde ΔG^e es la energía libre de Gibbs en exceso :

$$\Delta G_i^e = RT \ln \gamma_i \quad (3.31)$$

De una forma rigurosa ΔH_i y Δh_i deben ser calculadas a partir de una ecuación de estado. En este trabajo se calculan dichas deltas por medio de la siguiente función lineal :

$$\Delta H = H_{i,j}^* + Cp_{i,j}^v (T_i - T_i^*) \quad (3.32)$$

$$\Delta h = h_{i,j}^* + Cp_{i,j}^L (T_i - T_i^*) \quad (3.33)$$

donde $h_{i,j}^*$ y $H_{i,j}^*$ representan la entalpía de vapor y líquido a la temperatura de referencia T^* ; $Cp_{i,j}^L$ y $Cp_{i,j}^v$ representan el promedio de las capacidades caloríficas para las mezclas de vapor y líquido respectivamente.

Sustituyendo 3.32, 3.28 en 3.26 y 3.33, 3.29 en 3.27 se obtienen las entalpías de vapor y líquido :

$$H_i = \sum_{j=1}^{NC} y_{i,j} H_j^o - (H_{i,j}^* + Cp_{i,j}^v (T_i - T_i^*)) \quad (3.34)$$

$$h_i = \sum_{j=1}^{NC} x_{i,j} h_j^o - (h_{i,j}^* + Cp_{i,j}^L (T_i - T_i^*)) \quad (3.35)$$

donde $H_{i,j}^*$, $h_{i,j}^*$, $Cp_{i,j}^v$ y $Cp_{i,j}^L$ son parámetros estimados en el ciclo externo del algoritmo a partir de una serie de valores de ΔH_i y de Δh_i , calculados por métodos rigurosos.

3.2.3 Ecuaciones de Eficiencia en las Etapas.

La ecuación que determina los valores de $K_{i,j}$ expresa la relación de las composiciones de una especie j en las fases de vapor y líquido cuando estas se encuentran en equilibrio. Sin embargo, en realidad el equilibrio entre fases dista mucho de alcanzarse en cada etapa de una columna de destilación real. La razón de que solo se logre una aproximación al estado de equilibrio se debe al mezclado imperfecto, a las resistencias de transferencia de masa y a las pérdidas de calor que realmente existen en la columna. Es por todo ello que la relación entre fases debe ser corregida, para tomar en cuenta dichos efectos.

Una de las expresiones más tradicionales que expresan la desviación del estado de equilibrio es la eficiencia de Murphree la cual está dada para cada etapa de la columna por:

$$\eta_j^k = \frac{y_{i,j} - y_{i-1,j}}{K_{i,j}^k x_{i,j}^k - y_{i-1,j}} \quad (3.36)$$

donde el superíndice k indica la fase donde se calcula la eficiencia. Aunque se logran representaciones más aproximadas a la realidad con ecuaciones de eficiencia para cada especie en cada etapa de la columna, la eficiencia de Murphree para cada etapa es la más usada en todos los paquetes de simulación, debido a su sencillez y a su propiedad de no requerir datos o estimados de propiedades de transporte.

CAPITULO 4 ALGORITMO DE SOLUCION

En este capítulo se realiza una descripción detallada del método de cálculo empleado para el programa de simulación (Torresim). La idea principal del método elegido, es básicamente la misma que se emplea en el tradicional algoritmo de Boston y Sullivan con algunas modificaciones que son explicadas a continuación.

La estructura general de este algoritmo "modificado" de Boston y Sullivan fue hecha por Ross(1979) para una columna sencilla donde se considera la formación de dos fases líquidas. En este trabajo se amplió la modificación de Ross para una columna de destilación atmosférica considerando con ello la adición de agotadores laterales y bombas de calor, así mismo, se cambió el modelo de etapa original por el expuesto en la figura 3.1 lo cual permitió un manejo más eficiente de las especificaciones para una columna compleja.

El algoritmo completo se presenta en la tabla III. Los estimados iniciales de los flujos de líquido y vapor para cada etapa de la columna se determinan de la siguiente forma, partiendo de la especificación del flujo de fondos, corrientes laterales y relación de reflujo de la columna se calculan los perfiles de líquido y vapor considerando flujo molar constante. Como por lo general dichos resultados suelen representar estimados iniciales lejanos a la solución del problema, se resuelven con ellos la combinación de el balance de materia y las ecuaciones de equilibrio (ecuación 3.10) para los flujos de líquido por especies l_{ij} , con estos valores se calculan los flujos de vapor por especies v_{ij} y las fracciones mol promedio de líquido y vapor. Para calcular dichos estimados se utilizan valores de K_{ij} determinados para una composición promedio de las corrientes de alimentación, a una presión y temperatura promedio.

Según Ross, los estimados iniciales calculados de esta forma son suficientes para alcanzar la convergencia en pocas iteraciones; sin embargo, para sistemas con un amplio intervalo de puntos de burbuja, los estimados para la temperatura deben ser mejorados para prevenir que las correlaciones que predicen las propiedades termodinámicas no sean extrapoladas a regiones donde predicen resultados irreales. También para este tipo de sistemas el algoritmo contempla el mejoramiento de los estimados de la temperatura, llevando a cabo algunas iteraciones del algoritmo de punto de burbuja para sistemas donde las eficiencias de Murphree son menores que 0.1.

Tabla III Resumen del Algoritmo.

1) Se estima los valores iniciales de x^* , y^* , L^* , V^* y T^*

2) Se realiza el análisis de estabilidad de fases para cada etapa, determinándose la composición de ambas fases líquidas en equilibrio.

$$x, x^*, L, L^*$$

3) Se calculan los coeficientes de los modelos locales para los valores de K_{ij} y los valores de entalpia.

$$K_{b,i}, \alpha^*, \alpha A, B, \\ h^{v_{ij}}, h_{ij}, h_{ij}^*, cp_{ij}^*, cp_{ij}^*$$

4) Cálculo de K_{ij} y K_{ij}^* a partir de los modelos locales.

$$K_{ij} = K_{b,i} \alpha_{ij} \quad K_{ij}^* = K_{b,i}^* \alpha_{ij}^*$$

5) Se combinan las ecuaciones de balance de materia y las ecuaciones de equilibrio.

se resuelve el sistema de ecuaciones para calcular x_{ij}
se calculan y_{ij}, x_{ij}^*

6) Dado $L_{T,i} = L_i + L_i^*$ y $\bar{x}_{i,j}$ se resuelve la relación de equilibrio líquido-líquido para calcular :

$$\beta_i, x^*, x^*, L^* \text{ y } L^*$$

7) Se determinan los nuevos valores de K_{ij} y K_{ij}^* a partir de (4.8) y (4.9)

8) Cálculo del nuevo perfil de la temperaturas a partir de :

$$T_i = \frac{B_i}{A_i - \ln K_{b,i}}$$

9) Se calculan los valores de las entalpias de las corrientes por medio de los modelos locales (H_i, h_i, h_i^*). Dado β_i y los valores de las entalpias, se resuelven los balances de materia para los flujos molares de líquido (L_i) Se calculan los valores de los flujos de vapor por medio de un balance de masa total.

10) Dado $((L_i^* - L_i)/L_i^*) < \varepsilon_1$

No ajusta : los valores de L_i son ajustados por el método de Wegstein.

11) Si :

$$\text{ave} |T_i - T_i^*| \leq \varepsilon_2 \quad \max |T_i - T_i^*| \leq \varepsilon_3 \quad \max |x_{i,j} - x_{i,j}^*| \leq \varepsilon_4$$

termina el algoritmo.

No

Ajustar las composiciones de líquido y vapor por la ecuación 4.11

Basado en los perfiles iniciales, los valores de $x_{i,j}$, $x_{i,j}''$, $y_{i,j}$, L_i y L_i'' , son calculados mediante un análisis de estabilidad previo al cálculo del equilibrio líquido-líquido.

El análisis de estabilidad se realiza para cada etapa utilizando el algoritmo de Gautam y Seider (1979), el cual está basado en la minimización de la energía libre de Gibbs, considerando la reducción de la misma como una prueba de la existencia de tres fases en la etapa. La ecuación de equilibrio líquido-líquido se resuelve (únicamente para aquellas etapas en el que el análisis de estabilidad ha resultado positivo) de forma similar al equilibrio líquido-vapor que se realiza para un flash isotérmico, por medio de la siguiente ecuación:

$$f(\beta_i) = \sum_{j=1}^{NC} \frac{(RL_i + \beta_i)(1 - K_{i,j}^D) \bar{x}_{i,j}}{(RL_i + \beta_i K_{i,j}^D)} = 0 \quad (4.1)$$

donde

$$K_{i,j}^D = \frac{K_{v,j}}{K_{l,j}} \quad \text{y} \quad \beta_i = \frac{L_i'}{L_i} \quad (4.2), (4.3)$$

A continuación los parámetros de los modelos locales para la entalpía y los valores de $K_{i,j}$ y $K_{i,j}''$ son calculados de la forma que se desarrollo en el capítulo tres.

En el paso 4 comienza el ciclo interno del algoritmo calculando los valores de $K_{i,j}'$, $K_{i,j}''$, usando la ecuación (2.11). El balance de masa y las relaciones de fase, se combinan para eliminar los flujos molares de vapor por especies $v_{i,j}$, a partir de esta combinación de ecuaciones se calculan los flujos molares de líquido por especie $l_{i,j}$ (ecuación 3.10). Estas ecuaciones forman normalmente una matriz tridiagonal que puede resolverse por el algoritmo de Thomas, desgraciadamente cuando se toman en cuenta agotadores externos o bombas de calor, se generan elementos fuera de la diagonal de la matriz, obteniéndose una matriz dispersa. En el programa Torresim, el algoritmo utilizado para resolver dicho tipo de matriz es tomado de las librerías IMSL incluidas en FORTRAN 90, las cuales resuelven la matriz por el método numérico de Markowitz.

Una vez obtenidos los flujos de líquido y vapor por especie, las fracciones de líquido y las fracciones molares de vapor se calculan y normalizan a través de la siguiente ecuación general aplicable a $y_{i,j}$, $x_{i,j}$ y $x_{i,j}''$:

$$x_{i,j} = \frac{l_{i,j}}{\sum_{j=1}^{NC} l_{i,j}} \quad (4.4)$$

$$x_{i,j}^N = \frac{x_{i,j}}{\sum_{j=1}^{NC} x_{i,j}} \quad (4.5)$$

donde $x_{i,j}^N$ representa la fracción normalizada .

Para aquellas etapas en que estén presentes dos fases líquidas, el equilibrio líquido-líquido es nuevamente calculado para obtener nuevos valores de la composición de líquido en cada fase. Los moles totales de cada especie j en la etapa i , para ambas fases líquidas están dados por :

$$l_{T,i,j} = L_i x_{i,j} + L'_i x'_{i,j} \quad (4.6)$$

y la fracción molar promedio esta dada por :

$$\bar{x}_{i,j} = \frac{l_{T,i,j}}{(L_i + L'_i)} \quad (4.7)$$

Para cada etapa las nuevas composiciones para las dos fases en equilibrio son calculadas usando nuevamente la ecuación (4.1). La sugerencia de Ross de mantener esta ecuación en esta parte del algoritmo donde $K_{i,j}^D$ se mantiene fija, es una de las diferencias de su algoritmo con el método tradicional de Boston y Sullivan. Esta modificación reduce oscilaciones durante la iteración del ciclo interno del algoritmo.

Dadas las nuevas composiciones de líquidos se calculan nuevamente los valores para $K_{i,j}$ y $K''_{i,j}$, si se considera que $\eta_i = \eta'_i$, estos valores se determinan de la siguiente forma :

$$\bar{K}_i = \frac{1}{\sum_{j=1}^{NC} \alpha'_{i,j} \cdot x'_{i,j}} \quad (4.8)$$

$$\bar{K}_i = \frac{1}{\sum_{j=1}^{NC} \alpha_{i,j} \cdot x_{i,j}} \quad (4.9)$$

Si se considera la eficiencia de Murphree de la primer fase líquida diferente a la eficiencia de la segunda fase líquida los valores de $K_{i,j}$ y $K_{i,j}''$ se determinan a partir de :

$$\overline{K}_i' = \sum_{j=1}^{N_C} \frac{y_{i,j} + y_{i-1,j} (\eta_i' - 1)}{\eta_i' \cdot \mu_{i,j}} \quad (4.10)$$

$$\overline{K}_i'' = \sum_{j=1}^{N_C} \frac{y_{i,j} + y_{i-1,j} (\eta_i'' - 1)}{\eta_i'' \cdot \mu_{i,j}} \quad (4.11)$$

La determinación de las ecuaciones anteriores representa una de las grandes ventajas de el uso de modelos de aproximación local, por medio de estas se logra calcular de manera directa la temperatura de cada etapa usando la siguiente ecuación ; eliminando así la necesidad de cálculos iterativos.

$$T_i = \frac{B_i}{A_i - \ln K_{b,i}} \quad (4.12)$$

Una vez determinadas las nuevas temperaturas, las entalpías de las corrientes de líquido y vapor se calculan usando los modelos aproximados (3.34 y 3.35). Dados los valores de las entalpías de las corrientes el balance de energía se resuelve para los flujos totales L_i , finalmente los flujos totales de vapor V_i se determinan , a partir de un balance de materia total comenzando por la etapa del fondo de los agotadores y de la columna principal.

El ciclo interno del algoritmo finaliza con el chequeo del criterio de convergencia para los flujos de líquido totales.

Si el criterio de convergencia no es satisfecho, el nuevo valor de L_i es ajustado usando el método de Wegstein, comenzando así nuevamente el ciclo interno de cálculo.

Una vez conseguida la convergencia en el ciclo interno del algoritmo , el criterio de convergencia para el ciclo externo se checa para las temperaturas de las etapas y para las fracciones molares de líquido totales ($\bar{x}_{i,j}$) . Si el criterio de convergencia no se satisface se inicia nuevamente el algoritmo ajustando los valores de $\bar{x}_{i,j}$ a partir de la siguiente ecuación :

$$\bar{x}^k \leftarrow \lambda \cdot \bar{x} + (1 - \lambda) \bar{x} \quad (4.11)$$

Los nuevos valores de T_i , L_i y V_i se determinan por sustitución directa.

Precisamente en los dos últimos pasos del algoritmo de Ross se establecen las diferencias más importantes, con respecto al algoritmo tradicional de Boston y Sullivan ; dichas diferencias son dos :

- 1) El método de convergencia usado para ajustar el nuevo valor de iteración en el ciclo interno.
- 2) La variable usada para la iteración del ciclo externo del algoritmo.

La diferencia más significativa entre el algoritmo de Ross y el original de Boston y Sullivan son las diferentes variables de iteración que se utilizan en el ciclo externo del algoritmo. Boston y Sullivan terminan su algoritmo cuando convergen los valores de los parámetros de los modelos locales, calculados al principio y al final del ciclo . Por su parte, Ross prueba la convergencia en el ciclo externo comparando los valores de $\bar{x}_{i,j}$ y T_i al principio y final del algoritmo. Este cambio esta apoyado en la dependencia de los valores de los parámetros de los modelos locales con $\bar{x}_{i,f}$, T_i y en las diferencias drásticas que exhiben dichas variables en diferentes puntos de la columna.

La ampliación del algoritmo de Ross para el manejo de columnas de destilación que contienen bombas de calor y/o agotadores que se realiza en este trabajo, implicó desde el cambio del modelo de etapa de equilibrio hasta el uso de nuevas variables SS_i y G_i que complican la forma de resolver los sistemas de ecuaciones formados por los balances de materia por componente y los balances de energía. A continuación se presenta el algoritmo matemático usado para resolver dichos sistemas de ecuaciones.

Método de Solución de la Matriz Dispersa.

Una matriz dispersa es aquella que cuenta con un gran número de elementos iguales a cero, mientras los elementos con un valor numérico se encuentran dispersos con ó sin un orden predeterminado. Existen dos tipos de matrices dispersas, el primero de ellos lo conforman aquellas matrices que poseen una diagonal formada por valores diferentes de cero, mientras que el segundo, lo conforman todos aquellos arreglos que no caen dentro del primero.

Cuando se consideran agotadores externos y bombas de calor en una unidad de separación , la estructura tridiagonal de la matriz que forman los balances de materia y la estructura diagonal superior que posee la matriz formada por los balances de energía se pierden dando paso a la formación de matrices dispersas. Algunos simuladores como el desarrollado por López (1991) utilizan el método numérico de Kubicek (1976) para resolver dichos sistemas. En el caso de este trabajo, la solución de las matrices dispersas son

llevadas a cabo por un módulo externo al programa de simulación . Las librerías IMSL del compilador FONTRAN 90, son utilizadas, llamando la rutina DLXLG cada vez que se requiera resolver un sistema de ecuaciones que genere una matriz dispersa. La razón lógica para tal estrategia es aprovechar toda la gama de servicios que provee el compilador FORTRAN 90, así como ahorrar memoria de cálculo.

Las rutinas DLXLG de las librerías IMSL resuelven una matriz dispersa por el método de Markowitz , este método no es más que un método LU modificado para manejar adecuadamente una matriz con una gran cantidad de elementos igual a cero, a continuación se explica el procedimiento de cálculo :

Considerando el siguiente sistema lineal de ecuaciones

$$A \cdot x = b \quad (4.12)$$

donde A es una matriz dispersa de n x n elementos. El manejo adecuado de una matriz dispersa, requiere la descomposición de ésta, en tres vectores, uno real y dos enteros ; el vector real $a(nz)$, contiene todos los elementos no-ceros de A, mientras los dos vectores enteros arreglo *irow* y arreglo *icol* de longitud nz. contendrán el número de renglón y el número de columna que le corresponde a cada elemento de $a(nz)$ en la matriz A .

$$A.irow(i),icol(i) = a(i).....i = 1.....nz \quad (4.13)$$

La rutina LFTXG de las librerías IMSL usan por default la estrategia simétrica de Markowitz para elegir los pivotes del algoritmo. El método puede ser expresado por la siguiente ecuación :

$$PAQ = LU \quad (4.14)$$

donde P y Q son las matrices perturbación de los renglones y las columnas determinadas por la estrategia de Markowitz, mientras L y U son las matrices triangular inferior y triangular superior obtenidos por el método LU, finalmente la solución de x se obtiene mediante las siguientes ecuaciones :

$$Lz = Pb \quad (4.15)$$

$$Uy = z \quad (4.16)$$

$$x = Qy \quad (4.17)$$

Para sistemas de simulación donde se generan matrices de gran magnitud los métodos que resuelven matrices dispersas como el método de Markowitz o el método de Malachowski tienen la ventaja de reducir significativamente los requerimientos de almacenamiento comparados con los métodos convencionales LU o de eliminación Gaussiana. por esta razón se prefiere su uso en este trabajo.

CAPITULO 5 MODELOS TERMODINAMICOS.

En este capítulo se realiza una revisión de los modelos termodinámicos usados en el programa de simulación Torresim. En principio se establecen las ecuaciones de estado con las cuales se determina los valores de los coeficientes de distribución K'_{ij} , K''_{ij} . Estas mismas ecuaciones de estado se utilizan en el análisis de estabilidad de fases y en el cálculo de la energía de Gibbs en exceso (ΔG^E). Posteriormente se expone la correlación que tiene como opción el simulador para llevar a cabo la caracterización de fracciones de petróleo.

5.1 Ecuaciones de Estado.

El coeficiente de distribución, mal llamado constante de equilibrio, representa la relación con la cual un componente j se distribuye en la fase líquida y en la fase vapor cuando estas se encuentran en equilibrio. La destilación más que cualquier otra operación unitaria, depende fuertemente de los valores de este coeficiente, el cual determina el grado de separación que tendrá la mezcla a destilar. Por todo ello, el cálculo de K_{ij} es el paso más importante en el proceso de simulación de cualquier columna de destilación, de la exactitud de su valor dependen en gran medida la precisión de los resultados finales.

Para mezclas de hidrocarburos las ecuaciones de estado que generan mejores resultados son las ecuaciones de Peng-Robinson (1978) y la ecuación de Soave Redlich-Kwong (1972). Un estudio comparativo de todas las ecuaciones de estado existentes realizado por investigadores de la universidad de Oklahoma, determina a la ecuación de Soave Redlich-Kwong (1972) como la ecuación de estado más flexible para manejar adecuadamente un amplio intervalo de condiciones y componentes, con un grado de error mínimo, por esta razón esta ecuación de estado se usa en el programa de simulación desarrollado en esta tesis. Además la razón principal de restringir las ecuaciones de estado al uso de la ecuación de Soave Redlich-Kwong para sistemas que poseen fracciones de petróleo, es la gran cantidad de constantes o parámetros característicos de cada especie o componente, que requieren muchas de las ecuaciones empíricas que se utilizan para calcular los coeficientes de actividad. El uso de la ecuación de S-R-K no solo amplía el rango de mezclas de componentes a calcular, además simplifica el cálculo de las K_{ij} . A continuación se presenta una revisión completa del método de Soave Redlich-Kwong (1972) para el cálculo de propiedades termodinámicas :

Sólo para esta sección el subíndice i significará un componente más de la mezcla en vez de especificar el número de etapa. Los valores de $K_{i,j}$ se calculan por medio de la ecuación de Soave Rálich-Kwong (SRK) de acuerdo a la siguiente ecuación.

$$K_j = \frac{\phi_j^L}{\phi_j^V} \quad (5.1)$$

La misma ecuación se utiliza para predecir ϕ_j^L y ϕ_j^V ; usando las composiciones de líquido y vapor, para su cálculo respectivo. Las ecuaciones son las siguientes:

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{(\alpha_c \alpha)}{V(V+b)} \quad (5.2)$$

o

$$z^3 - z^2 + z(A - B - B^2) - AB = 0 \quad (5.3)$$

Las constantes en la ecuación 5.2 y 5.3 son funciones de las propiedades físicas que pueden predecirse por las siguientes expresiones:

$$\alpha_{c,j} = 0.42747 \frac{R^2 T_{c,j}^2}{P_{c,j}} \quad (5.4)$$

$$\alpha_j^{0.5} = 1 + m_i (1 - T_{r,j}^{0.5}) \quad (5.5)$$

$$m_j = 0.480 + 1.574W_j - 0.176W_j^2 \quad (5.6)$$

$$(\alpha_c \alpha) = \sum \sum x_i x_j \alpha_{c,i}^{0.5} \alpha_{c,j}^{0.5} \alpha_i^{0.5} \alpha_j^{0.5} (1 - k_{i,j}) \quad (5.7)$$

$$b = 0.08664 \frac{RT_{c,j}}{P_{c,j}} \quad (5.8)$$

$$A = (\alpha_c \alpha) \frac{P}{R^2 T^2} \quad (5.9)$$

$$B = b \frac{P}{T} \quad (5.10)$$

Los valores de k_{ij} (Parámetro de interacción binario) se determinan a partir de un análisis experimental . Los valores para varios pares binarios se encuentran reportados en el libro de Walas (1985), estos valores se encuentran incluidos en la base de datos que contiene el programa de simulación. Esta base de datos incluye todas las propiedades físicas requeridas por la ecuación de Soave Redlich-Kwong, para 61 componentes. La relación de los componentes incluidos y su número de identificación se presentan en la tabla IV. Para componentes no listados en la tabla IV o para componentes hipotéticos (pseudocomponentes) los valores de k_{ij} se fijan por las siguientes relaciones :

Pares de Componentes	$k_{ij} \times 100$
N ₂ - Hidrocarburos	8
CO ₂ - Hidrocarburos	15
H ₂ S - Hidrocarburos	3

La ecuación (5.3) se elige para calcular las densidades de las fases líquida y vapor. Los valores del coeficiente de fugacidad (ϕ_i) para la fase líquida y la fase vapor se calculan usando las composiciones respectivas para cada caso .

La ecuación es la siguiente :

$$\ln \phi_i = \frac{b_i}{b} (z-1) - \ln(z-B) - \frac{A}{B} \left(\frac{2 \sum_{j=1}^n x_j \alpha_{ei}^{0.5} \alpha_{ej}^{0.5} \alpha_i^{0.5} \alpha_j^{0.5} (1-k_{i,j})}{\sum \sum x_i x_j \alpha_{ei}^{0.5} \alpha_{ej}^{0.5} \alpha_i^{0.5} \alpha_j^{0.5} (1-k_{i,k})} - \frac{b_i}{b} \right) \ln \left(1 + \frac{B}{Z} \right) \quad (5.11)$$

La entalpia de mezclado se predice a partir de la ecuación de Soave Redlich-Kwong, usando la siguiente definición termodinámica :

$$\frac{-\Delta H}{RT} = -\frac{H_m - H_m^o}{RT} = 1 - z + \frac{1}{RT} \int_{\infty}^V (P - T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V) . dv \quad (5.12)$$

Introduciendo la ecuación de Soave a la expresión anterior se obtiene :

$$\frac{-\Delta H}{RT} = \left(\frac{A}{B} - \frac{\beta}{Rb} \right) \ln \left(1 + \frac{B}{z} \right) + 1 - z \quad (5.13)$$

$$\beta = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j \left[\frac{a_{ci}^{0.5} a_{cj}^{0.5} a_{ij}^{0.5} m_i}{2T_{ci} T_{rj}} + \frac{a_{cj}^{0.5} a_{ci}^{0.5} a_{ij}^{0.5} m_j}{2T_{cj} T_{rj}} \right] (1 - k_{i,j}) \quad (5.14)$$

la entalpia de gas ideal de la mezcla se predice a partir de la siguiente ecuación :

$$H_m^o = \sum_{i=1}^{NC} x_i H_i^o \quad (5.15)$$

donde H_i^o representa la entalpia a condiciones ideales del componente i . La entalpia de mezcla final se determina a partir de la siguiente expresión :

$$H_m = H_m^o - \left(\frac{\Delta H}{RT} \right) RT \quad (5.16)$$

Las mismas ecuaciones se utilizan para calcular las entalpias de vapor y líquido utilizando para cada caso las composiciones respectivas de cada fase.

Tabla IV Relación de Componentes Incluidos en la Base de Datos

No.	Nombre	No.	Nombre
1	Hidrógeno	32.	1-Penteno
2	Metano	33.	Cis-2-penteno
3	Etano	34.	Trans-2-penteno
4	Propano	35.	2-Metil-1-1-1-buteno
5	N-Butano	36.	3-Metil-1-1-1-buteno
6	Iso-Butano	37	2-Metil-2-buteno
7	N-Pentano	38.	1-Hexeno
8	Iso-Pentano	39.	1-Hepteno
9	2,2-Dimetil propano	40.	Propadieno
10	N-Hexano	41.	1,2-Butadieno
11	2-Metil pentano	42.	1,3-Butadieno
12	3-Metil pentano	43.	Ciclopentano
13	2,2,-Dimetil butano	44.	Metilciclopentano
14	2,3 -Dimetil butano	45.	Etilciclopentano
15	N-Heptano	46.	Ciclohexano
16	N-Octano	47.	Metilciclohexano
17	N-Nonano	48.	Etilciclohexano
18	N-Decano	49.	Benzeno
19	N-Undecano	50.	Tolueno
20	N-Dodecano	51.	Etilbenzeno
21	N-Tridecano	52.	O-Xileno
22	N-Tetradecano	53.	M-Xileno
23	N-Pentadecano	54.	P-Xileno
24	N-Hexadecano	55.	Nitrógeno
25	N-Heptadecano	56.	Oxígeno
26	Eteno	57.	Monóxido de carbono
27	Propeno	58.	Dióxido de carbono
28	Isobuteno	59	Sulfuro de hidrógeno
29	I-Buteno	60.	Dióxido de Azufre
30	Cis-2-Buteno	61.	Agua
31	Trans-2-Buteno		

5.2 Caracterización de Fracciones de Crudo.

El crudo es una mezcla compleja de componentes con puntos de ebullición muy cercanos, por lo que una separación total es casi imposible. La destilación de crudo se caracteriza por la generación de fracciones que se separan a un rango de temperatura dado, a estas fracciones se les conocen como pseudocomponentes, a diferencia de los componentes las propiedades físicas de los pseudocomponentes no se encuentran en bancos de datos por lo que deben ser calculadas mediante un procedimiento adecuado llamado caracterización de fracciones de crudo.

Existen diferentes métodos de caracterización de los cuales se presenta a continuación la correlación de Cavett. Todos los métodos de caracterización requieren de un mínimo de información requerida de cada fracción, como es: punto de ebullición promedio, gravedad específica y peso molecular; a partir de los cuales se generan las siguientes propiedades físicas, que se requieren para el cálculo de $K_{i,j}$, $H_{i,j}$, $h'_{i,j}$ y $h''_{i,j}$:

Tc : Temperatura crítica.

Pc : Presión crítica.

W : Factor acéntrico.

V : Volumen de líquido a 25 °C

Ha, Hb, Hc, Hd, : Parámetros para la capacidad calorífica de gas ideal.

Muchas veces el peso molecular de la fracción de petróleo no se determina experimentalmente, por lo que se calcula a partir de una correlación teórica como la de Kesler (1976) o Twu (1982).

Correlación de Cavett

Esta correlación es una modificación selectiva del método propuesto por Cavett. El procedimiento para caracterizar el pseudocomponente requiere para su inicio de la especificación de los siguientes datos:

- Gravedad °API
- Peso Molecular (PM)
- Punto de ebullición promedio (TBP)

Si la temperatura crítica o la presión crítica son conocidas estas deberán especificarse para no realizar los cálculos para su obtención. Con los puntos de ebullición, los grados °API y el peso molecular, las siguientes ecuaciones del método se utilizan para obtener las propiedades físicas de los pseudocomponentes:

1) Punto de ebullición Promedio

Este se calcula a partir del promedio entre el punto de ebullición molar (BP_{CA}) y el punto promedio cúbico de ebullición (BP_{mb}) a partir de la siguiente ecuación :

$$T_b = \frac{BP_{ca} + BP_{mb}}{2.0} \quad (5.17)$$

2) Gravedad Especifica.

La gravedad especifica de la fracción a 60 °C se calcula a partir de la siguiente ecuación:

$$Spgr = \frac{141.5}{131.5 + ^\circ API} \quad (5.18)$$

este valor se ajusta a 25 °C por medio de :

$$d_{25} = 0.98907 * Spgr \quad (5.19)$$

3) Volumen Molar de Líquido a 25 °C

esta propiedad se calcula con la siguiente ecuación :

$$V = \frac{PM}{d_{25}} \quad (5.20)$$

4) Temperatura Crítica.

La temperatura crítica de un pseudocomponente se calcula por :

$$T_c = a_0 + a_1 T_b + a_2 T_b^2 + a_3 T_b^3 + a_4 A T_b^4 + a_5 A T_b^2 + a_6 A^2 T_b^2 \quad (5.21)$$

donde A son los grados °API de la fracción y las constantes a_0, a_1, \dots, a_6 están en la tabla V.

5) Presión Crítica.

La presión crítica se calcula a partir de :

$$\log P_c = b_0 + b_1 T_b + b_2 T_b^2 + b_3 T_b^3 + b_4 A T_b + b_5 A T_b^2 + b_6 A^2 T_b + b_7 A^2 T_b^2 \quad (5.22)$$

donde las constantes $b_0, b_1, b_2, b_3, \dots, b_6$ están en la tabla V.

6) Factor Acéntrico.

El factor acéntrico (W) se calcula con la ecuación de Edmister.

$$W = \frac{3 \log(P_c / 14.7)}{7 (T_c / T_b - 1)} - 1 \quad (5.23)$$

donde T_b debe estar en grados °R.

7) Calor Latente de Vaporización.

El calor latente de vaporización a el punto normal de ebullición se calcula con la ecuación de Kistia-Kowsk's (1923) .

$$\frac{\Delta H^v}{T_b} = 7.58 + 4.571 * \log T_b \quad (5.24)$$

donde T_b debe estar en °R.

El valor de ΔH^v_{25} se ajusta a 25 °C con la ecuación de Watson's (1943) .

$$\Delta H^v_{25} = \left[\frac{T_c - 537}{T_c - T_b} \right]^{0.38} \quad (5.25)$$

8) Constantes de Capacidad Calorífica Molar (C_p)

Las constantes de la ecuación cúbica para determinar la capacidad calorífica de un componente se determinan por :

$$HA = PM(c_0 + c_1A + c_2A^2 + c_3A^3 + c_4k + c_5k + c_6k^3 + c_{18}Ak) \quad (5.26)$$

$$HB = PM(c_7 + c_8A + c_9A^2 + c_{10}A^3 + c_{11}k + c_{12}k + c_{13}k^3) \quad (5.27)$$

$$HC = PM(c_{14} + c_{15}A) \quad (5.28)$$

$$HD = PM(c_{16} + c_{17}A) \quad (5.29)$$

donde k esta dado por :

$$k = \frac{(BP_{m,n} + 459.6)^{1/3}}{Sprg} \quad (5.20)$$

donde $BP_{m,n}$ es el promedio del punto de ebullición del pseudocomponente. Las constantes c_0, c_1, \dots, c_7 se encuentran en la tabla V.

Tabla V Constantes del Método de Cavett.

Subíndice	a	b	c
0	768.07121	2.8290406	311.30335
1	1.7133693	9.4120109E-4	3.5442502
2	-1.0834003E-3	-3.0474749E-6	-5.2716944E-2
3	-8.9212579E-3	-2.0876110E-5	3.5353777E-4
4	3.8890584E-7	1.5184103E-9	43.401618
5	5.3094920E-6	1.1047899E-8	-8.9530784
6	3.2711600E-8	-4.8271599E-8	3.5118581E-1
7	-	1.3949619E-10	-8.186204E-1
8	-	-	-2.8568658E-5
9	-	-	1.7024654E-6
10	-	-	-1.4886832E-2
11	-	-	8.8395563E-2
12	-	-	4.2934713E-3
13	-	-	-3.0836492E-4
14	-	-	3.1073165E-4
15	-	-	-5.8323815E-8
16	-	-	-5.6334748E-8
17	-	-	9.1745019E-11
18	-	-	-5.9563889E-3

CAPITULO 6 ANALISIS DE RESULTADOS

En este capítulo se resuelven una serie de problemas de destilación utilizando para ello el programa de simulación Torresim. El programa cuenta con una amplia variedad de especificaciones para columnas de destilación, entre las que se encuentran condensadores parciales, condensadores totales y corrientes laterales de salida para flujos de líquido y de vapor. En este programa pueden especificarse bombas de calor y agotadores laterales con lo cual se amplía su uso para el manejo de columnas de destilación más complejas. Mención especial merece la posibilidad de simular torres de destilación atmosféricas de crudo, por lo cual, el programa cuenta con un módulo para la caracterización de fracciones de crudo por el método de Cavett y un módulo para determinar la formación de dos fases líquidas en cualquier etapa de la columna. A continuación se presentan los resultados de tres problemas. Primero se presentan los resultados obtenidos al simular una columna Depropanizadora con 10 componentes y 12 etapas, posteriormente se exponen los resultados obtenidos al resolver una columna de destilación con bomba de calor, por último se presentan los resultados que se obtienen al simular una columna de destilación atmosférica de crudo.

Problema 1 : Columna Depropanizadora.

Este problema de destilación se describe en la sección 6 del manual de el simulador Hysim (1987). Por otro lado, López (1991) resolvió este mismo problema con el simulador Crudesim, los resultados de este último son los que se comparan con los obtenidos con el programa Torresim. El depropanizador consiste de 12 etapas con un condensador parcial cuyo flujo de la corriente de productos líquidos es igual a cero. La composición de la alimentación y un resumen de las especificaciones de la columna se presentan en la tabla (VI). Un perfil lineal de presiones se especifica para toda la columna, introduciendo como únicos datos las presiones del domo y fondo de la columna 200 y 205 psia respectivamente. El perfil inicial estimado para las temperaturas se obtiene por medio de una interpolación lineal entre dos temperaturas estimadas 40 y 200 °F para el condensador y el rehervidor de la columna respectivamente. La alimentación se introduce en la etapa 6 con una relación V/F igual a cero.

Tabla VI : Problema 1; Composición de la Alimentación y Especificaciones de la Columna Depropanizadora

Componentes	Flujo molar (Lb/Lbmol)
Metano	12.2332
Etano	10.5976
Propano	8.1487
i-Butano	8.3864
m-Butano	7.6607
i-Pentano	6.9242
n-Pentano	5.9612
n-Hexano	4.9959
n-Heptano	3.9996
n-Octano	3.000
Condiciones de la alimentación	Temperatura 47.2522 °F Presión 480 psia
Especificaciones de la columna	1. Flujo de producto de Fondos 41.3 2. Relación de Reflujo 1.0

Para el cálculo de las propiedades termodinámicas se utilizó la ecuación de Soave Redlich-Kwong, tanto para calcular los valores de $K_{i,j}$ como para determinar el valor de ΔH_m .

Un resumen de los resultados obtenidos con el programa Torresim se presenta en el apéndice C. La comparación entre los perfiles de flujos de líquido y de vapor obtenidos con este programa y con Crudesim se presentan en la figura 6.1; como puede observarse la diferencia máxima entre ambos resultados para cada etapa de la columna es aproximada a la unidad (0.385 % para los flujos de líquido y 0.768 % para los flujos de vapor), por lo que puede considerarse tanto la tendencia como los valores de los perfiles semejantes a los reportados por López (1991). La comparación de los perfiles de temperaturas obtenidos por ambos programas se presenta en la figura 6.2 la diferencia máxima entre ambos perfiles para cada etapa de la columna es menor de un grado, consiguiéndose también para el perfil de temperaturas una gran exactitud con los resultados obtenidos con Crudesim

Por otro lado, el flujo de propano en la corriente de fondos de la columna, obtenido en Crudesim comparado con el obtenido con el programa Torresim arroja un error del 1.2 %, las diferencias entre los resultados de ambos programas se deben al uso por parte de López (1991) de la ecuación de Penn-Robinson para el cálculo de todas las propiedades termodinámicas mientras que en la simulación realizada en este trabajo se utilizó la ecuación de Soave Redlich-Kwong.

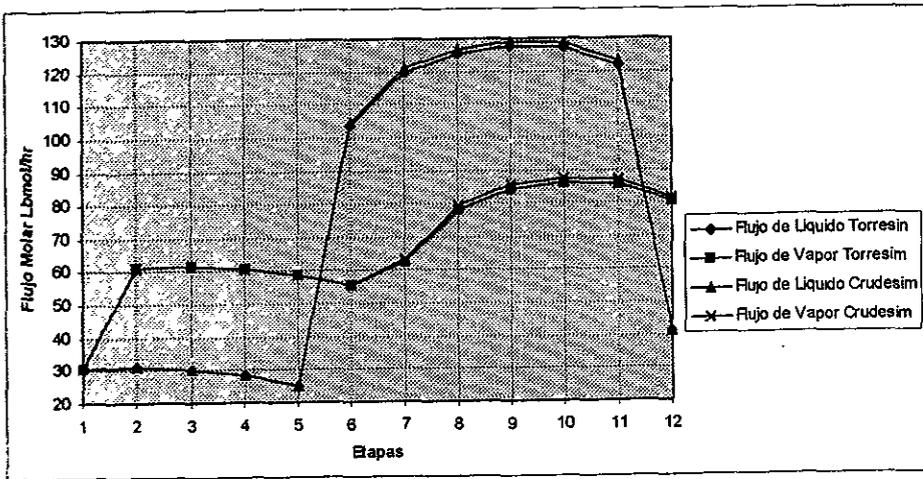


Figura 6.1 Perfil de Flujos : Problema No. 1

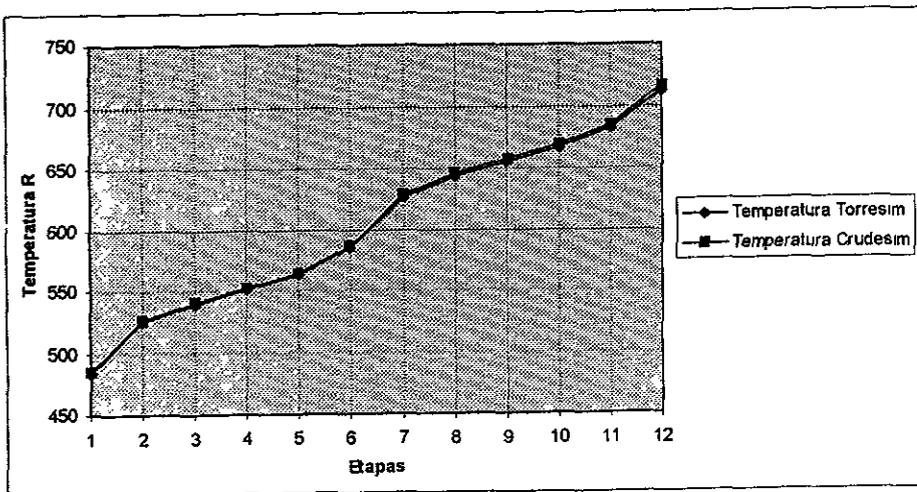


Figura 6.2 Perfil de Temperaturas : Problema No 1

Problema 2 : Columna de Destilación con Bomba de Calor.

Este problema es descrito en el artículo de Waggoner y Loud (1977), estos autores introdujeron algunas modificaciones al método theta de Holland(1981) para poder manejar satisfactoriamente la bomba de calor. Waggoner y Loud Loud (1977), resolvieron el problema para tres diferentes flujos de la corriente de líquido que va a la bomba de calor 0, 80 y 450 lbmol/hr respectivamente, en este trabajo sólo se comparan los resultados obtenidos con el flujo de 80lbmol/hr. La columna consiste en 20 etapas con un condensador total que es considerado como una etapa teórica más incluida dentro de las 20 etapas de la columna. La presión de la columna se considera constante, a 300 psia, para toda la columna. El perfil inicial estimado para las temperaturas se obtiene por medio de una interpolación lineal entre dos temperaturas estimadas 140 y 270 °F para el condensador y el rehervidor . La composición y carga térmica de la alimentación, así como un resumen de las especificaciones de la columna se presentan en la tabla (VII)

El flujo de la corriente de la bomba de calor va de la etapa 16 a la etapa 5.

Tabla VII : Problema 2; Composición de la Alimentación y Especificaciones de la Columna

Componentes	Flujo molar (Lbmol/hr)
C3	325
I-C4	50
N-C4	50
N-C5	75
Condiciones de la alimentación	Temperatura 170.8 °F Presión 300 psia
Especificaciones	1. Flujo de productos de Fondos 171.87 Lbmol/hr 2. Relación de Reflujo 1.22 3. Flujo de la Bomba de Calor. 80.24 Lbmol/hr

Para determinar la solución de este problema el programa Torresim, calcula los valores de K_{ij} , y los valores de ΔH utilizando la ecuación de Soave Redlich-Kwong. Por su parte Waggoner y Lound Loud (1977), utilizan expresiones polinomiales empíricas para determinar estos valores para cada componente, por lo cual, es de esperarse diferencias importantes entre ambos resultados debidas a esta discrepancia.

La comparación de los perfiles de los flujos de líquido y de vapor para cada etapa de la columna obtenidos por Waggoner y Lound Loud (1977), y por el programa Torresim se presentan en la figura 6.3. Como puede observarse la tendencia entre ambos resultados es la misma, por otra parte, el error promedio entre ambos perfiles no es mayor al 1% para todas las etapas. Los perfiles de temperatura obtenidos con ambos programas se presentan en la figura 6.4, en esta gráfica podemos observar que la tendencia de ambos perfiles es la misma, sin embargo, pequeñas desviaciones entre ambos valores se presentan como resultado de los diferentes modelos utilizados para calcular las propiedades termodinámicas. El resultado más importante de esta simulación es la validación del manejo apropiado de bombas de calor por parte de el programa Torresim.

En la figura 6.3 se puede observar el peculiar perfil de flujos que se obtiene cuando se consideran dentro de las especificaciones de una columna bombas de calor, también se puede observar que ambos resultados son similares. Un resumen de los resultados numéricos de la simulación de este problema se presenta en el apéndice D de esta tesis.

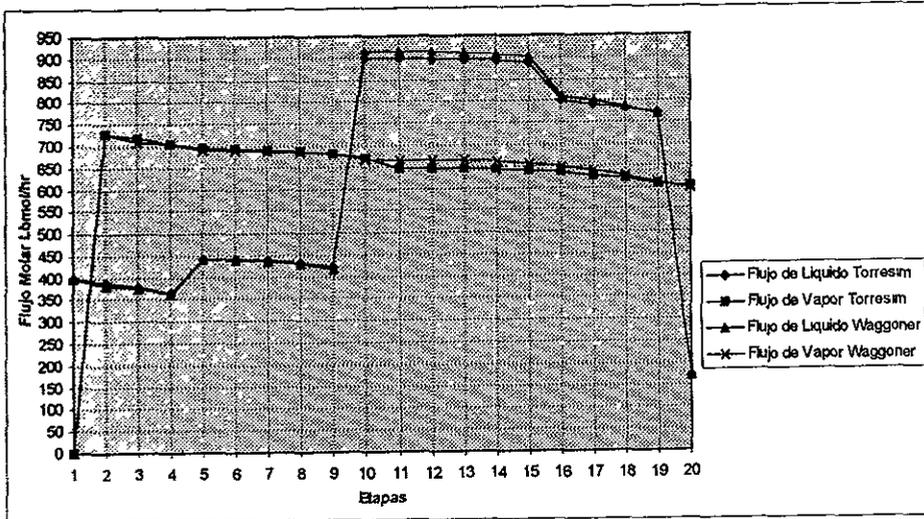


Figura 6.3 .Perfil de Flujos : Problema No.2

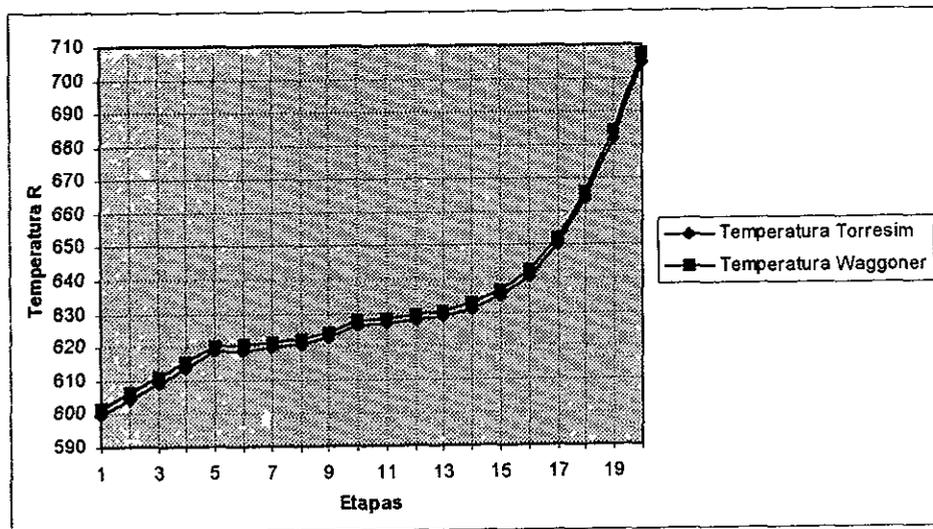


Figura 6.4 . Perfil de Temperaturas : Problema No.2

Problema 3 : Columna de Destilación Atmosférica de Crudo

La simulación de una unidad de destilación de crudo incrementa la dificultad de cálculo, de convergencia y de obtener resultados aproximados a los reportados en literatura. Esta dificultad se incrementa a un más al llevar a cabo la simulación de una columna de destilación de crudo real. La simulación de la columna comercial de destilación de crudo Exxon fue realizada en un principio por Cecchetti (1963), la configuración de esta columna se presenta en la figura 6.5. Esta consiste de una unidad de destilación de 36,700 barriles/día con cuatro agotadores laterales y una bomba de calor. La presión en el condensador parcial es de 23.1 psia y su caída de presión es de 2.1 psia. La caída de presión en el resto de la columna se considera de 4.2 psia. El perfil inicial estimado para las temperaturas se obtiene por medio de una interpolación lineal entre dos temperaturas estimadas 140 y 270 °F para el condensador y el reboiler de la columna respectivamente. De la misma forma se estiman las temperaturas de los domos y de los fondos de los agotadores. La alimentación de crudo se introduce en la etapa 34 con una carga térmica de 56,000 Btu/lbmol.

Para obtener un acercamiento razonable entre los resultados calculados por una simulación y las condiciones actuales de la columna, Cecchetti(1963) presentó el concepto de "columna teórica análoga" la cual se define como una columna semejante a la real, la cual posee un número de etapas de equilibrio entre cada corriente de salida lateral, con la finalidad de obtener para las corrientes de producto las mismas características que las corrientes de salida laterales de la columna real.

Varios han sido los autores que han resuelto este problema por diferentes métodos. Cecchetti (1963) resolvió este problema utilizando el método theta de Holland(1981), sin embargo, más tarde Hess et al. (1977) descubrió que este tipo de método generalmente falla para este tipo de columnas y propuso un método llamado "multi theta". Ambos autores cambian las especificaciones originales de la columna y seleccionan la entalpía de la alimentación como un punto fijo, sin embargo, ninguno de los dos autores explica si el valor de la entalpía cumple con las especificaciones de presión y temperatura de la alimentación de la columna. Hsie (1989) resolvió este problema por un método de relajación, utilizando las mismas especificaciones de Hess (1977). Sin embargo, todos los autores anteriores resolvieron el problema utilizando expresiones empíricas para calcular las K_{ij} y las entalpías de las corrientes. López (1991) resolvió este problema, utilizando un método modificado de Boston y Sullivan con el método de Broyden como método de convergencia. Además, López (1991) utiliza un paquete termodinámico basado en la ecuación de estado de Penn-Robinson para calcular los valores de K_{ij} y los valores de las entalpías. Por todo ello, la solución reportada por este último autor es la que se compara con los resultados obtenidos con el programa de simulación Torresim.

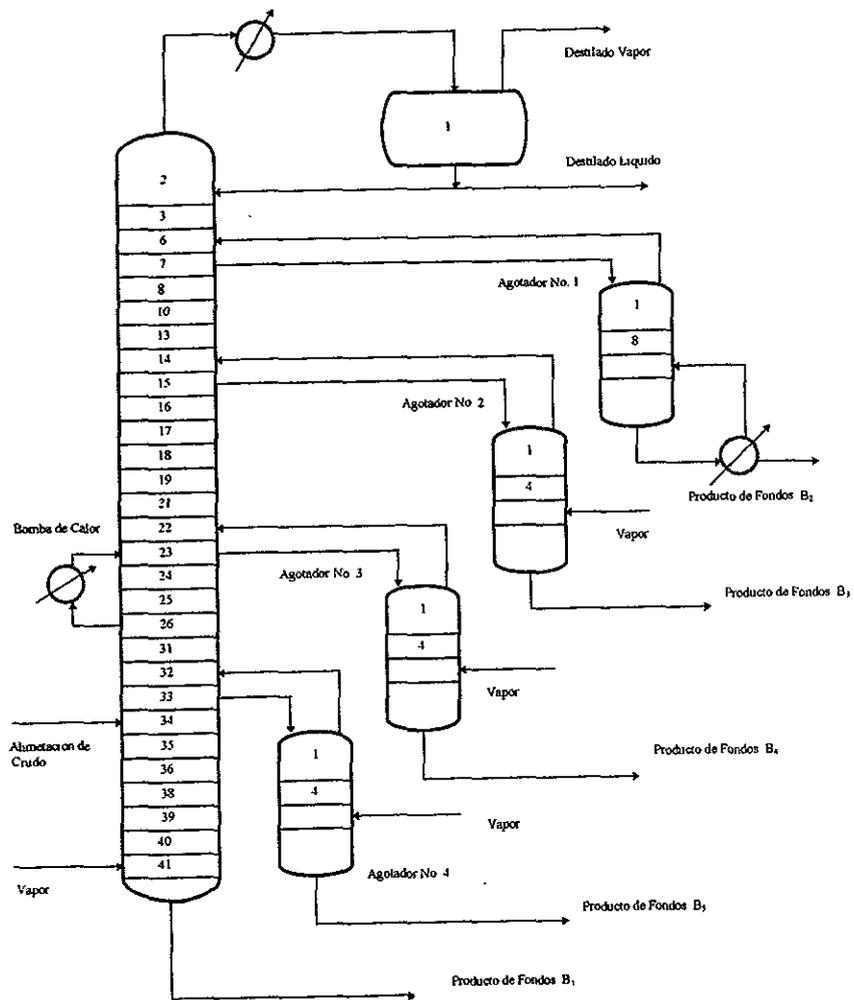


Figura 6.5 : Esquema de la Torre de Crudo Modelo Exxon

López (1991), cambia la configuración original de la columna, al considerar un calentador en la corriente de alimentación de crudo con el fin de satisfacer el flujo de la corriente de productos de fondos de la columna principal, es por esta misma razón que Hess y Hsie le dan un valor fijo a la entalpia de la alimentación. El flujo de salida de productos de fondos para la versión de Cecchetti (1963) es de 600 lbmol/hr, mientras que 778.86lbmol/hr se maneja en el artículo de Hess, en el trabajo de López (1991) se elige un valor de 770 lbmol/hr, es este ultimo valor el que se maneja para la simulación de este trabajo.

La columna teórica análoga manejada por López (1991) se presenta en la figura 6.6. Esta consiste de 37 etapas con un condensador parcial a diferencia de las 53 etapas de la columna de crudo real. Las especificaciones de la columna análoga se presenta en la tabla (VIII). Un total de 30 componentes donde 24 son pseudocomponentes se utilizan. Los detalles de la caracterización del crudo se incluyen en el apéndice E.

Tabla VIII Especificaciones de la Columna Análoga

Alimentación	1	2	3	4	5
Etapas	27	33	35	37	28
Temperatura (°F)	637	574	574	574	574
Presión (psia)	29.4	125	125	125	125
Flujo Molar (lbmol/hr)	2203.2	6.94	26.8	15.8	66.0

Especificaciones

1. Flujo de la corriente de vapor proveniente del condensador parcial 203.83 Lbmol/hr
2. Relación de reflujo 23.8153
3. Flujo de productos de el agotador No. 1 294.0 Lbmol/hr
4. Servicio de enfriamiento de la bomba de calor $-0.181 \text{ E}+8 \text{ Btu/hr}$
5. Flujo de la bomba de calor. 823.0 Lbmol/hr
6. Flujo de productos de el agotador No. 2 122.0 Lbmol/hr
7. Flujo de productos de el agotador No. 3 328.0 Lbmol/hr
8. Flujo de productos de el agotador No. 4 107 Lbmol/hr
9. Flujo de productos de el fraccionador principal. 770.0 Lbmol/hr

Consideración de una corriente de salida lateral en la etapa 1

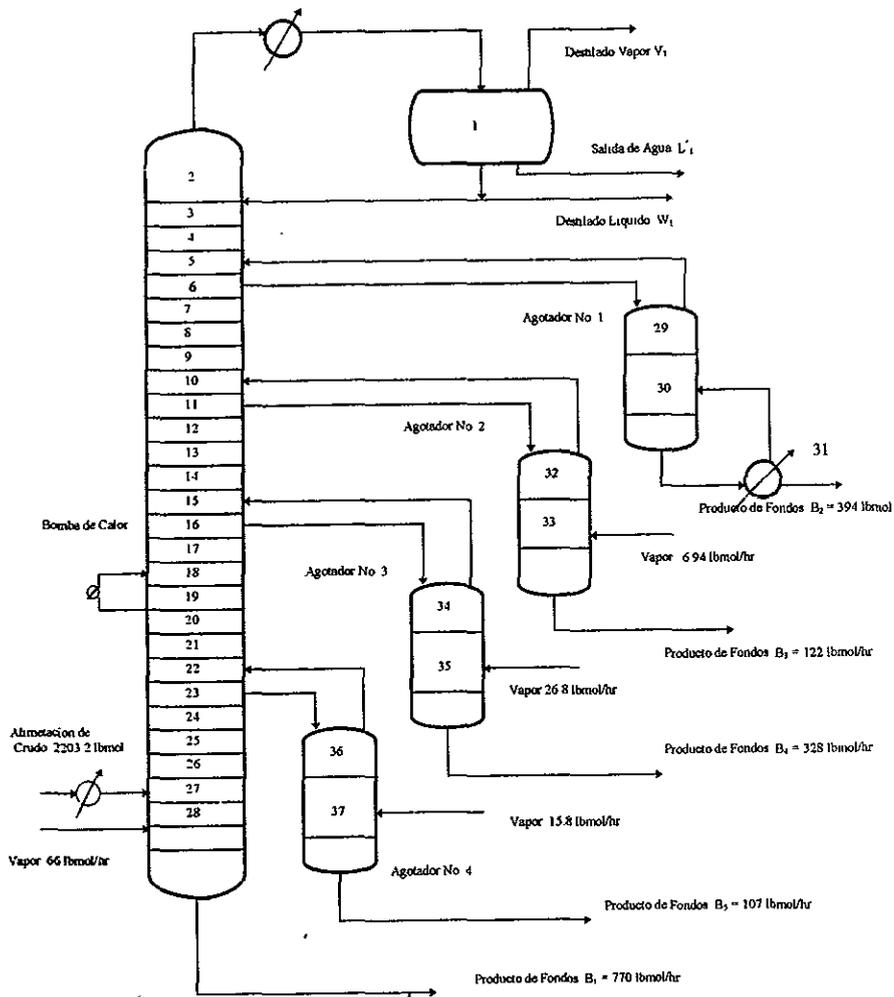


Figura 6.6 · Esquema de la Torre Teórica Analoga .

En la figura 6.8 se presenta la comparación de los flujos de líquido y vapor obtenidos por el programa y los resultados obtenidos por Crudesim. Nuevamente se observan tendencias similares entre ambos resultados, sin embargo se presentan variaciones entre algunos valores de las etapas, estas diferencias pueden ser resultado de los diferentes modelos utilizados entre ambos programas para obtener la caracterización del crudo; en el programa Torresim se utiliza el método de Cavett, mientras el simulador Crudesim obtiene dichos datos por el método de Kesler y Lee (1976). La comparación de los perfiles de temperatura se presenta en la figura 6.9, se pueden observar diferencias en algunas temperaturas de las etapas, la fuente principal de las diferencias en los resultados presentados por ambos programas se generan, en su mayoría, en la determinación de las propiedades físicas para las fracciones del crudo. Aún así el error generado entre ambos juegos de datos es mínimo. Para los flujos molares de líquido el error promedio entre ambos perfiles es del 0.089 % , para los flujos molares de vapor el error promedio para todas las etapas es del 0.1815 % , finalmente el error promedio para el perfil de temperaturas es de 0.3371% respecto a los valores reportados por López (1991).

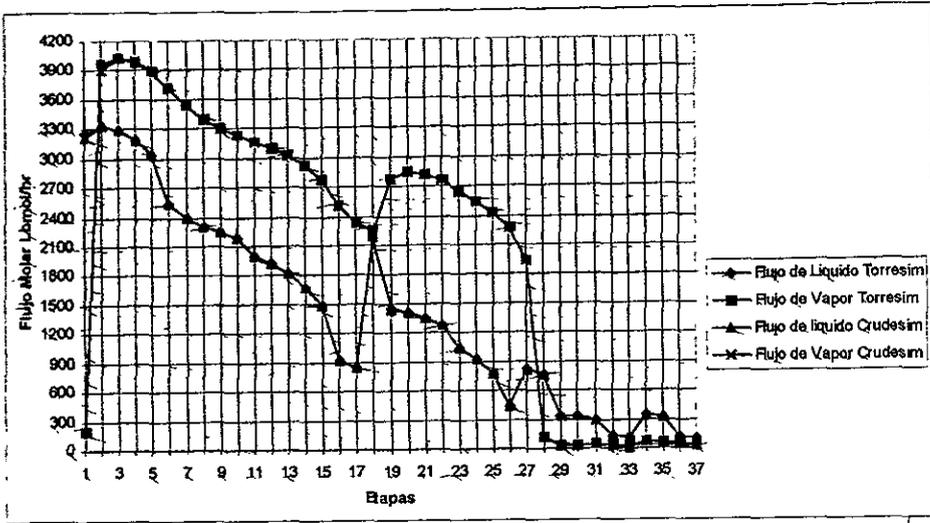


Figura 6.7 Perfil de Flujos : Problema No 3

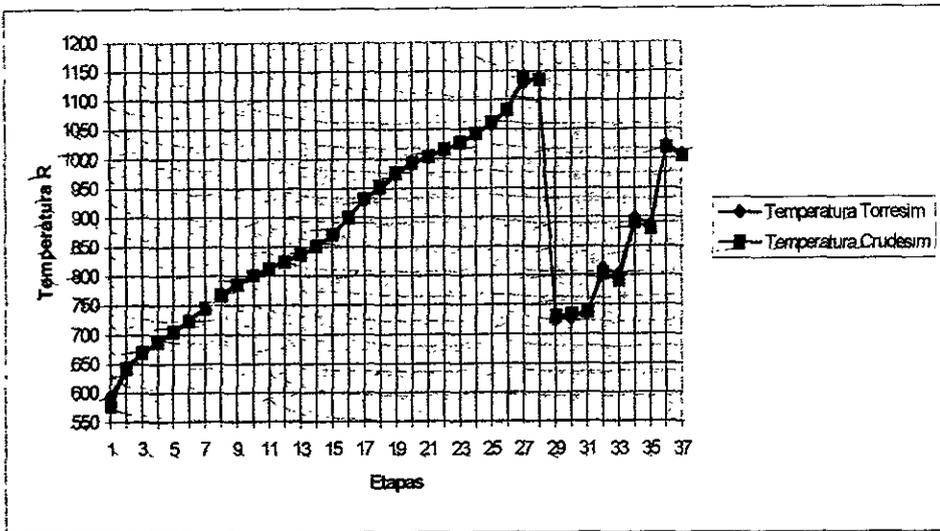


Figura 6.8 Perfil de Temperaturas : Problema No 3

CAPITULO 7 CONCLUSIONES.

El programa Torresim posee la flexibilidad de cambiar de especificaciones y configuraciones para simular desde columnas sencillas hasta columnas de destilación atmosféricas de crudo, puede manejar un máximo de 35 componentes y columnas con un máximo de 45 etapas. Ventajas importantes de este programa son la inclusión, en el mismo, de dos módulos que permiten caracterizar fracciones de crudo y determinar la existencia de dos fases líquidas en cualquier etapa de la columna. Una ventaja adicional de este programa es la anexión de una base de datos con 61 componentes.

En este trabajo se amplió el algoritmo de cálculo presentado por Ross (1979) para columnas de destilación simples a columnas complejas que pueden destilar mezclas que contengan algún tipo de crudo. La elección del algoritmo de modelos locales para la realización de este trabajo, esta basada en el ahorro de tiempo y memoria.

Las siguientes conclusiones se derivan de la investigación realizada en este trabajo :

1) La validación del programa se llevo a cabo con tres problemas de diferente grado de dificultad, comenzando por un fraccionador simple hasta una columna de destilación de crudo. La validación se lleva a cabo comparando los resultados obtenidos con los reportados en literatura, obteniéndose errores pequeños entre ambos resultados con lo cual queda validado el programa de simulación desarrollado en esta tesis.

2) Como una derivación de la conclusión número uno ; se puede afirmar que la elección de la ecuación de Soave Redlich-Kwong o la ecuación de Peng-Robinson para el cálculo de las propiedades termodinámicas, no influye significativamente en los resultados obtenidos para los problemas de destilación de hidrocarburos.

3) Una ventaja importante del algoritmo de Boston y Sullivan y de sus derivaciones es su capacidad de incorporar una amplia variedad de especificaciones para columnas de destilación, incluyendo agotadores y bombas de calor. La incorporación de estas dos especificaciones introduce dos nuevas variables que se incorporan satisfactoriamente al algoritmo principal.

4) El algoritmo empleado en este trabajo no necesariamente requiere de buenos estimados iniciales para llegar a la solución, sin embargo, si se presenta una diferencia en relación a los estimados para el perfil de flujos y para el perfil de temperaturas. Los

estimados para los flujos molares son menos susceptibles a valores alejados de la solución, mientras los estimados para el perfil de temperaturas requieren de un mayor acercamiento a esta. La rigurosidad para los estimados iniciales de temperatura varían proporcionalmente al número y complejidad de los componentes incluidos en la mezcla que se desea destilar. La razón para esto, es la fuerte dependencia de los valores de $K_{i,j}$ con la temperatura.

Un trabajo de programación nunca termina, una de sus características principales es la opción que presenta cada programa de ser mejorado o adicionar más módulos para resolver un problema mayor. Por lo tanto, no se pueden dejar de mencionar al final de este trabajo las mejoras que se pueden realizar al programa.

La principal mejora que puede realizarse al programa Torresim, consiste en la creación de un módulo más, que realice la determinación de las fracciones de crudo a partir de las curvas TBP; con lo cual, el usuario sólo se concreta en proporcionar dicha curva, en lugar de proporcionar las fracciones, su punto de ebullición normal, su peso molecular y los grados °API de cada fracción.

Aunque, el programa Torresim cumple con las características que requiere cualquier programa de simulación no se puede pasar por alto, el gran uso que tienen en la actualidad los programas realizados en lenguajes visuales, que permiten al usuario interactuar más fácilmente con el software. La extensión de este trabajo a un lenguaje de programación que permita dichos avances, no solo incrementaría la sencillez de manejo del programa, sino además permitiría la visualización gráfica de los resultados obtenidos, con lo cual el usuario realizará un mejor y más rápido análisis.

8) Bibliografia

Amundson, N.R. and A.J. Pontinen, "Multicomponent Distillation Calculation on a Large Digital Computer", Ind. Eng. Chem., Vol. 50, pag 730-739, (1958).

Block, U. and B. Hegner "Development and Application of a Simulation Model for Three-Phase Distillation," AIChE Journal, Vol. 22, pag 3 (1976).

Boston, J. F. and S. L. Sullivan, Jr., "An Improved Algorithm for Solving the Mass Balance Equations in Multistage Separation Processes," Can. Jour. of Chem. Eng., Vol 52, pag 103, (1974).

Boston, J. F. and H. Y. Britt, "A Radically Different Formulation and Solution of the Simple Stage Flash Problem", Comput. Chem. Eng., Vol. 2, pag 109-122, (1978).

Boston, J. F. and S.L. Sullivan, Jr., "A New Class of Solutions Methods for Multicomponent, Multistage Separation Processes", Can. J. of Chem. Eng., Vol. 52, pag 52-53, (1974).

Boston, J.F., "Inside-Out Algorithms for Multicomponent Separation Process Calculations", ACS Symp. Ser. pag 124, (1980).

Broyden, C.G., "A Class of Methods for Solving Nonlinear Simultaneous Equations", Math of Computation, Vol. 19, pag 577-593, (1956).

Burningham, D.W. and F. G. Otto, "Which Computer Design for Absorbers", Hydrocarbon Process, Vol. 46, (10), pag 163-168, (1967).

Buzzi G. Ferraris "Interlinked, Multistaged Separators with Nonstandard Specifications Solve by Newton - Raphson.", AIChE Journal Vol. 27, No 1, pag 137-145 (1985).

Buzzi G. Ferraris and Enrico Tronconi, "Operational Optimization and Sensitivity Analysis of Multistage Separators", Ing. Eng. Chem Process Des. Dev. Vol. 24, pag 112-116, (1985).

Cairns, B. P. and I. A. Furzer, "Multicomponent Three-Phase Azeotropic Distillation. 2. Phase Stability and Phase Splitting Algorithm", Ind. Eng. Chem. Res., Vol. 29,(7), pag 1364-1382, (1990 a).

Cecchetti, R.C., R.H. Johnson, J. L. Niedzwiczki, and C. D. Holland "Pipestill Products Verify These Computer Estimates", Hydrocarbon Processing and Petroleum Refiner, Vol. 42 (9), pag 159-169, (1963).

Chimowitz, E.H, T. F. Anderson, S.Macchietto and L.F Stutzman, "Local Models for Representing Phase Equilibria in Multicomponent, Nonideal Vapor-Liquid and Liquid-Liquid Systems .Aproximation Functions " Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev. , Vol 22, (2) , pag 217-225, (1983).

Edmister, W. C. , " Absorption and Stripping-Factor Functions for Distillation Calculation by Manual and Digital- Computer Methods ," AICHe Journal , Vol 3 (2) ,(1957).

Elliot, J.R, and T.E. Daubert, "Revised Procedures for Phase Equilibrium Calculations with the Soave Equation of State " , Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., Vol. 24, pag 743-748, (1985).

Erbar, J. H. , " Three Phase Equilibrium Calculations" , Proc. 52nd Ann. National Gas Processors Association Meeting, Vol. 62, pag 62-70 (1973).

Edgardo A. Lopez , " Modelling and Simulation of Complex Refinery Distillations", Ph. D. Thesis, Oklahoma State University (1991).

Ferraris , G. B. and M. Morbidelli, "Distillation Models for Two Partially Inmimiscible Liquids", AICHE J., Vol. 27 (6), pag 881-888, (1981).

García. C. B., W. Y. Zangwill. " Pathways to Solutions, Fixed Points, and Equilibria", Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jerse (1981).

Gautam, R.,and W.D. Seider , " Computation of Phase and Chemical Equilibrium", AICHE J., Vol 25, (6), pag 991-1015, (1979).

Goldstein , R. P. and R. B. Stanfield, " Flexible Method for the Solution of Distillation Design Problems Using the Newton -Raphson Tecnique , " IEC Proc. Des. Dev., Vol 9, (1) ,(1970)

Heidemann, R. A., "Three-Phase Equilibrium Using Equations of State " , AICHE J., Vol. 20, (5), pag 847-855, (1974).

Henley , E. J. and E. M. Rosen," Material and Energy Balance Computations," Wiley (1969).

Henley E. J., J. D. Seader " Operaciones de Separación por Etapas de Equilibrio en Ingeniería Química," Edt. Reverte, Barcelona , (1985).

Hess, F. E. , C. D. Holland, R. McDaniel, and N.J. Tetlow, "Solve More Distillation Problems- Part 7 , Absorber-type Pipestills", Hydrocarbon Processing, Vol. 56 (5), pag 241-249, (1977).

Holland, C. D. , " Fundamentals of Multicomponent Distillation", McGraw-Hill, Inc., New York , (1981).

Holland, C.D. , "Multicomponent Distillation ", Prentice-Hall, Inc., Englewood, Cliff. (1963).

Hlavacek, V. and P. Van Rompay, " , Simulation of Countercurrent Separation Processes Via Global Approach", Comput. Chem. Eng., Vol. 9 (4), pag 343-349 , (1985).

Kabadi, V. N. , and R. P. Danner, " A Modified SRK-EOS for Water- Hydrocarbon Phase Equilibria", Ind. Eng. Chem Process Des. Dev., Vol. 24, (3), pag 537-541, (1985).

Kovach, J. W., and W. D. Seider, " Heterogeneous Azeotropic Distillation - Homotopy-Continuation Methods", Comput. Chem. Eng. Vol. 11 (6), pag 593-605, (1987).

Kesler, M. G. and B.I. Lee " Improve Prediction of Entalpy of Fractions" , Hydrocarbon Processing , Vol. 55 , pag 153 -158. (1976).

King C. J. , "Procesos de Separacion " , McGraw-Hill Interamericana ,México D F (1980)

Kister H. Z. , " Distillation Design " , McGraw-Hill ,Inc ., New York , (1989).

Lang, P., G. Szalmas, G. Chikany, and S. Kemeny. Modelling of a Crude Distillation Column " , Computers Chen. Eng. Vol. 15 (2), pag 133-139. (1991).

Macchietto, S., E.H. Chimowitz, T. F. Anderson, and, L.F. Stutzman, " Local Models for Representing Phase Equilibria in Multicomponent Noideal Vapor-Liquid and Liquid-Liquid Systems. . Parameter Estimation and Update. " , Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev. , Vol. 25 (3) , pag 674-682. (1986).

Maddox, R. N. "Calculating Phase Equilibria for Hydrocarbon and Selected Non-hydrocarbon Systems " , Gas Processors Association, Tulsa, Oklahoma. (1974)

Maddox, R.N., and J.H. Erbar , "Gas Conditioning and Processing. Volume 3 . Advanced Technique and Applications" Campell Petroleum Series, Norman, Oklahoma (1992).

Michelsen, M.L. , "The Isothermal Flash Problem. Part Y Stability", Fluid Phase Equilibria, Vol. 9, pag 21-40. (1991).

Morris, C. G., W.D. Sim, and T. Vysniauskas, "Crude Tower Simulation on a Personal Computer", Chem. Eng. Prog., Vol (6) . pag 63-68 (1982).

Naphatali, L. M. and D. P. Sandholm " Multicomponent Separation Calculations by Linearization , " AIChE Journal , Vol 17 (1) , (1971).

Niedzwiecki, J. L. , R.D. Springer and R.G Wolfe, "Multicomponent Distillation in the Presence of Free Water", Chem. Eng. Prog. , Vol 76, pag 57-58 (1980).

Pucci, A. P. Mikitenko and L. Asselineau, "Three-Phase Distillation. Simulation ", Chem. Eng. Sci. Vol. 41 (3), pag 485-494, (1976).

Ross, B.A., "Simulation of Three-Phase Distillation Towers", Ph. D. Thesis, University of Pennsylvania (1979).

Ross, B.A, and W.D Seider, Simulation of Three-Phase Distillation Towers", Comput. and Chem. Eng. Vol. 5, pag 7-20. (1980).

Russell, R.A. , "A Flexible and Reliable Method Solves Single Tower and Crude-Distillation - Column Problems", Chem. Eng., Vol (5), pag 53-59. (1993).

Sujata, A.D., " Absorber-Stripper Calculations Made Easier" , Hydro. Proc. and Pet. Refiner, Vol. 40 (12), pag 137-146. (1961).

Swank, D.J., and J. C. Mullins, " Evaluation of Methods for Calculating Liquid-Liquid Phase Splitting", Fluid Phase Equilibria , Vol. 30, 101-110. (1986).

Tomich, J. F. , " A New Simulation Method for Equilibrium Stage Processes, " AIChE Journal , Vol 16 (2) , (1970).

Walas , S. M. " Phase Equilibria in Chemical Engineering", Butterworth Publishing, Boston (1985).

Wang, J. C. and G. E. Henke, " Tridiagonal Matrix for Distillation, " Hydr.Proc., Vol 45 (8), pag 155-162 (1966).

Wankat P., C. "Separation in Chemical Engineering: Equilibrium-Stage Separations", Prentice-Hall Inc. New Jersey, (1988).

Watkins, R., N., " Petroleum Refinery Distillation", Gulf Publishing Company , Houston Texas, (1973).

Wilson, A., R. N. Maddox, and J. H. Erbar , " C₆ Fractions Afefec Phase Behavior " , Oil and Gas Journal, Vol (5) , pag76-81, (1978).

APENDICE A Ecuaciones del Modelo.

Balance de Masa

Etapa Simple.

Todas las ecuaciones del balance de materia y energía derivadas de este trabajo están relacionadas con el modelo de etapa que se expone en la figura (3.1). En este programa los balances de materia y las relaciones de fases se combinan para obtener los flujos molares de líquido por especie. Para una etapa simple la combinación de dichas ecuaciones genera la siguiente ecuación.

$$a_{i,j}l_{i-1,j} + b_{i,j}l_{i,j} + c_{i,j}l_{i+1,j} = d_{i,j} \quad (1)$$

La derivación de los coeficientes a_{ij} , b_{ij} y c_{ij} para esta ecuación parten del siguiente balance de materia.

$$v_{i,j} + W_i y_{i,j} + l_{i,j} + U_i x_{i,j} - l_{i-1,j} - v_{i+1,j} + l'_{i,j} = f_{i,j} \quad (2)$$

$$v_{i,j} \left(1 + \frac{W_i}{V_i} \right) + l_{i,j} \left(1 + \frac{U_i}{L_i} \right) - l_{i-1,j} - v_{i+1,j} + l'_{i,j} = f_{i,j} \quad (3)$$

Introduciendo la expresión del equilibrio líquido-líquido para eliminar l'_{ij}

$$l'_{i,j} = \left(\frac{K_{i,j}}{K_{i,j}^*} \frac{L_i}{L_i} \right) l_{i,j} \quad (4)$$

$$l_{i,j} = K_{i,j}^D \beta_i l'_{i,j} \quad (5)$$

donde

$$K_{i,j}^D = \frac{K_{i,j}}{K_{i,j}^*} \quad (6)$$

$$\beta_i = \frac{L_i}{L_{i,j}} \quad (7)$$

sustituyendo la expresión 5 en la ecuación 3 :

$$v_{i,j} \left(1 + \frac{W_i}{V_i} \right) + l_{i,j} \left(1 + \frac{U_i}{L_i} \right) - l_{i-1,j} - v_{i+1,j} + l_{i,j} \beta_i K_{i,j}^D = f_{i,j} \quad (8)$$

Para eliminar los flujos molares por componente de vapor se usa la definición de la eficiencia de etapa de Murphree

$$v_{i,j} = \frac{V_i E_i K_{i,j}}{L_i} l_{i,j} \quad (9)$$

sustituyendo la ecuación (9) en (8)

$$\left(\frac{RV_i E_i K_{i,j}}{L_i} \right) l_{i,j} + RL_i l_{i,j} - l_{i-1,j} - \left(\frac{E_{i+1} K_{i+1,j}}{L_{i+1,j}} \right) l_{i+1,j} + \beta_i K_{i,j}^D l_{i,j} = f_{i,j} \quad (10)$$

rearrreglando :

$$-l_{i-1,j} + \left(RL_i + \frac{E_i K_{i,j} V_i RV_i}{L_i} + \beta_i K_{i,j}^D \right) l_{i,j} - \left(\frac{E_{i+1,j} K_{i,j} V_{i+1}}{L_{i+1}} \right) l_{i+1,j} = f_{i,j} \quad (11)$$

donde :

$$RL_i = 1 + \frac{U_i}{L_i} \quad (12)$$

$$RV_i = 1 + \frac{W_i}{V_i} \quad (13)$$

Por lo tanto, los valores de los coeficientes para la ecuación (1) son :

$$a_{i,j} = -1 \quad (14)$$

$$b_{i,j} = \left(RL_i + \frac{E_i K_{i,j} V_i RV_i}{L_i} + \beta_i K_{i,j}^D \right) \quad (15)$$

$$c_{i,j} = \left(\frac{E_{i+1,j} K_{i,j} V_{i+1}}{L_{i+1}} \right) l_{i+1,j} \quad (16)$$

$$d_{i,j} = f_{i,j} \quad (17)$$

Los coeficientes a_{ij} , b_{ij} , c_{ij} y d_{ij} , forman para un fraccionador simple, una matriz tridiagonal, sin embargo, para etapas especiales como el rehervidor, el condensador y aquellas etapas afectadas por entradas o salidas de agotadores laterales y bombas de calor, estos coeficientes pueden variar o en su caso nuevos coeficientes pueden aparecer en el balance.

1) Rehervidor.

Para el rehervidor se tienen las siguientes restricciones : $v_{i+1,j} = 0$ y $V_{i+1} = 0$ con las cuales se obteniendose la siguiente ecuación :

$$-l_{i-1,j} + \left(RL_i + \frac{E_i K_{i,j} V_i R V_i}{L_i} + \beta_i K_{i,j}^D \right) l_{i,j} = f_{i,j} \quad (18)$$

2) Condensador Total.

Si la columna posee un condensador total las ecuaciones que representan el balance de masa, están afectadas por la siguiente restricciones :

$$v_{ij} = 0$$

$$l_{i-1,j} = 0$$

quedando la expresión general de la siguiente forma.

$$\left(RL_i + \beta_i K_{i,j}^D \right) l_{i,j} - \left(\frac{E_{i+1,j} K_{i,j} V_{i+1}}{L_{i+1}} \right) l_{i+1,j} = f_{i,j} \quad (19)$$

3) Condensador Parcial.

Para un condensador parcial $l_{i,j} = 0$, por lo que la expresión general será la misma ecuación (1), pero en este caso b_{ij} estará dada por todos sus términos.

$$\left(RL_i + \frac{E_i K_{i,j} V_i R V_i}{L_i} + \beta_i K_{i,j}^D \right) l_{i,j} - \left(\frac{E_{i+1,j} K_{i,j} V_{i+1}}{L_{i+1}} \right) l_{i+1,j} = f_{i,j} \quad (20)$$

4) Etapas con Bombas de Calor.

La presencia de bombas de calor afecta a dos etapas de la columna, la etapa de donde sale el flujo hacia el intercambiador y la etapa que recibe el flujo del intercambiador. La figura (3.2) expone el modelo que se seguirá en la derivación de las ecuaciones de los balances de masa y energía.

a) Etapa de donde sale el flujo hacia el intercambiador (etapa “s”)

El balance de materia esta dado por la siguiente ecuación :

$$v_{i,j} \left(1 + \frac{W_i}{V_i} \right) + l_{i,j} \left(1 + \frac{U_i}{L_i} \right) - l_{i-1,j} - v_{i+1,j} + l'_{i,j} + G_i \frac{l_{i,j}}{L_i} = f_{i,j} \quad (21)$$

usando el mismo procedimiento descrito anteriormente, el balance de masa y las relaciones de equilibrio queda como :

$$-l_{i-1,j} + \left(RL_i + \frac{E_i K_{i,j} V_i R V_i}{L_i} + \beta_i K_{i,j}^D + \frac{G_i}{L_i} \right) l_{i,j} - \left(\frac{E_{i+1,j} K_{i,j} V_{i+1}}{L_{i+1}} \right) l_{i+1,j} = f_{i,j} \quad (22)$$

b) Etapa que recibe el flujo proveniente de la bomba de calor

El balance de materia inicial para esta etapa esta dado por :

$$v_{i,j} \left(1 + \frac{W_i}{V_i} \right) + l_{i,j} \left(1 + \frac{U_i}{L_i} \right) - l_{i-1,j} - v_{i+1,j} + l'_{i,j} - G_s \frac{l_{s,j}}{L_s} = f_{i,j} \quad (23)$$

procediendo de la misma forma

$$-l_{i-1,j} + \left(RL_i + \frac{E_i K_{i,j} V_i R V_i}{L_i} + \beta_i K_{i,j}^D \right) l_{i,j} - \left(\frac{E_{i+1,j} K_{i,j} V_{i+1}}{L_{i+1}} \right) l_{i+1,j} - \left(\frac{G_s}{L_s} \right) l_{s,j} = f_{i,j} \quad (24)$$

para este caso los coeficientes de la ecuación (1) son los mismos pero se genera un nuevo coeficiente ($e_{i,j}$), que contiene el termino G_s

5) Agotadores Laterales.

Como se ilustra en la figura (3.2) la presencia de agotadores laterales modifica 3 etapas de la columna, la etapa de donde proviene el flujo que va hacia el agotador lateral, la etapa que recibe el flujo que proviene del agotador lateral y la etapa de domos del agotador lateral.

a) Etapas de donde proviene el flujo que va hacia el agotador lateral (etapa SMF)

El balance de masa inicial para dicha etapa esta dado por :

$$v_{i,j} \left(1 + \frac{W_i}{V_i} \right) + l_{i,j} \left(1 + \frac{U_i}{L_i} + \frac{SS_i}{L_i} \right) - l_{i-1,j} - v_{i+1,j} + l'_{i,j} = f_{i,j} \quad (25)$$

siguiendo el mismo procedimiento para $i = SMF$ tenemos :

$$-l_{i-1,j} + \left(RL_i + \frac{E_i K_{i,j} V_i R V_i}{L_i} + \beta_i K_{i,j}^D + \frac{SS_i}{L_i} \right) l_{i,j} - \left(\frac{E_{i+1,j} K_{i,j} V_{i+1}}{L_{i+1}} \right) l_{i+1,j} = f_{i,j} \quad (26)$$

c) Etapas de domos del agotador lateral (etapa TSS).

El balance de masa inicial para esta etapa es siguiente :

$$v_{i,j} \left(1 + \frac{W_i}{V_i} \right) + l_{i,j} \left(1 + \frac{U_i}{L_i} \right) - SS_{SMF} \frac{l_{SMF,j}}{L_{SMF}} - v_{i+1,j} + l'_{i,j} = f_{i,j} \quad (27)$$

donde $i = TSS$

para este caso

$$-l_{i-1,j} + \left(RL_i + \frac{E_i K_{i,j} V_i R V_i}{L_i} + \beta_i K_{i,j}^D \right) l_{i,j} - \left(\frac{E_{i+1,j} K_{i,j} V_{i+1}}{L_{i+1}} \right) l_{i+1,j} - \left(\frac{SS_{SMF}}{L_{SMF}} \right) l_{SMF,j} = f_{i,j} \quad (28)$$

Para esta etapa el coeficiente $a_{i,j}$ de la ecuación (1) es igual a cero mientras que b, c y d se mantienen sin cambio y un nuevo coeficiente $g_{i,j}$ esta dado para el flujo proveniente de la etapa SMF .

b) Etapa que recibe el flujo que proviene del agotador lateral

El balance de materia para esta etapa esta dado por :

$$v_{i,j} \left(1 + \frac{W_i}{V_i} \right) + l_{i,j} \left(1 + \frac{U_i}{L_i} \right) - l_{i-1,j} - v_{i+1,j} + l'_{i,j} - v_{TSS,j} = f_{i,j} \quad (29)$$

procediendo como anteriormente tenemos :

$$-l_{i-1,j} + \left(RL_i + \frac{E_i K_{i,j} V_i R V_i}{L_i} + \beta_i K_{i,j}^D \right) l_{i,j} - \left(\frac{E_{i+1,j} K_{i,j} V_{i+1}}{L_{i+1}} \right) l_{i+1,j} - \left(\frac{E_{TSS} K_{TSS,j} V_{TSS}}{L_{TSS}} \right) l_{TSS,j} = f_{i,j} \quad (30)$$

Balance de Energía.

El balance de energía es resuelto para obtener los flujos molares de líquido para la primera fase líquida L_i . Cuando no existen bombas de calor ni agotadores laterales, la ecuación característica del balance de energía para una etapa simple esta dada por :

$$L_{i-1}h_{i-1} + V_{i+1}H_{i+1} - (V_i + W_i)H_i - (L_i + U_i)h_i + F_i H_f + Q_i - L_i h_i^* = 0 \quad (31)$$

Cuando no existen bombas de calor ni agotadores laterales el grupo de ecuaciones como la ecuación (31), forman una matriz de diagonal inferior, sin embargo nuevos términos o la variación de alguno de los coeficientes aparecen cuando se toman en cuenta dichos aditamentos extra de la columna de destilación. Existen además diferentes formas de manejar la ecuación (31) en función de los flujos de líquido, una de ellas es la de manejar las corrientes laterales como un valor constante, es decir, su valor es constante durante todo el cálculo del algoritmo principal y otra forma es aquella en la cual se manejan como función de los flujos de líquido y vapor correspondientes a la etapa de la que provienen, es decir :

$$U_i = L_i(RL_i - 1) \quad (32)$$

$$W_i = V_i(RV_i - 1) \quad (33)$$

En las ecuaciones anteriores, RL_i y RV_i permanecen fijas en ambos ciclos del algoritmo principal. Esta diferencia que se da en la forma de manejar la ecuación (31), no se presenta en el balance de masa, este balance se realiza para cada componente, en cambio el balance de energía se usa para obtener flujos totales. De cualquier modo, el algoritmo solo maneja las corrientes de salida laterales como valores constantes por lo cual no es necesario manejar la definición de RL_i y RV_i para especificar estas corrientes.

Etapa Simple.

Para arreglar la ecuación (31) en función de L_i se tiene que eliminar L_i^* y V_{i+1} , para la primer variable se tiene la relación expresada en la ecuación (7).

Sin embargo, encontrar una relación entre L_i y V_i no es tan sencillo debido a la fuerte funcionalidad que poseen estas dos variables. Para resolver el problema se realiza un balance de masa total por bloques de la columna. Cada bloque comienza en la etapa de fondos y termina en la etapa de donde sale el flujo V_i que se quiere relacionar con su flujo de Líquido, como se muestra en la figura (A.1).

Por ejemplo, para un bloque que no tiene bombas de calor ni agotadores laterales se tiene el siguiente balance :

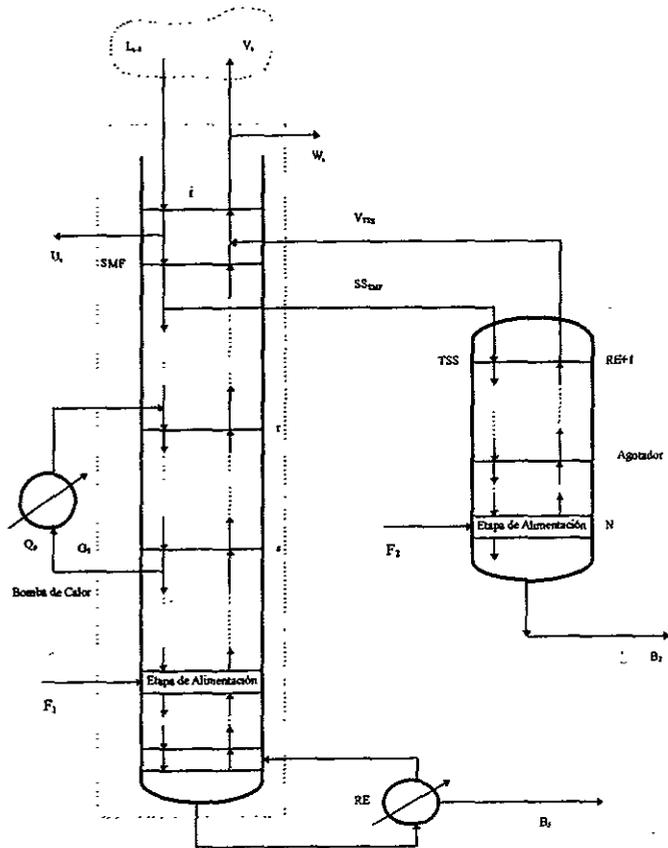


Figura A.1 : Bloque de la Definición de M_1

$$V_i - L_{i-1} = \sum_{k=1}^i (F_k - W_k - U_k - B) \quad (34)$$

donde B es el flujo de productos de fondos.

rearrreglando

$$V_i - L_i = M_i \quad (35)$$

$$V_i = M_i + L_i \quad (36)$$

donde M_i representa la diferencia entre los flujos de líquido y vapor que se cruzan al entrar y salir de la etapa i .

Para columnas con bombas de calor o agotadores laterales, figura A.1 :

$$V_i - L_{i-1} = \sum_{k=1}^i (F_k - W_k - U_k - B - SS_k - G_k + G^k_s + V^k_{TSS}) \quad (37)$$

donde G_k es el flujo que sale de la etapa k hacia una bomba de calor, mientras G^k_s representa el flujo de líquido que entra en la etapa k proveniente de la etapa s . SS_k es el flujo de líquido que va hacia un agotador lateral proveniente de la etapa k . V^k_{TSS} es el flujo de vapor que entra en la etapa k proveniente de la etapa TSS de un agotador externo:

sustituyendo la ecuación (7) y (36) en (31) se obtiene la siguiente expresión del balance de energía :

$$L_{i-1}h_{i-1} + (M_{i+1} + L_i)H_{i+1} - (M_i + L_{i-1} + W_i)H_i - (L_i + U_i)h_i + F_i H f_i + Q_i - L_i \beta_i h_i^* = 0 \quad (38)$$

rearrreglando se obtiene :

$$(h_{i-1} - H_i)L_{i-1} + (H_{i+1} - h_i - \beta_i h_i^*)L_i = -M_{i+1}H_{i+1} + M_i H_i + W_i H_i + U_i h_i - F_i H f_i - Q_i \quad (39)$$

Rehervidor.

Para un rehervidor $V_{i+1} = 0$ con lo cual tenemos.

$$(h_{i-1} - H_i)L_{i-1} + (-h_i - \beta_i h_i^*)L_i = +M_i H_i + W_i H_i + U_i h_i - F_i H f_i - Q_i \quad (40)$$

Condensador Total.

Para un condensador total $V_i = 0$ y $L_0 = 0$ por lo cual se obtiene .

$$(H_{i+1} - h_i - \beta_i h_i^*)L_i = -M_{i+1} H_{i+1} + U_i h_i - F_i H f_i - Q_i \quad (41)$$

Condensador Parcial.

Cuando se especifica un condensador parcial $L_{i-1} = 0$

$$(H_{i+1} - h_i - \beta_i h_i^*)L_i = -M_{i+1} H_{i+1} + M_i H_i + W_i H_i + U_i h_i - F_i H f_i - Q_i \quad (42)$$

Bombas de Calor.

a) etapa que recibe el flujo proveniente de la bomba de calor.

Para la etapa que recibe el flujo se adiciona un nuevo termino representado por el flujo de entrada G_s por lo que el balance de energía quedan de la siguiente forma:

$$(h_{i-1} - H_i)L_{i-1} + (H_{i+1} - h_i - \beta_i h_i^*)L_i = -M_{i+1} H_{i+1} + M_i H_i + W_i H_i + U_i h_i - F_i H f_i - Q_i - G_s h_s \quad (43)$$

b) etapa de donde proviene el flujo que va a la bomba de calor (etapa s).

Al contrario de la etapa anterior en esta el termino adicional será el flujo que sale hacia la bomba de calo, representado por G_i donde $i = s$.

$$(h_{i-1} - H_i)L_{i-1} + (H_{i+1} - h_i - \beta_i h_i^*)L_i = -M_{i+1} H_{i+1} + M_i H_i + W_i H_i + U_i h_i - F_i H f_i - Q_i + G_i h_i \quad (44)$$

Agotadores laterales.

Cuando se consideran agotadores laterales en el balance de energía, las variables adicionales que se agregan a la ecuación del balance son SS_x (el flujo que va al agotador lateral donde $x = SMF$ es el numero de etapa del cual proviene) y V_{TSS} (flujo de vapor proveniente de la etapa de domos del agotador $i = TSS$).

a) etapa de donde proviene el flujo que va hacia un agotador lateral (etapa SMF).

$$(h_{i-1} - H_i)L_{i-1} + (H_{i+1} - h_i - \beta_i h_i^*)L_i = -M_{i+1}H_{i+1} + M_i H_i + W_i H_i + U_i h_i - F_i H f_i - Q_i + SS_i h_i \quad (45)$$

b) etapa de domos de un agotador lateral (etapa TSS) .

$$(H_{i+1} - h_i - \beta_i h_i^*)L_i = -M_{i+1}H_{i+1} + M_i H_i + W_i H_i + U_i h_i - F_i H f_i - Q_i - SS_{SMF} h_{SMF} \quad (46)$$

c) etapa que recibe el flujo de vapor proveniente de un agotador externo.

$$(h_{i-1} - H_i)L_{i-1} + (H_{i+1} - h_i - \beta_i h_i^*)L_i = -M_{i+1}H_{i+1} + M_i H_i + W_i H_i + U_i h_i - F_i H f_i - Q_i - M_{TSS} H_{TSS} \quad (47)$$

Especificaciones Especiales.

El balance de energía para el rehervidor y el condensador, ecuaciones 41, 40 , y 42 pueden ser remplazadas por las relaciones que involucran a la relación de reflujo (R) y el flujo de productos de fondos (B) de la siguiente manera :

para el rehervidor la ecuación (40) se reemplaza por la siguiente relación :

$$L_{R,E} = B_{R,E} \quad R,E = \text{Numero de etapa de fondos}$$

para el condensador la ecuación (41 o 42) se reemplaza por la siguiente expresión :

$$L_{CO} = R * WL1 \quad CO = \text{Numero de etapa de domos}$$

La fijación de B para el rehervidor y R para el condensador, son preferibles a la especificación de los servicios de calentamiento y enfriamiento respectivos, debido a la simplificación algebraica y numérica obtenida con expresiones más sencillas que pueden manejarse más fácilmente. De cualquier manera en el programa de simulación es posible manejar ambas especificaciones.

APENDICE B EQUILIBRIO LIQUIDO-LIQUIDO.

Las ecuaciones que expresan la relación que existe entre las composiciones de las dos fases líquidas se deriva del balance de materia total :

$$\bar{L}_i \bar{x}_{i,j} = (L_i + U_i)x_{i,j} + L'_i x'_{i,j} \quad (1)$$

$$\bar{L}_i = L_i + U_i + L'_i \quad (2)$$

y la relación de equilibrio :

$$x'_{i,j} = K_{i,j}^D x_{i,j} \quad (3)$$

combinando las tres ecuaciones para obtener una funcionalidad de $x_{i,j}$ y $x'_{i,j}$ se obtienen.

$$x_{i,j} = \frac{(RL_i + \beta_i)\bar{x}_{i,j}}{(RL_i + \beta_i K_{i,j}^D)} \quad (4)$$

similarmente para la composición de la fase rica en agua :

$$x'_{i,j} = \frac{K_{i,j}^D (RL_i + \beta_i)\bar{x}_{i,j}}{(RL_i + \beta_i K_{i,j}^D)} \quad (5)$$

sumando las fracciones mol para cada fase líquida :

$$\sum_{j=1}^{NC} x_{i,j} = \sum_{j=1}^{NC} x'_{i,j} \quad (6)$$

$$\sum_{j=1}^{NC} (x_{i,j} - x'_{i,j}) = 0 \quad (7)$$

sustituyendo (4) y (5) en (7) y dividiendo ambos términos por $(1+\beta_i)$ se obtiene la relación de equilibrio líquido-líquido.

$$\sum_{j=1}^{NC} \frac{(RL_i + \beta_i)(1 - K_{i,j}^D) \bar{x}_{i,j}}{(RL_i + \beta_i K_{i,j}^D)} = 0 \quad (9)$$

una vez que la ecuación (9) se resuelve para β_i , las otras variables se calculan a partir de las siguientes ecuaciones :

$$L_i = \frac{\bar{L}_i}{RL_i + \beta_i} \quad (10)$$

$$L'_i = \beta_i L_i \quad (11)$$

APENDICE C

Problema 1 : Columna Depropanizadora. (1100 Btu/lbmol)

Tabla C1 : Resultados de la Simulación.

NT	L Lbmol/hr	V _i Lbmol/hr	F _i R	P _i Psta	Q _i Btu/hr	Alimentación Lbmol/hr
1	30.600000	30.597500	484.038600	200.00	-0.21907X10 ⁶	0.0
2	31.183850	61.207500	525.186200	200.45	0.0	0.0
3	30.054850	61.791740	540.254100	200.91	0.0	0.0
4	28.402310	60.662360	551.471900	201.36	0.0	0.0
5	25.092160	59.008820	563.432600	201.82	0.0	0.0
6	103.675100	55.697530	585.143000	202.27	0.0	71.91
7	119.715400	62.370020	626.956800	202.73	0.0	0.0
8	125.363600	78.407350	644.146500	203.18	0.0	0.0
9	127.538800	84.054560	655.663000	203.64	0.0	0.0
10	127.143500	86.229930	666.730800	204.09	0.0	0.0
11	121.636700	85.835510	682.004300	204.55	0.0	0.0
12	41.300000	80.330080	712.892900	205.00	0.72041 X10 ⁶	0.0

Tabla C2 : Reporte de Productos.

Componentes	Etapa 1		Etapa 12	
	Fración mol	Flujo Lmol/hr	Fración mol	Flujo Lmol/hr
CH4	.40013	12.2439	.00000	0.0000
C2H6	.34642	10.6004	.00011	0.00454
C3H8	.23882	7.30789	.02036	0.84086
I-C4H10	.01293	0.3956	.19335	7.98535
N-C4H10	.00169	0.05171	.18412	7.60415
I-C5H12	.00001	3.06E-4	.16755	6.91981
N-C5H12	.00000	0.0000	.14425	5.95752
N-C6H14	.00000	0.0000	.12089	4.99275
N-C7H16	.00000	0.0000	.09678	3.99700
N-C8H18	.00000	0.0000	.07259	2.99786

APENDICE D

Problema 2 : Columna de Destilación con Bomba de Calor.

Tabla D1: Resultados de la Simulación (2660 Btu/lbmol)

N	L _s Lbmol/hr	V _s Lbmol/hr	T _s R	P _s Psia	Q _s Btu/hr	Alimentación Lbmol/hr
1	400.318600	0.00000E+00	599.798000	300	-0.36875X10 ⁶	0.0
2	389.603200	728.448500	604.509500	300	0.0	0.0
3	379.131300	717.723100	609.122500	300	0.0	0.0
4	367.352600	707.247800	613.673200	300	0.0	0.0
5	444.454600	695.470900	618.449700	300	0.0	0.0
6	442.662000	692.342800	618.815900	300	0.0	0.0
7	439.392100	690.558200	619.439600	300	0.0	0.0
8	433.406200	687.295700	620.564100	300	0.0	0.0
9	422.791300	681.317100	622.631000	300	0.0	0.0
10	899.572600	670.711800	626.368800	300	0.0	500.0
11	898.839000	647.484800	626.812300	300	0.0	0.0
12	897.612200	646.739300	627.572900	300	0.0	0.0
13	895.609900	645.498400	628.870900	300	0.0	0.0
14	892.431200	643.478800	631.063800	300	0.0	0.0
15	887.557900	640.285700	634.719400	300	0.0	0.0
16	800.142000	635.405400	640.705100	300	0.0	0.0
17	791.178500	628.241800	650.288300	300	0.0	0.0
18	780.727400	619.316600	663.797200	300	0.0	0.0
19	773.005900	608.940700	682.075500	300	0.0	0.0
20	171.870000	601.315400	704.939600	300	0.39302X10 ⁶	0.0

Tabla D2: Reporte de Productos.

Componentes	Etapa 1		Etapa 20	
	Fracción mol	Flujo Lmol/hr	Fracción mol	Flujo Lbmol/hr
C3H82	.91636	366.8189	.14022	4.10381
I-C4H10	.05525	22.11657	.18565	31.91320
N-C4H10	.02724	10.90417	.23926	41.12879
N-C5H12	.00116	0.464348	.43487	74.75415

APENDICE E

Problema 3 : Columna de Destilación Atmosférica de Crudo (Exxon)

Tabla E1 : Caracterización del Crudo.

Componente	Punto de ebullición promedio °F	Gravedad (API)	Peso molecular	Composición
C1	-	-	-	3.31E-01
C2	-	-	-	1.17E-02
C3	-	-	-	1.73E-02
N-C4	-	-	-	1.99E-02
N-C5	-	-	-	4.34E-02
H2O	-	-	-	1.20E-01
FRAC1	150	73.67	86.37	3.31E-02
FRAC2	190	66.11	97.86	2.89E-02
FRAC3	210	62.86	103.7	2.87E-02
FRAC4	240	58.74	112.6	3.44E-02
FRAC5	260	56.35	118.88	3.43E-02
FRAC6	300.73	52.61	132.15	3.92E-02
FRAC7	340	48.34	145.05	3.86E-02
FRAC8	370.17	45.5	155.58	2.61E-02
FRAC9	400	43.01	166.58	2.26E-02
FRAC10	430.18	40.6	178.25	3.01E-02
FRAC11	460.18	38.5	190.53	2.71E-02
FRAC12	497.2	36.4	206.79	3.87E-02
FRAC13	534.63	34.3	224.1	3.81E-02
FRAC14	580	32.12	246.54	3.15E-02
FRAC15	620	30.11	267.22	2.99E-02
FRAC16	675	27.5	297.18	5.93E-02
FRAC17	750	25.17	342.14	5.14E-02
FRAC18	825	22.31	388.62	4.47E-02
FRAC19	900	20.72	439.79	3.80E-02
FRAC20	1000	19.17	512.94	3.23E-02
FRAC21	1100	16.52	584.92	2.28E-02
FRAC22	1200	11.32	643.5	2.80E-02
FRAC23	1300	-3.69	740	1.38E-02
FRAC24	1400	-20.95	800	1.32E-02

Tabla E2 :Resultados de la Simulación

Nº	L Lbmol/hr	V Lbmol/hr	F R	F ₁₂	Alimentaciones Lbmol/hr	G Btu/hr
1	3253.82700	185.304800	592.643200	23.1	0.000	-0.5107E+8
2	3331.02000	3962.61000	644.534200	25.2	0.000	0.000
3	3290.17800	4027.70700	669.593400	25.36	0.000	0.000
4	3192.20200	3986.86500	687.355700	25.52	0.000	0.000
5	3043.20900	3888.88800	704.097000	25.68	0.000	0.000
6	2544.47200	3714.20500	723.533900	25.85	0.000	0.000
					25.69 SS	
					-319.69 SS	
7	2399.57100	3535.15800	746.808100	26.01	0.000	0.000
8	2306.40900	3390.25600	768.855200	26.17	0.000	0.000
9	2245.72700	3297.09400	786.986600	26.33	0.000	0.000
10	2194.55600	3236.41200	801.205000	26.49	0.000	0.000
					23.34 SS	
11	1999.39100	3161.90000	813.039700	26.65	0.000	0.000
					-138.40 SS	
12	1925.97500	3105.13500	824.398000	26.82	0.000	0.000
13	1822.90100	3031.72000	836.447500	26.98	0.000	0.000
14	1672.76200	2928.64600	851.258800	27.14	0.000	0.000
15	1477.02300	2778.50700	871.437900	27.30	0.000	0.000
					74.65 SS	
16	924.617600	2508.11800	898.772000	27.46	0.000	0.000
					-375.85 SS	
17	846.995800	2331.56300	929.725500	27.62	0.000	0.000
18	2190.95100	2253.94100	950.038000	27.78	0.000	-0.1810E+8
					823 G	
19	1447.44400	2774.89600	973.993700	27.95	0.000	0.000
					-823 G	
20	1415.88700	2854.38900	990.802100	28.11	0.000	0.000
21	1353.81900	2822.83100	1002.82700	28.27	0.000	0.000
22	1272.50800	2760.76300	1014.14000	28.43	0.000	0.000
					37.31 SS	
23	1041.80300	2642.14200	1026.57300	28.59	0.000	0.000
					-128.51 SS	
24	923.674900	2539.94700	1041.63400	28.75	0.000	0.000
25	775.041400	2421.81900	1058.90700	28.92	0.000	0.000
26	436.923600	2273.18600	1081.32300	29.08	0.000	0.000
27	823.420000	1935.06800	1129.90100	29.24	2203.20	0.2781E+8
28	770.000000	119.414900	1138.12600	29.40	66.00	0.000
29	330.691500	25.690000	723.692300	25.85	0.000	0.000
30	334.329800	36.691500	727.254200	26.01	0.000	0.000
31	294.000000	40.329800	734.103000	26.17	0.000	0.650E+6
32	131.223900	23.340000	811.546700	26.65	0.000	0.000
33	122.000000	16.163920	801.385500	26.82	6.94	0.000
34	355.142200	74.649990	897.796600	27.46	0.000	0.000
35	328.000000	53.942240	886.653700	27.62	26.80	0.000
36	119.083900	37.310000	1021.49000	28.59	0.000	0.000
37	107.000000	27.883890	1006.17400	28.75	15.80	0.000

Tabla E3 : Composición de Productos.

Componente	Flujo de vapor etapa 1		Flujo de líquido etapa 25	
	Fracción mol	Flujo lbmol/hr	Fracción mol	Flujo lbmol/hr
CH4	0.00009	0.016677	0	0
C2H6	0.01821	3.374313	0.00001	0.0077
C3H8	0.19122	35.433066	0.00003	0.0231
N-C4H10	0.21758	40.317574	0.00006	0.0462
N-C5H12	0.34651	64.208303	0.00022	0.1694
H2O	0	0	0.01176	9.0552
FRAC 1	0.1559	28.88827	0.00028	0.2156
FRAC 2	0.05232	9.694896	0.00035	0.2695
FRAC 3	0.01651	3.059303	0.00042	0.3234
FRAC 4	0.00146	0.270538	0.00068	0.5236
FRAC 5	0.0002	0.03706	0.00083	0.6391
FRAC 6	0	0	0.00144	1.1088
FRAC 7	0	0	0.00216	1.6632
FRAC 8	0	0	0.00203	1.5631
FRAC 9	0	0	0.00244	1.8788
FRAC 10	0	0	0.00451	3.4727
FRAC 11	0	0	0.00564	4.3428
FRAC 12	0	0	0.01204	9.2708
FRAC 13	0	0	0.01833	14.1141
FRAC 14	0	0	0.03064	23.5928
FRAC 15	0	0	0.05264	40.5328
FRAC 16	0	0	0.15678	120.7206
FRAC 17	0	0	0.14662	112.8974
FRAC 18	0	0	0.12775	98.3675
FRAC 19	0	0	0.10876	83.7452
FRAC 20	0	0	0.09255	71.2635
FRAC 21	0	0	0.06516	50.1732
FRAC 22	0	0	0.08005	61.6385
FRAC 23	0	0	0.03941	30.3457
FRAC 24	0	0	0.03639	28.0203

Tabla E4 : Composición de Productos

Componente	Flujo de líquido etapa 21		Flujo de líquido etapa 22	
	Fracción mol	Flujo Lbmol/hr	Fracción mol	Flujo Lbmol/hr
CH4	0	0	0	0
C2H6	0	0	0	0
C3H8	0.00002	0.00588	0.00001	0.00122
N-C4H10	0.00025	0.0735	0.00007	0.00854
N-C5H12	0.00331	0.97314	0.00063	0.07686
H2O	0.00465	1.3671	0.02528	3.08416
FRAC 1	0.01353	3.97782	0.00159	0.19398
FRAC 2	0.08124	23.88456	0.00314	0.38308
FRAC 3	0.15222	44.75268	0.00482	0.58804
FRAC 4	0.23603	69.39282	0.0122	1.4884
FRAC 5	0.2356	69.2664	0.02284	2.78648
FRAC 6	0.2151	63.2394	0.14427	17.60094
FRAC 7	0.05442	15.99948	0.45143	55.07446
FRAC 8	0.00352	1.03488	0.24811	30.26942
FRAC 9	0.00011	0.03234	0.06884	8.39848
FRAC 10	0	0	0.01496	1.82512
FRAC 11	0	0	0.00165	0.2013
FRAC 12	0	0	0.00016	0.01952
FRAC 13	0	0	0.00001	0.00122
FRAC 14	0	0	0	0
FRAC 15	0	0	0	0
FRAC 16	0	0	0	0
FRAC 17	0	0	0	0
FRAC 18	0	0	0	0
FRAC 19	0	0	0	0
FRAC 20	0	0	0	0
FRAC 21	0	0	0	0
FRAC 22	0	0	0	0
FRAC 23	0	0	0	0
FRAC 24	0	0	0	0

Tabla E5 : Composición de Productos

Componente	Flujo de líquido etapa 35		Flujo de líquido etapa 37	
	Fración mol	Flujo lbmol/hr	Fración mol	Flujo lbmol/hr
CH4	0	0	0	0
C2H6	0	0	0	0
C3H8	0	0	0	0
N-C4H10	0.00002	0.00656	0	0
N-C5H12	0.00019	0.06232	0.00003	0.00321
H2O	0.02132	6.99296	0.01757	1.87999
FRAC 1	0.00046	0.15088	0.00006	0.00642
FRAC 2	0.00088	0.28864	0.0001	0.0107
FRAC 3	0.0013	0.4264	0.00015	0.01605
FRAC 4	0.00277	0.90856	0.0003	0.0321
FRAC 5	0.00406	1.33168	0.00043	0.04601
FRAC 6	0.0105	3.444	0.00105	0.11235
FRAC 7	0.03538	11.60464	0.00214	0.22898
FRAC 8	0.07422	24.34416	0.00251	0.26857
FRAC 9	0.1192	39.0976	0.0037	0.3959
FRAC 10	0.18309	60.05352	0.00841	0.89987
FRAC 11	0.16366	53.68048	0.01339	1.43273
FRAC 12	0.21649	71.00872	0.0467	4.9969
FRAC 13	0.15227	49.94456	0.18605	19.90735
FRAC 14	0.0138	4.5264	0.3858	41.2806
FRAC 15	0	0	0.1234	13.2038
FRAC 16	0	0	0.09241	9.88787
FRAC 17	0	0	0.00288	0.30816
FRAC 18	0	0	0.00005	0.00535
FRAC 19	0	0	0	0
FRAC 20	0	0	0	0
FRAC 21	0	0	0	0
FRAC 22	0	0	0	0
FRAC 23	0	0	0	0
FRAC 24	0	0	0	0

Tabla E6 : Composición de Productos

Componente	Flujo líquido etapa 1 fase orgánica		Flujo de líquido etapa 1 fase acuosa	
	Fración mol	Flujo lbmol/hr	Fración mol	Flujo lbmol/hr
CH4	0	0	0.01857	6.66731709
C2H6	0.00059	0.0795615	0.05787	20.7774712
C3H8	0.01843	2.4852855	0.01201	4.31203437
N-C4H10	0.06179	8.3323815	0.00023	0.08257851
N-C5H12	0.2771	37.366935	0.00002	0.00718074
H2O	0	0	0.91129	327.186828
FRAC 1	0.30908	41.679438	0	0
FRAC 2	0.21473	28.9563405	0	0
FRAC 3	0.09909	13.3622865	0	0
FRAC 4	0.01584	2.136024	0	0
FRAC 5	0.00324	0.436914	0	0
FRAC 6	0.0001	0.013485	0	0
FRAC 7	0	0	0	0
FRAC 8	0	0	0	0
FRAC 9	0	0	0	0
FRAC 10	0	0	0	0
FRAC 11	0	0	0	0
FRAC 12	0	0	0	0
FRAC 13	0	0	0	0
FRAC 14	0	0	0	0
FRAC 15	0	0	0	0
FRAC 16	0	0	0	0
FRAC 17	0	0	0	0
FRAC 18	0	0	0	0
FRAC 19	0	0	0	0
FRAC 20	0	0	0	0
FRAC 21	0	0	0	0
FRAC 22	0	0	0	0
FRAC 23	0	0	0	0
FRAC 24	0	0	0	0

APENDICE F

MANUAL DEL USUARIO

En este apéndice se presentan las formas específicas de entrada al programa Torresim. La entrada de datos al programa se lleva a cabo por medio de dos rutinas las cuales se listan a continuación :

rutina

Función

ENTRADA : En esta rutina se introducen al programa el número de *componentes*, su *condición* y en su caso los datos necesarios para calcular las propiedades físicas de los mismos.

TORRE: Por medio de esta rutina se introducen al programa las características y especificaciones de la columna que se desea simular.

Para explicar de una manera más simple las formas de entrada para el uso del programa, se presenta a continuación, los cuadros de dialogo que maneja el programa al introducir la configuración de la columna mostrada en la figura (F.1). Un resumen de las especificaciones de la alimentación introducida a esta columna se presenta en la tabla (F.2). La columna mostrada en la figura contiene todas las especificaciones posibles que puede manejar el programa.

Tabla F1 : Composición de las Alimentaciones y Especificaciones de la Columna.

Componentes	Flujo molar (lb/lbmol)	
	alimentación 1	alimentación 2
Metano	100	10
Etano	50	0.0
Propano	50	0.0
n-Butano	50	0.0
i-Butano	50	0.0
n-hexano	50	0.0
Frac 1	100	0.0
Frac 2	100	0.0
Entalpia de la alimentación	1000 Btu/lbmol	
Especificaciones de la columna	1. Flujo de producto de Fondos 250 lbmol/hr. 2. Relación de Reflujo 0.41666 3. Flujo de productos del agotador. 10 lbmol/hr 4. Flujo de la bomba de calor. 5 lbmol/hr. 5. Flujo líquido hacia el agotador 10 lbmol/hr 6. Presión de domos 7. Presión de Fondos	
Estimados Iniciales.	1. Temperatura de domos 610 °R 2. Temperatura de Fondos 710 °R	

Datos de la caracterización del crudo.

Fracción	BPCA	BMLA	BPMNA	T _c	P _c	°API	PM
Frac 1	-	-	730	-	-	56	67
Frac 2	850	867	-	-	-	67	70

Al introducir las especificaciones de la columna de la figura (F.1) el primer cuadro de dialogo que se presenta es el siguiente :

DESEA CORRER EL EJEMPLO DE UNA TORRE
DE DESTILACION DE CRUDO 1)SI 2)NO

2

en el anterior cuadro de dialogo se pregunta al usuario si desea correr el ejemplo de la columna de destilación Exxon presentado en el capítulo 6. El número subrayado indica la respuesta del usuario , indicando con el número 2 que se desea simular un nuevo problema.

A continuación se presentan los registros de entrada que tienen relación con el número y tipo de componentes.

NCOMP

8

NÚMERO DE COMPONENTES

6

NÚMERO DE PSEUDOCOMPONENTES

2

ESPECIFICAR EL NÚMERO DE LOS COMPONENTES QUE
SE ALIMENTAN A LA COLUMNA

2

3

4

5

6

10

la variable NCOMP pregunta el número de componentes que contienen en total todas las alimentaciones a la columna, el termino componentes se refiere a aquellos componentes que se encuentran definidos en la tabla (IV) por lo que sus propiedades físicas se encuentran definidas en la base de datos que contiene el programa. El número del componente es aquel que corresponde a cada componente en la tabla (IV). Se define pseudocomponentes a fracciones de crudo que requieren un método de cálculo adicional para calcular sus propiedades físicas. Cuando el problema a resolver considera pseudocomponentes, el programa de simulación conduce al usuario al siguiente cuadro de dialogo.

ELIGA EL METODO DE CARACTERIZACIÓN
DESEADO

1

DAME LOS SIGUIENTES DATOS CON EL FORMATO ESPECIFICADO

DAME LOS DATOS DE :
KZ-BPCA-BMLA-BPMNA-TC1-PC1-API-XXWM

62,0,0,730,0,0,56,67

DAME LOS SIGUIENTES DATOS CON EL FORMATO ESPECIFICADO

DAME LOS DATOS DE :
KZ-BPCA-BMLA-BPMNA-TC1-PC1-API-XXWM

63,850,867,0,0,0,67,70

el algoritmo de cálculo empleado en esta tesis posee los siguientes métodos de caracterización de fracciones de crudo :

- N Método
1 Cavett
2 Cavett Modificado.

el cuadro de dialogo anterior se presentara tantas veces como número de pseudocomponentes se hayan definido. Las variables anteriores se definen a continuación.

KZ : Es el número (mayor a 61) que se le asigna al pseudocomponente, para su anexión a la lista de la tabla (IV).
BPCA : Punto de ebullición promedio
BMLA : Primer punto de ebullición que define a determinada fracción .
BPMNA: Último punto de ebullición que define a determinada fracción.
TC1 : Temperatura crítica de la fracción .
PC1 : Presión crítica de la fracción.
API : Gravedad específica.
XXWM: Peso molecular.

a continuación se pide los números que fueron asignados a los pseudocomponentes que se desean tomar en cuenta y se imprime en pantalla el número de componente y su número correspondiente en el banco de datos.

ESPECIFICAR LOS NÚMEROS ASIGNADOS A LOS
PSEUDOCOMPONENTES

62
63

NUM DE COMPONENTES --NUM ARREGLOS IDCS

1	2
2	3
3	4
4	5
5	6
6	10
7	62
8	63

El programa tiene la opción de cancelar la búsqueda de una segunda fase líquida cuando no se incluye agua dentro del número de componentes, en tal caso se debe elegir el número (1) como entrada al programa .

DESEA REALIZAR LA BUSQUEDA DE
UNA SEGUNDA FASE 0)SI 1)NO

1

Los últimos cuadros de diálogo corresponden a la configuración de la columna :

CONFIGURACION DE LA TORRE
ESPECIFICAR NT,NW,NF,ICOND,IKEY

16.1.2.1.0

LA TORRE TIENE 16 ETAPAS
1 CON SALIDAS LATERALES
2 CON ALIMENTACIÓN
IKEY= 0

ESPECIFICAR NAGOTADORES,NCONDEN,NBOMBAS DE CALOR

1.1.1

LA TORRE TIENE CONDENSADOR PARCIAL

R

0.41666

RELACION DE REFLUJO= .4166600E+00

ESPECIFICAR I,B 1

13.250

FLUJO DE LIQUIDO DE FONDOS= .2500000E+03

ESPECIFICAR I,B 2

16,10

FLUJO DE LIQUIDO DE FONDOS= .1000000E+02

donde :

NT : Número de etapas de la columna.

NW : Número de corrientes de salida laterales.

NF : Número de alimentaciones.

ICOND ; Toma los siguientes valores para las siguientes especificaciones.

ICOND=0 condensador parcial , especificando la corriente de productos de fondos.

ICOND=1 condensador total , especificando la corriente de productos de fondos.

ICOND=2 condensador parcial, especificando el servicio de enfriamiento del condensador, fijando la corriente de productos de fondos.

rehervidor.
ICOND=3 condensador parcial, especificando la carga térmica del

rehervidor.
ICOND=4 condensador total , especificando el servicio de calentamiento del rehervidor.

ICOND=5 condensador parcial, especificando el servicio de enfriamiento, fijando la carga de calentamiento del rehervidor.

IKEY ; es el número asignado al componente cuya concentración (en caso de existir dos fases líquidas) es mucho mayor en la segunda fase líquida que en la primera.

I,B ; Número de etapa y flujo de la corriente de fondos de la columna principal y de los agotadores externos..

R ; relación de reflujo de la columna cuando se utiliza un condensador total.

NAGOTADORES : Número de agotadores laterales.

NCONDEN : Número de condensadores.

NBOMBAS DE CALOR : Número de bombas de calor.

La especificación de las composiciones de las alimentaciones y el número de etapa en el cual se introducen se especifican por el siguiente formato :

ESPECIFICAR I FFF(L,J),HF(I)

12,100,50,50,50,50,50,50,100,1000

ESPECIFICAR I, FFF(I,J),HF(I)

16,10,0,0,0,0,0,0,0,0,0

donde :

I : Etapa de alimentación .

FFF_{i,j} : Flujos de alimentación por componentes

HF_i : Entalpia de la corriente de alimentación.

La especificación de las corrientes laterales se especifican de la siguiente forma:

ESPECIFICAR I,WL1,WL2,WLS,WV(I)

1,100,0,100,0

donde :

I : número de etapa de la salida lateral.

WL1 : Flujo de la corriente lateral de la primer fase líquida

WL2 : Flujo de la corriente lateral de la segunda fase líquida

WLS : Flujo total de la corriente lateral WL1+WL2

La introducción del perfil de presiones para una columna de destilación se introduce de la siguiente manera :

ESPECIFICAR IL,IH,TEFF1,TQ,PB,PT

1,16,1,0,200,205

El formato anterior además tiene la función de introducir los valores de la eficiencia de Murphree y el flujo de calor de cada etapa. El programa Torresim tiene la propiedad de calcular los perfiles de dichas variables a partir de una interpolación lineal entre dos valores dados (IL y IH).

IL ; es el número de etapa que representa el limite inferior del segmento seleccionado de la columna.

IH ; es el número de la etapa que representa el límite superior del segmento seleccionado de la columna.

TEFF1 ; es el valor de la eficiencia de Murphree que se dará a todas las etapas que están entre IL y IH.

TQ ; es el valor de el calor que entra o sale de cada una de las etapas comprendidas entre IL y IH

PB ; es la presión de la etapa IL.

PT ; es la presión de la etapa IH.

El siguiente cuadro de diálogo solo se presenta en pantalla si se han especificado agotadores externos y/o bombas de calor en la configuración del problema.

ESPECIFICAR I , GI

5.5

ESPECIFICAR I, SS(I)

9.10

BOMBA DE CALOR 1

ESPECIFICAR ETAPA DE SALIDA

5

ESPECIFICAR ETAPA DE ENTRADA

4

AGOTADOR 1

ESPECIFICAR ETAPA DE SALIDA

9

ESPECIFICAR ETAPA DE ENTRADA

8

ESPECIFICAR ETAPA DE DOMOS DEL AGOTADOR

14

CONDENSADOR 1

ESPECIFICAR NÚMERO DE ETAPA

1

REHERVIDOR 1
ESPECIFICAR NÚMERO DE ETAPA

13

REHERVIDOR 2
ESPECIFICAR NÚMERO DE ETAPA

16

donde :

I, GI : Etapa del flujo GI que va a una bomba de calor.

I, SS(I) : Etapa del flujo SSI que va a un agotador lateral.

Para el estimado inicial del perfil de flujos molares de líquido y vapor, se especifican las siguientes entradas :

ESPECIFICAR FVD

0.0

ESPECIFICAR I,V/F

200.0

donde :

FVD : es el flujo de vapor estimado proveniente del condensador de la columna en cuestión, si se ha especificado un condensador total su valor es cero.

I,V/F : I es el número de etapa en la cual se introduce una alimentación ,V/F es la relación que establece la cantidad de vapor en la corriente. El ciclo de introducción de valores se detiene cuando se da un valor a I más grande que el número de etapas de la columna.

En seguida, el programa imprime en pantalla los estimados iniciales *construidos a partir de los datos introducidos hasta ahora*, estos estimados son mejorados resolviendo el balance de materia para los flujos de líquido por componente :

ESTIMADO INICIAL DE FLUJOS

NT	FV	FL1
1	0.000000E+00	41.666000
2	141.666000	41.666000
3	141.666000	41.666000
4	141.666000	46.666000
5	141.666000	41.666000
6	141.666000	41.666000
7	141.666000	41.666000
8	141.666000	41.666000
9	131.666000	31.666000
10	131.666000	31.666000
11	131.666000	31.666000
12	131.666000	531.666000
13	131.666000	250.000000
14	10.000000	10.000000
15	10.000000	10.000000
16	10.000000	10.000000

El último cuadro introduce los valores estimados de la temperatura. Este formato tiene la misma forma de entrada que el de los perfiles de presión explicados anteriormente, generando un perfil lineal entre la temperatura TB y TT.

IL ; número de etapa, que representa el límite inferior del segmento de columna seleccionado.

IH ; número de etapa, que representa el límite superior del segmento de columna seleccionado.

TB ; temperatura de la etapa IL.

TT ; temperatura de la etapa IH.

Para columnas que manejan sistemas sencillos, donde los estimados iniciales de temperaturas no tienen que ser demasiados rigurosos, IL es la etapa de fondos mientras IH es la última etapa de la columna o el condensador.

IL , IH , TT ,TB

1,16,610,710

Corrida de los Ejemplos Presentados en este Trabajo.

Para obtener la solución de los ejemplos, se presenta a continuación la secuencia de introducción de datos al programa, para la columna depropanizadora y para la columna de destilación atmosférica Exxon.

Columna Depropanizadora .

DESEA CORRER EL EJEMPLO DE UNA TORRE
DE DESTILACION DE CRUDO 1)SI 2)NO
2
NCOMP
10
NÚMERO DE COMPONENTES
10
NÚMERO DE SEUDOCOMPONENTES
0
ESPECIFICAR EL NÚMERO DE LOS COMPONENTES QUE
ALIMENTAN A LA COLUMNA
2
3
4
5
6
7
8
10
11
12
DESEA REALIZAR LA BUSQUEDA DE
UNA SEGUNDA FASE 0)SI 1)NO
1
CONFIGURACION DE LA TORRE
ESPECIFICAR NT,NW,NF,ICOND,IKEY
12,1,1,0,0

LA TORRE TIENE 12 ETAPAS
1 CON CORRIENTE LATERAL
1 CON ALIMENTACIÓN
IKEY= 0
ESPECIFICAR NAGOTADORES,NCONDEN,NBOMBAS DE CALOR
0,1,0

LA TORRE TIENE CONDENSADOR PARCIAL

R

3060.0

RELACION DE REFLUJO= .3060000E+04

ESPECIFICAR I,B 1

12,41.3

FLUJO DE LIQUIDO DE FONDOS= .4130000E+02

ESPECIFICAR FFF(I,J),HF(I)

6,12.2332,10.5976,8.1487,8.3864,7.6607,6.9242,5.9612,4.9959,3.9996,3,-1100

ESPECIFICAR I,WL1,WL2,WLS,WV(I)

1,.01,0,.01,0

ESPECIFICAR IL,IH,TEFF1,TQ,PB,PT

1,12,1,0,200,205

CONDENSADOR

ESPECIFICAR NÚMERO DE ETAPA

1

REHERVIDOR 1

ESPECIFICAR NÚMERO DE ETAPA

12

ESPECIFICAR FVD

30.6

ESPECIFICAR I,V/F

200,0

ESTIMADO INICIAL DE FLUJOS

NT,FV,FL1

1	30.600000	30.600000
2	61.210000	30.600000
3	61.210000	30.600000
4	61.210000	30.600000
5	61.210000	30.600000
6	61.210000	102.507500
7	61.210000	102.507500
8	61.210000	102.507500
9	61.210000	102.507500
10	61.210000	102.507500
11	61.210000	102.507500
12	61.210000	41.300000

IL , IH , TT ,TB

1,12,499.67,659.67

Columna de Destilación Atmosférica Exxon.

Para correr el problema de la columna Exxon se tienen que introducir en el cuadro de dialogo correspondiente a la caracterización, todos los datos de la tabla (G.1) que contienen los datos de la curva TBP y los pesos moleculares de las fracciones de crudo manejadas en este problema . Además, se tienen que dar una gran cantidad de especificaciones inherentes a los cuatro agotadores externos y la bomba de calor que se especifican para el problema. Es por ello que en el programa se incorpora la opción de correr dicho ejemplo anexando estos datos en el programa ejecutable, de esta manera se reduce en gran medida la introducción de datos por parte del usuario.

```
DESEA CORRER EL EJEMPLO DE UNA TORRE
DE DESTILACION DE CRUDO 1)SI 2)NO
1
NCOMP
30
NÚMERO DE COMPONENTES
6
NÚMERO DE SEUDOCOMPONENTES
24
ESPECIFICAR EL NÚMERO DE LOS COMPONENTES QUE
SE ALIMENTAN A LA COLUMNA
2
3
4
6
8
61
DESEA REALIZAR LA BUSQUEDA DE
UNA SEGUNDA FASE 0)SI 1)NO
0
CONFIGURACION DE LA TORRE
ESPECIFICAR NT,NW,NF,ICOND,IKEY
LA TORRE TIENE 37 ETAPAS
1 CON CORRIENTE LATERAL
5 CON ALIMENTACION
IKEY= 6
ESPECIFICAR NAGOTADORES,NCONDEN,NBOMBAS DE CALOR.

LA TORRE TIENE CONDENSADOR PARCIAL
R
RELACION DE REFLUJO= .2381530E+02
ESPECIFICAR Q(1),Q(18),Q(27),Q(31)
```

-5107e+8
-.181e+8
.2781e+8
.65e+6
ESPECIFICAR FVD
203.83
ESPECIFICAR I,V/F
28,1
ESPECIFICAR I,V/F
37,1
ESPECIFICAR I,V/F
35,1
ESPECIFICAR I,V/F
33,1
ESPECIFICAR I,V/F
200,0
IL , IH , TT ,TB
1,1,576,576
IL , IH , TT ,TB
2,2,640,640
IL , IH , TT ,TB
3,28,667,1133
IL , IH , TT ,TB
29,31,728,736
IL , IH , TT ,TB
32,33,801,789
IL , IH , TT ,TB
34,35,890,878
IL , IH , TT ,TB
36,37,1017,1013

Recomendaciones.

Las siguientes líneas especifican los posibles errores en que puede incurrir el usuario en el manejo de el programa. El hecho de que los perfiles de flujos de líquido y vapor iniciales del que parte el cálculo se construyan a partir de unos cuantos datos estimados, implica que estos últimos posean por lo menos coherencia, para construir los perfiles iniciales el programa solo pide los valores estimados de aquellas corrientes de entrada y salida tomando a la columna de destilación como una caja negra ; por lo cual dichos valores estimados por el usuario deberán ser coherentes con este balance de masa.

Los estimados para el perfil de temperatura requieren especial atención , para columnas complejas como las unidades de destilación de crudo, debido a la gran dependencia que poseen los valores de K_{ij} y los valores de entalpia con esta.

APENDICE G

NOMENCLATURA.

A_i	Parámetro del modelo local para la determinación de la temperatura para la etapa i
B_i	Parámetro del modelo local para la determinación de la temperatura para la etapa i
B	Flujo de fondos, lbmol/hr
NC	Número de componentes
$C_{p_{ij}}$	Capacidad calorífica de la especie j en la etapa i. Btu/lbmol .hr.°R
D	Flujo de destilado, lbmol/hr
F_i	Flujo de alimentación en la etapa i.
f_{ij}^L, f_j^V	Fugacidad de líquido y de vapor para la especie j.
f_j^{VP}	Fugacidad de vapor a la presión de vapor del componente j.
f_{ij}	flujo de alimentación de la especie j en la etapa i.
ΔG^o	Energía libre de Gibbs en exceso
H_i	Entalpia de la corriente vapor que sale de la etapa i Btu/lbmol
h_i	Entalpia de la corriente líquida que sale de la etapa i
H_m^o	Entalpia de mezcla a la temperatura T^o , Btu/lbmol
H_i^o	Entalpia ideal de la mezcla para la etapa i.
K_{ij}	Coefficiente de distribución para el componente j en la etapa i.
K_{bi}	Coefficiente de distribución promedio en la etapa i.
K_{ij}^D	Coefficiente de distribución de líquido de la especie j en la etapa i.
L_i	Flujo molar de líquido que sale de la etapa i. , lbmol/hr
l_{ij}	Flujo molar de líquido de la especie j en la etapa i. , lbmol/hr
N	Número de etapas.
P_i	Presión en la etapa i. psia
Q_i	Flujo de calor transferido a la etapa i. Btu/hr
R	Relación de reflujo.
U_i	Flujo molar de la corriente lateral de líquido, lbmol/hr
T_i	Temperatura en la etapa i. ° R
T_i^o	Temperatura de referencia de la etapa i. ° R
V_i	Flujo molar de vapor que sale de la etapa i lbmol/hr
v_{ij}	Flujo molar de vapor de la especie j que sale de la etapa i. lbmol/hr
W_i	Flujo molar de la corriente lateral de Vapor , lbmol/hr
x_{ij}	Fracción molar de líquido de la especie j en la etapa i.
y_{ij}	Fracción molar de vapor de la especie j en la etapa i.
z_{ij}	Fracción molar de la especie j en la corriente de alimentación de la etapa i.

Simbolos Griegos.

α_{ij}	Volatilidad relativa de la especie j en la etapa i.
β_i	Relación entre las dos fases (L''_i / L'_i).
γ_{ij}	Coefficiente de actividad de la especie j en la etapa i.
ϵ	Tolerancia de convergencia
η_i	Eficiencia de Murphree.
λ	Factor de amortiguamiento.
ϕ_i	Coefficiente de fugacidad para la especie i

Subíndices

i	Número de etapa.
j	Número de especies.
m	mezcla

Superíndices.

"	Segunda fase líquida
L	Fase líquida
v.	Fase vapor
f	Corriente de alimentación
*	Estado de referencia
o	Condiciones ideales