

300618

7  
2y  
J



# UNIVERSIDAD LA SALLE

ESCUELA DE QUIMICA  
Incorporada a la U.N.A.M.

## Análisis de la Obtención de Isopropanol Puro Mediante Destilación Azeotrópica.

**TESIS PROFESIONAL**  
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE  
INGENIERO QUIMICO  
P R E S E N T A  
**CLAUDIA GUERRERO BARAJAS**

Director de Tesis:  
**ING. JORGE E. GARCIA ACEVEDO**



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

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

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

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

## INDICE

INDICE DE TABLAS.  
INDICE DE FIGURAS.  
NOMENCLATURA.

	RESUMEN.	1
I	INTRODUCCION.	3
II	GENERALIDADES.	4
III	METODO DE NAPHTALI.	11
III.1	ALGORITMO DE CALCULO.	24
IV	MODELOS TERMODINAMICOS.	29
IV.1	EL MODELO UNIUAC.	29
IV.2	LA ECUACION VIRIAL.	31
V	CARACTERISTICAS DEL PROGRAMA Y SU FORMA DE USAR.	37
V.1	EJEMPLOS DE CALCULO COMO PRUEBA DEL PROGRAMA DE COMPUTO.	50
V.11	SISTEMA ETANOL, 1-PROPANOL, AGUA, ACIDO ACETICO.	51
V.12	SISTEMA N-OCTANO, ETILCICLOHEXANO, ETILBENCENO, DEST. EXTRACTIVA CON FENOL.	54
VI	CASO DE ESTUDIO: DESHIDRATAACION DE ISOPROPANOL.	58
VII	CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.	67
	APENDICES.	70
	REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS.	80

## INDICE DE TABLAS.

1.-Resultados del sistema: Etanol(1),i-Propanol(2), Agua(3), Acido acético(4). - - - - -	52
2.-Resultados del sistema: N-Octano(1), etilciclohexano(2), etilbenceno(3), destilación extractiva con Fenol(4). - - - - -	55
3.-Condiciones de operación del sistema de separación del isopropanol. - - - - -	60
4.-Resultados del sistema de deshidratación de isopropanol obtenidos mediante el programa de cómputo adaptado a la PC- - - -	61
5.-Resultados del sistema de purificación de isopropanol obtenidos mediante simuladores comerciales. - - - - -	63

## INDICE DE FIGURAS.

1.-Configuración de la columna de destilación. - - - - -	12
2.-Representación de una etapa arbitraria de la columna.- - - - -	12
3.-Diagrama de bloques que relaciona el programa principal con las diferentes subrutinas. - - - - -	38
4.-Esquema de resultados sistema: etanol(1), 1-propanol(2), agua(3), ácido acético(4). - - - - -	53
5.-Esquema de resultados sistema: n-octano(1), etilciclohexano(2), etilbenceno(3), dest. ext. con fenol(4) - - - - -	58
6.-Deshidratación de isopropanol con ciclohexano. Condiciones típicas de la torre de Union Carbide. - - - - -	59
7.-Esquema de resultados sistema: isopropiléter(1), acetona(2), isopropanol(3), ciclohexano(4), agua(5). - - - - -	85

## NOMENCLATURA

- A parámetro UNIQUAC.
- $A^t$  matriz de derivadas parciales de las funciones del plato  $t$  con respecto a las variables del plato  $t-1$ .
- $B^t$  matriz de derivadas parciales de las funciones del plato  $t$  con respecto a las variables en ese mismo plato.
- $B_{ij}$  coeficiente virial
- $C^t$  matriz de derivadas parciales de las funciones del plato  $t$  con respecto a las variables del plato  $t+1$ .
- E balance de energía para la función de discrepancia
- $f^o$  coeficiente de fugacidad en el estado de referencia
- F función de discrepancia
- F alimentación total (mol/hora)
- f composición de la alimentación (mol/hora)
- H entalpía fase vapor (cal/gmol)
- h entalpía fase líquido (cal/gmol)
- $H_e$  entalpía en el estado de referencia (cal/gmol)
- HF entalpía de la corriente de alimentación (cal/gmol)
- k constante de equilibrio
- L flujo total de líquido (mol/hora)
- $l$  flujo de líquido por componente (mol/hora)
- M balance de materia en función de discrepancia.
- M número de componentes
- N número de etapas
- P presión
- q parámetro UNIQUAC
- r parámetro UNIQUAC
- Q relación de equilibrio en función de discrepancia.
- Q carga térmica (cal/hora)
- S corriente lateral (mol/hora)
- T, temperatura ( $^{\circ}\text{C}$ )
- V flujo total de vapor (mol/hora)
- $v$  flujo de vapor por componente (mol/hora)
- x variable independiente.
- x fracción mol de líquido
- y fracción mol de vapor

Letras griegas.

- $\eta$  eficiencia de plato.
- $\phi$  coeficiente de fugacidad.
- $\gamma$  coeficiente de actividad.
- $\theta$  fracción molecular de superficie
- $\#$  fracción molecular de volumen
- $\tau$  parámetro UNIQUAC
- $\tau$  factor de separación

Subíndices.

- i i-ésimo componente
- j j-ésimo componente
- n n-ésima etapa
- r reboiler
- N condensador

Supraíndices.

- x exceso
- L fase líquida
- v fase vapor
- s saturación

## R E S U M E N

En este trabajo se modifica y se adapta a una computadora personal (PC), un programa de cómputo en lenguaje TURBOBASIC que está basado en el método de Naphtali<sup>2</sup> para calcular columnas de destilación. El método de Naphtali es adecuado para el cálculo de columnas complejas, como en el caso de que se tengan múltiples alimentaciones y extracciones laterales y separaciones de alto grado de dificultad como las que se presentan en destilación azeotrópica y extractiva.

El algoritmo de cómputo fue comprobado, al comparar los resultados derivados del programa con dos ejemplos reportados en la literatura y obtener diferencias mínimas en temperatura, presión, flujos máxicos y composición.

Se presentan los resultados de la destilación azeotrópica del isopropanol y se comparan con los obtenidos usando los simuladores comerciales ASPEN versión pública y HYSIM.

Se encontró que los resultados obtenidos con los dos simuladores comerciales son similares, pero diferentes a los que se presentan en la tesis doctoral de Bradley<sup>1</sup>.

La diferencia entre los resultados obtenidos en este trabajo y en los simuladores ASPEN y HYSIM con los de Bradley se debe fundamentalmente a que en la columna se debe controlar la relación de vaporización (boil up), opción que no se tomó en cuenta en este trabajo por requerir una modificación sustancial al algoritmo de cómputo original, lo cual no se encuentra entre los objetivos del trabajo presentado.

Sin embargo, se realizaron algunos cálculos tomando como variable independiente el "boil-up" y se encontraron resultados similares a los reportados por Bradley<sup>1</sup>.



Se concluye que el programa de cómputo adaptado a una computadora "PC" y reportado en éste trabajo, es adecuado para muchos problemas reales, incluyendo destilación extractiva y azeotrópica, pero está limitado en los casos que se presenten dos fases líquidas y en el que se deba fijar como variable independiente el "boil-up", o relación de vaporización.

## I INTRODUCCION

El presente trabajo tiene como objetivo obtener resultados satisfactorios en la evaluación del sistema de obtención industrial del isopropanol, mediante el uso del método de cálculo riguroso de Naphtali para columnas de destilación con sistemas multicomponentes.

Debido a que el tamaño de las torres de destilación creció, y su costo llegó a ser significativo, se hizo necesario desarrollar métodos de predicción de operación de dichas torres.

El método de Naphtali es un método completo y de fácil manejo y el sistema del cual se purifica el isopropanol es especialmente difícil, uno de los motivos por el cual se escogió.

Puesto que el isopropanol forma azeótropo con el agua, es imposible deshidratarlo completamente por destilación convencional. Por esta razón en el proceso industrial se usa la destilación azeotrópica, en donde se utiliza el ciclohexano como un agente másico para elevar la volatilidad del agua, permitiendo que por el fondo de la columna se obtenga alcohol puro.

Basados en la información obtenida de la tesis doctoral de Bradley, se plantea la solución a este problema de separación del isopropanol de entre los siguientes componentes: isopropil-éter, acetona, ciclohexano, agua e isopropanol.

## II GENERALIDADES

Existen muchos métodos para simular torres de destilación, así mismo, existen diversas técnicas para resolver las ecuaciones algebraicas no lineales que representan una torre. Los métodos más comunes para resolver todas las ecuaciones simultáneamente utilizan el método de Newton-Raphson.

Sin embargo, muchas investigaciones han logrado grandes ahorros en cuanto a tiempo por medio de un reacomodo de las ecuaciones en subconjuntos los cuales son resueltos separadamente.

De aquí surgen tres grupos genéricos en los cuales los algoritmos de destilación han sido clasificados: métodos etapa por etapa, métodos de corrección simultánea y métodos de ecuaciones "desacopladas".

Entre los algoritmos clasificados dentro de métodos etapa por etapa, el algoritmo de Lewis-Matheson es el mejor ejemplo. En este método, si se especifica la separación entre dos componentes, se pueden efectuar cálculos tanto en el fondo como en el domo de la columna y luego continuarlos hacia el centro de la torre hasta que se localiza la etapa de alimentación. Cuando no se tienen datos de composiciones del producto, entonces se suponen y los cálculos se llevan a cabo hacia el centro de la torre. Las etapas hacia el centro de la torre van adicionándose hasta que se localiza la etapa de alimentación.

En el algoritmo original de Lewis-Matheson, la etapa de alimentación es aquella donde la fracción mol de un componente

clave es la misma que la fracción mol de este componente en la corriente de alimentación.

Este algoritmo fue desarrollado mucho tiempo antes de la introducción de las computadoras, por esta razón, los autores asumieron que los cálculos se harían a mano; además no siempre la suposición de los valores para las composiciones del producto daban buenos resultados.

Como este método requiere una buena suposición de los valores para las composiciones del producto, se tuvieron problemas de convergencia y fue necesario desarrollar técnicas más accesibles.

Friday y Smith<sup>4</sup> reconocieron que agrupando las ecuaciones por tipo en vez de por etapa, cambian las propiedades de convergencia.

Tales métodos, conocidos como métodos de "desacoplamiento" de ecuaciones, tienen una más alta probabilidad y velocidad de convergencia.

Estas técnicas están diseñadas para resolver las ecuaciones MESH, (donde M=masa, E=equilibrio, S=sumatoria, H=entalpía) dado el número de etapas, localización y composición de las alimentaciones, razón de flujo de la corriente de alimentación y de las corrientes laterales, cargas de calor debidas a los platos (excepto por el rehervidor y el condensador); finalmente, se puede suponer que todas las etapas están en equilibrio o se especifica una eficiencia de plato.

Los algoritmos de corrección simultánea frecuentemente usan derivadas de los valores de  $k$  con respecto a la composición cuando se resuelven las ecuaciones MESH. Con algoritmos de ecuaciones "desacopladas", sin embargo, los valores de  $k$  son generalmente arreglados durante la solución de las ecuaciones de balance de materia, aunque son recalculados entre iteraciones.

Con mezclas altamente no ideales, los valores de  $k$  pueden variar considerablemente con la composición, y los algoritmos de ecuaciones "desacopladas" frecuentemente tienen dificultades para converger.

Aquellos métodos que resuelven todas las ecuaciones simultáneamente, es decir, sin descomponerlas en subconjuntos de ecuaciones, son conocidos como métodos de corrección simultánea.

Entre estos métodos se encuentra el algoritmo de Naphtali-Sandholm<sup>8</sup>. Estos métodos usan el método de Newton-Raphson para resolver las ecuaciones no lineales que definen la torre de destilación.

En el método de Naphtali-Sandholm<sup>8</sup>, las ecuaciones y variables son agrupadas por plato puesto que las corrientes que entran y salen del plato son funciones de las condiciones en platos adyacentes, esto causa que se forme una matriz tridiagonal.

Se han desarrollado métodos para invertir una matriz tridiagonal eficientemente, tratando de combinar velocidad de ejecución, espacio de almacenaje y acumulación de errores para obtener un resultado óptimo.

## ANTECEDENTES DE LA PURIFICACIÓN DEL ISOPROPANOL

### -Destilación azeotrópica.

Muchas veces es necesario efectuar la separación de componentes cuyos puntos de ebullición están muy cercanos unos de otros, esto hace que la destilación simple para su separación sea impráctica o imposible.

Compuestos de estructura química similar (miembros de series homólogas) no pueden hervir a la misma temperatura puesto que

difieren en peso molecular. Los compuestos que hierven a la misma temperatura, por lo tanto, deben pertenecer a una serie diferente que los haga distintos en algún aspecto de su estructura molecular.

Las diferencias moleculares causarán que cada uno de los componentes con punto de ebullición muy cercano, reaccionen de diferente forma cuando el entorno de la fase líquida sea cambiado por la adición de un nuevo componente comúnmente llamado solvente o "agente másico". Este nuevo componente debe mejorar la volatilidad de uno de los componentes clave más que la del otro.

Un azeótropo es una mezcla líquida la cual exhibe un punto de ebullición máximo o mínimo, según sean sus desviaciones a la ley de Raoult. La ocurrencia de un máximo o de un mínimo sobre la superficie de temperatura .vs. composición es causada por desviaciones positivas o negativas a dicha ley.

Sin embargo, la desviación de la ley de Raoult no es por sí misma suficiente para causar la ocurrencia de un azeótropo. Los puntos de ebullición de los componentes puros deben ser lo suficientemente cercanos para permitir que ocurran un máximo o un mínimo.

Componentes con puntos de ebullición cercanos y pequeñas desviaciones pueden producir un azeótropo, mientras que otros componentes los cuales forman mezclas altamente no ideales no pueden exhibir un azeótropo porque la diferencia de los puntos de ebullición de los componentes puros es muy amplia.

Rara vez ocurren azeótropos entre componentes cuyos puntos de ebullición difieren por más de 20 a 30°C.

Un azeótropo es denominado homogéneo si solamente una fase líquida está presente en la mezcla azeotrópica. Si dos fases

líquidas están presentes, el azeótropo es heterogéneo.

La elección del solvente es importante. La sustancia agregada debe formar un azeótropo lo suficientemente volátil para que se pueda separar con facilidad el componente de la mezcla.

Un solvente satisfactorio debe tener, en la medida de lo posible las siguientes características:

-bajo costo y fácil obtención.

-químicamente estable e inactivo frente a la solución que se va a separar.

-no corrosivo frente a los materiales comunes de construcción.

-no tóxico.

-de bajo calor latente de evaporación

-de bajo punto de congelamiento, para facilitar el almacenamiento y el manejo en exteriores.

-de baja viscosidad para que proporcione eficiencia elevada de los platos.

Puesto que el isopropanol forma azeótropo con el agua (a  $80.37^{\circ}\text{C}.$ ), es imposible deshidratarlo completamente por destilación convencional. Por esta razón, en el proceso industrial se usa la destilación azeotrópica, en donde el ciclohexano es un agente másico para elevar la volatilidad del agua, permitiendo que por el fondo de la columna se obtenga alcohol puro.

El isopropanol, también denominado 2-propanol o alcohol isopropílico, se obtiene a escala industrial de distintas maneras; a partir del propeno de los gases de craqueo, o bien, por reducción de la acetona, la tercera forma de obtención de dicho alcohol es haciendo pasar el propileno obtenido en las refinerías de petróleo sobre ácido sulfúrico e hidrolizando el sulfato de isopropilo que resulta.

Al obtener el isopropanol de la reducción de la acetona, resulta el alcohol enmedio de una mezcla que contiene pequeñas

trazas de acetona y de un subproducto de la reacción; el isopropiléter.

El proceso que permite que esta reacción sea de buenos rendimientos es información a la cual no se tiene acceso. Basados en la información obtenida de la tesis doctoral de Bradley<sup>1</sup>, se plantea la solución al problema de deshidratación del isopropanol de una mezcla que contiene al alcohol, el ciclohexano, como agente másico, agua, e impurezas en proporción relativamente insignificante como son el isopropiléter y la acetona.

El isopropanol tiene aplicaciones como disolvente, como agente de extracción y anticongelante, también para la elaboración de preparados farmacéuticos. Como antiséptico es mucho más eficiente que el alcohol etílico, se utiliza en una concentración del 30 al 50% , mientras que el alcohol etílico se necesita en una concentración del 70%.



### III METODO DE NAPHTALI

De entre los múltiples métodos existentes para la simulación de columnas de destilación en forma rigurosa, la técnica desarrollada por Naphtali-Sandholm<sup>2</sup> fue escogida para resolver el problema de obtención de isopropanol porque tiene las siguientes ventajas:

- Es posible tratar con sistemas no ideales e introducir eficiencias de platos de Murphree que son tomadas en cuenta de forma rigurosa, sin causar problema alguno.

- El método es flexible; los mismos algoritmos pueden ser usados para destilación, extracción y absorción; pueden especificarse cualquier número de alimentaciones y de corrientes laterales.

- Pueden ser usadas como especificaciones la temperatura, composición o flujo del componente clave, razón de reflujo, recuperación o cualquier otra función del condensador o rehervidor.

- El método converge rápidamente y ha sido probado en cierto número de problemas escogidos por exhibir algunas características que hacen que otras técnicas de solución fallen. La mayoría de los problemas son resueltos con diez iteraciones o menos.<sup>3</sup>

- El método es fácil de manejar presentado en un programa de cómputo al que en un momento dado pueden adicionársele otras subrutinas para tener diversos modelos termodinámicos.

En el método de Naphtali, las ecuaciones de balance de masa y energía y las de equilibrio de fases son obtenidas para cada componente y para cada plato.

El resultado de este conjunto de ecuaciones tiene una estructura tridiagonal, la cual permite la solución rápida usando el método de Newton-Raphson.

Con éste método pueden considerarse también cualquier número

de etapas y componentes, así como cualquier número de alimentaciones y corrientes laterales; la única limitante es la capacidad del sistema de cómputo usado.

En las figuras 1 y 2 se muestran respectivamente la configuración de una columna de destilación y la de un plato (cualquiera), el cual incluye la posibilidad de alimentación y corriente lateral.

En lo siguiente,  $M$  será el número total de componentes y  $N$  el número total de etapas, incluyendo el rehedidor ( $n = 1$ ), y el condensador ( $n = N$ ).

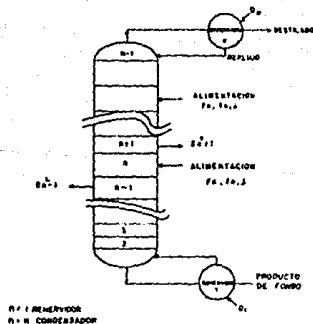


FIGURA 1 - CONFIGURACION DE LA COLUMNA DE DESTILACION

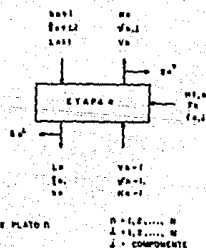


FIGURA 2 - REPRESENTACION DE UNA ETAPA ARBITRARIA DE LA COLUMNA.

- OBTENCIÓN DE RELACIONES GENERALES Y BALANCES DE ENERGÍA.  
ECUACIONES MESH.

Las relaciones que deben establecerse en la columna, conocidas como ecuaciones MESH (M=masa, E=equilibrio, S=sumatoria y H=entalpía) forman las llamadas funciones de discrepancia.

Para el plato arbitrario n, de acuerdo a la figura, pueden establecerse las siguientes funciones independientes (funciones de discrepancia)  $F^k(n, i)$ , donde k es el número de la función de discrepancia, n corresponde a la etapa e i a los componentes.

-Balance de masa por componente (k=1), (total: n x m relaciones), n etapas, m componentes.

$$F_1(n, i) = (1 + S_n^L/L^n)l_{n,i} + (1 + S_n^V/V^n)u_{n,i} - u_{n-1,i} - l_{n+1,i} - f_{n,i} = 0. \quad (3.1)$$

$$F_1(N, i) = (1 + S_N^L/L^N)l_{N,i} + (1 + S_N^V/V^N)u_{N,i} - u_{N-1,i} - f_{N,i} = 0.0 \quad (3.2)$$

donde  $V_N$  es el destilado y  $L_N$  los productos de fondo.

-Balance de energía (k=2)  
(total n relaciones).

$$F_2(n) = (1 + S_n^L/L^n)h_n + (1 + S_n^V/V^n)H_n - H_{n-1} - h_{n+1} - H_{f,n} = 0.0 \quad (3.3)$$

$$Q_1 = (1 + S_1^L/L_1)h_1 + (1 + S_1^V/V_1)H_1 - h_2 - H_{f,1}. \quad (3.4)$$

$$-Q_N = (1 + S_N^L/L_N)h_N + (1 + S_N^V/V_N)H_N - H_{N-1} - H_{f,N}. \quad (3.5)$$

Las ecuaciones (3.4) y (3.5) pudieran usarse para generar  $F_2(1)$  y  $F_2(N)$ , si el calor removido del condensador,  $Q_N$ , y el calor añadido al rehervidor,  $Q_1$ , fueran variables especificadas.

Sin embargo, para éste caso, cuando la razón de reflujo, R y

el flujo de destilado  $V_n$ , son las variables especificadas, las ecuaciones (3.4) y (3.5) calculan el calor del rehedidor y condensador respectivamente.

Las siguientes funciones de discrepancia se establecen para reemplazar a (3.4) y (3.5).

$$F_2(1) = \sum_{i=1}^M L_{1,i} - L_1 = 0 \quad i = 1, 2, \dots, M. \quad (3.8)$$

donde:

$$L_1 = \sum_{n=1}^N \sum_{i=1}^M f_{n,i} = V_n - \sum_{i=1}^M (S_n^L + S_n^V); \quad n = 1, 2, \dots, N. \quad (3.7)$$

$$i = 1, 2, \dots, M.$$

La ecuación (3.7) viene siendo el balance de líquido de la columna.

$$F_2(N) = \sum_{i=1}^M L_{N,i} - L_N = 0. \quad (3.8)$$

donde  $L_N = R_1 \times V_n$ .

Esto muestra como las ecuaciones (3.4) y (3.5) pueden modificarse por algunas otras especificaciones de la columna<sup>2</sup>, tales como temperaturas de destilado y productos de fondo, razones del componente clave, etc.

-CONDICIONES DE EQUILIBRIO CON EFICIENCIA DE PLATOS DE MURPHREE. (total  $n \times m$  relaciones).

La eficiencia de platos de Murphree está definida por:

$$\eta_{n,i} = y_{n,i} - y_{n-1,i} / (k_{n,i} x_{n,i} - y_{n-1,i}). \quad (3.9)$$

$$\text{donde } k_{n,i} = (y_i^s / x_i^s) / (\phi_i^s)_{n,i}. \quad (3.10).$$

Las ecuaciones (3.9) y (3.10) pueden reorganizarse para dar las siguientes funciones de discrepancia ( $k=3$ ).

$$F_3(n,i) = \eta_{n,i} k_{n,i} V_{n,i} / L_{n,i} - v_{n,i} + (1 - \eta_{n,i}) v_{n-1,i} V_n / V_{n-1} = 0. \quad (3.11).$$

Para el rehervidor, la eficiencia es 1, esto es  $\eta_{n,i} = 1$  para todos los compuestos " i ".

Las ecuaciones  $F^k(n,i)$ , comprenden un vector de funciones de discrepancia.

$$F(x) = \begin{Bmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \end{Bmatrix} = 0$$

el cual contiene  $N(2M+1)$  elementos y se resuelve para las variables independientes.

$$x = \begin{Bmatrix} l \\ v \\ T \end{Bmatrix} = 0$$

donde el vector l contiene todos los elementos  $l_{n,i}$ , v contiene todos los elementos  $v_{n,i}$ , y T todos los elementos  $T_n$ .

Una vez conocidos todos los valores de  $l_{n,i}$ ,  $v_{n,i}$  y  $T_n$ , las composiciones del producto, los perfiles de composición y temperatura en la columna pueden conocerse.

Sin embargo, si se asume:

$$\eta_{n,i} = 1, \phi_{n,i} = 1 \text{ y } h_n^k = 0 \text{ para toda } n \text{ y para toda } i, \text{ y} \\ \Delta H^k_{\text{Vap.}} = \Delta H^k_{\text{Vap.}} = \dots = \Delta H^k_{\text{Vap.}}$$

entonces  $V_n$  y  $L_n$  vienen a ser constantes en cada sección de la columna.

Las ecuaciones (3.1) y (3.11) se combinan como sigue:

$$F^k(n,i) = [ (1 + S_n^L/L_n) + \tau_{n,i}(1 + S_n^V/V_n) ] \quad l_{n,i} - \tau_{n-1,i} \quad , i \\ l_{n-1,i} - l_{n,i}, i - f_{n,i} = 0. \quad (3.12)$$

$$\tau_{n,i} = V_n \gamma_{n,i} P_{n,i}^S / P L_n. \quad (3.13)$$

donde  $P_{n,i}^s$  es la presión de vapor del componente puro  $i$  en la etapa  $n$ .

Y se obtiene otro conjunto de relaciones independientes debidas a los balances de masa en cada etapa.

$$F_3(n) = L_n - l_{n,1} - l_{n,2} - \dots - l_{n,M} = 0. \quad (3.14)$$

Las ecuaciones (3.12) y (3.14) comprenden  $N ( M + 1 )$  relaciones.

$$F(x) = \begin{Bmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \end{Bmatrix} = 0.$$

conteniendo igualmente variables independientes:

$$x = \begin{Bmatrix} 1 \\ T \end{Bmatrix}$$

La suposición de igualdad de calores de vaporización y la de entalpías de exceso iguales a cero, es equivalente a la suposición de "flujo molar constante".

Las ecuaciones  $F(x) = \begin{Bmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \end{Bmatrix} = 0$ , así como:

$F(x) = \begin{Bmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \end{Bmatrix} = 0$ , según sea el caso, son resueltas por

el método de Newton-Raphson, utilizando convergencia simultánea de todas las variables independientes,  $\{x\}$ . Se ha encontrado que la

convergencia simultánea es más eficiente que la convergencia secuencial cuando las volatilidades de los componentes dependen de la temperatura y composición al mismo tiempo.<sup>4</sup>

$$\text{Si } x^i = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \text{ y } F^i = \begin{bmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \\ \vdots \\ F_n \end{bmatrix} \quad (3.15)$$

donde  $x^i$  es el vector de variables en el plato  $i$  y  $F^i$  es el vector de funciones de dicho plato, entonces se tiene:

$$x^i = \begin{bmatrix} V_{i,1} \\ V_{i,2} \\ V_{i,3} \\ \vdots \\ V_{i,M} \\ T_i \\ L_{i,1} \\ L_{i,2} \\ L_{i,3} \\ \vdots \\ L_{i,M} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{i,1} \\ x_{i,2} \\ x_{i,3} \\ \vdots \\ x_{i,M} \\ x_{i,M+1} \\ x_{i,M+2} \\ \vdots \\ x_{i,2M+1} \end{bmatrix} \text{ y } F^i = \begin{bmatrix} E_i \\ M_{i,1} \\ M_{i,2} \\ \vdots \\ M_{i,M} \\ Q_{i,1} \\ Q_{i,2} \\ \vdots \\ Q_{i,M} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_{i,1} \\ F_{i,2} \\ \vdots \\ F_{i,M+1} \\ F_{i,M+2} \\ \vdots \\ F_{i,2M+1} \end{bmatrix} \quad (3.16)$$

usando esta notación, el método de Newton-Raphson queda de la siguiente manera:

$$\Delta x^{m+1} = - (\partial F / \partial x)^{-1} F_m, \quad (3.17) \text{ y,}$$

$$x_{m+1} = x_m + \Delta x_{m+1}, \quad (3.18).$$

donde  $\Delta x_{m+1}$  es la corrección calculada, la cual se suma a  $x_m$

para obtener los nuevos valores de las variables  $x_{m+1}$ . Si las funciones  $F_m$  fueran lineales, esta corrección podría hacer que los valores de cada una de las funciones fuese cero. Puesto que las funciones  $F_m$  no son lineales,  $\Delta x_{m+1}$  es sólo una aproximación al valor necesario.

$(\partial F / \partial x)$  es la matriz de las derivadas parciales de todas las funciones con respecto a todas las variables  $x_m$ , se evalúa con cada nuevo valor de  $x_m$ .

Entonces:

$$(\partial F / \partial x) = \begin{bmatrix} (\partial F_1 / \partial x_1) & (\partial F_1 / \partial x_2) & \dots & (\partial F_1 / \partial x_n) \\ (\partial F_2 / \partial x_1) & (\partial F_2 / \partial x_2) & \dots & (\partial F_2 / \partial x_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (\partial F_n / \partial x_1) & (\partial F_n / \partial x_2) & \dots & (\partial F_n / \partial x_n) \end{bmatrix} \quad (3.19)$$

donde:

$$(\partial f_i / \partial x_j) = \begin{bmatrix} \partial F_{i1} / \partial x_{j,1} & \partial F_{i1} / \partial x_{j,2} & \dots & \partial F_{i1} / \partial x_{j,2c+1} \\ \partial F_{i2} / \partial x_{j,1} & \dots & \dots & \partial F_{i2} / \partial x_{j,2c+1} \\ \vdots & & & \vdots \\ \partial F_{i,2c+1} / \partial x_{j,1} & \dots & \dots & \partial F_{i,2c+1} / \partial x_{j,2c+1} \end{bmatrix} \quad (3.20)$$

Las ecuaciones de balances de materia, de balances de energía y las relaciones de equilibrio involucran solamente las variables en los platos  $i - 1$ ,  $i$  e  $i + 1$ . De este modo, las derivadas parciales de las funciones en este plato con respecto a las variables en todos los otros platos que no sean esos tres, son cero. Siendo así, se ve que la ecuación (3.19) puede representarse como sigue:



$$(\partial F / \partial x) = \begin{bmatrix} B_1 & C_1 & 0 & 0 & \dots & \dots & & 0 \\ A_2 & B_2 & C_2 & 0 & \dots & \dots & & 0 \\ 0 & A_3 & B_3 & C_3 & 0 & \dots & & 0 \\ \vdots & & & & & & & \\ \dots & & 0 & A_{n-2} & B_{n-2} & C_{n-2} & \dots & 0 \\ & & & 0 & 0 & A_{n-1} & B_{n-1} & C_{n-1} \\ 0 & 0 \dots 0 & 0 & 0 & A_n & B_n & & \end{bmatrix} \quad (3.21)$$

donde :

$$A_i = (\partial F_i / \partial x_{i-1}), \quad B_i = (\partial F_i / \partial x_i) \quad \text{y} \quad C_i = (\partial F_i / \partial x_{i+1}).$$

$A_i$ ,  $B_i$  y  $C_i$  , se obtienen de la siguiente manera:

- Matriz  $A_i$

Esta es la matriz de las derivadas parciales de las funciones del plato  $i$  con respecto a las variables del plato  $i-1$ .

1.-Balance de entalpia =  $F_{i,1}$

$$\partial F_{i,1} / \partial v_{i-1,j} = \partial F_{i,1} / \partial x_{i-1,j} = 0 \quad j=1,2,\dots,M \quad (A.1.1)$$

$$\partial F_{i,1} / \partial T_{i-1} = \partial F_{i,1} / \partial x_{i-1,M+1} = \partial h_{i-1} / \partial T_{i-1}. \quad (A.1.2)$$

$$\partial F_{i,1} / \partial L_{i-1,j} = \partial F_{i,1} / \partial x_{i-1,M+j+1} = \partial h_{i-1} / \partial L_{i-1,j}. \quad (A.1.3)$$

2.-Balance de materia =  $F_{i,j+1}$

$$j = 1,2,\dots,M$$

$$\partial F_{i,j+1} / \partial v_{i-1,k} = 0 \quad k = 1,2,\dots,M \quad (A.2.1)$$

$$\partial F_{i,j+1} / \partial T_{i-1} = 0 \quad (A.2.2)$$

$$\partial F_{i,j+1} / \partial L_{i-1,k} = -\delta_{jk} \quad (A.2.3)$$

$$\text{donde } \delta_{jk} = 1 \text{ si } j = k$$

$$0 \text{ si } j \neq k$$

3.-Relaciones de equilibrio =  $F_{i,M+1+j}$ .

$$j = 1,2,\dots,M$$

$$\partial F_{i,M+1+j} / \partial v_{i-1,k} = \partial F_{i,M+1+j} / \partial T_{i-1} = \partial F_{i,M+1+j} / \partial L_{i-1,k} = 0 \quad (A.3.1)$$

$$k = 1,2,\dots,M.$$

La estructura de la matriz  $A_i$  es como sigue:

$$A_i = \begin{bmatrix} 0 & X & X \\ 0 & 0 & -I \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{A.4.1})$$

0 representa una submatriz con valor cero.

X representa una submatriz con valores diferentes de cero.

I representa una submatriz la cual es la matriz identidad del tamaño adecuado

- Matriz B<sub>i</sub>.

Esta es la matriz de las derivadas parciales de las funciones del plato i con respecto a las variables en ese plato.

1.-Balance de entalpía = F<sub>i,1</sub>.

$$\partial F_{i,1} / \partial v_{i,j} = (1 + S_i^V) \partial H_i / \partial v_{i,j}; \quad j = 1, 2, \dots, M, \quad (\text{B.1.1})$$

$$\partial F_{i,1} / \partial T_i = (1 + S_i^V) \partial H_i / \partial T_i + (1 + S_i^L) \partial h_i / \partial T_i \quad (\text{B.1.2})$$

$$\partial F_{i,1} / \partial L_{i,j} = (1 + S_i^L) \partial h_i / \partial L_{i,j} \quad (\text{B.1.3})$$

j = 1, 2, \dots, M.

2.-Balance de materia = F<sub>i,j+1</sub>

$$j = 1, 2, \dots, M$$

$$k = 1, 2, \dots, M$$

$$\partial F_{i,j+1} / \partial v_{i,k} = (1 + S_i^V) \delta_{jk} \quad (\text{B.2.1})$$

$$\partial F_{i,j+1} / \partial T_i = 0 \quad (\text{B.2.2})$$

$$\partial F_{i,j+1} / \partial L_{i,k} = (1 + S_i^L) \delta_{jk} \quad (\text{B.2.3})$$

3.-Relaciones de equilibrio = F<sub>i,M+1+j</sub>

$$j = 1, 2, \dots, M$$

$$\delta_{j,k} + (1 - \eta_i) v_{i+1,j} / v_{i+1,k} = \eta_i L_{i,j} / L_{i,k} (k_{i,j} + v_i ( \partial k_{i,j} / \partial v_{i,k} )) \quad (\text{B.3.1})$$

donde:

$$(B.3.2) \quad \left( \frac{\partial k_{i,j}}{\partial v_{i,k}} \right) = \sum_{p=1}^M \left( \frac{\partial k_{i,j}}{\partial v_{i,p}} \right) \left( \frac{\partial v_{i,p}}{\partial v_{i,k}} \right)$$

$$y \quad \frac{\partial F_{i,c+s+j}}{\partial T_i} = \eta_i L_{i,j} V_i / L_i \left( \frac{\partial k_{i,j}}{\partial T_i} \right) \quad (B.3.3)$$

$$\frac{\partial F_{i,M+s+j}}{\partial L_{i,k}} = \eta_i V_i / L_i \left( \frac{\partial k_{i,j}}{\partial L_{i,k}} \right) + L_{i,j} \left( \frac{\partial k_{i,j}}{\partial L_{i,p}} - L_{i,p} / L_i \frac{\partial k_{i,j}}{\partial L_{i,p}} \right) \quad (B.3.4)$$

donde:

$$\frac{\partial k_{i,j}}{\partial L_{i,k}} = \sum_{p=1}^M \left( \frac{\partial k_{i,j}}{\partial x_{i,p}} \right) \left( \frac{\partial x_{i,p}}{\partial L_{i,k}} \right) \quad (B.3.5)$$

$$y \quad \frac{\partial x_{i,p}}{\partial L_{i,k}} = 1 / L_i \left( \delta_{k,p} - L_{i,p} / L_i \right) \quad (B.3.6)$$

La matriz  $B_i$  tiene la siguiente estructura:

$$B_i = \begin{bmatrix} X & X & X \\ (1 + S_i^V) I & 0 & (1 + S_i^L) I \\ X & X & X \end{bmatrix} \quad (B.4.1)$$

-Matriz  $C_i$

Esta es la matriz de las derivadas parciales de las funciones del plato  $i$  con respecto a las variables en el plato  $i + 1$ .

1.-Balance de entalpía =  $F_{i,A}$

$$\frac{\partial F_{i,A}}{\partial v_{i+1,j}} = \frac{\partial H_{i+1}}{\partial v_{i+1,j}} ; j = 1, 2, \dots, M. \quad (C.1.1)$$

$$\frac{\partial F_{i,A}}{\partial T_{i+1}} = - \frac{\partial H_{i+1}}{\partial T_{i+1}} \quad (C.1.2)$$

$$\frac{\partial F_{i,A}}{\partial L_{i+1,j}} = 0 \quad (C.1.3)$$

2.-Balance de materia =  $F_{i,j+1}$

$$j = 1, 2, \dots, M.$$

$$k = 1, 2, \dots, M$$

$$\frac{\partial F_{i,j+1}}{\partial v_{i+1,k}} = - \delta_{j,k}. \quad (C.2.1)$$

$$\frac{\partial F_{i,j+1}}{\partial T_{i+1}} = 0. \quad (C.2.2)$$

$$\frac{\partial F_{i,j+1}}{\partial L_{i+1,k}} = 0 \quad (C.2.3)$$

3.-Relaciones de equilibrio =  $F_{i,M+1,j}$ .

$j=1,2,\dots,M$ .

$$\frac{\partial F_{i,M+1,j}}{\partial v_{i+1,k}} = C_{ij} - \eta(DV_i/V_{i+1})C_{ij} - V_{i+1,j}/V_{i+1} \quad (C.3.1)$$

$k=1,2,\dots,M$

$$\frac{\partial F_{i,M+1,j}}{\partial T_{i+1}} = 0 \quad (C.3.2)$$

$$\frac{\partial F_{i,M+1,j}}{\partial L_{i+1,k}} = 0 \quad (C.3.3)$$

La matriz  $C_{ij}$  queda como sigue:

$$C_{ij} = \begin{bmatrix} X & X & 0 \\ -I & 0 & 0 \\ X & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (C.4.1)$$

El bloque  $(\partial F/\partial x)$ , conformado por la ecuación (3.21) es llamado un bloque tridiagonal, y su estructura simplifica notablemente la solución. La solución de este bloque puede realizarse completamente por medio de una eliminación Gaussiana.

La medida de convergencia usada es la suma de los cuadrados de las funciones de discrepancia. Este valor fue escogido por dos razones: (1) es una medida cuantitativa de la bondad de la solución, y (2) el método de Newton-Raphson producirá un conjunto de correcciones  $\Delta x$  cuyo valor hará que decrezca la suma de los cuadrados de las funciones.

Una vez que se encuentra el conjunto de valores de las variables independientes  $x$ , donde:

$$x = \begin{Bmatrix} 1 \\ v \\ T \end{Bmatrix} \quad \text{ó} \quad x = \begin{Bmatrix} 1 \\ T \end{Bmatrix}$$

para el caso que así lo requiera, el conjunto de funciones de discrepancia:

$$F(x) = \begin{Bmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \end{Bmatrix} \quad \text{ó} \quad F(x) = \begin{Bmatrix} F_4 \\ F_5 \end{Bmatrix}$$

será igual a cero.

### III . 1 ALGORITMO DE CALCULO.

El procedimiento de cálculo para la columna requiere de las siguientes especificaciones<sup>2.d</sup>.

- 1.- El número de etapas
- 2.- Eficiencia de las etapas
- 3.- Localización de las corrientes de alimentación y de las corrientes laterales.
- 4.- Composición de alimentaciones, relaciones de flujo y estados térmicos para las corrientes de alimentación.
- 5.- Presión de operación de la columna, la cual se puede considerar constante a lo largo de ésta.
- 6.- Condiciones de fase de las corrientes laterales y relaciones de flujo.
- 7.- Razón de reflujo.
- 8.- Flujo de destilado.

Así como datos de los componentes puros y datos termodinámicos de la mezcla.

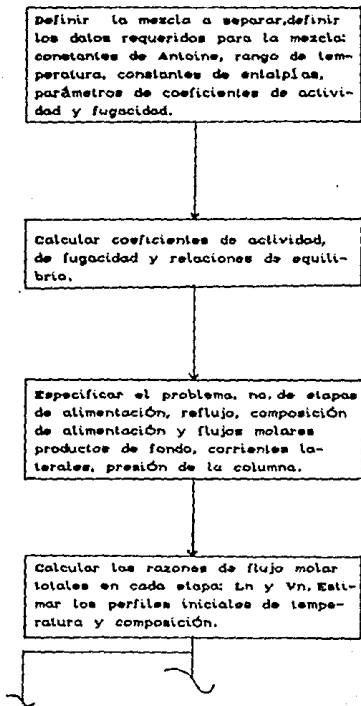
Una vez establecidos todos los datos requeridos se siguen los siguientes pasos:

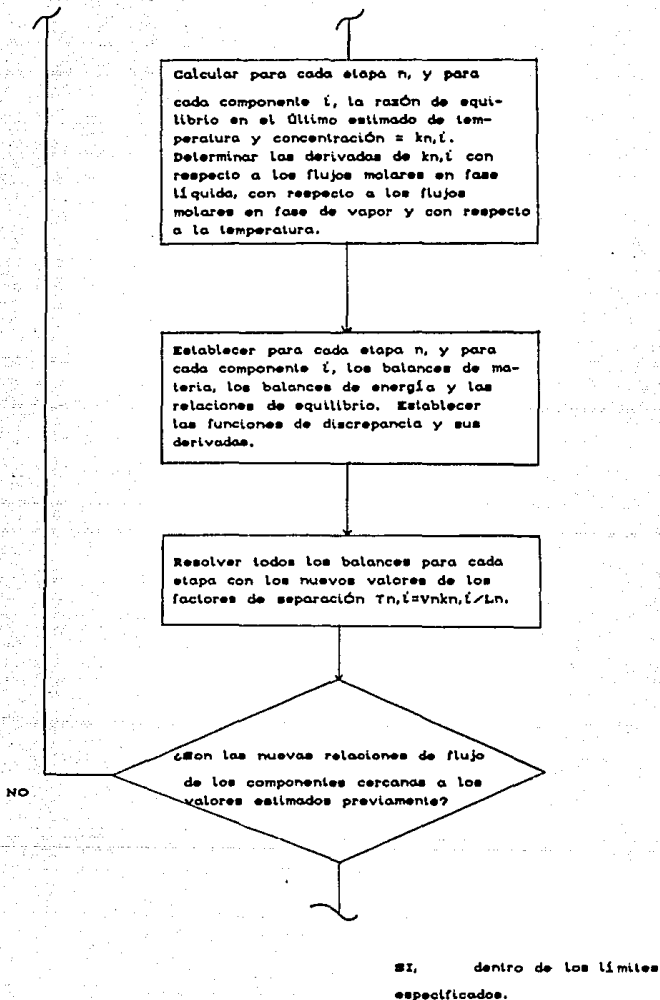
- 1.- Suposición inicial de perfiles de temperatura y de flujos para vapor y para líquido.
- 2.- Determinación de todos los factores de separación  $k$ , entalpías de las corrientes y sus derivadas con respecto a la temperatura y composición.
- 3.- Establecer el conjunto de ecuaciones de las funciones de discrepancia.
- 4.- Determinar los elementos de la matriz jacobiana ( $\partial F/\partial x$ ) ecuación (3.19) y resolver el sistema de bloque tridiagonal de ecuaciones.
- 5.- Determinar las correcciones a los perfiles de temperatura y los flujos de componentes de vapor y líquido. Obtener el nuevo valor de los perfiles.
- 6.- Verificar si las correcciones son más pequeñas que cierto valor especificado. Si esto se cumple, se regresa al paso 2 con

los valores de los nuevos perfiles; si el paso 6 se cumple, se sigue al paso 7.

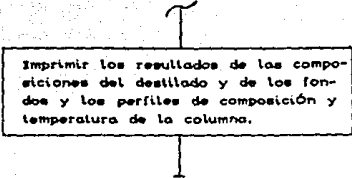
7.- Imprimir los datos de salida finales y parar.

El procedimiento para el cálculo de la columna se muestra en el siguiente diagrama:









Imprimir los resultados de las composiciones del destilado y de los fondos y los perfiles de composición y temperatura de la columna.

#### IV. MODELOS TERMODINÁMICOS

En el programa de cómputo basado en el método de Naphtali se escogieron un modelo de solución y una ecuación de estado para calcular los coeficientes de actividad y de fugacidad respectivamente, el modelo de solución escogido es el modelo UNIQUAC y la ecuación de estado es la ecuación virial.

A continuación se da una breve explicación tanto del modelo UNIQUAC como de la ecuación virial.

##### IV.1 EL MODELO UNIQUAC

El concepto de composiciones locales fue adoptado por Abrams y Prausnitz (1975) en el desarrollo semiteórico de esta ecuación. Su modelo estipulaba que la energía de Gibbs de exceso está dividido en dos partes:

1.- Una contribución debida a diferencias en tamaño y forma de las moléculas. (Parte configuracional o combinatoria)

2.- Una contribución debida a interacciones energéticas entre ellas. (Parte residual)

En el modelo UNIQUAC, la expresión para el coeficiente de actividad contiene las dos contribuciones; y se expresa de la siguiente manera:

$$\ln \gamma_k = \underbrace{\ln \gamma_k^c}_{\text{combinatorial}} + \underbrace{\ln \gamma_k^r}_{\text{residual}} \quad (4.1.1)$$

La contribución combinatorial está dada por:

$$\ln \gamma_k^c = \ln \frac{\Phi_k}{x_k} + \frac{z}{2} \left( q_k \ln \frac{\theta_k}{\Phi_k} \right) + l_k - \frac{\Phi_k}{x_k} \quad (4.1.2)$$

$\sum x_i l_i$

$$l_k = z / 2 \left( r_k - \frac{q_k}{r_k} \right) - (r_k - 1) ; z = 10 \quad (4.1.3)$$

$$\theta_k = q_k x_k / \sum q_i x_i \quad (4.1.4)$$

y

$$\Phi_k = r_k x_k / \sum r_i x_i \quad (4.1.5)$$

la ecuación (4.1.4) representa la fracción molecular de superficie

y la ecuación (4.1.5) representa la fracción molecular de volumen, para ambas  $j = 1, 2, \dots, M$

Las constantes del componente puro,  $r_k$  y  $q_k$ , son, respectivamente medidas del volumen molecular de Van der Waals y superficie molecular.

Son obtenidas de volúmenes de grupo de Van der Waals y superficies moleculares dadas por Bondi.

La contribución residual está dada por:

$$\ln \gamma_k^R = q_k \left[ 1 - \ln \left( \sum_j \theta_j \tau_{jk} \right) - \sum_j \left( \theta_j \tau_{kj} / \sum_i \theta_i \tau_{ij} \right) \right]$$

donde  $i$  y  $j = 1, 2, \dots, M$  (4.1.6).

$$\tau_{jk} = \exp \left[ - u_{jk} - u_{jk} / RT \right] \quad (4.1.7)$$

$$u_{jk} = u_{kj} ; \tau_{jk} \neq \tau_{kj}$$

En los cálculos de coeficientes de actividad utilizados en el algoritmo de destilación, el parámetro dependiente de la temperatura  $\tau_{jk}$  es linealizado como sigue:

$$\tau_{jk} = A_{jk}(0) + A_{jk}(1) T \quad (4.1.8)$$

Los parámetros ( $u_{jk} - u_{kj}$ ) pueden obtenerse de datos binarios.

Para cada posible par binario en la solución, se necesitan dos parámetros. La ecuación UNIQUAC puede ser usada para representar los equilibrios líquido-vapor y líquido-líquido.

UNIQUAC, NRTL y Wilson tienen en común que:

1.- Se puede predecir el equilibrio líquido-vapor multicomponente usando información experimental sobre sistemas binarios solamente.

2.- Permiten la extrapolación con respecto a temperatura, por lo menos dentro de un rango limitado.

3.- Su uso depende de la disponibilidad de parámetros binarios calculados de datos experimentales de equilibrio de fases, o por medio de algún método predictivo para todas las posibles combinaciones binarias en una mezcla multicomponente.

#### IV . 2 LA ECUACION VIRIAL

El coeficiente de fugacidad puede ser calculado por medio de la ecuación:

$$\ln \phi_i = 1/RT \int_0^P (\bar{V}_i - RT/P) dP. \quad (4.2.1)$$

P y T son la presión y la temperatura para el sistema, R es la constante universal de los gases, y  $\bar{V}_i$  es el volumen parcial molar del componente i en la mezcla.

El problema de encontrar  $\phi_i$  se transfiere ahora al problema de encontrar  $\bar{V}_i$  de una ecuación de estado.

Una ecuación tal como la virial, la cual da el factor de compresibilidad de la mezcla, z, como una función de composición, temperatura, y de presión o volumen.

A bajas presiones, la ecuación virial explícita en volumen puede truncarse después del segundo término.

$$z = PV / RT = 1 + BP/RT \quad (4.2.2)$$

V es el volumen molar de la mezcla y B es el segundo coeficiente virial tomando en cuenta para la interacción de dos moléculas.

En una mezcla con M componentes tenemos:

$$B = \sum_i \sum_j y_i y_j B_{ij} \quad i \text{ y } j = 1, 2, \dots, M \quad (4.2.3)$$

Los  $B_{ij}$ 's representan interacciones entre moléculas i y j. Si  $i = j$  se tiene el coeficiente virial  $B_{ii}$  que corresponde al de un componente puro.

La integración de la ecuación (4.2.1), usando la ecuación virial (4.2.2) y (4.2.3) da como resultado:

$$\ln \phi_i = P/RT (2 \sum_j y_j B_{ij} - B) \quad j = 1, 2, \dots, M \quad (4.2.4).$$

Existen diferentes expresiones para  $\phi^i$  basadas en la ecuación virial comprendiendo solo interacciones binarias.

$$\ln \phi^i = 2/V \sum_j y_j B_{ij} - \ln z ; j = 1, 2, \dots, M \quad (4.2.5)$$

Esta expresión es derivada de la ecuación virial explícita en presión

$$z = 1 + B/V \quad (4.2.8)$$

Para bajas presiones no existe mucha diferencia entre los valores de  $\phi^i$  calculados de (4.2.4) y (4.2.5).

#### - Segundos coeficientes viriales.

Rara vez es posible encontrar en la literatura los valores experimentales deseados para los coeficientes viriales.

Así pues, es necesario predecirlos de datos disponibles.

En este trabajo se usó el método desarrollado por Hayden y O'Connell<sup>o</sup>.

Este método está basado en la suposición de que las diversas clases de fuerzas intermoleculares contribuyen al segundo coeficiente virial en distintas maneras. El coeficiente virial total puede ser tomado de éste modo como la suma de varias contribuciones.

$$B_{\text{total}} = B_{\text{libre}} + B_{\text{metaestable}} + B_{\text{enlace}} + B_{\text{química}} \quad (4.2.7)$$

$B_{\text{libre}}$  representa los volúmenes moleculares, la contribución  $B_{\text{metaestable}} + B_{\text{enlace}}$  resulta de la energía potencial de pares de enlaces más o menos fuertes de las moléculas, y  $B_{\text{química}}$  resulta de la asociación de sustancias.

La asociación puede ser tan fuerte que los pares moleculares asemejen nuevos constituyentes en la mezcla, y esto forma la base de la teoría química.

Basados en el método usado de Hayden y O'Connell<sup>o</sup>, se tienen

que conocer algunos parámetros básicos para cada componente.

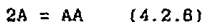
PC y TC. Las presiones y temperaturas críticas de cada uno de los componentes.

RD. El radio medio de giro  $A^0$ , DMU. momentos dipolo Deby. ETA. parámetros de asociación y solvatación. Estos son los parámetros más difíciles de encontrar, puesto que deben estimarse empíricamente.

#### -Coeficiente de fugacidad de la teoría química.

Para mezclas conteniendo ácidos carboxílicos los cuales tienen muy fuertes efectos de asociación, se aplica la llamada teoría química. Esta teoría postula que uno o más de los componentes en una mezcla, están asociados tan fuertemente que la asociación puede ser comparada a una reacción química, y que tal reacción esté en equilibrio.

Para un componente asociado A en una mezcla multicomponente, se puede escribir:



con la relación de equilibrio:

$$k = Z_{AA} / Z_A^2 (1/P) (\phi_{AA} / \phi_A^2) \quad (4.2.9)$$

donde k es la constante de equilibrio,  $Z_{AA}$  y  $Z_A$  son las fracciones mol "verdaderas" de los constituyentes AA y A ; P es la presión y  $\phi$  los coeficientes de fugacidad.

De acuerdo con Nothnagel se escribe:

$$\phi_{AA} / \phi_A^2 = \exp [-bP/RT] \quad (4.2.10)$$

donde b es el volumen "excluido" debido al tamaño finito de las moléculas.

De este modo, el valor de b es equivalente al valor de Baire. En la ecuación (4.2.10) se asume que  $b = b_{AA} = b_A$ .

La ecuación (4.2.9) se reescribe:

$$k t = k P \exp [ bP/RT ] = Z_{AA} / Z_A^2. \quad (4.2.11)$$

Por medio de balances de materia para los diferentes constituyentes y la ecuación (4.2.11) es posible calcular las fracciones mol verdaderas,  $Z_A, Z_{AA}$ , etc.

Para la asociación del componente A en la mezcla:

$$Z_A = \sqrt{(1 + 4kt y_A(2-y_A) - 1) / (2kt(2-y_A))} \quad (4.2.12)$$

y para un componente no asociado B, en la mezcla:

$$Z_B = y_B + 4kt(2-y_A) - \sqrt{1 - 4kt y_A(2-y_A)} / (2kt(2-y_A)). \quad (4.2.13)$$

En (4.2.12) y (4.2.13), los valores de  $y_A$  y  $y_B$  son las fracciones mol medibles de A y B.

Los valores de  $kt$  pueden ser calculados de la ecuación (4.2.11) como una función de  $P$  y  $T$  por medio de valores experimentales de  $k$  y valores de  $b$  determinados como  $E_{libre}$  en la ecuación (4.2.7).

La constante de dimerización  $k$  se expresa de la siguiente manera:

$$- \log k = A - B/T \quad (4.2.14)$$

En caso de no existir valores experimentales para  $k$ , Hayden y O'Connell sugieren que  $k$  puede ser calculado de:

$$- k = E_{libre} + E_{metaestable} + E_{química} / RT \quad (4.2.15)$$

conociendo los valores verdaderos de las fracciones mol, los coeficientes de fugacidad de cada componente pueden ser calculados de la siguiente expresión:

$$\phi_i = z_i/y_i \exp [ B_i R/P ] \quad (4.2.16).$$



## V CARACTERISTICAS DEL PROGRAMA Y SU FORMA DE USAR.

El programa, adaptado para ejecutarse en una PC, en lenguaje turbobasic, para poder utilizarse en la resolución de cualquier sistema, necesita de cierto conjunto de datos.

Desde luego, debe identificarse la mezcla dando el nombre de cada uno de sus componentes y asignándoles un número en la mezcla.

El número es independiente de la importancia del componente dentro de la mezcla.

Debe definirse si el sistema es ideal o no lo es, porque de aquí se va a decidir si es necesario el cálculo de coeficientes de actividad o de fugacidad, o si pueden considerarse iguales a la unidad sin mayor problema.

Si se trata de una mezcla cuyo comportamiento es no ideal en forma importante, debe considerarse el cálculo de la entalpía de exceso para la fase líquida. Más aún, si se trabaja con alguna mezcla conteniendo algún ácido carboxílico deberá tomarse en cuenta la modificación incluida para el cálculo del coeficiente de fugacidad ya que en este caso, se usa la ecuación virial para obtenerlo.

Para cada una de las diferentes alternativas se tiene una variable que permite el acceso a los cálculos necesarios.

El siguiente diagrama de bloques muestra la estructura del programa de cómputo y las subrutinas con las que efectúa los cálculos antes mencionados.

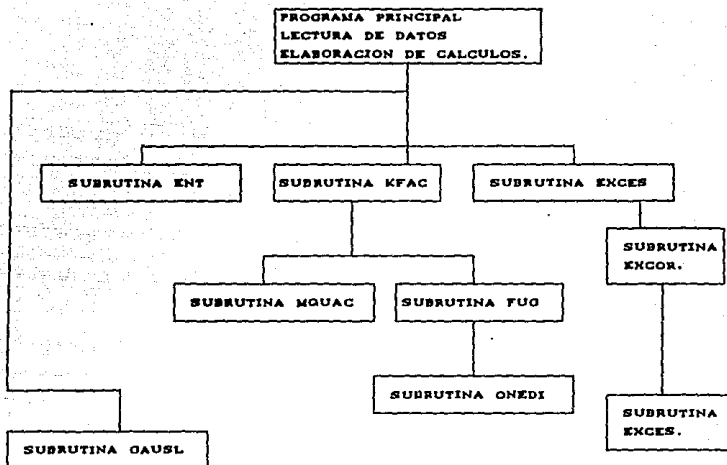


Figura 3 DIAGRAMA DE BLOQUES QUE RELACIONA EL PROGRAMA PRINCIPAL CON LAS DIFERENTES SUBROUTINAS

A continuación se mencionan las variables que forman el archivo de datos. Estas variables son leídas en el archivo DATOS.DAT.

- NOAC - Si el valor de ésta variable es mayor a cero, se efectuará el cálculo del coeficiente de actividad.
- NOFUG - Si el valor de NOFUG es mayor a cero se efectuará el cálculo del coeficiente de fugacidad.
- NOEX - Si NOEX tiene un valor mayor a cero, entonces se llevará a cabo el cálculo para la entalpía de exceso.
- NODIM - Si NODIM tiene un valor mayor a cero, quiere decir que en la mezcla se encuentra algún componente cuya asociación es muy fuerte, de modo que parece que hay un nuevo componente en la misma. Cuando esto sucede se dice que hay una dimerización. Generalmente esto ocurre cuando uno de los componentes del sistema a tratar es un ácido carboxílico.
- NDIM - NDIM es el número que se le asignó en la mezcla al componente que se dimeriza.

Se deben tener las constantes de Antoine para cada uno de los componentes, de acuerdo a la siguiente expresión para la obtención de la presión de vapor.

$$\log P \text{ ( mmHg )} = A - B / [ T(^{\circ}\text{C}) + C ] \quad (5.1)$$

El programa debe tener la expresión para el calor específico del sistema a tratar, y desde luego los valores de las constantes que involucra.

Son necesarios también todos los valores de las entalpías en el estado de referencia tanto para el vapor como para el líquido.

Para el cálculo del coeficiente de actividad por el modelo UNIQUAC<sup>4</sup>, es necesario tener los valores para los parámetros binarios  $A_{12}$  y  $A_{21}$ <sup>7</sup> de todas las combinaciones binarias posibles entre los componentes de la mezcla.

-Subrutinas que forman parte del programa principal para el cálculo de las propiedades termodinámicas.

Aunque el programa incluye el modelo UNIQUAC<sup>4</sup> y la ecuación virial para el cálculo de los coeficientes de actividad y fugacidad, es posible adaptarle algunas otras ecuaciones de estado y también otros modelos de solución. El programa maneja las subrutinas independientes entre sí.

-Subrutina KFAC.

Esta subrutina calcula el factor de separación y las derivadas parciales del factor de separación con respecto al flujo de componente en fase de vapor, al flujo de componente en fase líquida y a la temperatura.

Incluye el cálculo de los coeficientes de actividad y fugacidad por lo que hace uso de las subrutinas MQUAC y FUG.

Al terminar los cálculos, la subrutina KFAC regresa al programa principal.

-Subrutina MQUAC.

Esta subrutina calcula los coeficientes de actividad en la fase líquida de acuerdo al modelo UNIQUAC<sup>4</sup>.

Está incluida dentro de la subrutina KFAC, por lo tanto una vez realizados los cálculos regresa a KFAC.

-Subrutina FUG.

Esta subrutina calcula los coeficientes de fugacidad en la fase de vapor. El efecto de dimerización es incluido en el cálculo mediante el uso que hace esta subrutina de la subrutina ONEDI si el caso así lo requiere. Los coeficientes de fugacidad son evaluados utilizando la ecuación virial<sup>2,4</sup>.

Al finalizar los cálculos la subrutina regresa a KFAC.

-Subrutina ONEDI

Esta subrutina calcula la corrección por dimerización en la fase de vapor cuando no más de un componente se dimeriza.

Es utilizada por la subrutina FUG, por lo tanto al finalizar el cálculo regresa a FUG.

-Subrutina EXCES.

Esta subrutina calcula la entalpía de exceso de una mezcla líquida. La entalpía de la mezcla es definida como la entalpía ideal más la entalpía de exceso. Al terminar el cálculo, se regresa al programa principal.

-Subrutina EXCOR.

Esta subrutina calcula las derivadas parciales de la entalpía en exceso con respecto a los flujos de los componentes en la fase líquida y con respecto a la temperatura. Ambas derivadas se evalúan numéricamente.

Hace uso de la subrutina EXCES para evaluar los valores de las entalpías de exceso. Regresa al programa principal.

-Subrutina ENT.

La subrutina calcula:

La entalpía del componente puro.

La entalpía total de una fase.

Las derivadas parciales de la entalpía total con respecto a la temperatura.

La entalpía es calculada por:

$$H = H_0 + C*T \quad (5.2)$$

y es en esta subrutina donde debe contarse con las expresiones apropiadas para el calor específico según la mezcla de que se trate.

Se requieren siempre para el cálculo los valores de las entalpías en el estado de referencia.

Esta subrutina, una vez efectuados los cálculos regresa al programa principal.

**-Subrutina GAUSL**

Esta subrutina resuelve el sistema de  $M$  ecuaciones algebraicas lineales conformado por  $(\partial F/\partial x)$ , por el método de Gauss<sup>8</sup>. Regresa al programa principal.

**-Entrada de datos al programa.**

Para acceder los datos al programa se deben crear los archivos siguientes; es recomendable que se creen con los nombres asignados puesto que la lectura que de ellos se realiza en el programa principal los tiene registrados de esa manera.

**DATOS.DAT**

Archivo que contiene el número de componentes, los nombres de los componentes, las variables que indican las propiedades termodinámicas que habrán de efectuarse, las constantes de Antoine, las constantes de entalpía, las especificaciones de la columna y las especificaciones del sistema.

Los datos se escriben uno por cada línea, el formato es libre para todas las variables, de éste modo el archivo se escribe así:

En la primera línea, y siempre empezando en la primera columna; NK, número de componentes.

En las siguientes líneas, uno por cada una de ellas y dependiendo de NK; se escriben los nombres de cada uno de los componentes de la mezcla.

En la siguiente línea, inmediatamente después del último nombre de un componente, se escriben NOAC, NOFUG, NOEX, NODIM y NDIM, las cinco en el mismo renglón separadas por cualquier número de espacios en blanco.

En la siguiente línea, después de haber escrito las cinco últimas variables se escriben las constantes de Antoine, A,B,y C, en ese orden, una por renglón, escribiendo las primeras tres para el primer componente, enseguida las siguientes tres para el

segundo componente y así sucesivamente hasta terminar con las tres constantes para cada componente.

En la línea que sigue después de haber escrito la última constante C del último componente, se escriben, una por renglón las constantes de entalpía del mismo modo que se escribieron las constantes de Antoine.

Se escriben primero las constantes de entalpía correspondientes al líquido y después las correspondientes al vapor.

Al terminar con las constantes de entalpía, inmediatamente en la línea siguiente se escribe:

NST, número de platos.

En la siguiente línea:

NFEED, número de alimentaciones.

En la siguiente línea:

NSL, número de corrientes laterales de líquido.

En la siguiente línea:

NSV, número de corrientes laterales de vapor.

En la siguiente línea:

NCON, si NCON es menor a cero, la ejecución del programa se detiene.

En la siguiente línea:

NITP, número de iteraciones permitidas.

En la siguiente línea:

DEST, destilado ( mol/hr).

En la siguiente línea:

RFLX, reflujo.

En la siguiente línea:

P, presión de operación de la columna (atm).

En la siguiente línea:

TT, temperatura de la parte superior de la columna ( $^{\circ}\text{C}$ ).

En la siguiente línea:

TB, temperatura del fondo de la columna ( $^{\circ}\text{C}$ ).

En la siguiente línea:

COND, si COND es positivo entonces es condensador parcial, si

COND es negativo, es condensador total.

En la siguiente línea:

TSUB, temperatura de subenfriamiento, ( $^{\circ}\text{C}$ ), solo para condensador total, si COND es positivo este valor se escribe como cero.

En la siguiente línea:

ESC, tipo de impresión deseada. Si ESC es 0.0., se imprimirán los resultados de cada iteración y finales.

Si ESC es 1.0, se imprimirán las funciones de discrepancia y las correcciones a las variables incluyendo la impresión cuando ESC es cero.

Si ESC es 2.0, se imprimirán las matrices de las derivadas parciales, incluyendo la impresión cuando ESC es igual a cero y cuando ESC es igual a uno.

En la siguiente línea se escribe:

KMU, si KMU es mayor que cero se asume una misma eficiencia para cada plato.

En la siguiente línea:

MUS, eficiencia de plato.

En la siguiente línea:

NF, número de plato(s) de alimentación.

En la siguiente línea:

TF, temperatura del plato(s) de alimentación, ( $^{\circ}\text{C}$ ).

En la siguiente línea:

FKV, fracción de vapor en la alimentación.

En la siguiente línea:

FSTR, alimentación total por componente en el plato de alimentación, (mol/hora), se escribirá una FSTR por cada línea según el número de componentes de que se trate.

Si NF es mayor de uno, entonces en la siguiente línea, inmediatamente después de haber escrito la última FSTR para el último componente, se vuelve a escribir TF, correspondiente a la temperatura del plato de alimentación del cual van a darse otra vez las siguientes variables: FKV, FSTR, del mismo modo que se dieron por primera vez.



Una vez escrita la última FSTR, del último componente para el último plato de alimentación este archivo se cierra.

El segundo archivo que se debe crear es UNIQ.DAT, este archivo contiene los parámetros que se utilizan en el modelo UNIQAC<sup>4</sup>.

En este archivo se deberán escribir las constantes  $A_{ij}(0)$  primero y las  $A_{ij}(1)$  después.

Se escriben una por renglón, con formato libre. Una vez que se han escrito todas las constantes se cierra el archivo.

Un tercer archivo contendrá los parámetros Q, R, XL utilizados en el modelo UNIQAC. Para generar este archivo se procede introduciendo en formato libre y una por renglón, cada una de las constantes en el orden Q,R, y XL para cada componente hasta terminar con los datos para el total de los componentes. Una vez escritos los valores, el archivo se cierra.

El último archivo, FUG.DAT, contiene los datos para la subrutina FUG. En este último archivo se escriben, uno por cada línea los coeficientes viriales. Primero se escribirán los coeficientes viriales calculados a  $T_1$ , que es TT en K y después los coeficientes viriales calculados a  $T_2$ , que es TB en K.

Inmediatamente después del último coeficiente virial calculado a  $T_2$  se escribe en la siguiente línea  $T_1$ , una línea después se escribe  $T_2$ . Se cierra el archivo.

Si se necesitan las constantes A y BX para la corrección por dimerización de algún componente se introducen directamente en la subrutina ONEDI antes del cálculo.

La lectura de los archivos se lleva a cabo desde el programa principal y las subrutinas que los requieran los leen en el momento de ejecutar el programa, para esto es necesario crearlos bajo los nombres dados.

Quando se tengan los archivos completos se puede ejecutar el programa. Para poder ver e imprimir los resultados se hace el llamado al archivo de resultados DEST.DAT. el cual se genera dentro del programa principal desde que comienza la ejecución del programa almacenando en él los resultados completos.

A continuación se presentan algunos ejemplos representativos de los archivos de datos requeridos para la lectura.

ARCHIVO DE DATOS DATOS.DAT.  
ESPECIFICACIONES DE LA COLUMNA.

4				
ETANOL				
PROPANOL				
AGUA				
ACIDO-ACETICO				
2	2	2	2	4
8.04494				
1554.30005				
222.84898				
7.88733				
1568.88885				
209.50000				
7.88881				
1888.18885				
228.00000				
7.18807				
1416.88885				
211.00000				
-3032.32007				
37.80400				
0.00000				
0.00000				
7803.72				
18.878				
0.00000				
0.00000				
-2812.800				
35.180				
0.0000				
0.0000				
7722.38880				
28.77000				
0.00000				
0.00000				
-1440.00000				
18.00000				
00.00000				
00.00000				
8230.62012				
8.70500				
0.00000				
0.00000				
-2246.40				
28.08000				
00.00000				
00.00000				
4374.75000				
17.82000				
0.00000				
0.00000				
30				
2				

1  
0  
2  
10  
40  
2  
1  
80  
100  
2  
0  
0  
2  
0.7  
7  
85  
0  
0  
12.5  
12.5  
25  
23  
110  
1  
25  
12.5  
12.5  
0  
10  
20

ARCHIVO DE DATOS FUG.DAT  
COEFICIENTES VIRIALES.

-820.083  
-477.755  
-223.882  
-618.148  
-477.755  
-1180.835  
-252.530  
-783.738  
-223.882  
-252.530  
-852.388  
-323.858  
-328.105  
-384.054  
-183.889  
-1180.855  
-727.402  
-418.817  
-184.041  
-538.803  
-418.870  
-931.554  
-218.091  
-688.275  
-184.041  
-218.091  
-478.828  
-804.094  
-285.070  
-344.738  
-158.758  
-831.554  
353  
373

ARCHIVO DE DATOS UNIQ.DAT  
PARAMETROS UNIQAC.

1.9720  
2.1055  
-0.4380  
2.5120  
2.7799  
-0.4404  
1.4000  
0.9200  
-2.3200  
2.0720  
2.2024  
-0.5504  
0.1000E01  
0.12273E01  
0.19283E00  
-0.21891  
0.77161  
0.10000E01  
87.73200E-02  
33.46300E-03  
0.181280E+01  
20.58300E-02  
00.10000E+01  
-0.67430E-01  
41.13500E-01  
27.26300E-01  
29.81600E-01  
0.10000E+01  
0.000000E0  
-20.33000E-05  
90.82700E-05  
13.95000E-04  
13.14700E-05  
0.00000E00  
-2.4844E-004  
11.24300E-04  
-1.1735E-003  
98.91600E-05  
0.00000E00  
13.03200E-04  
-4.8680E-003  
-2.5139E-003  
-0.37084E-02  
0.0000000E00

## V.1 EJEMPLOS DE CÁLCULO COMO PRUEBA DEL PROGRAMA DE CÓMPUTO.

El programa de cómputo se usó con dos ejemplos escogidos por sus grandes desviaciones de la idealidad.

El primer ejemplo consiste en el sistema: etanol(1), 1-propanol(2), agua(3) y ácido acético(4).

El segundo ejemplo consiste en el sistema: n-octano(1), etilciclohexano(2), etilbenceno(3), destilación extractiva con fenol(4).

A continuación se presentan los dos ejemplos con los resultados que se obtuvieron, así como la confrontación de éstos resultados con los reportados en la bibliografía<sup>2</sup>.

En las tablas 1 y 2 se muestran las condiciones de la columna para cada sistema, así como los resultados obtenidos de la simulación de cada uno de los sistemas. La simulación se realizó en el programa original en FORTRAN en el sistema VAX/750 así como también en el adaptado a la "PC" de modo que los resultados pueden compararse entre sí y con los reportados en la bibliografía.<sup>2</sup>

En las figuras 4 y 5 se muestra para cada sistema respectivamente la estructura de cada columna incluyendo los resultados de cada simulación obtenidos utilizando el programa de cómputo adaptado a la "PC".

### V.1.1 Sistema Etanol(1), 1-Propanol(2), Agua(3) y Ácido acético(4).

El sistema etanol(1), 1-propanol(2), agua(3), y ácido acético(4), fue escogido por su gran desviación de la idealidad. Por la estructura de esta columna se esperaría que el 1-propanol se separara del agua de modo que la mayoría del 1-propanol se obtuviera en el destilado y la mayor parte del agua en los productos de fondo. Sin embargo, el agua tiene una actividad mucho más alta en ácido acético que el 1-propanol; de aquí que la mayoría del 1-propanol se va en los productos de fondo. En estos cálculos se desprecia la relativamente lenta esterificación de los alcoholes con ácido acético.

Los datos necesarios para el cálculo de dicho sistema se encuentran en el apéndice, para éste problema se tomaron en cuenta los cálculos de coeficientes de actividad, de fugacidad, de entalpía de exceso y también una corrección para el ácido acético ya que se dimeriza.

En la tabla 1 se muestran los datos de la configuración para la simulación del sistema y los resultados obtenidos de la simulación. En la figura 4 se muestra esquemáticamente la estructura de la columna y los resultados.



TABLA 1 RESULTADOS DEL SISTEMA  
 ETANOL(1), 1-PROPANOL(2), AGUA(3), ACIDO ACÉTICO(4)  
 CONDICIONES DE OPERACIÓN DE LA COLUMNA

REFLUJO: 2      DESTILADO:40 mol/hr    FONDOS:40 mol/hr.  
 No. DE ETAPAS:30    PRESIÓN:1 atm.

ETAPA DE ALIMENTACIÓN: 7

ALIMENTACIÓN: (1) 0.0000, (2) 12.5, (3) 12.5 (4) 25.0 (MOL/HORA)

ETAPA DE ALIMENTACIÓN: 23

ALIMENTACIÓN: (1) 25.0, (2) 12.5, (3) 12.5, (4) 0.0000 (MOL/HORA)

---

COMPONENTE	FRAC. MOL DESTILADO	FRAC. MOL PRODUCTO DE FONDO	SISTEMA DE COMPUTO
1	0.5780	0.0080	COMPUTADORA PC
2	0.1240	0.2880	
3	0.3000	0.0890	
4	0.0000	0.8190	

QR = 0.8884E08 cal/hr.

Qc = 0.7708E08 cal/hr.

---

1	0.5780	0.0080	VAX/750
2	0.1240	0.2880	
3	0.3000	0.0890	
4	0.0000	0.8190	

QR = 0.8884E08 cal/hr.

Qc = 0.7708E08 cal/hr.

---

1	0.5810	0.0050	IBM 370/185
2	0.1250	0.2830	
3	0.2940	0.0930	
4	0.0000	0.8190	

QR = 0.8700E08 cal/hr.

Qc = 0.7700E08 cal/hr.

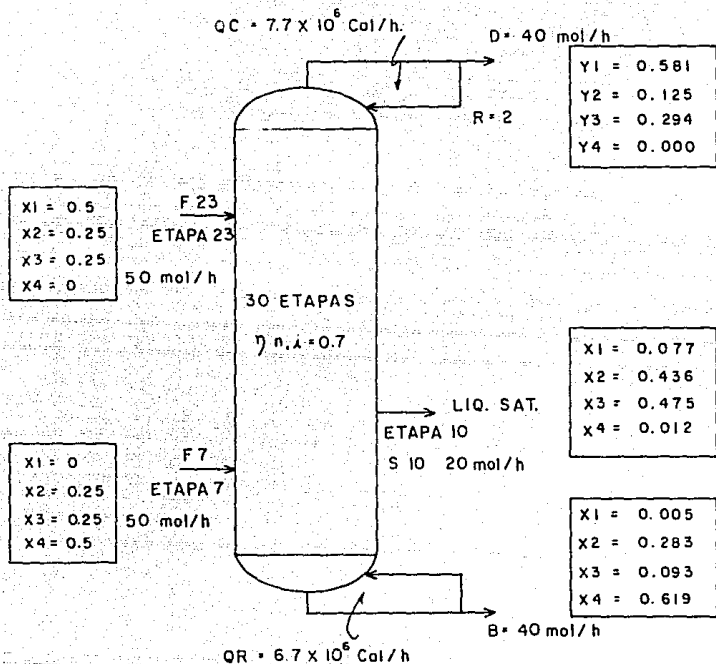


FIGURA 4... ESQUEMA DE RESULTADOS

SISTEMA : ETANOL (1), 1-PROPANOL (2)  
AGUA (3) ACIDO ACETICO (4).

V.1.2 Sistema n-Octano(1), Etilciclohexano(2), Etilbenceno(3),  
destilación extractiva con Fenol(4).

Este sistema es particularmente difícil de converger; debido a una notable variación de los perfiles de concentración durante las primeras iteraciones. Este ejemplo corresponde al ejemplo 11.1 de Van Winkle<sup>5</sup> y los resultados concuerdan con los aquí presentados. El etilciclohexano y el etilbenceno son difíciles de separar por destilación simple, Smith<sup>10</sup> presenta una solución etapa por etapa para un proceso de destilación extractiva con fenol como agente de extracción en problemas muy parecidos a éste en los que se separa metilciclohexano de tolueno, mediante este programa de cómputo adaptado a la PC se obtienen resultados bastante satisfactorios de este problema que es especialmente difícil de converger.

Los datos necesarios para el cálculo del sistema se encuentran en el apéndice. Se considera fase de vapor ideal, se calcularon coeficientes de actividad.

En la figura 5 se muestra la configuración de la columna incluyendo las condiciones de operación y los resultados obtenidos de la simulación, en la tabla 2 se resumen los resultados que se obtuvieron de dicho sistema.

TABLA 2 RESULTADOS DEL SISTEMA  
 N-OCTANO(1), ETILCICLOHEXANO (2), ETILBENCENO(3)  
 DEST. EXT. CON FENOL(4)

REFLUJO: 8      DESTILADO:70    mol/hr    FONDOS:330 mol/hr.  
 No. DE ETAPAS:30    PRESIÓN:1 atm.

ETAPA DE ALIMENTACIÓN: 15

ALIMENTACIÓN: (1) 20.0, (2) 40.0, (3) 40.0 (4) 0.0000 (MOL/HORA)

ETAPA DE ALIMENTACIÓN: 20

ALIMENTACIÓN:(1) 0.0000,(2)0.0000,(3)0.0000,(4) 300.0 (MOL/HORA)

COMPONENTE	FRAC. MOL	FRAC. MOL	SISTEMA DE COMPUTO
	DESTILADO	PRODUCTO DE FONDO	
1	0.2880	0.0000	COMPUTADORA PC
2	0.5710	0.0000	
3	0.0210	0.1170	
4	0.1220	0.8830	
QC = 1.94737E05 cal/hr.			
QR = 2.1907E05 cal/hr.			
<hr/>			
1	0.2880	0.0000	VAX/750
2	0.5710	0.0000	
3	0.0210	0.1170	
4	0.1220	0.8830	
QC = 1.94737E05 cal/hr.			
QR = 2.19080E05 cal/hr.			
<hr/>			
1	0.2857	0.0000	IBM 370/185
2	0.5709	0.0001	
3	0.0211	0.1167	
4	0.1224	0.8830	
QC = 1.95E05 cal/hr.			
QR = 2.19E05 cal/hr.			

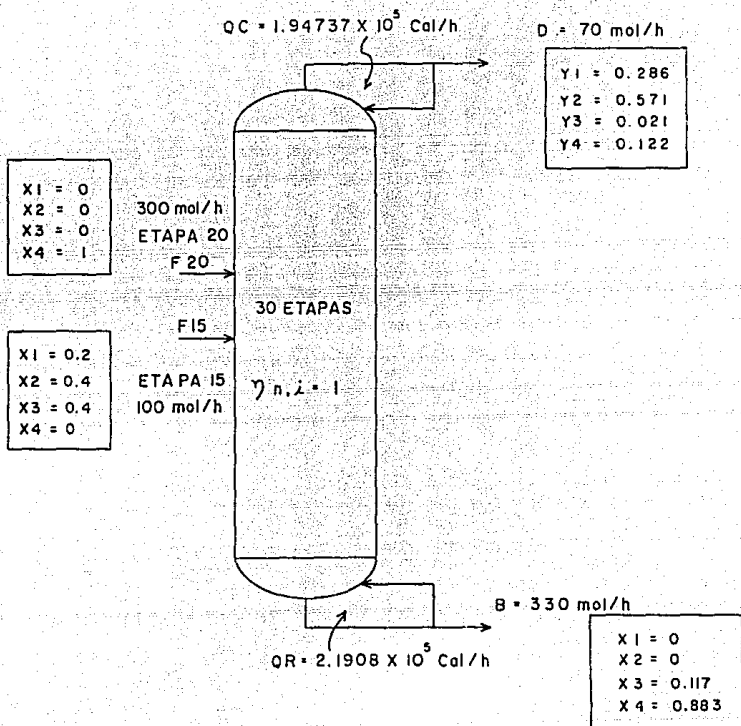


FIGURA 5. \_ ESQUEMA DE RESULTADOS

SISTEMA: N-OCTANO (1), ETILCICLOHEXANO (2),  
ETILBENBENCENO (3), DEST. EXT. CON FENOL (4).

## VI. CASO DE ESTUDIO: DESHIDRATACIÓN DEL ISOPROPANOL.

En este trabajo, y con el programa de cómputo adaptado a una computadora PC, se propuso realizar la simulación de la deshidratación del isopropanol por destilación azeotrópica con ciclohexano.

Las condiciones de operación de una columna existente, fueron obtenidas de la tesis doctoral de Bradley<sup>1</sup> y se presentan en la figura 8. La columna consta de 38 platos incluyendo rehervidor, la alimentación principal se realiza en el plato 33 y una corriente de reflujo se alimenta en el plato 38. La tabla 3 resume la configuración de dicha columna.

Para la resolución del sistema de purificación de isopropanol se tomaron en cuenta las siguientes condiciones basadas en la tesis doctoral de Bradley<sup>1</sup>. Los datos completos necesarios para el cálculo se encuentran en el apéndice.

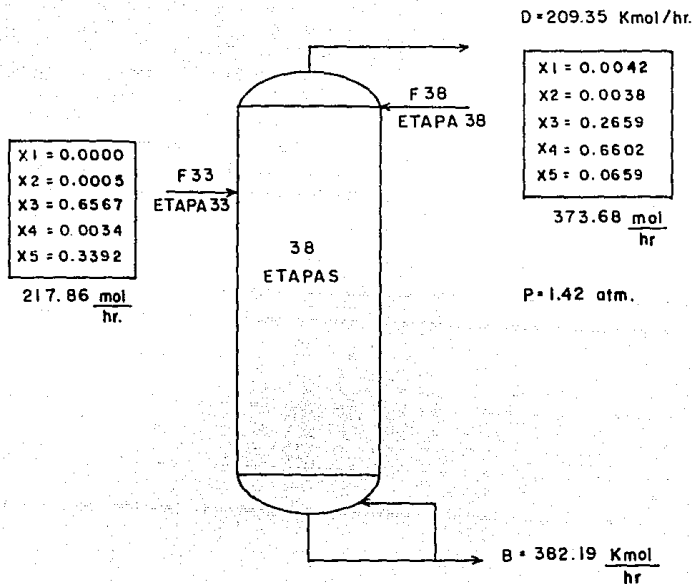


FIGURA 6... DESHIDRATACION DE ISOPROPANOL CON  
 CICLOHEXANO. CONDICIONES TÍPICAS DE  
 LA TORRE DE UNION CARBIDE.

TABLA 3. CONDICIONES DEL SISTEMA  
DE SEPARACIÓN DEL ISOPROPANOL

COMPONENTE	ETAPA DE ALIMENTACIÓN	COMPOSICIÓN.
isopropiléter	33	0.0000
acetona		0.0005
isopropanol		0.6567
ciclohexano		0.0034
agua		0.3393
FLUJO MOLAR(mol/hr)		217.86
	TEMPERATURA	345.2 K
isopropiléter	38	0.0042
acetona		0.0038
isopropanol		0.2659
ciclohexano		0.6602
agua		0.0659
FLUJO MOLAR(mol/hr)		373.68
PRESION 1.42 atm.	TEMPERATURA	313 K



Como se muestra en la figura 6, el cálculo se realiza sin considerar el condensador y únicamente se fija la cantidad de flujo de vapor al condensador y la corriente de reflujo alimentada en el plato 38.

El programa original adaptado a la "PC" no pudo realizar el cálculo debido a que la función de discrepancia en la última etapa no es adecuada para el caso en el que no se tenga condensador y se obtenga como producto del domo de la columna únicamente vapor saturado.

Al cambiar la función de discrepancia y modificar todas las ecuaciones necesarias en el programa, se obtuvieron los siguientes resultados:

TABLA 4 RESULTADOS DEL SISTEMA DE DESHIDRATACION  
DEL ISOPROPANOL OBTENIDOS MEDIANTE EL PROGRAMA  
DE COMPUTO ADAPTADO A LA PC

COMPONENTE	DESTILADO FRAC. MOL	FONDOS FRAC. MOL
isopropil*ter	0.0031	0.0023
acetona	0.0071	0.0000
isopropanol	0.3566	0.5983
ciclohexano	0.5014	0.3500
agua	0.2090	0.0000
QR = 1.53E13 cal/hr.		

Como se puede observar en la tabla 4, los resultados NO concuerdan con los valores reportados en la tesis de Bradley<sup>1</sup>.

Lo anterior dio origen a que se dudara del programa de cómputo basado en el método de Naphtali. Esto a su vez, originó que se realizara una búsqueda bibliográfica más extensa con relación a este proceso y que se realizaran cálculos comparativos con tres simuladores comerciales, a los cuales se podría tener acceso.

Con la ayuda de personal del IHP y de PEMEX relacionado con el área de simulación de procesos químicos, se obtuvieron los resultados que se muestran en la tabla 5 y que fueron los mismos que dieron los simuladores comerciales ASPEN, SIMPROC, y HYSIM.

TABLA 5. RESULTADOS DEL SISTEMA.  
 ISOPROPILÉTER(1), ACETONA(2), ISOPROPANOL(3),  
 CICLOHEXANO(4), AGUA(5).

DESTILADO: 461.74 mol/hr. PRESIÓN: 1.42 atm.

FONDO: 129.80 mol/hr.

No. ETAPAS 36

COMPONENTE	DESTILADO FRAC. MOL	FONDOS FRAC. MOL	SIST. DE CÓMPUTO
1	0.2760E-02	0.2320E-02	VAX/750
2	0.3325E-02	0.0000	SIMULADOR ASPEN
3	0.35677	0.59854	
4	0.42372	0.39914	
5	0.21342	0.0000	
QR = 0.177805E11 watt.			
1	0.0032	0.0023	PC
2	0.0072	0.0000	SIMULADOR HYSIM
3	0.2407	0.5024	
4	0.5514	0.3454	
5	0.1973	0.1497	
QR = 1.52876E13 cal/hr.			
1	0.0000	0.0000	
2	0.0000	0.0000	SIMULADOR SIMPROC
3	0.7288	0.7169	
4	0.0277	0.0000	
5	0.2434	0.2830	
QR = 1.52135 cal/hr.			

En adición, se encontró que en una publicación de la AIChE, Prokopakis et. al., revisan también este problema y encuentran que efectivamente los perfiles de concentración, temperatura y flujos son *extremadamente* sensibles a la selección de variables especificadas en el cálculo, y con el algoritmo que usan de desacoplamiento de ecuaciones, tampoco se puede lograr una alta pureza de alcohol en el fondo, con las condiciones de la figura 6.

Por lo que se demuestra que los resultados de la tabla 4 obtenidos con el programa modificado son consistentes. Y un análisis completo para la purificación de este sistema ya fue realizado por Prokopakis et al..

La figura 7 muestra los resultados obtenidos de la simulación de dicho sistema.

En este análisis se encontró que este sistema es muy complejo desde el punto de vista de simulación y se requieren de cambios sustanciales al programa para realizar un análisis más completo de este problema, que ya fue analizado por Prokopakis et al..

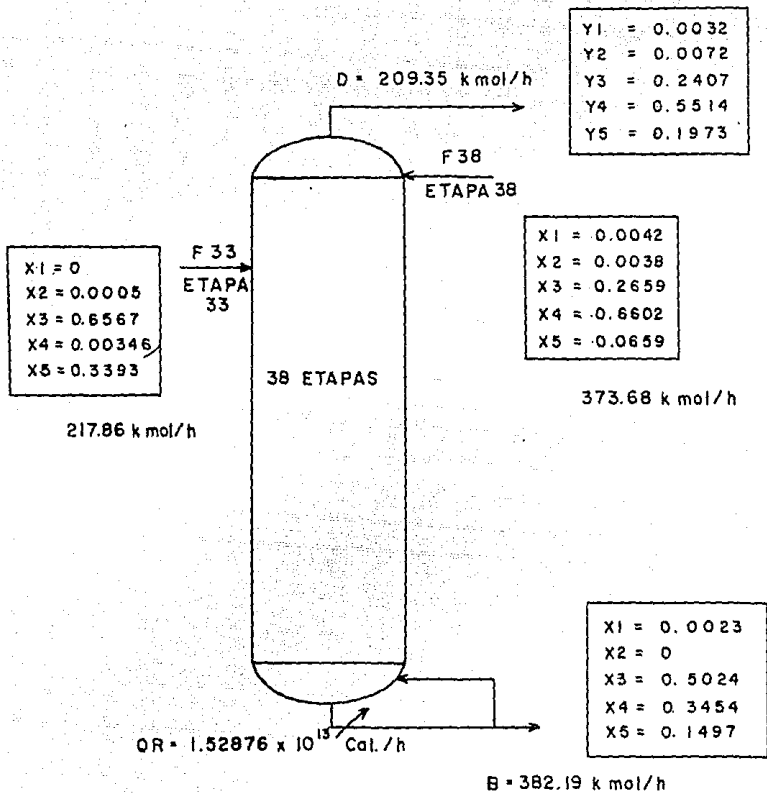


FIGURA 7.\_ ESQUEMA DE RESULTADOS

SISTEMA: ISOPROPILETER (1), ACETONA (2),  
ISOPROPANOL (3), CICLOHEXANO (4), AGUA (5).

## VII CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Del trabajo realizado se puede concluir lo siguiente:

1.- El programa de cómputo basado en el método de Naphtali y adaptado a una "PC" puede ser utilizado para resolver muchos problemas reales; altamente no ideales, y que impliquen destilación azeotrópica o destilación extractiva.

2.- Al modificar el programa de cómputo original se pudieron obtener muy buenos resultados de la simulación de deshidratación de isopropanol, los mismos que fueron comprobados comparándolos con los resultados de tres simuladores comerciales, lo que comprueba que el programa modificado opera adecuadamente, por lo tanto pueden simularse sistemas complejos de una forma mucho más accesible.

3.- Puede trabajarse con cualquier número de componentes y con cualquier número de etapas, la única limitante está en la capacidad del sistema de cómputo usado.

4.- Los modelos termodinámicos utilizados son adecuados para la mayoría de los sistemas, sin embargo, es posible modificarlos de manera relativamente sencilla, pues las subrutinas se manejan externamente.

5.- La simulación hecha con el programa presentado de los dos sistemas dados como ejemplos presentaron resultados completamente confiables, éstos sistemas fueron escogidos, el primero por su alta desviación de la idealidad, y el segundo por su dificultad para converger, lo cual significa que no existe ningún obstáculo para manejar ningún sistema complejo.

6.- El programa está diseñado de tal forma que el usuario

puede familiarizarse rápidamente con él, pudiendo utilizarlo inmediatamente.

7.- El programa reportado está limitado en los casos que se presenten dos fases líquidas, así como en aquellos en que deba fijarse como variable independiente el "boil up".

8.- Aunque la mayoría de los problemas convergen en diez iteraciones ó menos, es conveniente que cuando el usuario no tenga un conocimiento muy amplio del sistema que vaya a simular con este programa, se de un número de iteraciones permitidas de 30.

9.- El requerimiento mínimo de capacidad del sistema de cómputo para poder ejecutar el programa es de 512 K.

- APENDICE. I

I Datos para el problema de separación del isopropanol de la mezcla:

NK

5

1.- isopropiléter.

2.- acetona.

3.- isopropanol. nombre de los componentes

4.- ciclohexano.

5.- agua .

1 1 0 0 0

NOAC, NOFUG, NOEX, NODIM, NDIM.

Constantes de Antoine

(una por renglón, A, B, y C para cada componente)

	A	B	C
1.-isopropiléter	6.84953	1139.340	218.742
2.-acetona	7.11714	1210.595	229.864
3.-isopropanol	8.87829	2010.330	252.638
4.-ciclohexano	6.85146	1208.470	223.136
5.-agua	8.07131	1730.630	233.428

Entalpia.

Las entalpias para las especies son determinadas por la integración del calor específico.

Para éste problema, en particular, las correlaciones usadas para el calor específico como una función de temperatura son:

$$C_{pL} = a_{1j} + a_{2j}T + a_{3j}T^2 + a_{4j}T^3 \text{ para el líquido.}$$

y

$$C_{pV} = b_{1j} + b_{2j}T + b_{3j}T^2 + b_{4j}T^3 + b_{5j}/\sqrt{T}.$$

para el vapor.

Las constantes para ambas expresiones son:

	$a_{1j}$	$a_{2j} \times 10^3$	$a_{3j} \times 10^6$	$a_{4j} \times 10^9$
1.-isopropiléter	92.115	346.28	204.45	0.0
2.-acetona	35.952	352.59	-135.62	0.0
3.-isopropanol	38.89	522.66	-173.39	0.0
4.-ciclohexano	407.42	-1929.80	3548.90	0.0
5.-agua	50.83	213.02	-631.21	648.55



	$b_{1j}$	$b_{2j} \times 10^3$	$b_{3j} \times 10^6$	$b_{4j} \times 10^9$
1.-isopropiléter	20.03	527.08	-219.30	20.209
2.-acetona	13.978	226.58	-74.661	-2.1077
3.-isopropanol	17.614	316.84	-171.91	36.266
4.-ciclohexano	-55.334	617.97	-281.53	0.0
5.-agua	33.913	-3.014	15.198	-4.857

$b_{5j} = 0.0$  para todas las especies.

Las entalpías en el estado de referencia a 298 K y baja presión son:

	$h_{jL}^{\circ}$	$h_{jV}^{\circ}$
1.-isopropiléter	0.0	30898.8
2.-acetona	0.0	31481.0
3.-isopropanol	0.0	45588.2
4.-ciclohexano	0.0	32494.9
5.-agua	0.0	44529.3

La temperatura se da en K y la entalpía.

$$H' = H_0^{\circ} + \int_{T_0}^T C_p dT.$$

se da en joules/ gmol.

Desde luego debe tenerse la expresión correspondiente para  $C_{pL}$  y  $C_{pV}$  dependiendo de la mezcla de que se trate.

Parámetros UNIQUAC.	R	Q	XL
1.-isopropiléter			
2.-acetona			
3.-isopropanol	2.78	2.51	-0.43
4.-ciclohexano	3.97	3.01	1.83
5.-agua	0.920	1.40	-2.32

**Especificaciones de la columna:**

NST 38  
NFED 2  
NSL 0  
NSV 0  
NCON 2  
NITP 20  
P 1.42  
ESC 0

-APENDICE II

II Datos para el problema de la mezcla etanol(1),  
1-propanol(2), agua(3), ácido acético(4).

NK

4

- 1.-Etanol
- 2.-1-Propanol
- 3.-Agua
- 4.-Ácido acético.

2 2 2 2 4

Constantes de Antoine.

	A	B	C
1.-etanol	8.04494	1554.3	222.65
2.-1-propanol	7.99733	1569.7	209.50
3.-agua	7.96681	1668.2	228.00
4.-Ácido acético	7.18807	1416.7	211.0

Constantes de entalpía

Para el líquido

	a1	a2	a3	a4
1.- -3032.320	37.904	0.0	0.0	0.0
2.- -2812.60	35.16	0.0	0.0	0.0
3.- -1440.0	18.00	0.0	0.0	0.0
4.- -2245.40	28.09	0.0	0.0	0.0

Para el vapor

	b1	b2	b3	b4
1.- 7903.72	18.676	0.0	0.0	0.0
2.- 7722.40	26.770	0.0	0.0	0.0
3.- 9230.62	8.705	0.0	0.0	0.0
4.- 4374.75	17.920	0.0	0.0	0.0

Las constantes de entalpía para este sistema están contenidas  
en las siguientes expresiones:

$$C_{pL} = a1 + a2T + a3T^2 + a4T^3. \text{ para el líquido}$$

y

$$C_{pV} = b1 + b2T + b3T^2 + b4T^3. \text{ para el vapor.}$$

Las entalpias de referencia se consideran cero para éste caso y la entalpia se da en cal/gmol.

Coefficientes viriales

Calculados a  $T_1 = 353$  K y  $T_2 = 373$  K.

A  $T_1 = 353$  K

	1	2	3	4
1	-920.083	-477.755	-223.882	-616.148
2	-477.755	-1160.935	-252.530	-763.736
3	-223.882	-252.530	-652.368	-323.959
4	-328.105	-394.054	-183.889	-1160.955

A  $T_2 = 373$  K

	1	2	3	4
1	-727.402	-418.917	-194.041	-539.903
2	-418.917	-931.554	-219.091	-668.275
3	-194.041	-219.091	-479.629	-604.094
4	-285.070	-344.738	-159.758	-931.554

Parámetros UNIQUAC

	Q	R	XL
1	1.97199	2.10550	-0.43799
2	2.51200	2.77990	-0.44039
3	1.40000	0.92000	-2.32000
4	2.07200	2.20240	-0.55039

$A_{ij}^H(0)$  y  $A_{ij}^H(1)$  en la expresión:

$$\tau_{ij} = A_{ij}^H(0) + A_{ij}^H(1) T.$$

$A_{ij}^H(0)$

	1	2	3	4
1	0.10000E01	0.12273E01	0.19283E00	-0.21691E00
2	0.77161E00	0.10000E01	0.87732E00	0.33463E-01
3	0.18128E01	0.20593E00	0.10000E01	-0.67430E-01
4	0.41135E01	0.27263E01	0.29816E01	0.10000E01

AA(1)

	1	2	3	4
1	0.00000E00	-0.20330E-03	0.90927E-03	0.1395E-02
2	0.13147E-02	0.00000E00	-0.24844E-03	0.11243E-02
3	-0.11735E-02	0.98918E-03	0.00000E00	0.13032E-02
4	-0.49680E-02	-0.25139E-02	-0.37084E-02	0.00000E00

Especificaciones de la columna

NST	30	DEST	40	KMU	2
NFEED	2	RFLX	2	MUS	0.7
NEL	1	P	1		
NEV	0	TT	80		
NCON	2	TB	100		
NITP	10	COND	2		
		TSUB	0		
		ESC	0		
NF	7	NF	23	NF	10
T(NF)	85	T(NF)	110	SL	20
FKV	0	FKV	1		
FSTR(NF,I)	0	FSTR(NF,I)	25		
	12.5		12.5		
	12.5		12.5		
	25.0		0		

APENDICE III.

III. Datos para el problema de la mezcla: n-octano(1), etilciclohexano(2), etilbenceno(3), destilación extractiva con fenol(4). NK 4

1.-n-octano  
 2.-etilciclohexano  
 3.-etilbenceno  
 4.-dest.ext.con fenol  
 1 0 0 0 0

Constantes de Antoine

	A	B	C
1.-n-octano	6.92374	1355.128	209.518
2.-etilciclohexano	6.87041	1384.036	215.128
3.-etilbenceno	6.95719	1424.255	213.208
4.-fenol	7.13617	1518.100	175.000

Constantes de entalpía

Para el líquido

	a1	a2	a3	a4
1	-245.0953	0.0	0.0	0.0
2	-245.0953	0.0	0.0	0.0
3	-245.0953	0.0	0.0	0.0
4	-245.0953	0.0	0.0	0.0

Para el vapor

	b1	b2	b3	b4
1	102.65055	0.0	0.0	0.0
2	102.65055	0.0	0.0	0.0
3	102.65055	0.0	0.0	0.0
4	102.65055	0.0	0.0	0.0

Las constantes de entalpía para este sistema están contenidas en las siguientes expresiones:

$$C_{pL} = a_1 + a_2T + a_3T^2 + a_4T^3 \text{ para el líquido}$$

y

$$C_{pV} = b_1 + b_2T + b_3T^2 + b_4T^3 \text{ para el vapor.}$$

Las entalpías de referencia se consideran cero y la entalpía se da en cal/ gmol.

Puesto que se considera ideal la fase de vapor no es necesario  
 coeficientes viriales

Parámetros UNIQUAC

	Q	R	XL
1	4.938	5.8486	-0.2856
2	4.316	5.3944	0.9978
3	3.508	4.5972	1.84881
4	2.680	3.5517	1.80681

AA(0)

	1	2	3	4
1	0.10000E01	0.10000E01	0.65737E00	-0.76135E-01
2	0.10000E01	0.10000E01	0.65737E00	-0.76135E-01
3	0.12762E01	0.12762E01	0.10000E00	0.42844E-01
4	0.18637E01	0.18637E01	0.17925E01	0.10000E01

AA(1)

	1	2	3	4
1	0.00000E00	0.00000E00	0.38239E-03	0.42876E-03
2	0.00000E00	0.00000E00	0.38248E-03	0.42876E-03
3	-0.31464E-03	-0.31475E-03	0.00000E00	0.90209E00
4	-0.7528E-04	0.75320E-04	0.86317E-03	0.00000E00

Especificaciones de la columna

NST	30	DEST	70	NF	15
NFERD	2	RFLX	8	T(NF)	140
NSL	0	P	1	FKV	0
NSV	0	TT	115	FSTR(NF,I)	20
NCON	1	TB	160		40
NITP	40	COND	2		40
		TSUB	0		0.0
		ESC	0		

NF 20

T(NF) 145

FKV 0

FSTR(NF,I) 0.0      0.0  
                   0.0      300.00

**APENCICE IV**

**PROGRAMA DE CÓMPUTO, ARCHIVOS DE ENTRADA Y DE SALIDA DE DATOS**



\*\*\*\*\*  
 \*  
 \* PROGRAMA PRINCIPAL  
 \*  
 \*\*\*\*\*

DIMENSIONAMIENTOS

```
CLS
$DYNAMIC
DIM Q(5),R(5),XL(5),PARAM(5,5,2)
DIM BI1(5,5),BI2(5,5),ANT(3,5),ENP(5,8),HL(30),HV(30)
DIM AMAT(11,11),EMAT(30,11,11),CM(22,22),FVV(30,5),FLL(30,5)
DIM XFK(30,5),FL(30),FV(30),FEED(8),PROD(2,30,5),FLMAX(5)
DIM SL(30),SV(30),FKV(30),FSTR(30,6),A(11,22)
DIM D(30,11),DEX(30,6),Y(30)
DIM T(30),FVMAX(5),ANTH(2,5),FINH(2,30,5)
DIM MU(30),DFK(30,5,30),HF(30),TF(30),HVV(30,5),HLL(30,5)
DIM DEXH(30,6),HHE(30),CL(30),CV(30)
DIM DFAC(30,5,11),XKF(30,5),HE(30),ATE(30),TEM(30),TE(30)
```

SE INCLUYEN LAS SUBROUTINAS PARA EL PROGRAMA PRINCIPAL DONDE SE ALMACENAN LOS DATOS Y SE CALCULAN LOS COEFICIENTES DE ACTIVIDAD Y FUGACIDAD Y LAS CORRECCIONES QUE SEAN NECESARIAS.

```
$INCLUDE "A:KFAC1.INC"
$INCLUDE "A:ENT1.INC"
$INCLUDE "A:EXCES1.INC"
$INCLUDE "A:EXCOR1.INC"
$INCLUDE "A:GAUSL1.INC"
```

TMAX ES LA DESVIACION MAXIMA DE TEMPERATURA ENTRE ITERACIONES  
 TMAX=10.

NK ES EL NUMERO DE COMPONENTES

```
OPEN "A:DATOS.DAT" FOR INPUT AS #1
SE ABRE EL ARCHIVO DE RESPUESTAS "DRST.DAT"
OPEN "C:DEST.DAT" FOR OUTPUT AS #90
LECTURA DE DATOS
INPUT#1,NK
PRINT#90," NK ES EL NUMERO DE COMPONENTES "
FOR I = 1 TO NK
INPUT#1,NK$(I)
PRINT#90,"COMPONENTE",,PRINT #90,USING "##";I,PRINT #90,NK$(I)
NEXT I
```

SI LAS CONSTANTES ABAJO MENCIONADAS SON MAYORES QUE CERO, COEFICIENTES DE ACTIVIDAD, COEFICIENTES DE FUGACIDAD, FACTOR DE CORRECCION POR DIMERIZACION, Y ENTALPIAS DE EXCESO SERAN CALCULADAS. NDIM ES EL NUMERO DEL COMPONENTE QUE SE DIMERIZA.

```
CS=" # # # # # (COMPONENTE QUE SE DIMERIZA) "
INPUT#1,NOAC,NOFUG,NODIM,NOEX,NDIM
PRINT#90," NOAC NOFUG NODIM NOEX NDIM"
```

```

PRINT#90, USING C$; NOAC, NOFUG, NODIM, NOEX, NDIM
NK0=NK
NK1=NK+1
NK2=2*NK+1
NK11=NK1+1
NK21=NK2-1
NNN=4
NN1=2*NNN+1
NN2=2*NN1
LL2=NNN+1
MMM=50
LL1=2
LL3=8
LL4=3
IF NOAC > 0 THEN GOTO 801
801 PRINT #90, "      INCLUYE COEFICIENTES DE ACTIVIDAD      "
IF NOFUG > 0 THEN GOTO 802
802 PRINT #90, "      INCLUYE COEFICIENTES DE FUGACIDAD      "
IF NODIM > 0 THEN GOTO 803
803 PRINT #90, "      INCLUYE DIMERIZACION      "
IF NOEX > 0 THEN GOTO 804
804 PRINT#90, "      INCLUYE ENTALPIA DE EXCESO      "

```

LECTURA DE LAS CONSTANTES DE ANTOINE

```

FOR J = 1 TO NK
FOR K = 1 TO 3
INPUT#1, ANT(K, J)
NEXT K
NEXT J
FOR J=1 TO NK
ANTM(1, J)=ANT(1, J)
ANT(1, J)=2.302585*(ANT(1, J)-2.880814)
ANTM(2, J)=ANT(2, J)
ANT(2, J)=2.302585*ANT(2, J)
NEXT J

```

LECTURA DE LAS CONSTANTES DE ENTALPIA

```

FOR J = 1 TO NK
FOR K = 1 TO 8
INPUT#1, ENP(J, K)
NEXT K
NEXT J

```

LECTURA DE LAS ESPECIFICACIONES DE LA COLUMNA

```

333 REM
INPUT#1, NST, NFRED, NSL, NSV, NCON, NITP
IF NCON=0 THEN GOTO 555
INPUT #1, DEST, RFLX, P, TT, TB, COND, TSUB, ESC
NITP      NUMERO DE ITERACIONES PERMITIDAS (SI NITP = 0, NO
          HAY LIMITE EN LAS ITERACIONES)
NITE      NUMERO DE ITERACIONES EFECTUADAS
COND      ESPECIFICACION DEL TIPO DE CONDENSADOR:
          [ + ]  PARCIAL
          [ - ]  TOTAL
ESC       ESPECIFICACION DE TIPO DE IMPRESION DESEADA :

```

```

0.0  RESULTADOS DE CADA ITERACION Y FINALES
1.0  FUNCIONES DE DISCREPANCIA Y CORRECCIONES
      A LAS VARIABLES (INCLUYENDO ESC=0.)
2.0  MATRICES DE DERIVADAS PARCIALES BMAT Y
      AMAT (INCLUYENDO ESC=0.,1.)

```

```

LEER EFICIENCIAS DE ETAPA DE MURPRHEE. SI KMU ES POSITIVA, SE
LEE UNA CONSTANTE DE EFICIENCIA EN CADA MUS

```

```

INPUT#1,KMU
IF KMU < 0 THEN GOTO 1001
IF KMU = 0 THEN GOTO 1001
IF KMU > 0 THEN GOTO 1002
1001 REM
   FOR I = 2 TO NST
   INPUT #1,MU(I)
   NEXT I
   GOTO 1004
1002 INPUT#1, MUS
   FOR I=2 TO NST
   MU(I)=MUS
   NEXT I
1004 MU(1)=1.
   IF COND < 0.0 THEN MU(NST) = 1
   FOR I=1 TO NST
   SL(I)=0.
   SV(I)=0.
   FKV(I)=0.
   FSTR(I,NK1)=0.
   FOR J=1 TO NK
   FSTR(I,J)=0.
   NEXT J
   NEXT I
   FOR I=1 TO NST
   HF(I)=0.
   NEXT I

```

```

LECTURA DE LAS ESPECIFICACIONES DE ALIMENTACION

```

```

FOR I = 1 TO NFEED
INPUT#1,NF
INPUT#1, TF(NF)
INPUT#1, FKV(NF)
FOR J = 1 TO NK
INPUT#1, FSTR(NF,J)
HF(NF)=HF(NF)+FSTR(NF,J)*(FKV(NF)*(ENP(J,5)+ENP(J,8)*TF(NF)+ENP_
(J,7)*TF(NF)^2+ENP(J,8)*TF(NF)^3)+(1 - FKV(NF))*(ENP(J,1)+ENP_
(J,2)*TF(NF)+ENP(J,3)*TF(NF)^2+ENP(J,4)*TF(NF)^3))
FSTR(NF,NK1)=FSTR(NF,NK1)+FSTR(NF,J)
NEXT J
NEXT I
IF NSL = 0 THEN GOTO 203
FOR I=1 TO NSL
INPUT#1, NF
INPUT#1,SL(NF)
NEXT I
203 IF NSV = 0 THEN GOTO 204

```

```

FOR I=1 TO NSV
INPUT#1, NF
INPUT#1, SV(NF)
NEXT I
CLOSE#1

```

PRIMERA APROXIMACION DE LOS FLUJOS DE COMPONENTE Y FLUJOS TOTALES.

LOS FLUJOS TOTALES SON ESTIMADOS SUPONIENDO FLUJO CONSTANTE DE ETAPA A ETAPA EN CADA SECCION DE LA COLUMNA.  
PARA LOS FLUJOS DE COMPONENTE, LAS PRIMERAS APROXIMACIONES SON HECHAS POR LAS SIGUIENTES ECUACIONES.

```

FVV(I,J)=FEED(J)/FEED(NK1)*FV(I), Y
FLL(I,J)=FRED(J)/FEED(NK1)*FL(I), DONDE
NK1=NUMERO DE COMPONENTES +UNO
FEED(NK1)=ALIMENTACION TOTAL
FV=FLUJO TOTAL DE VAPOR
FL=FLUJO TOTAL DE LIQUIDO

```

```

204 FV(NST)=DEST
FL(NST)=DEST*RFLX
FV(NST-1)=FL(NST)-FSTR(NST,NK1)+SV(NST)+SL(NST)+DEST
FOR II=3 TO NST
IF NST <= 2 THEN GOTO 210
I=NST+2-II
FL(I)=FL(I+1)-SL(I)+(1.-FKV(I))*FSTR(I,NK1)
FV(I-1)=FV(I)+SV(I)-FKV(I)*FSTR(I,NK1)
NEXT II
210 FL(1)=FL(2)-SL(1)+(1 - FKV(1))*FSTR(1,NK1)
FL(1)=FL(1)-FV(1)
FOR J=1 TO NK1
FEED(J)=0.
FOR I=1 TO NST
FEED(J)=FEED(J)+FSTR(I,J)
NEXT I
NEXT J
BU=0.
FOR J=1 TO NKO
BU=BU+FEED(J)
NEXT J
XDEST=0.
FOR I=1 TO NST
XDEST=XDEST+SV(I)+SL(I)
NEXT I
BU=BU-DEST-XDEST
R$="### *****.### *****.### *****.###
*****.###"
PRINT #90," COMPOSICION DE LA ALIMENTACION Y CONSTANTES DE ANTOINE "
FOR J = 1 TO NK
PRINT #90,USING R$;J,FEED(J),ANTM(1,J),ANTM(2,J),ANT(3,J)
NEXT J

```

DESVIACIONES MAXIMAS DE LOS FLUJOS DE COMPONENTE ENTRE ITERACIONES

```

FOR J=1 TO NK
FVMAX(J)=FEED(J)*RFLX

```



```

FOR I=1 TO NST
FOR J=1 TO NKO
D(I,J)=FVV(I,J)*(1.+SV(I)/FV(I))+FLL(I,J)*(1.+SL(I)/FL(I))-FSTR(I,-
J)
IF I > 1 THEN D(I,J)=D(I,J)-FVV(I-1,J)
IF I < NST THEN D(I,J)=D(I,J)-FLL(I+1,J)
NEXT J
IF I = NST AND COND < 0.0 THEN GOTO 321
FOR J=NK1 TO NK21
K=J-NKO
D(I,J)=MU(I)*XFK(I,K)*FV(I)*FLL(I,K)/FL(I)-FVV(I,K)
IF I > 1 THEN D(I,J)=D(I,J)+(1.-MU(I))*FVV(I-1,K)*FV(I)/FV(I-1)
NEXT J
GOTO 325
BALANCES DE EQUILIBRIO EXCLUSIVAMENTE PARA CONDENSADOR TOTAL
321 SUM = 0.0
FOR J = 1 TO NKO
SUM = SUM + XFK(I,J)*FLL(I,J)/FL(I)
NEXT J
D(I,NK1) = (SUM - 1.)*FV(I)
FOR J = NK11 TO NK21
K = J - NKO
D(I,J) = FLL(I,K)/FL(I)*FV(I) - FVV(I,K)
NEXT J
325 IF I = 1 THEN GOTO 27
IF I = NST THEN GOTO 28
D(I,NK2)=(1.+SV(I)/FV(I))*HV(I)+(1.+SL(I)/FL(I))*HL(I)-HF(I)-HV(I-
1)-HL(I+1)+(FL(I)+SL(I))*HHE(I)-FL(I+1)*HHE(I+1)
GOTO 29
27 D(I,NK2)=BU
FOR J=1 TO NKO
D(I,NK2)=D(I,NK2)-FLL(1,J)
NEXT J
GOTO 29
28 D(I,NK2)=RFLX*DEST
FOR J=1 TO NKO
D(I,NK2)=D(I,NK2)-FLL(NST,J)
NEXT J
GOTO 29
29 REM CONTINUE
NEXT I
IF ESC >= 1 THEN GOTO 800
goto 888
800 PRINT#90, " FUNCIONES DE DISCREPANCIA EN LA ITERACION "
FOR I = 1 TO NST
FOR J = 1 TO NK2
PRINT#90,NITE,D(I,J)
NEXT J
NEXT I

```

DEFINICION DE LA MATRIZ JACOBIANA. CONSISTE DE LAS DERIVADAS PARCIALES DE LAS FUNCIONES CON RESPECTO A LAS VARIABLES EN EL PLATO I

EN LA DESCRIPCION DE LA MATRIZ JACOBIANA(B-MATRIX) LAS FUNCIONES SERAN IDENTIFICADAS COMO F Y LAS VARIOABLES INDEPENDIENTES COMO V.

888 FOR I=1 TO NST  
FOR J=1 TO NKO  
FOR K=1 TO NKO

F=BALANCES DE MATERIA  
V=FLUJO DE COMPONENTE EN FASE LIQUIDA

EMAT(I,J,K)=-FLL(I,J)\*SL(I)/(FL(I)^2)  
NEXT K  
EMAT(I,J,J)=EMAT(I,J,J)+(FL(I)+SL(I))/FL(I)

F=BALANCES DE MATERIA  
V=TEMPERATURA

EMAT(I,J,NK1)=0.  
FOR KK=NK11 TO NK2

F=BALANCES DE MATERIA  
V=FLUJO DE COMPONENTE EN FASE VAPOR

K=KK-NK1  
EMAT(I,J,KK)=-FVV(I,J)\*SV(I)/(FV(I)^2)  
NEXT KK  
EMAT(I,J,J+NK1)=EMAT(I,J,J+NK1)+(1.+SV(I)/FV(I))  
NEXT J  
FOR JJ=NK1 TO NK21  
J=JJ-NKO  
FOR K=1 TO NKO

F=RELACIONES DE EQUILIBRIO  
V=FLUJO DE COMPONENTE EN FASE LIQUIDA

EMAT(I,JJ,K)=MU(I)\*FV(I)\*FLL(I,J)/FL(I)\*(DFK(I,J,K)-XFK(I,J)/FL(I))  
NEXT K  
EMAT(I,J+NKO,J)=EMAT(I,J+NKO,J)+MU(I)\*FV(I)\*XFK(I,J)/FL(I)

F=RELACIONES DE EQUILIBRIO  
V=TEMPERATURA

EMAT(I,JJ,NK1)=MU(I)\*FV(I)\*FLL(I,J)\*DFK(I,J,NK1)/FL(I)  
FOR KK=NK11 TO NK2

F=RELACIONES DE EQUILIBRIO  
V=FLUJO DE COMPONENTE EN FASE VAPOR

K=KK-NK1  
EMAT(I,JJ,KK)=MU(I)\*FLL(I,J)\*(XFK(I,J)+DFK(I,J,KK)\*FV(I))/FL(I)  
IF I > 1 THEN EMAT(I,JJ,KK)=EMAT(I,JJ,KK)+(1.-MU(I))\*FVV(I-1,J)/FV(I-1)  
NEXT KK  
EMAT(I,J+NKO,J+NK1)=EMAT(I,J+NKO,J+NK1)-1.  
NEXT JJ  
IF I < > NST OR COND >= 0.0 THEN GOTO 465  
DERIVADAS DE RELACIONES DE EQUILIBRIO PARA CONDENSADOR TOTAL  
FOR K = 1 TO NK2  
FOR JJ = 2 TO NKO  
J = JJ + NKO

```

BMAT(I,NK1,K) = BMAT(I,NK1,K) + BMAT(I,J,K)
NEXT JJ
NEXT K
CONS1 = FV(I)/FL(I)
FOR JJ = NK11 TO NK21
J = JJ - NKO
CONS2 = FLL(I,J)/FL(I)
FOR K = 1 TO NKO
BMAT(I,JJ,K) = -CONS2*CONS1
NEXT K
BMAT(I,JJ,J) = BMAT(I,JJ,J) + CONS1
BMAT(I,JJ,NK1) = 0.0
FOR KK = NK11 TO NK2
BMAT(I,JJ,KK) = CONS2
NEXT KK
BMAT(I,JJ,NK1+J) = BMAT(I,JJ,NK1+J) - 1.0
NEXT JJ

```

NOTE LA ECUACION ESPECIAL PARA I=1 E I=NST

```

485 IF I = 1 THEN GOTO 103
IF I = NST THEN GOTO 103
FOR K = 1 TO NKO

```

F=BALANCES DE ENTALPIA  
V=FLUJO DE COMPONENTE EN FASE LIQUIDA

```

BMAT(I,NK2,K)=-HL(I)*SL(I)/(FL(I)^2)+(1.+SL(I)/FL(I))*HLL(I,K)+HHR_
(I)+(FL(I)+SL(I))*DEXH(I,K)
NEXT K

```

F=BALANCES DE ENTALPIA  
V=TEMPERATURA

```

BMAT(I,NK2,NK1)=CV(I)*(1.+SV(I)/FV(I))+CL(I)*(1.+SL(I)/FL(I))+(FL(_
I)+SL(I))*DEXH(I,NK1)
FOR KK=NK11 TO NK2

```

F=BALANCES DE ENTALPIA  
V=FLUJO DE COMPONENTE EN FASE VAPOR

```

K=KK-NK1
BMAT(I,NK2,KK)=-HV(I)*SV(I)/(FV(I)^2)+(1.+SV(I)/FV(I))*HVV(I,K)
NEXT KK
GOTO 104

```

```

103 FOR K=1 TO NK2
BMAT(I,NK2,K)=0.
NEXT K
FOR K=1 TO NKO
BMAT(I,NK2,K)=-1.
NEXT K
104 NEXT I

```

```

IF ESC < 2.0 THEN GOTO 739
FOR I = 1 TO NST
PRINT#90,"MATRIZ B PARA EL PLATO",
PRINT#90,I;
PRINT#90,"
FOR K=1 TO NK2 : FOR J=1 TO NK2 :PRINT#90, BMAT(I,J,K);:

```



```
NEXT J : NEXT K
NEXT I
```

```
DEFINICION DE LA PRIMERA MATRIZ JACOBIANA CONSISTENTE DE LAS DERIVADAS PARCIALES DEL I'ESIMO PLATO CON RESPECTO A LAS VAIRABLES EN EL PLATO I-1(A-MATRIX,I=1)
```

```
NOTE QUE LA PROXIMA MATRIZ JACOBIANA(I=2,3,...) SE DEFINE EN EL CICLO NUMERO 50
```

```
  *$SEGMENT
739 FOR J=1 TO NK2
    FOR K=1 TO NK2
      AMAT(J,K)=0
    NEXT K
  NEXT J
  FOR J=1 TO NKO
```

```
    F=BALANCES DE MATERIA
    V=FLUJO DE COMPONENTE EN FASE VAPOR
```

```
  AMAT(J,J+NK1)= -1
  NEXT J
```

```
    F=BALANCES DE ENTALPIA
    V=TEMPERATURA
```

```
  AMAT(NK2,NK1)=-CV(1)
  YX=(1-MU(2))*FV(2)/(FV(1)^2)
```

```
    F=RRELACIONES DE EQUILIBRIO
    V=FLUJO DE COMPONENTE EN FASE VAPOR
```

```
  FOR JJ=NK1 TO NK21
    J=JJ-NKO
    FOR KK=NK11 TO NK2
      K=KK-NK1
      AMAT(JJ,KK)=-YX*FVV(1,J)
    NEXT KK
    AMAT(J+NKO,J+NK1)=AMAT(J+NKO,J+NK1)+YX*FV(1)
  NEXT JJ
  FOR KK=NK11 TO NK2
```

```
    F=BALANCES DE ENTALPIA
    V=FLUJO DE COMPONENTE EN FASE VAPOR
```

```
  K=KK-NK1
  AMAT(NK2,KK)=-HV(1,K)
  NEXT KK
  IF ESC >= 2.0 THEN GOTO 561
  GOTO 562
561 PRINT#90,"MATRIZ A PARA EL PLATO 2"
  FOR I = 1 TO NK2
    FOR J = 1 TO NK2
      PRINT#90,AMAT(I,J);
    NEXT J
  NEXT I
```

```
NOTE QUE EL SIGNO DE D(I,J) ES CAMBIADO DEBIDO A LA ECUACION DE NEWTON-RAPHSON.
```

```
562 FOR I=1 TO NST
    FOR J=1 TO NK2
    D(I,J)=-D(I,J)
    NEXT J
    NEXT I
```

SOLUCION DEL BLOQUE TRIDIAGONAL DE ECUACIONES.

```
FOR I = 2 TO NST
FOR J=1 TO NK2
```

LA B-MATRIZ Y LA A-MATRIZ SON ALMACENADAS EN LA MATRIZ CM. NOTE QUE AMBAS, A Y B SON ALMACENADAS EN FORMA TRANSPUESTA.

```
FOR K=1 TO NK2
CM(J,K)=BMAT(I-1,K,J)
NEXT K
NEXT J
FOR K=1 TO NK2
KK=K+NK2
FOR J=1 TO NK2
CM(J,KK)=AMAT(K,J)
NEXT J
NEXT K
```

FORMACION DE LA A-MATRIX.

```
FOR J=1 TO NK2
FOR K=1 TO NK2
AMAT(J,K)=0.
NEXT K
NEXT J
IF I = NST THEN GOTO B5
FOR J=1 TO NKO
```

F=BALANCES DE MATERIA  
V=FLUJO DE COMPONENTE EN FASE VAPOR

```
AMAT(J,J+NK1)=-1.
NEXT J
FIN DE DERIVADAS PARA CONDENSADOR TOTAL
IF I = NST-1 AND COND < 0.0 THEN GOTO B5
X=(1 - MU(I+1))*FV(I+1)/(FV(I)^2)
FOR JJ=NK1 TO NK21
```

F=RELACIONES DE EQUILIBRIO  
V=FLUJO DE COMPONENTE EN FASE VAPOR

```
J=JJ-NKO
FOR KK=NK11 TO NK2
K=KK-NK1
AMAT(JJ,KK)=-X*FVV(I,J)
NEXT KK
AMAT(J+NKO,J+NK1)=AMAT(J+NKO,J+NK1)+X*FV(I)
NEXT JJ
```

NOTE QUE PARA EL PLATO NST (DOMO DE LA COLUMNA), SE TIENEN

RELACIONES ESPECIALES (GO TO 85).

IF I = NST-1 THEN GOTO 85

F=BALANCES DE ENTALPIA  
V=TEMPERATURA

AMAT(NK2,NK1)=-CV(I)  
FOR KK=NK11 TO NK2

F=BALANCES DE ENTALPIA  
V=FLUJO DE COMPONENTE FASE DE VAPOR

K=KK-NK1  
AMAT(NK2,KK)=-HVV(I,K)

85 NEXT KK

IF ESC < 2.0 THEN GOTO 88

III = I + 1

PRINT#90,"MATRIZ A PARA EL PLATO"

PRINT#90,III;

FOR I1= 1 TO NK2

FOR J1= 1 TO NK2

PRINT#90,AMAT(I1,J1);

NEXT J1

NEXT I1

SOLUCION A  $Q=A \quad *B$  (INVERSA).  
N-1 N-1

NOTE QUE LA SOLUCION ES TRANSPUESTA.

88 CALL GAUSLI(NN1,NN2,NK2,NK2,CM())

FOR J=1 TO NK2

FOR K=1 TO NK2

KK=NK2+K

CM(K,J)=CM(J,KK)

NEXT K

NEXT J

ALINEAMIENTO DE LAS MATRICES PARA ELIMINACION

NOTE QUE LA MATRIZ JACOBIANA, CONSISTE DE LAS DERIVADAS PARCIALES DE LAS FUNCIONES DEL I'ESIMO PLATO CON RESPECTO A LAS VARIABLES EN EL PLATO I+1, NO ES ALMACENADA, PORQUE SU ESTRUCTURA ES SIMPLE.

FOR J=1 TO NK2

FOR K=1 TO NK0

IF I = 2 THEN BMAT(I,J,K)=EMAT(I,J,K)+CM(J,K)

IF I = 2 THEN GOTO 58

BMAT(I,J,K)=EMAT(I,J,K)+CM(J,K)+CM(J,NK2)\*(HLL(I,K)+HHE(I)+FL(I)\*

DEXH(I,K))

58 REM

NEXT K

NEXT J

IF I = 2 THEN GOTO 150

FOR J=1 TO NK2

BMAT(I,J,NK1)=EMAT(I,J,NK1)+CM(J,NK2)\*(CL(I)+FL(I)\*DEXH(I,NK1))

NEXT J

```

150 FOR J=1 TO NK2
    FOR K=1 TO NK2
    D(I,J)=D(I,J)-CM(J,K)*D(I-1,K)
    NEXT K
    NEXT J
    NEXT I

```

CORRECCION DE LAS VARIABLES DE ACUERDO AL METODO DE NEWTON-RAPHSON  
 LA ESTRUCTURA SIMPLE DE LA MATRIZ JACOBIANA COMPLETA ES LA UTILIZADA.

```

FOR KK=1 TO NST
    I=NST+1-KK
    FOR J=1 TO NK2
    CM(J,NK2+1)=D(I,J)
    FOR K=1 TO NK2
    CM(J,K)=EMAT(I,J,K)
    NEXT K
    NEXT J
    IF I-NST < 0 THEN GOTO 662
    IF I-NST = 0 THEN GOTO 63
    IF I-NST > 0 THEN GOTO 63
862 FOR J=1 TO NKO
    CM(J,NK2+1)=CM(J,NK2+1)+D(I+1,J)
    NEXT J
    IF I = 1 THEN GOTO 63
    FOR J=1 TO NKO
    CM(NK2,NK2+1)=CM(NK2,NK2+1)+D(I+1,J)*(HLL(I+1,J)+HHE(I+1)+FL(I+1)*_
    DEXH(I+1,J))
    NEXT J
    CM(NK2,NK2+1)=CM(NK2,NK2+1)+D(I+1,NK1)*(CL(I+1)+FL(I+1)*DEXH(I+1,NK1_
    ))
63 CALL GAUSL1(NN1,NN2,NK2,1,CM())
    FOR J=1 TO NK2
    D(I,J)=CM(J,NK2+1)
    NEXT J
    FOR J=1 TO NKO

```

EVALUACION DE LAS CORRECCIONES. SI SON GRANDES, ENTONCES  
 SON LOS LIMITES ESPECIFICADOS PARA LAS CORRECCIONES DE FLUJO Y  
 TEMPERATURA. (FLMAX,FVMAX,TMAX)

```

QQ=1.
IF (ABS(D(I,J))-FLMAX(J)) < 0 THEN GOTO 222
IF (ABS(D(I,J))-FLMAX(J)) = 0 THEN GOTO 222
IF (ABS(D(I,J))-FLMAX(J)) > 0 THEN GOTO 223
223 QQ=FLMAX(J)/ABS(D(I,J))
222 REM CONTINUE
    FLL(I,J)=FLL(I,J)+QQ*D(I,J)
    NEXT J
    QQ=1.
    IF (ABS(D(I,NK1))-TMAX) < 0 THEN GOTO 233
    IF (ABS(D(I,NK1))-TMAX) = 0 THEN GOTO 233
    IF (ABS(D(I,NK1))-TMAX) > 0 THEN GOTO 234
234 QQ=TMAX/ABS(D(I,NK1))
233 REM CONTINUE
    T(I)=T(I)+D(I,NK1)*QQ
    FOR JJ=NK11 TO NK2
    J=JJ-NK1
    QQ=1.

```

```

IF (ABS(D(I,JJ))-FVMAX(J)) < 0 THEN GOTO 243
IF (ABS(D(I,JJ))-FVMAX(J)) = 0 THEN GOTO 243
IF (ABS(D(I,JJ))-FVMAX(J)) > 0 THEN GOTO 244
244 QQ=FVMAX(J)/ABS(D(I,JJ))
243 REM CONTINUE
FVV(I,J)=FVV(I,J)+D(I,JJ)*QQ
NEXT JJ
FOR J=1 TO NKO

```

LOS SIGNOS DE LAS VARIABLES SON REVISADOS.

```

IF FLL(I,J) < 0 THEN GOTO 121
IF FLL(I,J) = 0 THEN GOTO 121
IF FLL(I,J) > 0 THEN GOTO 122
121 FLL(I,J)=0.0001
122 REM CONTINUE
IF FVV(I,J) < 0 THEN GOTO 131
IF FVV(I,J) = 0 THEN GOTO 131
IF FVV(I,J) > 0 THEN GOTO 132
131 FVV(I,J)=0.0001
132 REM CONTINUE
NEXT J
NEXT KK
IF ESC > = 1 THEN GOTO 601
GOTO 666

```

```

601 PRINT#90,"CORRECCIONES A LAS VARIABLES EN LA ITERACION"
PRINT#90,NITE
FOR I = 1 TO NST
FOR J=1 TO NK2
PRINT#90,D(I,J)
NEXT J
NEXT I
666 FOR I=1 TO NST
FL(I)=0.
FV(I)=0.
FOR J=1 TO NKO
FL(I)=FL(I)+FLL(I,J)
FV(I)=FV(I)+FVV(I,J)
NEXT J
NEXT I

```

LOS FLUJOS DE COMPONENTE SON MODIFICADOS DE MODO QUE LOS FLUJOS TOTALES SEAN LOS MISMOS QUE LOS SUPUESTOS DE ANTEMANO (ALREDEDOR DEL DOMO Y FONDO)

```

PRINT#90," "
PRINT#90," "
PRINT#90," ETAPA    TEMP.    FLUJO TOTAL    FLUJO DE COMPONENTE    "
PRINT#90,"(TODOS LOS FLUJOS SON FLUJOS DE LIQUIDO) "
FOR I = 1 TO NST
PRINT#90," "
PRINT#90,USING X55;I,T(I),FL(I); :FOR J=1 TO NKO : _
PRINT#90,USING X55$; FLL(I,J);: NEXT J
NEXT I
PRINT#90," "
PRINT#90," "
PRINT#90," ETAPA    TEMP.    FLUJO TOTAL    FLUJO DE COMPONENTE"
PRINT#90,"(TODOS LOS FLUJOS SON FLUJOS DE VAPOR)"
FOR I = 1 TO NST
PRINT#90," "

```

```

PRINT#90,USING X5$;I,T(I),FV(I); :FOR J=1 TO NKO : _
PRINT#90,USING X5$; FVV(I,J);: NEXT J
NEXT I
RES=0.
FOR I=1 TO NST

```

SUMA DE LOS CUADRADOS DE LAS CORRECCIONES A LAS VARIABLES INDEPENDIENTES

```

FOR J=1 TO NK2
RES=RES+(D(I,J)^2)
NEXT J
NEXT I
E$= "####.#####.-----"
PRINT#90, "
PRINT#90, "
PRINT#90, " RESIDUO = ",:PRINT#90,USING E$;RES
PRINT "RESIDUO=";RES
IF (ABS(RES)-1) < 0 THEN GOTO 600
IF (ABS(RES)-1) = 0 THEN GOTO 600
IF (ABS(RES)-1) > 0 THEN GOTO 500
600 FOR I=1 TO NST
FOR J=1 TO NK
PROD(1,I,J)=FLL(I,J)*SL(I)/FL(I)
PROD(2,I,J)=FVV(I,J)*SV(I)/FV(I)
NEXT J
NEXT I
FOR J=1 TO NKO
PROD(1,1,J)=FLL(1,J)
PROD(2,NST,J)=FVV(NST,J)
NEXT J
FOR K=1 TO 2
IF K = 1 THEN GOTO 614
IF K = 2 THEN GOTO 615
614 PRINT#90,"
PRINT#90, "
PRINT#90, " FLUJO DE PRODUCTO, FASE LIQUIDA "
GOTO 616
615 PRINT#90,"
PRINT#90, "
PRINT#90, " FLUJO DE PRODUCTO, FASE VAPOR "
616 FOR I = 1 TO NST
PRINT#90,"
PRINT#90, USING X5$; I;:FOR J=1 TO NKO :PRINT#90,USING X5$;PROD(K,I,J)
:_:NEXT J
NEXT I
NEXT K
603 PRINT#90,"
PRINT#90, "
PRINT#90, " PERFIL DE FACTOR-K EN LA COLUMNA "
FOR I = 1 TO NST
PRINT#90,"
PRINT#90, USING X5$; I;:FOR J=1 TO NKO :PRINT#90,USING X5$;XFK(I,J);_
:NEXT J
NEXT I
FOR I=1 TO NST
XT=0.
YT=0.
FOR J=1 TO NK

```

```

XT=XT+FLL(I,J)
YT=YT+FVV(I,J)
NEXT J
FOR J=1 TO NK
FINM(1,I,J)=FLL(I,J)/XT
FINM(2,I,J)=FVV(I,J)/YT
NEXT J
NEXT I
FOR K=1 TO 2
IF K = 1 THEN GOTO 723
IF K = 2 THEN GOTO 724
723 PRINT#90," "
PRINT#90," "
PRINT#90," PERFIL DE FRACCION MOL EN LA COLUMNA (FASE LIQUIDA) "
GOTO 725
724 PRINT#90," "
PRINT#90," "
PRINT#90," PERFIL DE FRACCION MOL EN LA COLUMNA (FASE VAPOR) "
725 FOR I = 1 TO NST
PRINT#90," "
PRINT#90, USING X5$, I; FOR J=1 TO NK :PRINT#90, USING X55$, FINM(K,I,J)
;_:NEXT J
NEXT I
NEXT K
LAS CARGAS TERMICAS DEBIDAS AL REHERVIDOR Y AL CONDENSADOR SON CALCULADAS.
CALL ENT1(NK,NST,T( ),FLL( ),FVV( ),HLL( ),HVV( ),HL( ),HV( ),
CL( ),CV( ),ENP( ))
QC=HV(NST-1)-HL(NST)-HV(NST)
QR=HV(1)+HL(1)-HL(2)
Z$= "#####.#####.-----"
PRINT#90," "
PRINT#90," "
PRINT#90," EL CALOR SUMINISTRADO EN EL REHERVIDOR ES ",:PRINT#90,
USING Z$;QR,:PRINT#90," (CAL/HR) "
PRINT#90," "
PRINT#90," "
PRINT#90," EL CALOR ELIMINADO POR EL CONDENSADOR ES",:PRINT#90,USING_
Z$;QC,:PRINT#90," (CAL/HR) "
CLOSE#90
PRINT "EJECUCION TERMINADA"
555 END

```

```

*****
*
* SUBROUTINA KFAC(NST,NKO,T,ANT,P,FLL,FVV,XKF,DFAC)
*
*****

```

TEMPERATURA EN GRADOS CELSIUS

ESTA SUBROUTINA CALCULA EL FACTOR DE SEPARACION Y LAS DERIVADAS PARCIALES DEL FACTOR DE SEPARACION CON RESPECTO AL FLUJO DE COMPONENTE EN LA FASE VAPOR, AL FLUJO DE COMPONENTE EN FASE LIQUIDA Y A LA TEMPERATURA.

EXCEPTO PARA LA DEPENDENCIA DE LA TEMPERATURA, TODAS LAS DERIVADAS SON EVALUADAS NUMERICAMENTE.

EN EL CALCULO DE DERIVADAS, SE ASUME QUE LA DEPENDENCIA DE LOS COEFICIENTES DE ACTIVIDAD (FASE LIQUIDA), LOS COEFICIENTES DE FUGACIDAD (FASE VAPOR) CON RESPECTO A LA TEMPERATURA SE PUEDEN DESPRECIAR, EXCEPTO EN EL CASO DE DIMERIZACION.

EN ESTE CASO LA DERIVADA SE HACE NUMERICAMENTE

\$INCLUDE "A:MQUAC1.INC"

\$INCLUDE "A:FUG1.INC"

\$INCLUDE "A:ONEDI1.INC"

SUB KFAC1(NK,NST,T(1),FLL(2),FVV(2),ANT(2),P,XKF(2),DFAC(3),NKO,NODIM,NDIM,NOAC,NOFUG)

LOCAL XX(),PAR(),X()

,GAM(),GAMX(),YY(),Y(),FI(),FIM(),FIXM()

DIM XX(5),PAR(5),X(5)

,GAM(5),GAMX(5),YY(5),Y(5),FI(5),FIM(5),FIXM(5)

NK1=NKO+1

CALCULO DEL FACTOR DE SEPARACION.

FOR I=1 TO NST

XT=0.

YT=0.

FOR J=1 TO NK0

YT=YT+FVV(I,J)

XT=XT+FLL(I,J)

PAR(J)=EXP(ANT(1,J)-ANT(2,J)/(T(I)+ANT(3,J)))/P

NEXT J

FOR J=1 TO NK0

YY(J)=FVV(I,J)/YT

Y(J)=YY(J)

XX(J)=FLL(I,J)/XT

NEXT J

CALL MQUAC1(NK,T(I)+273.16,XX(),GAM(),NOAC)

IF NODIM > 0 THEN CALL ONEDI1(P,T(I)+273.16,Y(NDIM),AKA,ZDIM,ZNODIM)

IF NODIM > 0 THEN PAR(NDIM)=(SQR(1+4\*AKA\*PAR(NDIM)\*P)-1)/2/ AKA/P

CALL FUG1(NK,T(I)+273.16,P,YY(),FI(),PAR(),NOFUG,NODIM,NDIM)

FOR J=1 TO NK0

XKF(I,J)=PAR(J)\*GAM(J)/FI(J)

NEXT J

SI NOAC ES MENOR QUE UNO, SE ASUME QUE LA FASE LIQUIDA FORMA



UNA MEZCLA IDEAL. EN ESE CASO LAS DERIVADAS PARCIALES DEL FACTOR DE SEPARACION CON RESPECTO AL FLUJO DE COMPONENTE EN FASE LIQUIDA SON CERO ( GO TO 1)

IF NOAC < 1 THEN GOTO 111

CALCULO DE LA DERIVADA DEL FACTOR DE SEPARACION CON RESPECTO AL FLUJO DE COMPONENTE EN FASE LIQUIDA.

```
FOR K=1 TO NKO
FOR J=1 TO NKO
XX(J)=FLL(I,J)/(XT+1)
NEXT J
XX(K)=(FLL(I,K)+1)/(XT+1)
CALL HQUAC1(NK,T(I)+273.16,XX( ),GAMX( ),NOAC)
FOR J=1 TO NKO
DFAC(I,J,K)=PAR(J)*GAMX(J)/FI(J)-XKF(I,J)
NEXT J
NEXT K
GOTO 40
```

```
111 FOR J=1 TO NKO
FOR K=1 TO NK
DFAC(I,J,K)=0.
NEXT K
NEXT J
```

40 REM CONTINUE

SI NOFUG ES MENOR QUE UNO, SE ASUME QUE LA FASE DE VAPOR FORMA UNA MEZCLA IDEAL, ENTONCES LAS DERIVADAS PARCIALES DEL FACTOR DE SEPARACION CON RESPECTO AL FLUJO DE COMPONENTE EN FASE DE VAPOR SON CERO.( GO TO 41).

IF NOFUG < 1 THEN GOTO 41

CALCULO DE LA DERIVADA DEL FACTOR DE SEPARACION CON RESPECTO AL FLUJO DE COMPONENTE EN FASE VAPOR.

```
FOR K=1 TO NK
FOR J=1 TO NK
YY(J)=FVV(I,J)/(YT+1.)
NEXT J
YY(K)=(FVV(I,K)+1.)/(YT+1)
CALL FUG1(NK,T(I)+273.16,P,YY( ),FIM( ),PAR( ),NOFUG,NODIM,NDIM)
FOR J=1 TO NK
DFAC(I,J,K+1+NK)=PAR(J)*GAM(J)/FIM(J)-XKF(I,J)
NEXT J
NEXT K
GOTO 42
```

```
41 FOR J=1 TO NKO
FOR K=1 TO NKO
DFAC(I,J,K+NKO+1)=0
NEXT K
NEXT J
```

42 REM CONTINUE

CALCULO DE LA DRIVADA DEL FACTOR DE SEPARACION CON RESPECTO A LA TEMPERATURA.

```
FOR J=1 TO NKO
DFAC(I,J,NKO+1)=XKF(I,J)*ANT(2,J)/(T(I)+ANT(3,J))^2
NEXT J
```

```
SI NODIM ES MENOR QUE UNO, SE ASUME QUE NO HAY DIMERIZACION
POR LO TANTO NO HAY CORRECCION PARA LA DERIVADA.
```

```
IF NODIM > 0 THEN CALL ONEDI1(P,T(I)+278.16,Y(NDIM),AKAS,ZDIMM,ZNO)
IF NODIM > 0 THEN PAR(NDIM)=EXP(ANT(1,NDIM)-ANT(2,NDIM)/(T(I)+5.+ANT(
3,NDIM)))
IF NODIM > 0 THEN PAR(NDIM)=(SQR(1.+4.*AKAS*PAR(NDIM))-1.)/2./AKAS/P
IF NODIM > 0 THEN CALL FUG1(NK,T(I)+278.16,P,Y( ),FIXM( ),PAR(
),NOFUG,NODIM,NDIM)
```

```
CALCULO DE LA DERIVADA DEL FACTOR DE SEPARACION CON RES-
PECTO A LA TEMPERATURA EN CASO DE QUE EXISTA DIMERIZACION.
```

```
IF NODIM > 0 THEN DFAC(I,NDIM,NK1)=(PAR(NDIM)*GAM(NDIM)/FIXM(NDIM)-
XKF(I,NDIM))/5.
```

```
10 NEXT I
END SUB
```

```

*****
*
* SUBROUTINA ENT(NST,T,FLL,FVV,HLL,HVV,HL,HV,CL,CV)
*
*****

```

ESTA SUBROUTINA CALCULA

LA ENTALPIA DEL COMPONENTE PURO.

LA ENTALPIA TOTAL DE UNA FASE.

LAS DERIVADAS PARCIALES DE LA ENTALPIA TOTAL

CON RESPECTO A LA TEMPERATURA.

LA ENTALPIA ES CALCULADA POR

$H=H_0+C \cdot T$ .

NOTE QUE EN LA ENTRADA DE DATOS, LOS PARAMETROS DEL LIQUIDO

SON LEIDOS PRIMERO QUE LOS PARAMETROS DEL VAPOR.

LAS ENTALPIAS DE EVAPORACION ESTAN REFERIDAS A LA MISMA

TEMPERATURA.

```

SUB ENT1(NK,NST,T(1),FLL(2),FVV(2),HLL(2),HVV(2),HL(1),HV(1),
CL(1),CV(1),ENP(2))

```

```

FOR I=1 TO NST

```

```

HL(I)=0

```

```

HV(I)=0

```

```

CL(I)=0

```

```

CV(I)=0

```

```

FOR J=1 TO NK

```

```

HLL(I,J)=ENP(J,1)+ENP(J,2)*T(I)+ENP(J,3)*T(I)^2+ENP(J,4)*T(I)^3

```

```

HVV(I,J)=ENP(J,5)+ENP(J,6)*T(I)+ENP(J,7)*T(I)^2+ENP(J,8)*T(I)^3

```

```

HL(I)=HL(I)+HLL(I,J)*FLL(I,J)

```

```

HV(I)=HV(I)+HVV(I,J)*FVV(I,J)

```

```

CL(I)=CL(I)+(ENP(J,2)+2*ENP(J,3)*T(I)+3*ENP(J,4)*T(I)^2)*FLL(I,J)

```

```

CV(I)=CV(I)+(ENP(J,6)+2*ENP(J,7)*T(I)+3*ENP(J,8)*T(I)^2)*FVV(I,J)

```

```

NEXT J

```

```

NEXT I

```

```

END SUB

```

```

*****
*
* SUBROUTINA EXCOR(NST,TEM,FLL,DEX)
*
*****

```

TEMPERATURA EN GRADOS CELSIUS

ESTA SUBROUTINA CALCULA LAS DERIVADAS PARCIALES DE LA ENTALPIA DE EXCESO CON RESPECTO AL FLUJO DE COMPONENTE EN FASE LIQUIDA Y TEMPERATURA. AMBAS SON EVALUADAS NUMERICAMENTE.

SUB EXCOR1(NK,NST,TEM(1),FLL(2),DEX(2),NOEX,Q(1),PARAM(3),TE(1),ATE(1))

```

LOCAL FL2(),FL3(),FLM(),HE(),HEX(),TEMX()
DIM FL2(30,5),FL3(30,5),FLM(30,5),HE(30),HEX(30),TEMX(30)
NK1=NK+1
IF NOEX < 1 THEN GOTO 550
for i=1 to nst
  for j=1 to nk
    f12(i,j)=f11(i,j)
    FL3(I,J)=FLL(I,J)
  next j
next i
CALL EXCES1(NK,NST,TEM( ),f12( ),HE( ),NOEX,Q( ),PARAM( ),TE())
for m=1 to nst
  for n=1 to nk
    flm(m,n)=0.0
  NEXT N
NEXT M
FOR J=1 TO NK
FOR I=1 TO NST
FOR K=1 TO NK
FLM(I,K)=FL3(I,K)
NEXT K
FLM(I,J)=FL2(I,J)+1.
NEXT I
CALL EXCES1(NK,NST,TEM( ),FLM( ),HEX( ),NOEX,Q( ),PARAM( ),TE())
FOR I = 1 TO NST
DEX(I,J)=HEX(I)-HE(I)
NEXT I
NEXT J
FOR I=1 TO NST
TEMX(I)=TEM(I)+20
NEXT I
CALL EXCES1(NK,NST,TEMX( ),FL2( ),HEX( ),NOEX,Q( ),PARAM( ),TE())
FOR I=1 TO NST
DEX(I,NK+1)=(HEX(I)-HE(I))/20
NEXT I
GOTO 760
550 FOR I=1 TO NST
FOR J=1 TO NK1
DEX(I,J)=0.
NEXT J
NEXT I
760 END SUB

```

```
*****
*
* SUBROUTINA EXCES(NST,ATE,FLL,HE)
*
*****
```

TEMPERATURA EN GRADOS CELSIUS

ESTA SUBROUTINA CALCULA LA ENTALPIA DE EXCESO DE LA MEZCLA LIQUIDA, LA ENTALPIA DE UNA MEZCLA ES DEFINIDA COMO LA ENTALPIA IDEAL +EL EXCESO DE ENTALPIA. EL CALCULO ESTA BASADO EN LOS PARAMETROS UNIQUAC.

NOTE QUE ESTE METODO NO ES LO MAS EXACTO PARA PREDECIR ENTALPIAS DE EXCESO.

SUB EXCES1(NK,NST,ATE(1),FLL(2),HE(1),NOEX,Q(1),PARAM(3),TE(1))

```
IF NOEX < 1 THEN GOTO 790
OPEN "A:UNIQU.DAT" FOR INPUT AS#11
FOR I = 1 TO NK
  INPUT#11,Q(I),R(I),XL(I)
NEXT I
FOR K = 1 TO 2
  FOR I = 1 TO NK
    FOR J = 1 TO NK
      INPUT#11,PARAM(I,J,X)
    NEXT J
  NEXT I
NEXT K
CLOSE#11
FOR I=1 TO NST
  HE(I)=0
  TE(I)=ATE(I)+273.16
  NEXT I
  FOR K=1 TO NST
    XT=0
    FOR J=1 TO NK
      XT=XT+FLL(K,J)
    NEXT J
    FOR J=1 TO NK
      X(J)=FLL(K,J)/XT
    NEXT J
    THETS=0
    FOR I=1 TO NK
      THETS=THETS+Q(I)*X(I)
    NEXT I
    FOR J=1 TO NK
      THETA(J)=Q(J)*X(J)/THETS
    NEXT J
    FOR I=1 TO NK
      HFAC(I)=0
      HHFA(I)=0
      FOR J=1 TO NK
        HFAC(I)=HFAC(I)+THETA(J)*(PARAM(J,I,1)+PARAM(J,I,2)*TE(K))*_
        LOG(PARAM(J,I,1)+PARAM(J,I,2)*TE(K))
```

```
HHFA(I)=HHFA(I)+THETA(J)*(PARAM(J,I,1)+PARAM(J,I,2)*TE(K))
NEXT J
NEXT I
FOR I=1 TO NK
HM(I)=Q(I)*X(I)*HFAC(I)/HHFA(I)
NEXT I
FOR I=1 TO NK
HE(K)=HE(K)-1.9872*TE(K)*HM(I)
NEXT I
NEXT K
GOTO 999
790 FOR I=1 TO NST
HE(I)=0
NEXT I
999 END SUB
```

```
*****  
* SUBROUTINA MQUAC(TEMP,X,GAM)  
*  
*****
```

```
ESTA SUBROUTINA CALCULA LOS COEFICIENTES DE ACTIVIDAD EN LA FASE  
LIQUIDA DE ACUERDO AL MODELO UNIGUAC.
```

```
SUB MQUAC1(NK,TEMP,X(1),GAM(1),NOAC)  
LOCAL PAR()  
DIM PAR(5,5)  
IF NOAC < 1 THEN GOTO 5
```

```
OPEN "A:UNIQ.DAT" FOR INPUT AS#11  
FOR I = 1 TO NK  
INPUT#11,Q(I),R(I),XL(I)  
NEXT I  
FOR K = 1 TO 2  
FOR I = 1 TO NK  
FOR J = 1 TO NK  
INPUT#11,PARAM(I,J,K)  
NEXT J  
NEXT I  
NEXT K  
CLOSE#11
```

```
THETS=0.
```

```
PHS=0.
```

```
XLS=0.
```

```
FOR I=1 TO NK
```

```
THETS = THETS + Q(I)*X(I)
```

```
PHS = PHS + R(I)*X(I)
```

```
XLS = XLS + XL(I)*X(I)
```

```
NEXT I
```

```
FOR I=1 TO NK
```

```
THETA(I) = Q(I)*X(I)/THETS
```

```
PHI(I) = X(I)*R(I)/PHS
```

```
NEXT I
```

```
FOR I=1 TO NK
```

```
THS(I)=0.
```

```
FOR J=1 TO NK
```

```
PAR(J,I)=PARAM(J,I,1)+TEMP*PARAM(J,I,2)
```

```
THS(I)= THS(I) + THETA(J)*PAR(J,I)
```

```
NEXT J
```

```
NEXT I
```

```
FOR I=1 TO NK
```

```
GA = LOG(R(I)/PHS) + 5 *Q(I)*LOG(Q(I)/R(I)*PHS/THETS)
```

```
GA=GA+XL(I)-R(I)/PHS+XLS
```

```
GB = 1 - LOG(THS(I))
```

```
FOR J=1 TO NK
```

```
GB = GB - THETA(J)*PAR(I,J)/THS(J)
```

```
NEXT J
```

```
GAM(I) = EXP(GA + Q(I)*GB)
```

```
NEXT I
```

```
GOTO 100
```

```
5 FOR J=1 TO NK
```

```
GAM(J)=1
```

```
NEXT J
```

```
100 END SUB
```

```

*****
*
* SUBROUTINA FUG(TT,P,Y,FI,PAR)
*
*****

```

TEMPERATURA EN KELVIN

BI1 Y BI2 SON LOS SEGUNDOS COEFICIENTES VIRIALES A LAS TEMPERATURAS T1 Y T2, AMBAS EN KELVIN.  
 ESTA SUBROUTINA CALCULA LOS COEFICIENTES DE FUGACIDAD EN LA FASE DE VAPOR. EL EFECTO DE DIMERIZACION ES INCLUIDO EN EL CALCULO.  
 LOS COEFICIENTES DE FUGACIDAD SON EVALUADOS POR MEDIO DE LA ECUACION VIRIAL.

\$INCLUDE "A:ONEDI2.INC"

SUB FUG1(NK,TT,P,Y(1),FI(1),PAR(1),NOFUG,NODIM,NDIM)

```

IF NOFUG < 1 THEN GOTO 7
OPEN "A:FUG.DAT" FOR INPUT AS#12
FOR I = 1 TO NK
FOR J = 1 TO NK
INPUT#12,BI1(I,J)
NEXT J
NEXT I
FOR I = 1 TO NK
FOR J = 1 TO NK
INPUT#12,BI2(I,J)
NEXT J
NEXT I
INPUT #12,T1,T2
CLOSE#12

```

```

FOR I=1 TO NK
FOR J=1 TO NK
B(I,J)=BI1(I,J)+(BI2(I,J)-BI1(I,J))/(T2-T1)*(TT-T1)
NEXT J
NEXT I
BMIX=0.
FOR I=1 TO NK
FOR J=1 TO NK
BMIX=BMIX+Y(I)*Y(J)*B(I,J)
NEXT J
NEXT I
FOR J=1 TO NK
FIFAC(J)=0.
NEXT J
FOR J=1 TO NK
FOR K=1 TO NK
FIFAC(J)=FIFAC(J)+Y(K)*B(J,K)
NEXT K
NEXT J
FOR J=1 TO NK

```



```
      FI(J)=EXP((2.*FIFAC(J)-BMIX)*P/82.05/TT-B(J,J)*PAR(J)*P/82.05/TT)
      NEXT J
      IF NODIM < 1 THEN GOTO 200
      GOTO 8
7     FOR J=1 TO NK
      FI(J)=1.
      NEXT J
      IF NODIM < 1 THEN GOTO 200
8     IF NODIM > 0 THEN CALL ONEDI2(TT,P,Y(NDIM),ZDIM,ZNOD)
      FOR J=1 TO NK
      FI(J)=FI(J)*ZNOD
      NEXT J
      FI(NDIM)=ZDIM
200  END SUB
```

```
*****
*
* SUBROUTINA ONEDI(P,ATEM,Y,AKA,ZDI,ZNODI)
*
*****
```

TEMPERATURA EN KELVIN

ESTA SUBROUTINA CALCULA LAS CORRECCIONES DE DIMERIZACION EN FASE DE VAPOR CUANDO NO MAS DE UN COMPONENTE SE DIMERIZA. PARA LA DIMERIZACION DE UN COMPONENTE, EL COEFICIENTE DE FUGACIDAD ES MODIFICADO POR EL FACTOR ZDI. PARA TODOS LOS OTROS COMPONENTES EL COEFICIENTE DE FUGACIDAD ES MODIFICADO POR EL FACTOR ZNODI.

```
SUB ONEDI1(P,ATEM,YY,AKA,ZDI,ZNODI)
OPEN "A:DIME.DAT" FOR INPUT AS #9
INPUT#9,AA,BX
CLOSE#9
```

```
IF (YY-0.0001) < 0 THEN GOTO 120
IF (YY-0.0001) = 0 THEN GOTO 120
IF (YY-0.0001) > 0 THEN GOTO 220
220 AKA=EXP((2.880814-AA+BX/ATEM)*2.302585)
AKOR=4 *AKA*P*YY*(2 -YY)
ZDI=(SQR(1 +AKOR)-1)*2/AKOR
ZNODI=2.*(1-YY+SQR(1 +AKOR))/(2 -YY)/(1 +SQR(1 +AKOR))
GOTO 330
120 ZDI=1
ZNODI=1
330 REM CONTINUE
END SUB
```

```
*****  
* SUBROUTINA GAUSL(ND,NCOL,N,NS,A)  
*  
*****
```

```
*****  
LA SUBROUTINA GAUSL RESUELVE N ECUACIONES ALGEBRAICAS LINEALES  
POR LA TECNICA DE ELIMINACION POR PIVOTEO.  
*****
```

```
SUB GAUSL1(ND,NCOL,N,NS,A(2))
```

```
LOCAL X
```

```
N1=N+1
```

```
NT=N+NS
```

```
IF N = 1 THEN GOTO 50
```

```
COMIENZA LA ELIMINACION
```

```
FOR I=2 TO N
```

```
IP=I-1
```

```
I1=IP
```

```
X=ABS(A(I1,I1))
```

```
FOR J=I TO N
```

```
IF ABS(A(J,I1)) < X THEN GOTO 11
```

```
X=ABS(A(J,I1))
```

```
IP=J
```

```
11 NEXT J
```

```
IF IP = I1 THEN GOTO 13
```

```
INTERCAMBIO DE RENGLONES
```

```
FOR J=I1 TO NT
```

```
X=A(I1,J)
```

```
A(I1,J)=A(IP,J)
```

```
A(IP,J)=X
```

```
NEXT J
```

```
13 FOR J=I TO N
```

```
X=A(J,I1)/A(I1,I1)
```

```
FOR K=I TO NT
```

```
A(J,K)=A(J,K)-X*A(I1,K)
```

```
NEXT K
```

```
NEXT J
```

```
NEXT I
```

```
ELIMINACION TERMINADA.
```

```
50 FOR IP= 1 TO N
```

```
I= N1-IP
```

```
FOR K = N1 TO NT
```

```
A(I,K)= A(I,K)/A(I,I)
```

```
55 IF I= 1 THEN GOTO 20
```

```
I1=I-1
```

```
FOR J=1 TO I1
```

```
56 A(J,K) = A(J,K) - A(I,K)* A(J,I)
```

```
CM(J,K)=A(J,K)
```

```
57 NEXT J
```

```
NEXT K
```

```
NEXT IP
```

```
20 END SUB
```

ARCHIVO DATOS.DAT. CONFIGURACION DE LA COLUMNA

4				
ETANOL				
PROPANOL				
AGUA				
ACIDO-ACETICO				
2	2	2	2	4
8.04494				
1554.30005				
222.64999				
7.99733				
1589.69995				
209.50000				
7.96681				
1668.19995				
228.00000				
7.18807				
1416.89995				
211.00000				
-3032.32007				
37.90400				
0.00000				
0.00000				
7903.72				
18.676				
0.00000				
0.00000				
-2812.800				
35.160				
0.0000				
0.0000				
7722.39990				
28.77000				
0.00000				
0.00000				
-1440.00000				
18.00000				
00.00000				
00.00000				
9230.62012				
8.70500				
0.00000				
0.00000				
-2246.40				
28.09000				
00.00000				
00.00000				
4374.75000				
17.92000				
0.00000				
0.00000				
30				
2				

1  
0  
2  
10  
40  
2  
1  
80  
100  
2  
0  
0  
2  
0.7  
7  
85  
0  
0  
12.5  
12.5  
25  
23  
110  
1  
25  
12.5  
12.5  
0  
10  
20

ARCHIVO FUG.DAT. COEFICIENTES VIRIALES.

-920.083  
-477.755  
-223.862  
-616.148  
-477.755  
-1160.935  
-252.530  
-763.736  
-223.862  
-252.530  
-652.368  
-323.959  
-326.105  
-394.054  
-183.888  
-1160.955  
-727.402  
-418.917  
-194.041  
-539.903  
-418.970  
-931.554  
-219.091  
-668.275  
-184.041  
-219.091  
-479.629  
-604.094  
-265.070  
-344.738  
-159.758  
-831.554  
353  
373

ARCHIVO UNIQ.DAT. PARAMETROS UNIQUAC.

1.9720  
 2.1055  
 -0.4380  
 2.5120  
 2.7799  
 -0.4404  
 1.4000  
 0.9200  
 -2.3200  
 2.0720  
 2.2024  
 -0.5504  
 0.1000E01  
 0.12273E01  
 0.19283E00  
 -0.21691  
 0.77161  
 0.10000E01  
 87.73200E-02  
 33.46300E-03  
 0.181280E+01  
 20.59300E-02  
 00.10000E+01  
 -0.87430E-01  
 41.13500E-01  
 27.26300E-01  
 29.81600E-01  
 0.10000E+01  
 0.00000E0  
 -20.33000E-05  
 90.92700E-05  
 13.95000E-04  
 13.14700E-05  
 0.00000E00  
 -2.4844E-004  
 11.24300E-04  
 -1.1735E-003  
 98.91600E-05  
 0.00000E00  
 13.03200E-04  
 -4.9680E-003  
 -2.5139E-003  
 -0.37084E-02  
 0.0000000E00





11	80.00	70.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	80.00	70.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	80.00	70.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	80.00	70.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	80.00	70.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	80.00	70.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	80.00	70.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	80.00	70.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	80.00	70.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	80.00	70.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	80.00	70.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	80.00	70.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	80.00	120.00	0.00	0.00	1.00	25.00	12.50	12.50	0.00
24	80.00	120.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	80.00	120.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	80.00	120.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	80.00	120.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	80.00	120.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	80.00	120.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	80.00	40.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

ETAPA      TEMP.      FLUJO TOTAL      COMPONENTE EN EL FLUJO  
(TODOS LOS FLUJOS SON FLUJOS DE LIQUIDO)

1	107.494	40.000	0.248	11.435	3.571	24.746
2	102.134	121.914	1.298	41.075	20.343	59.199
3	99.162	117.535	1.612	40.899	26.286	48.738
4	97.001	114.301	1.883	40.003	31.160	41.255
5	95.999	112.269	2.114	39.013	34.717	36.426
6	94.753	111.060	2.314	38.182	37.067	33.497
7	94.261	110.363	2.492	37.569	38.511	31.791
8	88.589	58.411	2.603	24.069	26.055	5.684
9	86.981	57.689	3.662	24.684	27.064	2.278
10	86.225	57.271	4.868	24.640	27.034	0.728
11	85.940	77.119	8.014	32.824	35.927	0.354
12	85.772	77.069	9.464	32.264	35.215	0.126
13	85.639	77.062	10.948	31.637	34.433	0.045
14	85.510	77.072	12.484	30.966	33.606	0.016

15	85.375	77.089	14.085	30.259	32.739	0.006
16	85.228	77.111	15.759	29.520	31.831	0.002
17	85.068	77.136	17.510	28.747	30.878	0.001
18	84.893	77.163	19.340	27.944	29.880	0.000
19	84.704	77.194	21.247	27.111	28.836	0.000
20	84.500	77.228	23.227	26.253	27.747	0.000
21	84.284	77.264	25.269	25.377	26.618	0.000
22	84.058	77.303	27.358	24.490	25.456	0.000
23	83.825	77.345	29.475	23.602	24.269	0.000
24	83.747	79.803	29.654	22.037	28.113	0.000
25	83.637	79.796	30.007	20.572	29.217	0.000
26	83.507	79.802	30.680	19.266	29.855	0.000
27	83.330	79.817	31.828	17.986	30.003	0.000
28	83.073	79.850	33.659	16.580	29.611	0.000
29	82.695	79.906	36.443	14.880	28.583	0.000
30	82.151	80.000	40.512	12.712	26.776	0.000

ETAPA TEMP. FLUJO TOTAL COMPONENTE EN EL FLUJO  
(TODOS LOS FLUJOS SON FLUJOS DE VAPOR)

1	107.494	81.914	1.050	29.640	16.772	34.453
2	102.134	77.535	1.363	29.464	22.715	23.993
3	99.162	74.301	1.635	28.569	27.589	16.509
4	97.001	72.269	1.866	27.578	31.145	11.680
5	95.599	71.060	2.065	26.747	33.496	8.752
6	94.753	70.363	2.244	26.134	34.940	7.045
7	94.261	68.411	2.355	25.135	34.983	5.938
8	88.989	67.689	3.414	25.750	35.993	2.532
9	86.981	67.270	4.620	25.706	35.963	0.982
10	86.225	67.119	6.066	25.285	35.415	0.354
11	85.940	67.069	7.515	24.725	34.703	0.126
12	85.772	67.062	8.999	24.097	33.921	0.045
13	85.639	67.072	10.536	23.426	33.094	0.016
14	85.510	67.089	12.137	22.720	32.227	0.006
15	85.375	67.111	13.810	21.980	31.319	0.002
16	85.228	67.136	15.561	21.208	30.366	0.001
17	85.068	67.163	17.391	20.404	29.368	0.000
18	84.893	67.194	19.299	19.572	28.324	0.000
19	84.704	67.228	21.279	18.714	27.235	0.000
20	84.500	67.264	23.321	17.837	26.106	0.000
21	84.284	67.303	25.410	16.950	24.944	0.000
22	84.058	67.345	27.526	16.063	23.757	0.000
23	83.825	119.803	52.705	26.998	40.100	0.000
24	83.747	119.796	53.058	25.933	41.205	0.000
25	83.637	119.802	53.732	24.227	41.843	0.000
26	83.507	119.817	54.880	22.946	41.991	0.000
27	83.330	119.850	56.710	21.540	41.599	0.000
28	83.073	119.906	59.495	19.840	40.571	0.000
29	82.695	120.000	63.563	17.673	38.764	0.000
30	82.151	40.000	23.052	4.961	11.988	0.000

RESIDUO = 3987.816162E-06

FLUJO DE PRODUCTO, FASE LIQUIDA.

1	0.248	11.435	3.571	24.746
2	0.000	0.000	0.000	0.000
3	0.000	0.000	0.000	0.000
4	0.000	0.000	0.000	0.000
5	0.000	0.000	0.000	0.000
6	0.000	0.000	0.000	0.000
7	0.000	0.000	0.000	0.000
8	0.000	0.000	0.000	0.000
9	0.000	0.000	0.000	0.000
10	1.700	8.605	9.441	0.254
11	0.000	0.000	0.000	0.000
12	0.000	0.000	0.000	0.000
13	0.000	0.000	0.000	0.000
14	0.000	0.000	0.000	0.000
15	0.000	0.000	0.000	0.000
16	0.000	0.000	0.000	0.000
17	0.000	0.000	0.000	0.000
18	0.000	0.000	0.000	0.000
19	0.000	0.000	0.000	0.000
20	0.000	0.000	0.000	0.000
21	0.000	0.000	0.000	0.000
22	0.000	0.000	0.000	0.000
23	0.000	0.000	0.000	0.000
24	0.000	0.000	0.000	0.000
25	0.000	0.000	0.000	0.000
26	0.000	0.000	0.000	0.000
27	0.000	0.000	0.000	0.000
28	0.000	0.000	0.000	0.000
29	0.000	0.000	0.000	0.000
30	0.000	0.000	0.000	0.000

FLUJO DE PRODUCTO, FASE VAPOR.

1	0.000	0.000	0.000	0.000
2	0.000	0.000	0.000	0.000
3	0.000	0.000	0.000	0.000
4	0.000	0.000	0.000	0.000
5	0.000	0.000	0.000	0.000
6	0.000	0.000	0.000	0.000
7	0.000	0.000	0.000	0.000
8	0.000	0.000	0.000	0.000
9	0.000	0.000	0.000	0.000
10	0.000	0.000	0.000	0.000
11	0.000	0.000	0.000	0.000
12	0.000	0.000	0.000	0.000
13	0.000	0.000	0.000	0.000
14	0.000	0.000	0.000	0.000
15	0.000	0.000	0.000	0.000
16	0.000	0.000	0.000	0.000
17	0.000	0.000	0.000	0.000
18	0.000	0.000	0.000	0.000
19	0.000	0.000	0.000	0.000
20	0.000	0.000	0.000	0.000
21	0.000	0.000	0.000	0.000
22	0.000	0.000	0.000	0.000
23	0.000	0.000	0.000	0.000
24	0.000	0.000	0.000	0.000
25	0.000	0.000	0.000	0.000

26	0.000	0.000	0.000	0.000
27	0.000	0.000	0.000	0.000
28	0.000	0.000	0.000	0.000
29	0.000	0.000	0.000	0.000
30	23.052	4.961	11.988	0.000

PERFIL DE K-FACTOR EN LA COLUMNA.

1	2.064	1.266	2.293	0.680
2	1.844	1.151	1.982	0.539
3	1.742	1.111	1.811	0.446
4	1.666	1.087	1.675	0.376
5	1.618	1.077	1.580	0.329
6	1.589	1.074	1.520	0.299
7	1.573	1.074	1.484	0.282
8	1.286	0.937	1.212	0.167
9	1.205	0.895	1.142	0.122
10	1.172	0.870	1.111	0.100
11	1.168	0.858	1.101	0.092
12	1.170	0.849	1.096	0.089
13	1.175	0.840	1.092	0.088
14	1.180	0.831	1.089	0.088
15	1.185	0.822	1.085	0.088
16	1.189	0.812	1.081	0.088
17	1.192	0.801	1.076	0.088
18	1.194	0.789	1.071	0.089
19	1.196	0.777	1.066	0.089
20	1.196	0.763	1.060	0.089
21	1.195	0.749	1.054	0.089
22	1.193	0.735	1.048	0.089
23	1.190	0.720	1.042	0.088
24	1.195	0.753	0.988	0.089
25	1.199	0.766	0.960	0.090
26	1.202	0.774	0.938	0.090
27	1.203	0.775	0.920	0.091
28	1.200	0.767	0.902	0.091
29	1.193	0.749	0.885	0.090
30	1.178	0.718	0.866	0.090

PERFIL DE FRACCION MOL EN LA COLUMNA (FASE LIQUIDA).

1	0.006	0.286	0.089	0.619
2	0.011	0.337	0.167	0.486
3	0.014	0.348	0.224	0.415
4	0.016	0.350	0.273	0.361
5	0.019	0.347	0.309	0.324
6	0.021	0.344	0.334	0.302
7	0.023	0.340	0.349	0.288
8	0.045	0.412	0.446	0.097
9	0.063	0.428	0.469	0.039
10	0.085	0.430	0.472	0.013
11	0.104	0.426	0.466	0.005
12	0.123	0.419	0.457	0.002
13	0.142	0.411	0.447	0.001
14	0.162	0.402	0.436	0.000
15	0.183	0.393	0.425	0.000
16	0.204	0.383	0.413	0.000
17	0.227	0.373	0.400	0.000

18	0.251	0.362	0.387	0.000
19	0.275	0.351	0.374	0.000
20	0.301	0.340	0.359	0.000
21	0.327	0.328	0.345	0.000
22	0.354	0.317	0.329	0.000
23	0.381	0.305	0.314	0.000
24	0.372	0.276	0.352	0.000
25	0.376	0.258	0.366	0.000
26	0.384	0.241	0.374	0.000
27	0.399	0.225	0.376	0.000
28	0.422	0.208	0.371	0.000
29	0.456	0.186	0.358	0.000
30	0.506	0.159	0.335	0.000

PERFIL DE FRACCION MOL EN LA COLUMNA (FASE VAPOR)

1	0.013	0.362	0.205	0.421
2	0.018	0.380	0.293	0.309
3	0.022	0.384	0.371	0.222
4	0.026	0.382	0.431	0.162
5	0.029	0.376	0.471	0.123
6	0.032	0.371	0.497	0.100
7	0.034	0.367	0.511	0.087
8	0.050	0.380	0.532	0.037
9	0.069	0.382	0.535	0.015
10	0.090	0.377	0.528	0.005
11	0.112	0.369	0.517	0.002
12	0.134	0.359	0.506	0.001
13	0.157	0.349	0.493	0.000
14	0.181	0.339	0.480	0.000
15	0.206	0.328	0.467	0.000
16	0.232	0.316	0.452	0.000
17	0.259	0.304	0.437	0.000
18	0.287	0.291	0.422	0.000
19	0.317	0.278	0.405	0.000
20	0.347	0.265	0.388	0.000
21	0.378	0.252	0.371	0.000
22	0.409	0.239	0.353	0.000
23	0.440	0.225	0.335	0.000
24	0.443	0.213	0.344	0.000
25	0.449	0.202	0.349	0.000
26	0.458	0.192	0.350	0.000
27	0.473	0.180	0.347	0.000
28	0.496	0.165	0.338	0.000
29	0.530	0.147	0.323	0.000
30	0.576	0.124	0.300	0.000

EL CALOR SUMINISTRADO AL REHERVIDOR ES 66638.281250E+01 (CAL/HR)

EL CALOR ELIMINADO POR EL CONDENSADOR ES 77056.787500E+01 (CAL/HR)

ARCHIVO DE DATOS DATOS.DAT

4

1-N-OCTANO  
 2-ETILCICLOHEXANO  
 3-ETILBENCENO  
 4-DEST-EXT-CON-FENOL

1	0	0	0	0
	6.92374			
	1355.12800			
	209.516			
	6.87041			
	1384.038			
	215.128			
	6.95719			
	1424.255			
	213.208			
	7.13617			
	1518.1			
	175.00			
-245.0953	0.0			
	0.00000			
	0.00000			
102.85055	0.00			
	0.00000			
	0.00			
-245.0953	0.0000			
	0.00			
	0.00			
102.85055	0.00000			
	0.00000			
	0.00000			
-245.0953	0.00000			
	0.00000			
	0.00000			
102.8505500	0.00000			
	0.00000			
	0.00000			
-245.095300	0.0000			
	0.00000			
	0.00000			
102.850055	0.00000			
	0.00000			
	0.00000			

30

2

0  
0  
2  
40  
70  
8  
1  
115  
180  
2  
0  
0  
2  
1  
15  
140  
0  
20  
40  
40  
0  
20  
145  
0  
0  
0  
0  
300

ARCHIVO DE DATOS UNIQ.DAT. PARAMETROS UNIUQUAC.

4.936  
5.8486  
-0.2856  
4.316  
5.3944  
0.9976  
3.508  
4.5972  
1.84881  
2.88  
3.5517  
1.80681  
0.1000E01  
0.1000E01  
0.65737E00  
-0.781358E-01  
0.10000E01  
0.10000E01  
0.85733E00  
-0.76135E-01  
0.12762E01  
0.12762E01  
0.10000E01  
0.42845E-01  
0.18637E01  
0.18637E01  
0.17825E01  
0.10000E01  
0.00000E0  
0.00000E0  
0.38238E-03  
0.42876E-03  
0.00000E00  
0.00000E00  
0.38248E-03  
0.42876E-03  
-0.31464E-03  
-0.31475E-03  
0.00000E00  
0.90209E-03  
-0.75263E-04  
0.75320E-04  
-0.86317E-03  
0.000000E00





11	960.00	630.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	960.00	630.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	960.00	630.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	960.00	630.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	960.00	630.00	0.00	0.00	0.00	20.00	40.00	40.00	0.00
16	860.00	630.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	860.00	630.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	860.00	630.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	860.00	630.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	860.00	630.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	300.00
21	560.00	630.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22	560.00	630.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23	560.00	630.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	560.00	630.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	560.00	630.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	560.00	630.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	560.00	630.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
28	560.00	630.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
29	560.00	630.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30	560.00	70.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

ETAPA TEMP. FLUJO TOTAL COMPONENTE EN EL FLUJO  
(TODOS LOS FLUJOS SON FLUJOS DE LIQUIDO)

1	165.434	330.000	0.000	0.035	38.533	291.431
2	150.101	960.000	0.000	0.416	317.839	641.745
3	143.751	960.000	0.001	0.998	494.007	464.993
4	142.317	960.000	0.003	1.751	551.825	406.421
5	141.995	960.000	0.007	2.790	564.000	393.202
6	141.880	960.000	0.017	4.340	565.297	390.347
7	141.781	960.000	0.039	6.692	563.678	389.591
8	141.645	960.000	0.088	10.267	560.469	389.175
9	141.442	960.000	0.202	15.671	555.436	388.691
10	141.134	960.000	0.458	23.759	547.793	387.900
11	140.674	960.000	1.029	35.682	536.342	386.947
12	139.995	960.000	2.275	52.856	519.455	385.414

13	139.020	960.000	4.920	76.730	495.135	383.214
14	137.675	960.000	10.299	108.185	461.338	380.178
15	135.922	960.000	20.589	146.436	416.761	376.214
16	135.685	860.000	18.712	147.746	322.112	371.429
17	134.531	860.000	21.137	179.082	285.317	374.464
18	133.042	860.000	25.095	218.336	244.824	371.745
19	131.420	860.000	30.976	261.310	199.965	367.789
20	129.810	860.000	39.296	302.827	154.185	363.693
21	128.378	560.000	51.012	337.265	111.811	59.911
22	128.119	560.000	55.716	354.284	97.615	52.385
23	127.852	560.000	59.601	361.830	84.734	53.835
24	127.570	560.000	64.339	366.979	72.360	56.322
25	127.274	560.000	70.429	370.215	60.596	58.760
26	126.964	560.000	78.262	371.098	49.660	60.980
27	126.637	560.000	88.272	369.035	39.738	62.955
28	126.290	560.000	100.947	363.413	30.958	64.682
29	125.921	560.000	116.804	353.644	23.378	66.174
30	125.524	560.000	136.349	339.210	16.990	67.452

ETAPA TEMP. FLUJO TOTAL COMPONENTE EN EL FLUJO  
(TODOS LOS FLUJOS SON FLUJOS DE VAPOR)

1	165.434	630.000	0.000	0.381	279.306	350.313
2	150.101	630.000	0.001	0.963	455.474	173.562
3	143.751	630.000	0.003	1.716	513.292	114.990
4	142.317	630.000	0.007	2.755	525.467	101.771
5	141.995	630.000	0.017	4.305	526.764	98.915
6	141.880	630.000	0.039	6.657	525.144	98.160
7	141.781	630.000	0.088	10.232	521.935	97.744
8	141.645	630.000	0.202	15.636	516.902	97.260
9	141.442	630.000	0.458	23.724	509.260	96.559
10	141.134	630.000	1.029	35.647	497.809	95.516
11	140.674	630.000	2.275	52.821	480.922	93.982
12	139.995	630.000	4.920	76.695	456.602	91.783
13	139.020	630.000	10.299	108.150	422.805	88.747
14	137.675	630.000	20.589	146.401	378.227	84.783
15	135.922	630.000	38.712	187.711	323.579	79.998
16	135.685	630.000	41.137	219.047	286.783	83.033
17	134.531	630.000	45.095	258.301	246.290	80.313
18	133.042	630.000	50.936	301.275	201.431	76.358
19	131.420	630.000	59.296	342.792	155.651	72.261
20	129.810	630.000	71.012	377.230	113.278	68.480
21	128.378	630.000	75.716	394.249	99.081	60.954
22	128.119	630.000	79.601	401.795	86.200	62.404
23	127.852	630.000	84.339	406.944	73.827	64.890
24	127.570	630.000	90.429	410.180	62.063	67.329
25	127.274	630.000	98.262	411.063	51.126	69.549
26	126.964	630.000	108.272	409.000	41.205	71.523
27	126.637	630.000	120.947	403.378	32.425	73.251
28	126.290	630.000	136.804	393.609	24.844	74.742
29	125.921	630.000	156.349	379.175	18.456	76.020
30	125.524	70.000	20.000	39.965	1.467	8.569

RESIDUO = 2744.087763E-05

FLUJO DE PRODUCTO, FASE LIQUIDA.

1	0.000	0.035	38.533	291.431
2	0.000	0.000	0.000	0.000
3	0.000	0.000	0.000	0.000
4	0.000	0.000	0.000	0.000
5	0.000	0.000	0.000	0.000
6	0.000	0.000	0.000	0.000
7	0.000	0.000	0.000	0.000
8	0.000	0.000	0.000	0.000
9	0.000	0.000	0.000	0.000
10	0.000	0.000	0.000	0.000
11	0.000	0.000	0.000	0.000
12	0.000	0.000	0.000	0.000
13	0.000	0.000	0.000	0.000
14	0.000	0.000	0.000	0.000
15	0.000	0.000	0.000	0.000
16	0.000	0.000	0.000	0.000
17	0.000	0.000	0.000	0.000
18	0.000	0.000	0.000	0.000
19	0.000	0.000	0.000	0.000
20	0.000	0.000	0.000	0.000
21	0.000	0.000	0.000	0.000
22	0.000	0.000	0.000	0.000
23	0.000	0.000	0.000	0.000
24	0.000	0.000	0.000	0.000
25	0.000	0.000	0.000	0.000
26	0.000	0.000	0.000	0.000
27	0.000	0.000	0.000	0.000
28	0.000	0.000	0.000	0.000
29	0.000	0.000	0.000	0.000
30	0.000	0.000	0.000	0.000

FLUJO DE PRODUCTO, FASE VAPOR.

1	0.000	0.000	0.000	0.000
2	0.000	0.000	0.000	0.000
3	0.000	0.000	0.000	0.000
4	0.000	0.000	0.000	0.000
5	0.000	0.000	0.000	0.000
6	0.000	0.000	0.000	0.000
7	0.000	0.000	0.000	0.000
8	0.000	0.000	0.000	0.000
9	0.000	0.000	0.000	0.000
10	0.000	0.000	0.000	0.000
11	0.000	0.000	0.000	0.000
12	0.000	0.000	0.000	0.000
13	0.000	0.000	0.000	0.000
14	0.000	0.000	0.000	0.000
15	0.000	0.000	0.000	0.000
16	0.000	0.000	0.000	0.000
17	0.000	0.000	0.000	0.000
18	0.000	0.000	0.000	0.000
19	0.000	0.000	0.000	0.000
20	0.000	0.000	0.000	0.000
21	0.000	0.000	0.000	0.000
22	0.000	0.000	0.000	0.000
23	0.000	0.000	0.000	0.000
24	0.000	0.000	0.000	0.000
25	0.000	0.000	0.000	0.000

26	0.000	0.000	0.000	0.000
27	0.000	0.000	0.000	0.000
28	0.000	0.000	0.000	0.000
29	0.000	0.000	0.000	0.000
30	20.000	39.965	1.467	8.569

PERFIL DE K-FACTOR EN LA COLUMNA.

1	9.798	5.701	3.797	0.630
2	5.712	3.527	2.184	0.412
3	4.023	2.618	1.583	0.377
4	3.618	2.398	1.451	0.382
5	3.531	2.351	1.423	0.383
6	3.508	2.338	1.416	0.383
7	3.495	2.330	1.411	0.382
8	3.479	2.321	1.405	0.381
9	3.456	2.307	1.397	0.379
10	3.422	2.286	1.385	0.375
11	3.370	2.256	1.367	0.370
12	3.296	2.211	1.340	0.363
13	3.190	2.148	1.301	0.353
14	3.047	2.062	1.249	0.340
15	2.865	1.954	1.183	0.324
16	3.001	2.024	1.215	0.305
17	2.913	1.969	1.178	0.293
18	2.771	1.884	1.123	0.280
19	2.616	1.791	1.063	0.268
20	2.467	1.700	1.003	0.257
21	1.319	1.039	0.788	0.904
22	1.270	1.008	0.785	1.059
23	1.258	1.000	0.774	1.071
24	1.249	0.994	0.762	1.063
25	1.240	0.987	0.750	1.052
26	1.230	0.980	0.738	1.043
27	1.218	0.972	0.725	1.034
28	1.205	0.963	0.713	1.027
29	1.190	0.953	0.702	1.021
30	1.173	0.943	0.691	1.016

PERFIL DE FRACCION MOL EN LA COLUMNA (FASE LIQUIDA).

1	0.000	0.000	0.117	0.883
2	0.000	0.000	0.331	0.668
3	0.000	0.001	0.515	0.484
4	0.000	0.002	0.575	0.423
5	0.000	0.003	0.588	0.410
6	0.000	0.005	0.589	0.407
7	0.000	0.007	0.587	0.406
8	0.000	0.011	0.584	0.405
9	0.000	0.016	0.579	0.405
10	0.000	0.025	0.571	0.404
11	0.001	0.037	0.559	0.403
12	0.002	0.055	0.541	0.401
13	0.005	0.080	0.516	0.399
14	0.011	0.113	0.481	0.396
15	0.021	0.153	0.434	0.392
16	0.022	0.172	0.375	0.432
17	0.025	0.208	0.332	0.435

18	0.029	0.254	0.285	0.432
19	0.036	0.304	0.233	0.428
20	0.046	0.352	0.179	0.423
21	0.091	0.602	0.200	0.107
22	0.099	0.633	0.174	0.094
23	0.106	0.646	0.151	0.096
24	0.115	0.655	0.129	0.101
25	0.126	0.661	0.108	0.105
26	0.140	0.663	0.089	0.109
27	0.158	0.659	0.071	0.112
28	0.180	0.649	0.055	0.116
29	0.209	0.632	0.042	0.118
30	0.243	0.606	0.030	0.120

PERFIL DE FRACCION MOL EN LA COLUMNA (FASE VAPOR).

1	0.000	0.001	0.443	0.556
2	0.000	0.002	0.723	0.275
3	0.000	0.003	0.815	0.183
4	0.000	0.004	0.834	0.162
5	0.000	0.007	0.836	0.157
6	0.000	0.011	0.834	0.156
7	0.000	0.016	0.828	0.155
8	0.000	0.025	0.820	0.154
9	0.001	0.038	0.808	0.153
10	0.002	0.057	0.790	0.152
11	0.004	0.084	0.763	0.149
12	0.008	0.122	0.725	0.146
13	0.016	0.172	0.671	0.141
14	0.033	0.232	0.600	0.135
15	0.061	0.298	0.514	0.127
16	0.065	0.348	0.455	0.132
17	0.072	0.410	0.391	0.127
18	0.081	0.478	0.320	0.121
19	0.094	0.544	0.247	0.115
20	0.113	0.599	0.180	0.109
21	0.120	0.626	0.157	0.097
22	0.126	0.638	0.137	0.099
23	0.134	0.646	0.117	0.103
24	0.144	0.651	0.099	0.107
25	0.156	0.652	0.081	0.110
26	0.172	0.649	0.065	0.114
27	0.192	0.640	0.051	0.116
28	0.217	0.625	0.039	0.119
29	0.248	0.602	0.029	0.121
30	0.286	0.571	0.021	0.122

EL CALOR SUMINISTRADO AL REHERVIDOR ES 21907.989063E+01 (CAL/HR)

EL CALOR ELIMINADO POR EL CONDENSADOR ES 19473.764063E+01 (CAL/HR)

## REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- 1.-Ross, Bradley Alfred  
Simulation of three-phase distillation towers  
Tesis doctoral 1979.
- 2.-Fredenslund, Aage; Gmhelng, Jürgen y Rasmussen, Peter.  
Vapor- Liquid equilibria using UNIFAC  
Elsevier, Scientific Publishing Company, 1977.
- 3.-L.M.Naphtali y D. P Sandholm, AIChE Journal.  
17(1971)148.
- 4.-Walas, Stanley M.  
Phase equilibria in Chemical Engineering.  
Butterworth Publishers.
- 5.-M. Van Winkle  
Distillation  
Mc. Graw Hill
- 6.-C. J. King  
Separation Processes  
Mc. Graw Hill., 1971.
- 7.-Gmhelng, J Onken, U  
Vapor-Liquid Equilibrium Data Collection  
DECHEMA Chemistry Data Series, Frankfurt.  
am Main, 1977.
- 8.-Burden, Faibes  
Análisis numérica  
Grupo Editorial Iberoamérica, 1986.
- 9.-Hayden, J.G, O'Connell, J.P., Ind. Eng. Chem., Process Des.  
Dev., 14, 209(1975).
- 10.-Buford D., Smith  
Design of equilibrium stage processes  
Mc. Graw Hill.