UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO FACULTAD DE QUIMICA

APLICACION DEL METODO DE NEWTON-RAPHSON AL CALCULO DE SISTEMAS DE SEPARACION DE MULTICOMPONENTES.

Por

CARLOS NORIEGA ROMERO

INGENIERIA QUIMICA

1878

1977 - 24 dan H 2928 395



Universidad Nacional Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

# DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

С. Тиск) 10 М.Т. 303 FEGHA / 978 303 PROG



Jurado asignado<br/>originalmentePRESIDENTE.Jorge Martínez Montes.UOCAL.Luis Romero Cervantes.SECRETARIO.Gerardo Bazán Navarrete.ler SUPLENTE.Alejandro Lozada Cañibe.2do SUPLENTE.Gerardo Rodríguez Alonso.

Sitio en donde se desarrolló el tema: México, D.F.

Nombre del sustentante: Carlos Noriega Romero.

Nombre del asesor del tema: Luis Romero Cervantes.

# INDICE

CAPITULO I -	INTRODUCCION1
CAPITULO 2 -	METODOS DE CALCULO
	2.1 Modelo de etapas de equilibrio5
	2.2 Diferentes métodos de cálculo10
	2.3 Procedimientos mas comunes10
	2.4 Mêtodo del punto de burbuja16
	2.5 El método de la suma de flujos17
	2.6 Otras alternativas17
	2.7 El método de Newton-Raphson18
	2.8 Métodos de relajación21
CAPITULO 3 -	EL METODO DE TOMICH22
	3.1 El algoritmo de Tomich22
	3.2 El procedimiento de Broyden
	3.3 Selección de un criterio de convergencia35
CAPITULO 4 -	PROPIEDADES TERMODINAMICAS
	4.1 Relaciones o constantes de equilibrio K39
	4.2 La correlación de Chao-Seader41
	4.3 Cálculo de entalpias49
	4.4 Componentes hipotéticos
CAPITULO 5 -	RESULTADOS OBTENIDOS
	5.1 Características del programa54
	5.2 Evaluación del programa63
	5.3 Caso 1 (absorción)65
	5.4 Caso 2 (absorción)80
	5.5 Caso 3 (absorción)95
	5.6 Caso 4 (destilación)

	5,7	Caso	5	(destilación)
1 de e	5,8	Caso	6	(destilación)
CONCLUSIONES	• • • •	• • • • • •		
NOMENCLATURA		• • • • • •	••••	
BTBLTOGRAFTA		• • • • • •		

### INTRODUCCION

La separación de mezclas de multicomponentes mediante columnas de transferencia de masa o torres de separación, es una de las operaciones unitarias básicas en las industrias química y del petróleo.

La simulación de dichos equipos adquiere gran importancia en su aplicación al diseño de nuevas unidades, así como también en la optimización o mejoramiento de los procesos existentes. Las ecuaciones matemáticas que definen el modelo de simulación de un equipo de separación constituído por un conjunto de etapas de equilibrio son bien conocidas, sin embargo, los sistemas de multicomponentes se definen mediante conjuntos numerosos de ecuaciones no lineales, cuya solución implica laboriosos procedimientos de tanteo. Debido a la complejidad de los procedimientos de solución, se hace necesario el empleo de métodos numéricos. Como consecuencia de ésto, diferen tes métodos de cálculo han sido propuestos.

La mayor parte de los procedimientos de cálculo diseñados para la solución rigurosa de las ecuaciones del modelo no resuelven todas las ecuaciones simultáneamente, sino que fraccionan el problema en sub-problemas más pequeños, lo cual se logra mediante la separación de los efectos de ciertas varia bles y resolviendo grupos selectos de ecuaciones en un orden

- 1 -

particular, para composiciones, temperaturas y flujos. Las ecuaciones se agrupan en una forma que permita que las soluciones de los subconjuntos puedan obtenerse después de suponer los valores de ciertas variables. Diversas técnicas de convergencia se usan para ligar los diferentes subconjuntos y obtener una solución global para todas las ecuaciones.

Entre los procedimientos más conocidos que emplean esta estrategia se encuentran los propuestos por Lewis y Matheson (18), Holland (13), Thiele y Geddes (32), Wang y Henke (36) y Sujata (31). El principal problema que se presenta al emplear estos métodos es que no existe la seguridad que conve<u>r</u> gerán para un problema dado y su habilidad o capacidad para converger varía grandemente dependiendo de el tipo de probl<u>e</u> ma que se trate de resolver.

En los últimos años el mayor esfuerzo se ha dedicado a encon trar un algoritmo general que se aplique y sea confiable para una amplia variedad de problemas, que comprendan diferentes tipos y más complejas columnas de separación. En general se reconoce que un método que se base en la solución simultánea de todas las ecuaciones sería el mejor procedimiento de solución, sin embargo, la cantidad de cálculos necesarios para encontrar una solución representan un serio problema.

El método de Newton-Raphson es una técnica que ha sido empleada con éxito para resolver conjuntos complejos de euuaciones no lineales. Recientemente, varios autores han publicado pro cedimientos iterativos para resolver las ecuaciones del mode-

- 2 -

lo de etapas de equilibrio para varias o todas las variables involucradas simultáneamente, empleando el método de Newton-Raphson. Entre este tipo de métodos se cuentan los propuestos por Naphtali y Sandholm (21), Tierney y colaboradores (33), (24), Greenstadt, Bard y Morse (12), Tomich (35) y el más reciente.de éstos el de Otto e Ishii (24).

El objetivo principal de este trabajo es el de implementar un programa de computadora, que constituya una herramienta y una ayuda eficaz para la simulación y el diseño de procesos de destilación o absorción y en general para cualquier tipo de torres de fraccionamiento. El método de cálculo empleado en este programa es un procedimiento de Newton-Raphson, deb<u>i</u> do a que según los reportes más recientemente publicados es el que ha dado mejores resultados. Durante el curso de este trabajo, diferentes variaciones sobre el método de Newton-Raphson fueron evualuadas.

Un factor determinante en la predicción acertada del comportamiento de los procesos de separación, es el uso de correlaciones adecuadas para el cálculo de propiedades físicas y ter modinámicas de los componentes del sistema. Esto es muy impor tante, no solo debido a que la precisión o confiabilidad del método depende grandemente de la exactitud con la que se evalúen las propiedades, sino porque la forma de las funciones que representan dichas propiedades influyen en las características de convergencia de diferentes métodos.

Para el cálculo de propiedades de mezclas de hidrocarburos,

- 3 -

en el programa se emplean la correlación de Chao-Seader (9) para la determinación de constantes de equilibrio y la corr<u>e</u> lación de Yen y Alexander (38) para el cálculo de entalpias.

### CAPITULO 2

### METODOS DEL CALCULO

# 2.1. El Modelo de Etapas de Equilibrio

La representación esquemática de una columna de separación general se muestra en la figura 1.1. En este modelo se supone que cada una de las etapas és una etapa de equilibrio, ésto es, se supone que las corrientes de v<u>a</u> por y líquido que salen de un mismo plato se encuentran en equilibrio termodinámico.

Como puede observarse, mediante este modelo es posible representar una gran variedad de columnas de separación, incluyendo columnas complejas para destilación y absorción, con múltiples corrientes de alimentación, corrien tes laterales e intercambiadores de calor en cualquiera de los platos.

- 5 -



Figura 2.1- Modelo general de etapas de equilibrio.

Las ecuaciones que describen el modelo en estado permanente se derivan de los balances de materia y energía, así como de las relaciones de equilibrio. Para el plato "j" y el componente "i" pueden representarse como sigue:

(1) Relaciones de equilibrio:

$$Yi,j = Ki,j Xi,j$$
(2-1)

(2) Balances de materia por componente:

$$Ci,j = Fj Zi,j + Lj-1 Xi,j-1 + Vj+1 Yi,j+1$$

-(Lj + SLj) Xi,j - (Vj + SVj) Yi,j (2-2)

(3) Balances de energía:

Ej = FjHFj + Qj + Lj-1 HLj-1 + Vj+1 HVj+1  
-(Lj
$$+$$
 SLj) HLj - (Vj + SVj) HVj (2-3)

(4) Suma de fracciones mol:

Sj = 
$$\sum_{i=1}^{NC}$$
 Yi, j - 1.0  
Sj =  $\sum_{i=1}^{NC}$  Xi, j - 1.0

0

(2-4)

- 7 -

(5) Balance de materia global:

$$Mj = Fj + Lj - 1 + Vj + 1 - (Lj + SLj)$$

$$-(V_{j} + SV_{j})$$
 (2-5)

Las ecuaciones del balance de materia por componente, pueden combinarse con las relaciones de equilibrio en la siguiente forma:

> Ci,j = Fj Zi,j + Lj-1 Xi,j-l + Vj+l Ki,j+l Xi,j+l -(Lj + SLj) Xi,j - (Vj + SVj) Ki,j Xi,j (2-6)

Donde N representa el número de etapas, incluyendo el rehervidor y condensador cuando los haya y NC el número de componentes del sistema y 1  $\stackrel{\checkmark}{=}$  i  $\stackrel{\checkmark}{=}$  NC y 1  $\stackrel{\checkmark}{=}$  j  $\stackrel{\checkmark}{=}$  N.

Existen por lo tanto un total de N (2NC + 3) ecuaciones e igual número de incógnitas, cuando se especifican las siguientes variables:

- a) Número de etapas de equilibrio (N)
- b) Presión en cada plato (P)
- Magnitud del flujo, composición y condiciones de todas las corrientes de alimentación (Fj, Zi,j, HFj)
- d) Flujo de todas las corrientes laterales (SLj, SVj).
- e) Cantidad de calor añadido o extraído de cada plato,

- 8 -

incluyendo el rehervidor y el condensador ( Qj ).

Cuando se especifican estas variables, para la solución de las ecuaciones del modelo se requiere encontrar los valores de las siguientes incógnitas, para cada una de las etapas.

- a) Temperatura (Tj)
- b) Flujo de vapor (Vj)
- c) Flujo de líquido ( Lj )
- d) Fracción mol de cada componente en la fase líquida
  ( Xi,j ).
- e) Fracción mol de cada componente en la fase de vapor ( Yi,j ).

La solución se encuentra cuando Mj, Ci,j, Ej, Y Sj son iguales a cero.

El conjunto de especificaciones seleccionadas anteriormente, corresponden a un problema del tipo de absorbedor, sin embargo frecuentemente se requiere cambiar el conjunto de especif<u>i</u> caciones, lo cual puede lograrse intercambiando una variable conocida por una desconocida. En problemas de destilación generalmente se especifican la cantidad de producto que se obtiene de la parte alta de la columna y la relación de reflujo y se calculan la carga térmica de el rehervidor y la del condensador. En una forma similar, para absorbedores con rehervidor, generalmente se especifica la salida de vapor de la parte alta (y1) y se calcula la carga térmica del rehervidor.

- 9 -

## 2.22Diferentes Métodos de Cálculo

En general, las ecuaciones del modelo de etapas de equilibrio forman un sistema complejo y altamente no lineal, de manera que, como se menciona en la introducción se ha ce necesario el empleo de métodos numéricos para encontrar una solución. Matemáticamente, quizá el mejor proce dimiento de solución sería el linearizar todas las ecuaciones del sistema y resolverlas simultáneamente, encontrando soluciones sucesivas, hasta que una de ellas satisfaga un criterio de convergencia específicado. A este tipo de procedimientos se les denomina como procedimientos de Newton-Raphson. Sin embargo, el procedimiento general de Newton-Raphson requiere de la evaluación de un gran número de derivadas parciales, lo que trae como con secuencia la necesidad de un gran espacio de memoria en la computadora y el tiempo necesario para efectuar los cálculos llega a ser inaceptable. Debido a estas dificul tades se ha dedicado gran esfuerzo al desarrollo de métodos que hagan un uso más eficiente del tiempo y el espacio de almacenamiento o memoria en una computadora digita.

Holland (15) presenta una descripción más o menos detallada de los principales métodos empleados hasta la fecha, con excepción del más recientemente publicado por Otto e Ishii (9).

### 2.3 Procedimientos mas Comunos

Friday y Smith (11) hacen un buen análisis y clasificación de los métodos de cálculo tradicionales, que se basan en resolver separadamente las diferentes ecuaciones del modelo y destacan seis decisiones básicas que deben hacerse al formular un procedimiento de solución, los métodos publicados d<u>i</u> fieren entre sí en la forma en que resuelven estas desiciones.

- 2.3.1 La primera decisión es la de escoger uno de entre dos procedimientos con respecto a la forma de agrupar las ecuaciones, ésto es agrupar por etapa o por tipo de ecuaciones. Greenstadt y colaboradores (12) y Bergamini (4) agrupan las ecuaciones por etapa, sin embargo la ma yor parte de los autores lo hacen por tipo, debido principalmente a que el agrupamiento por etapa hace a un método suceptible de errores debido a lo que se conoce como "truncation error" o pérdida de precisión en los cálculos.
- 2.3.2 La segunda decisión involucra el orden de resolución de las ecuaciones, siendo lo más común el combinar las ecuaciones de balance de materia por componente (ec. 2-1) con las relaciones de equilibrio (ec. 2.2) y resolverlas. Posteriormente se resuelven las ecuaciones de suma de fracciones mol y finalmente los balances de energía (ec. 2-3). Las ecuaciones de balance global de materia (2.5) se emplean para eliminar uno de los conjuntos Vj o Lj.

- 2.3.3 La tercera decisión concierne a la selección del tipo de ecuaciones adecuado para obtener el valor de una variable, ésto es, mediante las ecuaciones de balance de materia y relaciones de equilibrio es posible obtener un conjunto de composiciones o fracciones mol (Yi,j y Xi,j) cuando se suponen valores iniciales de V, T,X e Y. Los nuevos valores de Xi,j y Yi,j pueden ser utilizados ya sea para encontrar nuevos valores de Vj, mediante las ecuaciones de suma de fracciones mol o pueden ser empleadas para encontrar un nuevo conjunto de temperaturas (Tj). A el procedimiento que emplea la primera alter nativa se le conoce con el nombre de "suma de flujos" ("sum-rates method") y al segundo se le conoce como el método del punto de burbuja. La mayor parte de los métodos conocidos, emplean el segundo procedimiento, en el cual se encuentra primero el conjunto de temperaturas y mediante las ecuaciones de balance de energía se obtienen los nuevos valores de Vj.
  - 2.3.4 La cuarta decisión es la selección de una método para resolver las ecuaciones de balance de materia para nuevos valores de Xi,j y Yi,j en cada plato. Una forma es resolver las ecuaciones plato por plato ("stage to stage method"), lo cual generalmente se hace comenzando por ambos extremos de la columna y siguiendo hacia la mitad. La segunda forma es haciendo uso de una matriz para describir simultáneamente todas las ecuaciones del ba-

- 12 -

lance de materia para cada componente. El primer método generalmente tiende a ser numéricamente inestable, principalmente cuando se usa con sistemas de componentes cuyas volatilidades relativas son muy diferentes.

El método de Thiele-Geddes (32) y el de Lewis-Matheson (18) usan procedimientos de plato por plato ("stage to stage"). En el de Lewis-Matheson se especifican la alimentación, la relación de reflujo y la separación desea da de dos componentes, scalculándose el número de etapas ideales necesarias para llevar a cabo la separación especificada. La localización del plato de alimentación se encuentra comparando las composiciones obtenidas mediante el cálculo desde ambos extremos de la columna, usándose la diferencia de composiciones en el plato de alimentación para corregir las composiciones supuestas en los extremos. La ventaja de este método es que puede usarse para diseño, pues se calcula directamente el número de platos teóricos necesarios para efectuar una separación y se encuentra el plato de alimentación óptimo. Sin embargo, es difícil obtener una solución para columnas con varias corrientes laterales y multiples alimentaciones.

En el método de Thiele-Geddes se especifican el número de platos teóricos en cada sección de la columna, las <u>a</u> limentaciones, la relación de reflujo y la cantidad de destilado. Este método difiere del de Lewis-Matheson en que calcula una relación de la composición en un plato a la composición en los extremos y empleando las ecuaciones de balance de materia se calcula la relación entre la composición en el plato del fondo y en el superior. A partir de esta relación se calcula la cantidad de destilado y se compara con el valor especificado. Si estos valores no son iguales, se repite el procedimiento sucesivamente.

Holland y colaboradores (14), (15) desarrollaron una técnica de convergencia denominada el método Theta, em pléándola junto con el método de Thiele-Geddes para aumentar su rango de aplicación y eficiencia.

Los métodos que emplean matrices han sido ampliamente usados, debido a que son numéricamente más estables y funcionan correctamente para cualquier número de alime<u>n</u> taciones y corrientes laterales. En estos métodos, las especificaciones son las mismas que en el de Thiele-Geddes. El primer algoritmo para la solución simultánea de las ecuaciones del balance de materia fué propuesto por Amundson y Pontinen (1) y posteriormente Wang y Henke (36) propusieron el método de la matriz tridiago nal, que es actualmente el de uso más extendido.

2,3,5 <u>La quinta decisión</u> se refiere a las temperaturas, las cuales generalmente se determinan mediante cálculos de punto de burbuja o de rocío en los cuales frecuentemente se emplea el método de Regula-falsi o el de Newton-

- 14 -

Raphson. Wang y Henke recomiendan el método de Müller en cálculos de temperaturas de burbuja o de rocío. De cualquier forma, este procedimiento para calcular temperaturas es costoso en tiempo de máquina. Para evitar el cálculo de temperaturas de rocío o burbuja, Holland (14) em plea un método al que denomina Kb, en el cual usa volat<u>i</u> lidades relativas a un componente de referencia.

Newman (22) propone el uso del método de Newton-Raphson para encontrar las temperaturas en cada plato, de forma que satisfagan las ecuaciones de balance de materia y r<u>e</u> laciones de equilibrio. Un procedimiento similar es empleado por Sujata (31) y Burningham y Otto (7), en el método de suma de flujos, para encontrar los valores de temperatura que satisfagan las ecuaciones de balance de energía.

2.3.6 La sexta decisión es el método para encontrar los nuevos valores de Vj ( o Lj ). En el método de suma de flujos estos valores se calculan directamente, a partir de los valores de composición calculados. En el método del punto de burbuja los flujos se determinan de manera que satisfagan las ecuaciones de balance de energía.

Estas seis decisiones deben tomarse al diseñar el proce dimiento de cálculo en cada iteración. La solución al sistema de ecuaciones se obtiene mediante aproximaciones sucesivas, hasta que se satisface un criterio de

- 15 -

convergencia.

A continuación se presenta la secuencia de cálculos que se encuentra más frecuentemente.

- (1) Suposición de un conjunto de temperaturas (Tj)
   y de valores de flujo de vapor (Vj) para cada plato.
- (2) Cálculo de la composición de cada una de las fases ( xi,j e Yi,j).
- (3) Corrección a los valores supuestos de Tj y Vj
- (4) Si el criterio de convergencia no ha sido satisfecho se repite el procedimiento desde el paso
   (2).

El principal problema encontrado en la aplicación de este tipo de métodos, que se basan en resolver grupos de ecuaciones separadamente, es que su comportamiento en cuanto a propiedades de convergencia se refiere varía grandemente de un tipo de problema a otro, de manera que por ejemplo, procedimientos de cálculo que son adecuados para problemas de destilación, se comportan erráticamente al tratar de resolver problemas de absorción y viceversa.

# 2.4 El Método del Punto de Burbuja

Para mezclas que consisten de componentes cuyas volatilidades varían grandemente (componentes muy volátiles con

- 16 -

componentes poco volátiles), como ocurre en problemas de absorción, la magnitud de los flujos de las fases puede estar completamente dominada por las volatilidades relativas y puede ser muy poco afectada por variaciones en la temperatura. Si las temperaturas se calculan usando el mé todo del punto de burbuja, entonces cambios pequeños en la composición ocasionarán correcciones muy elevadas en las temperaturas, de aquí que el método original del punto de burbuja no sea adecuado para resolver este tipo de problemas.

# 2.5 El Método de la Suma de Flujos

Métodos basados en el procedimiento de suma de flujos, en la forma que se describe en el inciso 2.3.3, han sido desarrollados para resolver problemas del tipo de absorbedores. Entre estos métodos se encuentran los propuestos por Sujata (31). Burningham y Otto (7) y Friday y Smith (11). Como en el caso de los métodos del punto de burbuja estos procedimientos no son generales y normalmente no es posible utilizarlos para resolver problemas que involucran sistemas con componentes cuyos puntos de ebullición son similares. Por otra parte, se ha encontrado (7) que este tipo de métodos no son adecuados para problemas de absorbedores con rehervidor.

# 2.6 Otras Alternativas

Holland y colaboradores (14), (15) han utilizado el méto-

- 17 -

do de Thiele-Geddes, junto con el procedimiento Theta de convergencia para resolver absorbedores simples y con rehervidor, sin embargo, para encontrar soluciones conver gentes a estos problemas, emplean técnicas especiales para manejar los balances de energía. Una de ellas es el método "O" en el cual se emplean intercambiadores de calor hipoté ticos en cada plato, con el objeto de mantener los flujos dentro de valores especificados. Las soluciones obtenidas empleando este método, no necesariamente corresponden a condiciones de operación reales. Holland también emplea el método de composición constante para calcular la entalpia de una corriente, con el objeto de evitar errores de redon deo asociados con los balances de entalpia, sin embargo es ta simplificación ocasiona que dicho método no pueda ser em pleado en sistemas en los que la entalpia depende de la com posición.

Sin embargo, a pesar de sus limitaciones, el método de Holland es uno de los que han tenido éxito en resolver abso<u>r</u> bedores con rehervidor.

### 2.7 El Método de Newton-Raphson

Friday y Smith (11) señalan en su análisis, que métodos más eficientes pudieran ser encontrados resolviendo las ecuacio nes de balance de materia (2-6) empleando procedimientos matriciales para encontrar las composiciones en cada una de las etapas (Xi,j e Yi,j ) y posteriormente re

- 18 -

solviendo las ecuaciones de suma de fracciones mol (2-4) y los balances de energía (2-3) simultáneamente para encontrar nuevos valores de temperatura (Tj) y flujos (Vj).

Tierney y colaboradores (33), (34) y Tomich (35) han desarrollado algoritmos empleando esta estrategia, utilizando el método de Newton-Raphson.

La aplicación que hacen del método de Newton-Raphson esencialmente consiste en aproximar las funciones que representan los imbalances (o residuos del balance) de materia y energía, expandiéndolos, como funciones de las temperatura (Tj) y los flujos (Vj), mediante series de Taylor truncadas después de la primera derivada. Posteriormente, estas funciones se igualan a cero y se resuelven simultáneamente, para encontrar correcciones a los valores de Vj y Tj. En este caso, la matriz de Jacobianos tiene que ser calculada numéricamente. Una de<u>s</u> cripción más detallada de este procedimiento se hace más adelante.

Tomich (35) emplea el procedimiento de Broyden (6), que es un método de Newton-Rphson modificado, para obtener las nuevas temperaturas y flujos. El procedimiento de Broyden consiste en actualizar la matriz de Jacobianos empleando los residuos calculados en una iteración anterior, de manera que evita tener que calcular la matriz en cada iteración. Esto redunda en unadisminución apreciable del tiempo de cálculo. Además, este procedimiento emplea una técnica especial para preveer la divergencia.

- 19 -

Billingsley y Boynton (5) proponen otro método para reducir la cantidad de cálculos necesarios al empleardirectamente el método de Newton-Raphson, que consiste en suponer temporalmen te que las ecuaciones de los imbalances de materia son función únicamente de la temperatura y resuelve para temperaturas, de lamanera propuesta por Newman (22). Las temperaturas calculadas se substituyen en las ecuaciones generales. Este método parece ser poco eficiente, especialmente en sistemas de componentes con puntos de ebullición muy diferentes.

En el análisis de Friday y Smith se señala que probablemente el mejor método de solución sería linearizar todas las ecuaciones del modelo y resolverlas simultáneamente para todas las variables, sin embargo aún cuando este concepto se reconoce como lo deseable, en la práctica es difícil de implementar, debido principalmente a la cantidad de cálculos necesarios para efectuar este proceso. Naphtali y Sandholm (21) proponen un método basado en este concepto, en el cual todas las ecuaciones se agrupan por etapa, en lugar de hacerlo por tipo, considerando entalpias dependientes de la composición. Sin embargo, estos métodos requieren mucha memoria y tiempo de computadora, para el cálculo de las derivadas parciales que se necesitan.

Recientemente Otto e Ishii (24) presentaron un nuevo algorit mo basado en la linearización y solución simultánea de todas las ecuaciones del modelo, que parece representar una mejora a los procedimientos existentes en tiempo de cálculo y memo-

- 20 -

# 2.8 Método de Relajación

Esta es una técnica empleada para resolver ecuaciones no lineales, que en general presenta gran estabilidad, aún cuando la velocidad de convergencia disminuye al aproximarse a la solución.Esencialmente se evalúa el comportamiento transitorio de las variables en un plato, hasta que se alcanza la operación en estado permanente. Al principio se suponen los valores de todas las variables como temperatura, flujo y composición en todas las etapas y después se calculan las variables correspondientes a c<u>a</u> da etapa, de manera que compensen los imbalances de mate= ria y energía, repitiéndose el proceso hasta que todas las ecuaciones se consideran resueltas. Un ejemplo de la aplicación de esta técnica es el algoritmo propuesto por Prowse y Johnson (28).

Debido a la estabilidad de este tipo de métodos, pueden ser útiles en la solución de problemas con componentes de puntos de ebullición muy diferentes.

#### EL METODO DE TOMICH

Durante el desarrollo de este trabajo se comenzó probando el método de Newton-Raphson en su forma más general, esto es, evaluando la matriz de jacobianos en cada iteración y modificando los valores de temperatura y flujo en la cantidad o i<u>n</u> cremento calculado mediante la solución de dicha matriz. Este procedimiento resultó demasiado costoso en tiempo y en muchos casos su comportamiento fué errático y divergente. Debido a ésto se consideró necesario el buscar un procedimiento más eficiente.

### 3.1 El Algoritmo de Tomich

De entre los métodos más recientemente reportados en la literatura, el algoritmo propuesto por Tomich (35) parece ser el mejor, exceptuando quizá el último de Otto e Ishii (24).

Básicamente en el método de Tomich se separa el efecto de la composición, resolviendo las ecuaciones de balance de materia (2-1), (2-2) independientemente. Posteriormente, con los valores de composición encontrados (Xi,j y Yi,j) se encuentran simultáneamente correcciones a los valores iniciales de temperatura y flujos, empleando un modelo de Newton-Raphson modificado en la forma propuesta por Broyden (6), lo cual hace que el tiempo de cálculo dismi-

- 22 -

nuya y aún cuando no garantiza la convergencia, no perm<u>i</u> te la divergencia. A continuación se hace una descripción detallada del método de Tomich.

Las ecuaciones del balance de materia por componente (2-2) combinadas con las relaciones de equilibrio (2-1), esto es, las ecuaciones (2-5) pueden expresarse en forma de una matriz tridiagonal para Ci,j igual a cero:

donde

bi,1 = -(L1 + SL1) - V1 Ki,1ci,1 = V2 Ki,2 mi,1 = -F1 Zi,1ai,j = Lj-1 bi,j = -(Lj + SLj) - (Vj + SVj) Ki,jci,j = Vj+1 Ki,j+1 mi,j = -F Zi,jai,n = Ln-1 bi,n = -Ln - (Vn + SY) Ki,nmi,n = -Fn - Zi,n

n = número de etapas.

- 23 -

Cuando se especifican los valores de los flujos de vapor (Vj) y líquido (Lj) y las constantes de equilibrio ( Ki,j ), el conjunto de ecuaciones (3-1) es lineal, y puede resolverse para encontrar los valores correspondientes de Xi,j, que a su vez determinan a Yi,j, mediante el algoritmo de Thomas, tal como lo hacen Wang y Henke (36).

Los imbalances de energía y las ecuaciones de suma de fracciones mol en cada plato están dadas por

$$Ej = Fj HFj + Qj + Lj-1 HLj-1 + Vj+1 HVj+1$$
  
-(Lj + SLj) HLj - (Vj + SVj) HVj (3-2)

У

$$Sj = \sum_{i=1}^{NC} Yi, j - \sum_{i=1}^{NC} Xi, j \qquad (3-3)$$

Los valores de temperatura (Tj), flujos (Vj y Lj) y composiciones se calculan empleando el método de Newton-Raphson sugerido por Broyden de tal forma que se satisfagan las siguien tes condiciones:

$$Ej = 0.0$$
 (3-4)

Х

$$S_{j} = 0.0$$

(3-5)

Una función no lineal de múltiples variables puede aproxima<u>r</u> se mediante una función lineal, expandiéndola como una serie de Taylor truncada después de la primera derivada en la siguiente forma:

$$f^{k+1} (x1, x2, ..., xn) = f^{k} (x1, x2, ..., xn)$$
$$+ \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\partial^{2} f}{\partial xi} \Delta xi \qquad (3-6)$$

Donde k es el número de la iteración y Xi son las variables. De esta forma, si Ej y Sj se consideran funciones no lineales dependientes de la temperatura (Tj) y el flujo (Vj) pueden aproximarse como sigue:

$$Ej^{k+1} = Ej^{k} + \sum_{i=1}^{N} \frac{Ej}{Vi} \Delta Vj + \sum_{i=1}^{N} \frac{Ej}{Ti} \Delta Ti$$
(3-7)

$$Sj^{k+1} = Sj^k + \sum_{i=1}^{N} \frac{Sj}{Vi} \Delta Vi + \sum_{i=1}^{N} \frac{Sj}{Ti} \Delta Ti$$
 (3-8)

Como Sj y Ej representan el error o residuo en las ecuaciones de balance de energía y de suma de fracciones mol, los nuevos valores de Avj y ATj se encuentran resolviendo las ecuaciones (3-7) y (3-8) con Sj<sup>k+1</sup> y Ej<sup>k+1</sup> igual a cero. Esto es, se pretende que Sj y Ej en la nueva iteración sean igual a cero, que es la condición necesaria para encontrar una solución.

El conjunto de ecuaciones (3-7) y (3-8), con  $Ej^{k+1}$ y  $Sj^{k+1}$  iguales a cero pueden representarse en forma matri-

- 25 -

La aplicación de el conjunto de ecuaciones (3-9a) es para problemas del tipo de absorbedores, en donde todas las temperatu ras (Tj) y flujos (Vj) son las variables por determinar. Sin embargo, para resolver problemas de destilación y absorbedores con rehervidor únicamente se requiere modificar ligeramen te estas ecuaciones.

26

En el caso de un absorbedor con rehervidor, en donde la salida de vapor por el extremo superior de la columna V1 se especifica, el conjunto de ecuaciones a resolver es el siguiente:

Js1 Jv2		<u>∂s1</u> ∂Vn	<u>)51</u> λτ1	•••	ds1 dTn	AV2	S1	
•						· .	·  .	
JSn JV2		<u>JSn</u>	<u>Jsn</u> JT1		<u>Jsn</u>	ΔTI	Sn	
JE1 V2	•••	$\frac{\partial E1}{\partial Vn}$	)E1 )T1		$\frac{\partial E1}{\partial Tn}$	ΔT2 =	- E1	(3-96)
		Ū	Ū			•	.	
						•   •	· ·	
$\frac{\partial En-1}{\partial V_2}$		<u>den-1</u> dvn	<u>den-1</u>		$\frac{\partial En-1}{\partial^{Tn}}$	ATn	En-1	

Para problemas de destilación, en los que se especifica la sa lida de vapor del destilado (V1) e indirectamente V2 al especificar el reflujo, las ecuaciones son:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial} \frac{S1}{\partial V3} & \cdots & \frac{\partial}{\partial} \frac{S1}{\partial Vn} & \frac{\partial}{\partial} \frac{S1}{\partial T1} & \cdots & \frac{\partial}{\partial} \frac{S1}{\partial Tn} \\ \vdots & & & & & \\ \vdots & & & & & \\ \frac{\partial}{\partial Sn} & \cdots & \frac{\partial}{\partial Sn} & \frac{\partial}{\partial Sn} & \cdots & \frac{\partial}{\partial} \frac{Sn}{\partial Tn} \\ \frac{\partial}{\partial Tn} & \frac{\partial}{\partial Tn} & \frac{\partial}{\partial T1} & \cdots & \frac{\partial}{\partial Tn} \\ \frac{\partial}{\partial E2} & \cdots & \frac{\partial}{\partial E2} & \frac{\partial}{\partial E2} & \cdots & \frac{\partial}{\partial E2} \\ \vdots & & & & \\ \vdots & & & & \\ \vdots & & & & \\ \frac{\partial}{\partial En-1} & \cdots & \frac{\partial}{\partial Tn} & \frac{\partial}{\partial Tn} & \frac{\partial}{\partial Tn} \\ \frac{\partial}{\partial Tn} & \frac{\partial}{\partial Tn} & \frac{\partial}{\partial Tn} \\ \frac{\partial}{\partial Tn} & \frac{\partial}{\partial Tn} & \frac{\partial}{\partial Tn} \\ \vdots & & & \\ \vdots & &$$

Una vez que se ha calculado la matriz de jacobianos, suponien do valores de Vj y Tj, se resuelven las ecuaciones (3-9) para encontrar valores de las correcciones AVj y ATj. Los nuevos valores de Tj y Vj que se emplearán en la siguiente iteración se calculan como sigue:

- 28 -

$$V_j^{k+1} = V_j^k + t \Delta V_j$$
 (3-10)

$$r_{j}^{k+1} = T_{j}^{k} + t \Delta T_{j} \qquad (3-11)$$

donde k es el número de la iteración y t es un factor de relajación, cuyo significado se explica más adelante.

Los valores de Ej y Sj se calculan mediante las ecuaciones de suma de fracciones mol (3-3) y los balances de energía (3-2) y las derivadas parciales en la matriz de jacobianos se evalúan mediante el método de diferencias finitas. Posteriormente se resuelven las ecuaciones (3-9) y se hacen las co rrecciones a los anteriores de Tj y Vj, como se indica en (3-10) y (3-11).

El procedimiento de solución puede resumirse como sigue:

- (1) Suponer valores iniciales para Vj y Tj.
- (2) Calcular los valores de Lj mediante las ecuaciones de balance de materia global (2-5).
- (3) Resolver el conjunto de ecuaciones (3-1) mediante el algoritmode matriz tridiagonal para encontrar Xi,j.
- (4) Calcular Yi, j mediante las relaciones de equilibrio(2-1).
- (5) Determinar Ej y Sj mediante las ecuaciones de suma

- 29 -

de fracciones mol (3-3) y los balances de energía (3-2).

- (6) Evaluar las derivadas parciales de Ej y Sj.
- (7) Resolver las ecuaciones (3-9) para Avj y Atj.
- (8) Determinar nuevos valores de Tj y Vj mediante las ecuaciones (3-10) y (3-11).
- (9) Con el nuevo conjunto de valores Tj y Vj repetir desde el paso (2), hasta que se satisfaga un criterio de convergencia.

Como se menciona anteriormente, al aplicar estrictamente este procedimiento, la matriz de jacobianos tiene que ser calculada y resuelta en cada iteración, incrementando grandemente el tiempo de cálculo, especialmente debido a que las derivadas se evalúan numéricamente. Para eliminar esta dificultad, se emplea el procedimiento de Broyden (6), el cual es una ve<u>r</u> sión modificada del método de Newton-Raphson, diseñado para reducir el número de veces que tiene que ser evaluada una función, modificando los coeficientes del inverso de la matriz de jacobianos, en lugar de evaluarla, en cada iteración.

## 3.2 El Procedimiento de Broyden

A continuación se hace una breve descripción de la clase de métodos propuesta por Broyden (6) para resolver sistemas de ecuaciones no lineales.

Dado un conjunto de ecuaciones no lineales

- 30 -
fj (x1, x2, ..., xn) = 0; j = 1, 2, ..., n (3-12)

empleando notación matricial pueden escribirse como

$$f(\bar{x}) = 0$$
 (3-13)

Si  $\bar{x}$  es la k-ésima aproximación de la solución de la ecuación (3-13) entonces, de acuerdo con el método de Newton-Raphson, los valores de X en la iteración k+l se definen como

$$\bar{x}^{k+1} = \bar{x}^{k-1} - \bar{A}^{k-1} \bar{f}^{k}$$
 (3-14)

- k donde A es la matriz de jacobianos.

k - k<sup>-1</sup>

Definiendo p como

$$\bar{p}^{n} = -\bar{B}^{n}\bar{f}^{n}$$
 (3-15)  
 $\bar{B}^{n}$  es alguna aproximación a la matriz de jacobianos  
 $\bar{B}^{n}$  es alguna aproximación a la matriz de jacobianos

Entonces, una modificación al algoritmo de Newton-Raphson que daría como:

$$\bar{\mathbf{x}}^{k+1} = \bar{\mathbf{x}}^{k} + t \bar{\mathbf{p}}^{k}$$
(3-16)

- k kdado  $\overline{H} e \overline{y}$  definidos como

$$\begin{array}{l} -k & -k^{-1} \\ \overline{H} & = \overline{B} \end{array}$$
 (3-17)

31

$$\overline{y} = \overline{f} - \overline{f}$$
(3-18)

La matriz  $\overline{B}$  se escoge de manera que el cambio en  $\overline{f}$   $\overline{B}$  k+1 predicho por  $\overline{B}$  en una dirección ortogonal al vector k  $\overline{p}$  es el mismo que sería predicho por  $\overline{B}$ . Mediante la fórmula de Householder (17) se obtiene la siguiente relación.

$$\frac{1}{H} = \frac{1}{H} - \frac{(\frac{1}{H} \frac{k}{y} + t \frac{k}{p}) \frac{k^{T} - k}{p}}{\frac{k^{T} - k}{H} \frac{k}{y}}$$
(3-19)

donde t es un factor de relajación y  $\overline{P}^{n}$  es el vector transk - k puesto de  $\overline{P}^{n}$ .  $\overline{H}^{n}$  es una aproximación al inverso de la matriz de jacobianos  $\overline{A}^{n}$ .

Los nuevos valores de  $\overline{x}$  se calculan como

$$\overline{x}^{k+1} = \overline{x}^{k} + t \overline{\overline{H}}^{k} \overline{f}^{k}$$
(3-20)

La selección del factor de relajación t, se hace de forma tal que los nuevos valores de  $\bar{x}$  sean una aproximación a la solución mejor que los valores de  $\bar{x}$  de la iteración anterior, previendo de esta manera que el algoritmo sea divergente, empleando como criterio de convergencia alguna de las normas de la función  $\bar{f}$ .

- 32 -

Broyden utiliza el siguiente algoritmo para el cálculo de t.

En cada iteración, como primer valor del factor de relajación  $t^{(1)}$ se escoge la unidad, debido a que este es el valor natural del método de Newton-Raphson. Un segundo valor  $t^{(2)}$ se calcula mediante una ecuación semi-empírica.

donde

$$-\Theta = \frac{\emptyset (1)}{\emptyset (0)}$$
(3-22)

y donde  $\emptyset(t)$  es el cuadrado de la norma euclidiana de  $\overline{f}(t)$ .

Cuando ninguno de los valores t<sup>(0)</sup> ni t<sup>(1)</sup> causan una reducción en el valor anterior de  $\emptyset(t)$ , se busca un nuevo valor de t sistemáticamente, para lo cual Broyden aproxima la función  $\emptyset(t)$ .mediante un polinomio de segundo grado, con los valores de t = 0, l y t<sup>(2)</sup>, trata de encontrar un valor de t tal que  $\emptyset(t^{k+1}) \leq \hat{\emptyset}(t^k)$  mediante un algoritmo de minimización.

Las funciones  $\overline{f}$ j en la ecuación general (3-12) representan los residuos en las ecuaciones del modelo, esto es Ej y Sj y el vector  $\overline{x}$  corresponde a los valores de temperaturas (Tj) y flujos (Vj). Por lo tanto, la matriz  $\overline{H}$  de la ecuación (3-19) que es actualmente una aproximación a el inverso de la matriz

- 33 -

jacobiana se expresa en términos de Ej, Sj, Tj y Vj en la iteración anterior y en la presente.

En iteraciones sucesivas, el procedimiento de Broyden se usa para actualizar la matriz inversa, empleando información de las iteraciones anteriores, lográndose de esta manera evitar el cálculo múltiple de las derivadas parciales, así como del inverso de la matriz jacobiana.

El procedimiento de cálculo modificado puede resumirse como sigue:

- Suponer valores îniciales de temperaturas (Tj)
   y flujos (Vj).
- (2) Calcular los valores de Lj mediante las ecuaciones de balance de materia global (2-5).
- (3) Resolver el conjunto de ecuaciones (3-1) mediante el algoritmo de matriz tridiagonal para encontrar Xi,j.
- (4) Calcular Yi, j mediante las relaciones de equilibrio(2-1).
- (5) Determinar Ej y Sj mediante las ecuaciones de suma de fracciones mol (3.3) y los balances de energía (3-2).
- (6) Calcular una aproximación del inverso de la matriz de jacobianos empleando el procedimiento de Broyden y encontrar un nuevo conjunto de valores de Tj y Vj

34

mediante las ecuaciones (3-20).

(7) Con los nuevos valores de Vj y Tj se repite el proceso desde el paso (2) al (6) hasta que se satisface un criterio de convergencia.

En la primera iteración debe calcularse e invertirse la matriz de jacobianos. El cálculo de las derivadas parciales tiene que ser numérico, debido a que Ej en la ecuación (3-2) y Sj en la ecuación (3-3) son los residuos en las ecuaciones de balances de materia y energía y no pueden representarse analíticamente. En sistemas en los que las constantes de equilibrio y las entalpias dependen de la composición, es necesario suponer las composiciones (Xi,j) en el paso (1), lo cual puede hacerse empleando un valor cualquiera y resolvie<u>n</u> do repetidamente la matriz tridiagonal.

#### 3.3 Selección de un Criterio de Convergencia.

Con objeto de establecer con seguridad, que un conjunto de valores de Vj, Tj y Xi,j representan una solución real al sistema de ecuaciones, es necesario seleccionar un criterio de convergencia adecuado.

Aún cuando éste es un punto de considerable importancia no se discute explícitamente en la mayor parte de los a<u>r</u> tículos publicados, en los que se proponen nuevos métodos de solución.

Un criterio de convergencia que es común en muchos de los primeros métodos, tales como el de Holland (15),

- 35 -

Wang y Henke (36), Burningham y Otto (4), Sujata (31), etc. es la magnitud de las correcciones  $\Delta Vj$  y  $\Delta Tj$  en una iteración dada. Este criterio puede implementarse en dif<u>e</u> rentes formas, tales como

$$\sum_{i=1}^{N} \Delta V j^{2} + \Delta T j^{2} \leq \epsilon$$

donde e es una cantidad arbitrariamente pequeña y m es un subíndice que se utiliza para designar el valor máximo de  $\Delta T_j / T_j$ .

A pesar de ser de uso común, este criterio de convergencia es inadecuado, debido a que por la misma naturaleza altamente no lineal de las ecuaciones y por las características de los procedimientos iterativos, es posible y personalmente lo he comprobado, el obtener una "solución" que satisfaga este criterio de convergencia y sin embargo no haber satisfecho las condiciones necesarias para considerar que una solución para las ecuaciones del mod<u>e</u> lo ha sido encontrada, siendo estas condiciones la sati<u>s</u> facción de los balances de materia y energía (Sj=0 y Ej=0), aún cuando también estas condiciones pueden ser satisfechas sin tener una solución real.

Broyden propone el empleo como criterio de convergencia,

- 36 -

de cualquier norma de la función de residuos  $\overline{f}(\overline{x})$ . Específicamente, en la implementación de su algoritmo él emplea la norma euclidiana lo que es una medida mejor de la bondad de una solución. Cabe señalar que el método de Broyden es un procedimiento matemático general para la solución de sistemas de ecuaciones no lineales y no un algoritmo para resolver problemas de separación.

El criterio de convergencia empleado en la implementación del método de Tomich en el programa de computadora es el siguiente:

$$\sum_{j=1}^{N} (E'j^2 + Sj^2) \leq e$$

donde N es el número de etapas y e es una cantidad arbitraria mente pequeña.

Como información adicional se emplea el valor que corresponde al máximo (Sj( o (E'j)para tener una medida del comportamiento del algoritmo empleado.

Con el objeto de que los valores de Ej y Sj sean comparables, es necesario "normalizar" Ej, esto es, hacer que los valores de E'j estén en la vecindad del intervalo -1, 1 . Una forma de lograrlo puede ser dividiendo Ej entre la magnitud del calor total de entrada en la etapa J:

- 37 .

Sin embargo, la estrategia de normalización depende de las funciones que se empleen en el cálculo de entalpias, lo que se discutirá más adelante.

#### PROPIEDADES TERMODINAMICAS

Para la simulación y diseño de equipos de separación, además de un algoritmo eficiente para la solución de las ecuaciones del modelo, es necesario contar con algún método adecuado para calcular con precisión las propiedades termodinámicas de los componentes del sistema. Por otra parte, el uso de un método en particular, en muchos casos determina o cuando menos influye grandemente en el comportamiento del algori<u>t</u> mo de solución. Debido a su importancia se ha dedicado gran esfuerzo en la búsqueda de métodos eficientes para predecir los valores de las relaciones de equilibrio (K) y entalpias de mezclas de multicomponentes, siendo de particular importan cia las correlaciones semiempíricas desarrolladas para la evaluación numérica de las propiedades de mezclas de hidrocarburos.

## 4.1 Relaciones o Constantes de Equilibrio K

En la región de bajas presiones, lejos de las condiciones críticas, la relación o constante de equilibrio(K) puede ser aproximada empleando las presiones de vapor de cada componente y la presión total del sistema líquido-vapor. Para sistemas no ideales, frecuentemente se emplean los coeficientes de actividad en fase líquida para modificar dichas relaciones.

- 39

Sin embargo, las relaciones de equilibrio entre dos fases de sistemas operando a altas presiones, tales como las que se encuentran frecuentemente en las industrias petroquímica y de procesamiento de gas natural no pueden ser aproximadas correctamente mediante el uso exclusivo de las presiones de vapor.

Tradicionalmente, una de las fuentes de información, para determinar las constantes de equilibrio, han sido las tablas (23) de la N.G.P.S.A. (Natural Gas Processing Association). Sin embargo, para el cálculo mediante computadores de las constantes de equilibrio de mezclas de multicomponentes, es necesario contar con procedimientos generales que representen con precisión el equilibrio entre las fases (líquido-vapor) de el sistema. La ecuación de estado de Benedict, Webb y Rubin (3), fué uno de los primeros métodos analíticos utilizados para predecir ace<u>r</u> tadamente el comportamientoPVT de mezclas de hidrocarburos, y ha sido empleada con frecuencia para el cálculo de constantes de equilibrio y entalpias.

Una correlación general, para calcular constantes de equilibrio en mezclas de hidrocarburos fué desarrollada por Chao y Seader (9), en 1966. A partir de esa fecha, su empleo se ha ido generalizando siendo ampliamente utilizada desde entonces, en las industrias petroquímica y de procesamiento de gas natural. Nuevas correlaciones, tales como la presentada por Prausmitz y Chueh (27), (10) han sido

- 40

elaboradas y las investigaciones en este campo continúan, tratando de desarrollar métodos más precisos.

En este trabajo, la correlación de Chao-Seader (9) se utilizó para el cálculo de las constantes de equilibrio, por ser la más probada y aceptada, además de ser apropiada para implementarse en un programa para computadora digital.

#### 4.2 La Correlación de Chao-Seader

Chao y Seader (9) expresan la constante de equilibrio K, como una función de tres cantidades termodinámicas;

$$Ki \equiv \frac{Yi}{Xi} = \gamma_{i}^{*} \frac{\gamma_{i}}{\gamma_{i}}$$

$$(4-1)$$

donde "i" se refiere a un componente cualquiera en una mezcla de hidrocarburos.

El coeficiente de fugacidad del componente "i" en la fase de vapor ( $\frac{W}{2}$ ) se determina empleando la ecuación de estado de Redlich y Kwong (29). El coeficiente de fugacidad del componente "i" en la fase líquida ( $\frac{W}{2}$ ) es una propiedad del componente puro, y se evalúa mediante una correlación que se enmar ca dentro del teorema de los estados correspondientes con las modificaciones sugeridas por Gryson y Streed. Para el cálculo de el coeficiente de actividad ( $\frac{W}{2}$ ) se emplea la teoría de so luciones regulares, usándose la ecuación de Scatchard-Hildebrand la cual pertenece al tipo de la ecuación de Van Laar. (Como se

- 41 -

ñalan Chao y Seader, ecuaciones del tipo de la de Margules tam bién pueden ser utilizadas).

Una característica muy importante de esta correlación es que en ella no existen parámetros que dependan de las interacciones entre moléculas con el sistema de multicomponentes, al correlacionar la no-idealidade cada componente en la mezcla, en ambas fases (líquido y vapor) con las propiedades del compone<u>n</u> te puro.

El cálculo de cada uno de los parámetros de esta correlación se presenta a continuación.

4.2.1 <u>Coeficiente de fugacidad de la fase de vapor (%).</u> Como se menciona anteriormente, en la correlación de Chao-Seader la ecuación de estado de Redlich-Kwong (29) se utiliza para encontrar las propiedades de la fase de vapor. Dicha ecuación se expresa como

$$Z = \frac{1}{1 - h} - \frac{A^2}{B} \frac{h}{1 + h}$$
(4-2)  
$$h = \frac{BP}{B}$$

donde Z es el factor de compresibilidad, y A y B son constantes para un componente dado, que se expresan en términos de las propiedades críticas Pc y Tc como

Z

Ai = 
$$(\frac{0.4278}{\text{Pc Tr}^{2.5}})^{1/2}$$

$$Bi = \frac{0.0867}{Pc Tr}$$

 $A = \sum_{i=1}^{N_{c}} Yi Ai$  $B = \sum_{i=1}^{N_{c}} Yi Bi$ 

donde

Pc = Presión crítica
Tr = Temperatura reducida
Nc = Número de componentes en la mezcla

El coeficiente de fugacidad  $\frac{1}{2}$ es rigurosamente relacionado con las propiedades volumétricas de la mezcla en fase de vapor mediante la ecuación

Ln 
$$\emptyset i = \frac{1}{RT} \int_{V} \left[ \left( \frac{\partial P}{\partial ni} \right)_{T,V,nj} - \frac{RT}{V} \right] dV - Ln Z$$

(4 - 4)

43

(4 - 3)

#### donde

ni = número de moles del componente i
V = Volumen total de la mezcla de vapor
P = Presión total del sistema
Z = Factor de compresibilidad (PV/nRT)
T = Temperatura de la mezcla
n<sub>t</sub> = Número de moles totales
n<sub>j</sub> = Número de moles de cualquier componente
 exceptuando el componente "i".

Para obtener resultados numéricos de esta ecuación se requiere emplear una ecuación de estado. Substituyendo la ecuación de Redlich-Kwong se obtiene

$$\ln \phi i = (Z-1) \frac{Bi}{B} - \ln (Z - B P) + \frac{A^2}{B} \left[ \frac{2Ai}{A} - \frac{Bi}{B} \right] \ln \left[ \frac{1}{P} + \frac{BP}{Z} \right] \quad (4-5)$$

la cual se utiliza para encontrar  $\emptyset_i$ 

4.2.2 <u>Coeficientes de Actividad en una Solución Líquida</u> (<sup>V</sup><sub>1</sub>). Para cualquier componente "i" en una solución, el prop<u>ó</u> sito de el coeficiente de actividad es el de relacionar la fugacidad del componente en la fase líquida, para valores de temperatura, presión y composiciones dados, con algún otro valor de fugacidad en otras condiciones en las que el valor es conocido con exactitud. A esta con-

- 44 -

dición se le conoce como el "estado estandard", y debe ser calculado a la misma temperatura que la solución y a alguna presión y composiciones fijos, seleccionados arbitrariamente.

El coeficiente de actividad  $\delta_i$ . se calcula mediante la ecuación de Hildebrand

$$\ln \forall i = \frac{\text{Vi } (\hat{S}i - \bar{S})^2}{\text{R T}}$$
(4-6)

$$S = \frac{\sum_{x=1}^{N_{c}} \delta_{i \ xi \ Vi}}{\sum_{x=1}^{N_{c}} xi \ Vi}$$
(4-7)

donde

- V = Volumen molar del componente "i" en la fase lí quida.
- Si = Parámetro de solubilidad del componente "i".  $\overline{S}$  = Valor promedio de el parámetro de solubilidad de la solución.

S: puede definirse como

$$\int i = \left(\frac{\Delta H}{Vi^*}\right)^{1/2}$$

donde AH es el calor de vaporización y Vi el volumen molal del componente i en la fase líquida.

- 45 -

Yalores de V y §i para diferentes componentes han sido determinados y se encuentran tabulados. La aplicación de la ecuación anterior en la determinación de

Si es restringida, debido a que únicamente se apli ca a soluciones denominadas regulares, para las cuales la entropía de exceso ("excess entropy") de mezclado es cero. Dado que la energía libre de exceso de Gibbs, consiste de la entropia y entalpia de mezclado, el comporta miento no ideal de las soluciones regulares es atribuído únicamente a su calor de mezclado.

En general, no es válido suponer que una solución es regular, sin embargo, el comportamiento de sistemas de líquidos no polares tales como hidrocarburos, se aproxima mucho al de las soluciones regulares.

La principal característica de este método de cálculo es que el coeficiente de actividad es evaluado como una función de las propiedades del componente puro.

# 4.2.3.El Coeficiente de Fugacidad ().

Este parámetro es una propiedad termodinámica bien definida en condiciones en las que el componente existe como líquido, y como tal puede ser calculado mediante correlaciones generalizadas, en términos de temperaturas y presiones reducidas. Bajo condiciones donde el componente no existe como líquido, la correlación del coeficiente de fugacidad es ampliada. La teoría de los

- 46 -

estados correspondientes ha sido modificada por Pitzer, con la introducción de un tercer parámetro Wi, el cual es llamado factor acéntrico, de manera que cualquier propiedad de un fluído se define como una función de la presión y temperatura reducidas y del factor acéntrico.

Este concepto es empleado para correlacionar el coeficien te de fugacidad ( $V_{i}$ ].

$$\log \gamma_{i} = \log \gamma_{i}^{(0)} + \tilde{w}_{i} \log \gamma_{i}^{(1)} \qquad (4-8)$$

El primer término  $yi^{(\circ)}$  es el coeficiente de fugacidad de fluídos simples caracterizados por un valor cero de el factor acéntrico  $yi^{(1)}$  es una corrección para compensar por el alejamiento de los fluídos reales de el estado de fluído simple.

yi <sup>(0)</sup> y yi <sup>(1)</sup> dependen únicamente de la presión y temperatura reducidas. Mediante datos de equilibrio experimentales Chao y Seader encontraron las siguientes correlaciones:

 $\log \gamma_{i}^{(0)} = A1 + A2/Tr + A3 Tr + A4 Tr^{2} + A5 Tr^{3}$  $+ (A6 + A7 Tr + A8 Tr^{2}) Pr$  $+ (A9 + A10 Tr) Pr^{2} - \log Pr \qquad (4-9)$ 

 $\log \gamma_{i}^{(1)} = -4.23893 + 8.65808 \text{ Tr} - 1.2206/\text{Tr}$  $-3.15224 \text{ Tr}^{3} - 0.025 \text{ (Pr} - 0.6)$ 

#### (4 - 10)

donde todos los coeficientes constantes fueron obtenidos para los hidrocarburos más comunes.

En general, mediante el uso de las ecuaciones (4-8), (4-9) y (4-10), el coeficiente de fugacidad de un componente en la fase líquida puede ser calculado si se conocen la temperatura y presión reducidas y el factor acéntrico.

# 4.2.4 Limitaciones de la Correlación de Chao-Seader.

La correlación de Chao-Seader ha sido y es ampliamente usada para determinar constantes de equilibrio y por lo mismo ha sido intensamente evaluada. La característica principal del método es que está basado en relaciones termodinámicas adecuadas y el uso exclusivo de propieda des de componente puro. Sin embargo, debido a las simpli ficaciones hechas en su desarrollo, la correlación tiene ciertas limitaciones. Estas restricciones pueden resumir se como :

 El uso de la correlación se restringe a mezclas de componentes no polares.

48

- (2) La presión no debe exceder de 1000 psia y deberá ser menor a 0.8 de la presión crítica del sistema.
- (3) La temperatura reducida de cualquier hidrocarburo, exceptuando al metano deberá estar entre 0.5 y 1.3.
- (4) El contenido de metano en la fase líquida no debe exceder un valor de fracción mol de 0.3 y para cualquier sistema que contenga hidrógeno o metano la temperatura reducida debe ser menor que 0.93 y la temperatura deberá estar entre 100 y 500<sup>0</sup>F.
- (5) Para calcular constantes de equilibrio de parafinas u olefinas, el contenido de compuestos aromáticos no deberá exceder un valor de fracción mol de 0.5.

#### 4.3 Cálculo de Entalpias.

La entalpia de una mezcla de composición constante es una función de la presión y de la temperatura del sistema. De la termodinámica clásica, la entalpia de una mezcla a tem peratura T y presión P puede representarse como:

Hm (T,P) = 
$$\sum_{i=1}^{N_{c}} xi Hi^{0}(T,0) - Hm^{D}(T,P)$$
 (4-11)

donde todos los valores de Hi<sup>0</sup>(T,o) (entalpia molar parcial) se refieren a un mismo estado de referencia y el té<u>r</u> mino Hm<sup>D</sup>, conocido comunmente como la desviación isotérmica de la entalpia, relaciona la entalpia de la mezcla a presión p, con la entalpia de una mezcla de gases ideales a presión cero.

La entalpia de gas ideal Hi<sup>0</sup>puede calcularse a partir de datos experimentales, o mediante valores estimados de la capacidad calorífica de un gas ideal, en la forma presentada por Reid, Sherwood (30). La desviación de la entalpia M<sup>D</sup> puede calcularse mediante diferentes métodos tales como las correl<u>a</u> ciones de Hougen y Watson (16) y Lyderson, Greenkorn y Hougen (19).las cuales emplean como parámetros la temperatura, presión reducida y el factor de compresibilidad crítica, o mediante la correlación de Pitzer (25) la cual emplea la temperatura y presión reducida y el factor acéntrico.

Yen y Alexander (38) actualizaron y aproximaron las tablas de Lyderson, Greenkorn y Hougen mediante polinomios, con el obj<u>e</u> to de emplearlas en un programa de computadora, igualmente, se han encontrado expresiones analíticas para la correlación de Pitzer.

Otra forma de calcular las desviaciones isotérmicas de entalpia es a partir de una ecuación de estado. De la termodinámica clásica:

$$dH = d(PV) + \left[T (\partial P / \partial T)_V - P\right]_T dV \qquad (4-12)$$

Integrando esta ecuación desde P = 0 hasta la presión del sistema (P), o lo que es lo mismo, desde volumen infinito hasta

- 50 -

el volumen del sistema (V), se obtiene la desviación isotérmica de la entalpia.

$$Hm^{D} = RT - PV + \int_{\infty} \left[ P - T (\mathcal{P} \mathcal{D}) \right]_{T} dV \qquad (4-13)$$

de manera, que si se dispone de una ecuación de estado adecuada, tal como la de Benedict, Webb y Rubin (2) es posible emplearla en el cálculo de  $H_m^D$ .

En el programa elaborado, se emplea la correlación de Yen y Alexander (38). Debido al número de ecuaciones necesarias para describirla, no se presentan aquí. De acuerdo con los exp<u>e</u> rimentos de Yen y Alexander, sus ecuaciones deberían predecir datos experimentales con una precisión entre 80 y 90 porciento. Por otra parte, en general, esta correlación es más prec<u>i</u> sa que el método basado en la ecuación de Benedict, Webb y Rubin cuando la temperatura reducida es menor a 0.6.

Aún cuando la entalpia de mezclas puede calcularse basándose en relaciones termodinámicas y la correlación de Chao-Seader, empleando las correlaciones desarrolladas por Edmister, Persy y Erbar se ha encontrado que no es un método muy exacto.

#### 4.4 Componentes Hipotéticos

En la industria del petróleo, con frecuencia se encuentran fracciones de petróleo complejas. Para manejar este tipo de fracciones como un solo componente puro, se emplean las correlaciones de Cavett (8).

51 -

La información que se requiere conocer sobre una fracción es la densidad o gravedad específica en grados API, el peso molecular medio y el punto de ebullición promedio.

# RESULTADOS OBTENIDOS

## 5.1 Características del Programa

El programa desarrollado está escrito en lenguaje FOR-TRAN y consta de un programa principal y doce subrutinas que realizan diferentes funciones. Cada una de estas subrutinas fué probada independientemente con datos reportados en la literatura y con diversos ejemplos. Por último, se hicieron un gran número de pruebas con el pro grama completo, para detectar cualquier tipo de error, tanto en los algoritmos, como en la codificación. A continuación se da una descripción de las principales rutinas del programa.

#### 5.1.1 Programa Principal

En esta sección del programa se leen todos los da tos de entrada, los cuales son descripción del problema:

NC Número de componentes

NT Número de platos o etapas de equilibrio

- IRB Indicador para identificar el problema como absorbedor (IRB=0) o absorbedor con rehervi dor (IRB=1).
- INH Indica si se conoce la salida de vapor del plato uno SV<sub>1</sub> (INH=1) o si no se especifica, entonces la carga térmica del rehervidor Qn puede especificarse.
- ITIPO Indica el tipo de problema que se quiere re solver; absorción (ITIPO=0) o destilación

- 54 -

#### (ITIPO=1).

Restricciones impuestas para las iteraciones:

TMAX,TMIN Valores máximo y mínimo de temperatura (<sup>O</sup>F) que pueden ser supuestos en cualquier iteración.

VMAX,VMIN Valores máximo y mínimo de flujo de vapor (Lb mol/hr) en la columna que pueden ser supuestos en cualquier iteración.

LIMK3 Número máximo de iteraciones en el pro cedimiento de Broyden, que implican mo dificaciones a la matriz inversa de ja cobianos H. El número máximo de intentos de encontrar un conjunto de valores Vjy Tj modificando el coeficiente de relajación t se definió como 10.

MP Indicador para imprimir la matriz de jacobianos (MP=1) o suprimir impresión (MP=0).

CHNG Cambio máximo permitido en una variable de una iteración a la otra (valor nuevo-valor anterior 4 CHNG veces el valor anterior).

- 55 -

SFINMX Yalor mínimo de la norma euclidiana del vector de residuos (Sj,Ej) de los balances de materia y energía, empleado como criterio de convergencia.

Componentes y presión del sistema:

COMPNT (I) Clave de cada uno de los componentes del sistema.

PR Presión de la columna.

Descripción de las corrientes de alimentación:

NRD	Número	de	corrientes

J Plato de alimentación

KIND Condición de la corriente, ésto es, lí quido subenfriado (KIND=1),a la temperatura de burbuja (KIND=2), a la temp<u>e</u> ratura de rocío (KIND=3) o sobrecalentado (KIND=4). Si se conocen la-temperatura y la entalpia de la corriente, entonces KIND=10.

F(J) Flujo molar (Lb-mol/hr).

TF

HF(J) Entalpia de la corriente (BTU's/Lb-mol). Este valor se calcula en el programa, cuando KIND es diferente de 10.

Temperatura de la corriente en F. Se

- 56 -

calcula en el programa cuando la corriente se encuentra en el punto de burbuja.

(KIND=2) o en el de rocio (KIND=4).

FC(I,J) Fracción mol de cada uno de los componentes.

Relación de reflujo:

REFLUX	Relación de reflujo L/D para proble-
	mas de destilación. En problemas de ab
	absorción no se utiliza esta variable
	(valor de entrada 0.0).

Corrientes laterales:

NRD	Número de corrientes.
J	Plato del que se extrae la corriente.
\$V(J)	Salida de vapor (lb-mol/hr).
SL(J)	Salida de líquido (lb-mol/hr).

Flujo de calor:

NRD	NRD	Número	de	intercambiadores	de	calor	en
		la colu	ımna	a.			

J Plato en el que se adiciona o extrae calor.

- 57 -

Q(J) Flujo de calor (BTU/hr).

Valores iniciales de flujo de vapor y temperatura:

т(J)	Valores iniciales de temperatura (F)
V(J)	Valores iniciales de flujo de vapor
	Lb-mol/hr). V(1) siempre se considera
	igual a cero, debido a que la salida
	de vapor del plato l se considera co-
	mo SV(1).

Una vez leídos todos los datos de entrada y en su caso calculadas las temperaturas y entalpias de las corrientes de alimentación se toman como valores iniciales de las composiciones X(I,J) e Y(I,J)=1/NC y se pasa el control a la subrutina MODIF6.

#### 5.1.2 Subrutina MODIF6.

Esta rutina se utiliza para calcular el inverso de la matriz de jacobianos y realizar el proceso iterativo que se describe en el capítulo 3, modificando los coeficientes de la matriz inversa H. Para la ejecución de esta subrutina, se requiere de ABSORB,RIT, NORMAS, INVMAT, QUADMN y MODIFH, las cuales se describen post<u>e</u> riormente.

#### 5.1.3 Subrutina MODIFH.

Esta rutina se utiliza para efectuar las modificaciones a la matriz H, requeridas por el procedimiento de Broy-

58

den.

#### 5.1.4 Subrutina NORMAS

Se emplea para calcular diferentes normas de un vector  $\overline{x}$ .

#### 5.1.5 Subrutina QUADMN.

Esta rutina se emplea para encontrar un valor mínimo de una función, aproximándola mediante polinomios de segundo grado. En el programa se usa como parte del procedimiento de Broyden (28) para encontrar nuevos valores de Tj, y Vj modificando el factor de relajación t que se menciona en el capítulo 2. Para su ejecución utiliza a las subrutinas ABSORB y NORMAS y SET (esta última se considera parte de QUADMN).

### 5.1.6 Subrutina DIAG3

Es un algoritmo para resolver una matriz tridiagonal, como la que resulta del balance de materia por componentes, representado por las ecuaciones (3-1).

#### 5.1.7 Subrutina INVMAT

Es una rutina para encontrar la inversa de una matriz cuadrada. Si la matriz es singular se genera un aviso para el programa que hace uso de ella. Se utiliza por MODIF6 para calcular la matriz H, inversa de la matriz de jacobianos.

#### 5.1.8 Subrutina ABSORB

59

Esta rutina se emplea para resolver los balances de materia y energía, para unas condiciones iniciales da= das. Para resolver los balances y calcular los residuos Sj y Ej, se encuentran valores de las composiciones Xi,j e Yi,j mediante un procedimiento iterativo. Para realizar su función, se requiere emplear las subrutinas KHOL y KHZT, para el cálculo de constantes de equilibrio y entalpias. También se emplea DIAG3 para la solución de la matriz tridiagonal (ecuaciones 3-1).

#### 5.1.9 Subrutina RIT

Se emplea para generar diversos tipos de reportes; en ella se especifican la mayor parte de los formatos de salida de el programa.

#### 5.1.10 Subrutina COMPID

En esta sección del programa se definen la mayor parte de las constantes y parámetros necesarios para las correlaciones utilizadas para el cálculo de constantes de equilibrio, entalpias, etc., para sesenta y dos compue<u>s</u> tos diferentes. Las propiedades más importantes de cada uno de los sesenta y dos compuestos tabuladas son:

a).- Nombre y clave de cada compuesto.

b).- Factores acéntricos (w) de Chao-Seader modificados.

c).- Parámetros de solubilidad de Hildebrand para la

correlación de Chao-Seader modificados.

d).- Volúmenes molares a 25°C.

60 •

- e).- Volúmenes molares característicos de Chao-Seader.:
- f).- Temperaturas críticas.
- g).- Presiones críticas.
- h).- Volúmenes críticos.
- i) .- Pesos moleculares.
- j).- Densidades a 15°C.
- k).- Coeficientes de contenido de calor a presión cero alpha, betta, gamma y delta.

Esta subrutina es ejecutada por el programa para inicializar las variables correspondientes a un problema particular.

#### 5.1.11 Subrutina KHZT

En realidad esta es una subrutina constituída por seis rutinas internas, para evaluar otras tantas pro piedades termodinámicas de mezclas de hidrocarburos en fase líquido ovapor, esto es: relaciones o constantes de equilibrio, entalpias, densidades, tempera tura de burbuja, temperaturas de rocío y temperatura a partir de la entalpia de una mezcla. Como se mencio na en el capítulo 4, las relaciones de equilibrio se calculan mediante la correlación de Chao-Seader (9).

Las entalpias molares parciales se obtienen mediante la correlación de Yen y Alexander (38).

Para el cálculo de densidades en la fase líquida, se emplea la correlación de Yen y Woods (39) y para el

61 -

cálculo de mezclas en fase de vapor se utiliza la ecuación de estado de Redlich-Kwong, para encontrar el factor de compresibilidad Z. La solución de la ecuación de tercer orden (cúbica en Z) de Redlich\_Kwong, se realiza mediante un procedimiento analítico, al contrario de la tradicional solución iterativa media<u>n</u> te el método de Newton-Raphson.

Tanto las temperaturas de burbuja, como las de rocío, se obtienen mediante un procedimiento iterativo, util<u>i</u> zando el método de falsa posición (regula-falsi) con interpolación mediante polinomios de segundo grado, lo que generalmente acelera la convergencia.

#### 5.1.12 Datos de salida

Como resultado de los cálculos, efecutados por el programa, a partir de los datos de entrada (inciso 5.1.1), se obtienen los siguientes resultados:

- a).- Relaciones de equilibrio para cada componente en cada una de las etapas (Ki,j).
- b).- Temperatura en cada una de las etapas (Tj).
- c).- Entalpias molares parciales de cada corriente (HLj y HVj).
- d).- Composición de las fases líquidos y vapor en cada etapa (Xi,j e Yi,j).
- e).- Flujos de vapor y líquido en todas las etapas(Vj y Lj).

- 62

- f) .- Balances de materia y energía.
- g).- Información adicional como la norma euclidiana de los residuos Ej y Sj, el error máximo en los balances, número de iteraciones necesarias para alcanzar la solución, etc.

# 5.2 Evaluación del Programa

El programa desarrollado, ha sido probado minuciosamente con diferentes datos y parte por parte, con objeto de asegurar su buen comportamiento. En el caso del procedimiento de Broyden (6), se codificaron y probaron indepen dientemente las rutinas para la solución de ecuaciones lineales. Ligeras modificaciones hechas al algoritmo por el autor de este trabajo, ocasionaron una disminución del número de iteraciones requeridas para encontrar la solución de un sistema de ecuaciones empleado por Broyden (6) para demostrar su algoritmo. Las restricciones adicionales que se utilizan (Tmax, Tmin, CHNG, etc) ayu dan a preveer la divergencia y mejoran también el compor tamiento del algoritmo. El método de Tomich (35), con el procedimiento de Broyden, es uno de los mejores algoritmos generales para la solución de problemas de separación de mezclas de multicomponentes mediante etapas multiples. Por otra parte, para el cálculo de propiedades termodiná micas se emplearon las correlaciones generalmente reconocidas como las mejores para sistemas de hidrocarburos no polares, en condiciones de P,TyV por debajo de la región crítica.

63

Por último, la estructura modular del programa, permite utilizar individualmente cada una de sus partes, así co mo realizar modificaciones parciales, para adaptarse a requerimientos diferentes a los actualmente planteados, con muy poco esfuerzo de programación.

Con objeto de comparar los resultados del programa, con resultados reconocidos por otros autores, se prepararon diferentes pruebas que se describen a continuación.

## 5.3 Caso 1. (Absorción).

Este problema, descrito por Holland etal (13),(15), corresponde a un sistema de absorción, con seis componentes y ocho etapas de equilibrio. En la columna solo se introducen dos alimentaciones, a los platos 1 y 8 y no se extraen corrientes laterales sino de dichos platos.

Este problema se eligió para probar el programa, debido a que es un problema real, para el cual se cuenta con cálculos realizados empleando dos procedimientos distin tos, por dos autores diferentes: Holland etal (13), (15). y Otto e Ishii (24).

Como valores iniciales de V y T, se emplearon los mismos utilizados por Otto e Ishii, obteniéndose una solución al problema en siete iteraciones. Cuando se emplean los valores iniciales propuestos por Holland et al (13), el algoritmo no converge, debido principalmente a que la distribución de los valores de T y V no corresponde a la distribución esperada para una columna de esta naturaleza (ver figuras 5.3a y 5.3b).

Aún cuando en todos los problemas presentados, la comparación de resultados que se presenta es con respecto a los valores de V y T, también se compararon la composición de las corrientes en todos los platos.

- 65 -

# 5.3.1 Resultados del Programa
PROBLEMA TIPO ABSORCION

LIMITES PARA LAS VARIABLES :

TEMPERATURA MAXI	11A = 300.0
TEMPERATURA MINI	MA = 55.0
FLUJO DE VAPOR M	AX = 120.0
FLUJO DE VAPOR M	IN = 0.0
SV1 MAXIMA	= 120.0

EL NUMERO MAXIMO DE ITERACIONES ES 10

CRITERIO DE CONVERGENCIA :

NORMA MENOR O IGUAL A .10E-04

EL CAMBIO MAXIMO PERMITIDO EN CADA VARIABLE ES 0.25



#### ESPECIFICACIONES DEL PROBLEMA :

NUMERO DE COMPONENTES = 6

NUMERO DE ETAPAS = 8

EQUIPO SIN REHERVIDOR

SALIDA DE VAPOR SV1 NO SE ESPECIFICA

RELACION DE COMPONENTES :

COMPONENTE	NOMBRE	CLAVE
1	METHANE	2
5	ETHANE	3
3	PROPANE	4
4	1-BUTALE	6
5	N-PENTANE	8
6	N-OCTANE	12

LA PRESION DE LA COLUMNA ES 300.00 PSIA

CORRIENTES	DE	ALIMEN	TACION :				
	J	TIPO	F(J)	HF(J)	TF(J)	I	FC(I,J)
	8	4	100.000	.329E+04	56,661	123456	$\begin{array}{c} 0.700\\ 0.150\\ 0.100\\ 0.040\\ 0.010\\ 0.000\end{array}$
	ĩ	1 -	20.000	•138E+04	90.000	12345	

6

RELACION DE REFLUJO L/D = 0.00 CORRIENTES LATERALES : J SV(J) SL(J) 1 85.000 0.000

1

### VALORES ESTIMADOS DE TEMPERATURA Y FLUJOS :

Т	V	L
$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{c} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 7 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 9 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 9 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 9 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 9 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 9 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 9 & 5 & 0 & 0 & 0 \\ 9 & 5 & 0 & 0 & 0 \end{array}$	NNNNNNN NNNNNNN NNNNNNN 00000000000000

## SALIDA DE VAPOR DEL PLATO 1 = 85.00

2345678

70

L

## CONSTANTES DE EQUILIBRIO :

к	1	9.7813	2.5072	0.9205	0.2636	0.0923
к	2	9.8680	2.5706	0.9621	0.2814	0.1000
к	3	9.9159	2.6008	0,9816	0.2896	0.1036
к	4	9.9238	2.6119	0.9893	0.2931	0.1052
к	5	9 8950	2.6017	0,9844	0.2917	0.1047
к	6	9.7844	2.5591	0.9606	0,2834	0.1013
к	7	9.5225	2.4555	0.9030	0.2631	0.0931
к	8	8.8737	2.2094	0.7717	0.2190	0.0757

### ENTALPIAS UNITARIAS :

Т	HL	HV
108.61	.230E+04	.366E+04
113.52	-251E+04	378E+04
112.75	• 201E+04	• 383E+04
116 41	260E+04	- 3036704
114.16	244E+04	384F+04
108.45	206E+04	378E+04
94.99	.118E+04	_365E+04

## COMPOSICION DE LAS DUS FASES :

Х	1	0.0795	0.0586	0.0749	0.0105	0.0000
Х	2	0.0701	0.0599	0.0889	0.0197	0.0000
Х	3	0.0751	0.0590	0.0911	0.0283	0.0001
х	4	0.0747	0.0586	0.0910	0.0366	0.0003
Х	5	0.0748	0.0586	0.0915	0.0451	0.0008
Х	6	0.0754	0.0595	0.0939	0.0556	0.0023
х	7	0.0771	0.0619	0.1007	0.0723	0.0074
Х	8	0.0818	0.0686	0.1205	0.1122	0.0298
Y	1	0.7776	0.1468	0.0689	0.0028	0.0000
Y	2	0.7507	0.1540	0.0855	0.0055	0.0000
Y	3	0.7443	0.1536	0.0894	0.0082	0.0000
Y	4	0.7417	0.1530	0.0901	0.0107	0.0000
Y	5	0.7397	0.1526	0.0901	0.0132	0.0001
Y	6	0.7374	0.1523	0.0902	0.0158	0.0002
Y	7	0.7338	0.1520	0.0909	0.0190	0.0007
Y	8	0.7262	0.1516	0.0930	0.0246	0.0023

BALANCE DE ENERGIA :

J	F_HF	Q	V_HV	L.HL	SV_HV	SL_HL	J
1	.276E+05	0.	0.	.594E+05	.317E+06	0.	1
2	0.	0.	.349E+06	.667E+05	0.	0.	2
3	0.	0.	.356E+06	.702E+05	0.	0.	3
4	0.	0.	.360E+06	.718E+05	0.	0.	4
5	0.	0.	.361E+06	.715E+05	0.	0.	5
6	0.	0.	•361E+06	684E+05	0.	0	6
7	0.	0.	.358E+06	.602E+05	0.	0.	7
8	.329E+06	0.	.350E+06 ·	0.	0.	.395E+05	8

BALANCE DE MATERIA :

J	F	Т	V	L	SV	SL.	J
1	20.000	108.606	0.000	25.830	86,498	0.000	1
2	0.000	113.522	92.328	26.578	0.000	0.000	2
3	0.000	115.794	93.076	26.910	0.000	0.000	3
4	0.000	116.754	93.408	27.177	0.000	0.000	4
5	0.000	116.410	93.675	27.503	0.000	0.000	5
6	0.000	114.157	94.001	28.037	0.000	0.000	6
7	0.000	108.449	94.535	29.221	0.000	0.000	7
8	100.000	94,987	95,719	0.000	0.000	33,502	8

RESUMEN DE LA CORRIDA :

CRITERIO DE CONVERGENCIA	=	.1000000E-04
NUMERO MAXIMO DE ITERACIONES	=	10
NORMA EUCLIDIANA	=	.19771964E=05
ERRCR MAXINO EN LOS BALANCES	=	.25787213E-04
NUMERO DE ITERACIONES REQUERIDA	S=	7
TIEMPO DE PROCESADOR UTILIZADO	=	19.90 SEGS.
TIEMPO DE ENTRADA / SALIDA .	=	1.08 SEGS.

## 5.3.2 Comparación de Resultados

	HOLLAND (24)	C. NORIEGA	OTTO E ISHI (1	5)
Plato	T( <sup>O</sup> F)	T( <sup>O</sup> F)	т ( <sup>0</sup> ғ)	
· 1	107.6	108.6	119.5	
2	111.4	113.5	125.1	
3.	112.5	115.8	126.2	
4	112.1	116.7	125.2	
5	110.2	116.4	122.5	
6	105.8	114.2	117.9	
7	96.4	108.4	109.9	
8	74.4	95.0	94.8	
Plato	V (Lb-mol/hr)	V (Lb-mol/hr)	V (Lb-mol/hr)	
1	85.00	86.5	86.01	
2	89.8	92.3	91.7	
3	90.5	93.1	92.4	
4	90.8	93.4	92.7	
5	91.0	93.7	93.0	

94.0

94.5

95.7

93.4

94.0

95.4

Tabla 5.3 Comparación de los resultados del caso 1.

6

7

8

91.3

91.8

93.2

PLATO



D. HOLLAND X OTTO E ISHII • C. NORIEGA •

FIGURA 5-3a Comparación de los resultados (Tj) del caso 1.

- 78

PLATO



D. HOLLAND × OTTO E ISHII • C. NORIEGA O V

FIGURA 5-3b Comparación de los resultados (Vj) del caso 1.

### 5.4 Caso 2.- (Absorción).

Al igual que el caso 1, este problema es descrito por D. Holland (15) y corresponde también a un sistema de absorción, de ocho etapas de equilibrio. Entre los catorce componentes del sistema, se encuentran el  $CO_2$  y N<sub>2</sub> en pequeñas cantidades.

En este caso, se encontró una solución que satisface el criterio de convergencia en once iteraciones:

Como valores iniciales de V y T se utilizaron los mismos empleados por D. Holland (15), ésto es, valores iguales de Tj en todos los platos y se tomó una distribución lineal de los valores de V, tomando como valor máximo la <u>a</u> limentación al plato 8 y como mínimo el valor de la misma alimentación menos un valor estimado de la cantidad absorbida.

A pesar de las diferencias entre los resultados calculados por el programa y los presentados por Holland, es po sible afirmar que la solución encontrada es adecuada. Las diferencias en los resultados pueden atribuírse al uso de diferentes procedimientos para evaluar las propiedades termodinámicas, así como al empleo de diferentes criterios de convergencia. Cabe hacer notar, que en este caso, Holland emplea como criterio de convergencia la relación  $\left(\frac{\Delta T}{T}\right) (0.0001.$ 

5.4.1 Resultados del Programa.

# PROBLEMA TIPO ABSORCION

LIMITES PARA LAS VARIADLES :

TEMPE	RAT	URA MA	XINA	=	50.0
TEMPE	RAT	URA MI	NIHA	=	0.0
FLUJO	DE	VAPUE	MAX	=	3200.0
FLUJO	DE	VAPU	MIN	=	2500.0
SV1 M	AXI	A		=	3000.0

EL NUMERO MAXIMO DE ITERACIONES ES 20

CRITERIO DE CONVERGENCIA :

1

82

L

NORMA MENON O IGUAL A .10E-04

EL CAMBIO MAXIMO PERMITIDO EN CADA VARIABLE ES 0.25

ESPECIFICACIONES DEL PROBLEMA :

NU ERO DE COMPONENTES = 14 NUMERO DE ETAPAS = 8 EQUIPO SIN REHERVIDOR SALIDA DE VAPOR SV1 NO SE ESPECIFICA

RELACION DE COMPONENTES :

1

83

1

COMPONENTE	NONBRE	CLAVE
1	CD2	49
2	NITRUGEN	46
3	METHALE	2
4	ETHALE	3
5	PROPANE	4
6	I-BUTANE	5
7	N-BUTANE	6
8	I-PENTANE	7
9	N-PENTANE	8
10	MN-HEXANE	10
11	N-HEPTANE	11
12	N-OCTANE	12
13	N-NOLANE	13
14	N-DECANE	14

LA PRESION DE LA COLUMNA ES 800.00 PSIA

	J TIPO	F(J)	HF(J)	TF(J)	I	FC(I.J)
	1 1	188.906	-•400E+04	2.900	1233456789011123314	$\begin{array}{c} 0.000\\ 8.888\\ 0.000\\ 0.$
	85	2994.163	•198E+04	0.000	12 34 56 78 90 11 12 13 14	0 0002 0 887 0 028 0 028 0 026 0 006 0 006 0 000 0 000
RELACION	DE REFLUJ	$L/\frac{1}{2} = 0$	•00			

CORRIENTES LATERALES : J SV(J) SL(J) 1 2721.000 0.000

1

84

# VA DRES ESTIMADOS DE TELPERATURA Y FLUJOS :

J	Т	V	· L
12345678	20000000000000000000000000000000000000	0.000 2755.145 2789.291 2823.436 2857.581 2891.727 2925.872 2960.017	223.052 257.197 2591.342 325.488 3593.778 393.7783 427.923 0.000

## SA IDA DE VAPOR DEL PLATO 1 = 2721.00

85

T

## CONSTANTES DE EQUILIBRIO :

к	1	3.2369	11.9801	3.0838	0.6805 0.	2103
к	2	3.2197 0.0795	11.7617 0.0561	0.0004 3.0664 0.0265	0.0002 0.6848 0. 0.0189 0.	2132
к	3	0.0028 3.1884 0.0790	11.5937 0.0557	C•0004 3•0349 C•0264	0.0002 0.6773 0. 0.0188 0.	2107
к	4	0.0026 3.1528 0.0778	1I.4338 0.0548	0.0004 2.9992 0.0260	0.0002 0.6668 0.0185 0.	2068
к	5	3.1136	11.2617 0.0538	0.0004 2.9598 0.0256	0.0002 0.6550 0. 0.0182 0.	2023
к	6	3.0662	1I.0456 0.0526	$2 \cdot 9121$ $0 \cdot 0251$	0.0002 0.6409 0. 0.0178 0.	1971
К	7	2.9951	10.6991	0.0004 2.8397 0.0245	0.0002 0.6207 0. 0.0173 0.	1897 0061
к	8	2 • 85 36 0 • 0692 0 • 0024	9.9170 9.0425 0.0009	0.0004 2.6914 0.0237 0.0004	0.0002 0.5829 0.0167 0.0002	1765
ENT	LPIAS	UNITARIA	5 :			
		12345	19.89 21.47 20.77 19.47 19.47	HL 127E+04 119E+04 121E+04 125E+04 130E+04	HV •223E+04 •224E+04 •223E+04 •222E+04 •220E+04	
		78	3.81 9.92	• 142E+04 • 148E+04	•218E+04 •215E+04 •211E+04	

# CUMPOSICION DE LAS DOS FASES :

X	1	0.0015	0:00c2	0.3020	0.0788	0.0359
x	2	0.0529 0.0015 0.0009	0 • 1679 0 • 0002 0 • 0002	$0.1554 \\ 0.3004 \\ 0.0006$	0•1899 0•0878 0•0005	0.0531
x	3	0.0015	0.1606	0 • 1 4 87 C • 3024 C • 0006	0.1817 0.0906 0.0005	0.0642
X	4	0.0015	0.0002	$0.1442 \\ 0.3053 \\ 0.0006$	0.1763 0.0926 0.0005	0.0728
X	5	0.0016	0.1514 0.0002 0.0011	0 • 1 4 0 2 0 • 3 0 8 8 0 • 0 0 0 6	0.1714 0.0949 0.0005	0.0807
x	6	0.0016	8.8883	0.1358 0.3131 0.0007	$0.1661 \\ 0.0976 \\ 0.0005$	8:8892
x	7	0.0441 0.0016 0.0174	0.1404 0.0002 0.0071	$0 \cdot 1301 \\ 0 \cdot 3201 \\ 0 \cdot 9015$	$0.1591 \\ 0.1017 \\ 0.0007$	0.1006
x	8	0.0407	0.0202 0.0211	0 • 1205 0 • 3358 0 • 0070	$0.1474 \\ 0.1099 \\ 0.0032$	0.1218
Y	1	0.0050	0.1046	$0.0971 \\ 0.9314 \\ 0.0000$	$0.1189 \\ 0.0536 \\ 0.0000$	0.0075
Y	2	0.0001	0.0019	$0.0001 \\ 0.9211 \\ 0.0000$	0.0000 0.0602 0.0000	0.0113
Y	3	0.0001 0.0049 0.0001	0.0002	0.0001 0.9177 0.0000	0.0000 0.0613 0.0000	0.0135
Y	4	0.0001		0.0001	0.0000	8:8151
Y	5	0.0001	0.00019	0.0001 0.9139 0.0000	0.0000	8:8183
Y	6	0.0001	0.0001	$0.0001 \\ 0.9119 \\ 0.0000$	0.0000	0.0176
Y	7	0.0048	8:8812	0.0001 0.9091 0.0000		8:8181
Y	8	0.0048 0.0025 0.0001	0.0001 0.0019 0.0010 0.0001	0.0000 0.9037 0.0002 0.0000	0.0000 0.0641 0.0001 0.0000	0.0215

BA ANCE DE MATERIA :

J	F	Т	V	L	SV	si	J
1	188.906	19.892	0.000	325.073	2664 • 718	0 • 0 0 0	1
2	0.000	21.474	2800.885	339.743	0.000	0.000	2
3	0.000	20.774	2815.555	350.173	0.000	0.000	3
4	0.000	19.467	2825 . 985	360.168	0.000	0.000	4
5	0.000	17.944	2835.980	371.677	0.000	0.000	5
6	0.000	164190	2847 . 488	387.893	0.000	0.000	6
7	0.000	13.806	2863.705	418.840	0.000	0.000	7
8	2994 • 163	9.924	2894 . 652	0.000	0.000	518 . 351	8

BA ANCE DE ENERGIA :

J	F+HF	Q	V.HV	L.HL	SV.HV	SL.HL
1	756E+06	0.	0.	413E+06	•594E+07	0.
2	0.	0.	•628E+07	404E+06	0.	0.
3	0.	0.	.629E+07	423E+06	с.	0.
4	С.	0.	.627E+07	451E+06	с.	0.
5	0.	0.	.625E+07	483E+06	0.	0.
6	0.	0.	.621E+07	527E+06	0.	0
7	0.	0.	.617E+07	594E+06	0.	0.
8	•593E+07	0.	.610E+07	0.	0.	769E+06

RE UMEN DE LA CORRIDA :

CRITERIO DE CONVERGENCIA	=	•1000000E-04
NU ERO MAXIMO DE ITERACIONES	=	20
NU! MA EUCLIDIANA	=	.35384671E-05
ERROR MAXIMO EN LOS BALANCES	=	•43848733E-04
NU ERO DE ITERACIONES REQUERIDAS	=	11
TIEMPO DE PROCESADOR UTILIZADO	=	36.15 SEGS.
TIEMPO DE ENTRADA / SALIDA	=	1.58 SEGS.

### 5.4.2 Comparación de Resultados.

**	HOLLAND (15)	C. NORIEGA
Plato ·	T( <sup>O</sup> F)	T( <sup>O</sup> F)
1	27.9	19.9
2	31.0	21.5
3	30.9	20.8
4	29.6	19.5
5	27.7	17.9
6	25.1	16.2
7	21.5	13.8
8	15.3	9.9
Plato	V(Lb-mol/hr)	V (lb-mol/hr)
1	2659.25	2664.7
2	2813.22	2800.9
3	2824.80	2815.6
4	2833.7	2825.0
5	2843.3	2836.0
6	2855.3	2847.5
7	2872.8	2863.7
8	2904.6	2894.7

Tabla 5.4 Comparación de los resultados del caso 2.

- 92 •





C.NORIEGA O

т

FIGURA 5-4a Comparación de los resultados (Tj) del caso 2.





D.HOLLAND X C.NORIEGA O



94 -

### 5.5 Caso 3.- (Absorción).

Este es el último problema de absorción que se presenta en este trabajo, y corresponde a un absorbedor con un rehervidor, diez etapas de equilibrio y cinco compone<u>n</u> tes, descrito por Holland et al (14).

La solución de absorbedores con rehervidor, se dificulta grandemente, debido a que introduce un elemento de cambio importante, que modifica las propiedades de convergencia de los algoritmos, al ocasionar gradientes elevados de temperatura.

En este caso, se tomaron como valores iniciales de V y T los presentados como solución por Holland et al (14), con objeto de verificar si estos valores corresponden a una solución al problema, de acuerdo con el programa desarrollado.

Los resultados obtenidos con el programa, se comparan con los de Holland et al (14) y los obtenidos por Otto e Ishii (24) para el mismo problema.

# 5,5.1 Resultados del Programa.

## PROBLEMA TIPO ABSORCION

LIMITES PARA LAS VARIABLES :

TEMPER	RATURA	MAXIDA	=	600.0
TEMPER	ATURA	MININA	=	80.0
FLUJO	DE VA	POR MAX	. =	200.0
FLUJO	DE VA	POR MIN	n	10.0
SV1 HA	XIMA		=	110.0

EL NUMERO MAXIMO DE ITERACIONES ES 20

CRITERIO DE CONVERGENCIA :

1

97

1

NORMA MENOR 0 .IGUAL A .10E-04

EL CAMBIO MAXIMO PERMITIDO EN CADA VARIABLE ES 0.25

### ESPECIFICACIONES DEL PROBLEMA :

NUMERO DE COMPONENTES = 5 NUMERO DE ETAPAS = 10 EQUIPO CON REHERVIDOR SALIDA DE VAPOR SV1 SE ESPECIFICA RELACION DE COMPONENTES :

	COMPONENTE	NOMBRE	CLAVE
	1	METHANE	2
	2	ETHAME	3
	3	PROPANE	4
	4	N-BUTANE	6
	5	N-DCTANE	12

#### LA PRESION DE LA COLUMNA ES 300.00 PSIA

CORRIENTES	DE	ALIMEN	NTACION :				
	J	TIPO	F(J)	HF(J)	TF(J)	I	FC(I+J)
	1	1	30.000	•138E+04	90.000	1 2 3 4 5	0.000 8.888 0.000 1.000
	5	4	100.000	•313E+04	46.419	1 2 3 4 5	0 • 800 0 • 067 0 • 067 0 • 067 0 • 000

RELACION DE REFLUJO L/D = 0.00

# VALORES ESTIMADOS DE TEMPERATURA Y FLUJOS :

, , , , , , , , , , , , , , , , , , ,	V	L
129.400 147.200 157.200 161.100 156.300 268.300 331.300 331.300 394.200 455.500 495.300	$\begin{array}{c} 0 \cdot 000\\ 106 \cdot 800\\ 110 \cdot 500\\ 113 \cdot 100\\ 113 \cdot 600\\ 21 \cdot 400\\ 57 \cdot 000\\ 67 \cdot 000\\ 70 \cdot 000\\ 84 \cdot 600\end{array}$	$\begin{array}{r} 41 \cdot 800 \\ 45 \cdot 500 \\ 48 \cdot 100 \\ 50 \cdot 600 \\ 56 \cdot 400 \\ 92 \cdot 000 \\ 102 \cdot 000 \\ 105 \cdot 000 \\ 104 \cdot 600 \\ 0 \cdot 000 \end{array}$

66

1

## CONSTANTES DE EQUILIBRIO :

к	1	10.3247	2.7822	1.0909	0.3330	0.0075
к	2	10.7002	3.0269	1.2583	0.4102	0.0110
к	3	10.9054	3.1643	1.3557	0.4582	0.0136
к	4	10.9358	3.2058	1.3889	0.4770	0.0148
к	5	10.6303	3.0907	1.3211	0.4508	0.0137
к	6	12.2089	4 • 4943	2.4611	1.2119	0 • 1 0 3 2
к	7	13 • 1338	5.1893	3.1299	1.6804	0 • 2211
к	8	13.9064	5.7603	3.8030	2 . 1523	0 • 4131
к	9	13 • 4443	5.8095	4 • 2041	2 • 5355	0 • 6848
к	10	11.3094	5.1137	3 • 9 4 9 4	2.5056	0.8380

ENTALPIAS UNITARIAS :

	Т	HL.	HV
1	128.07	• 328F+04	· 397F+04
Ź	145.51	•403E+04	•441E+04
3	155.31	+444E+04	•469E+04
4	158.98	•452E+04	•484E+04
5	153.78	•402E+04	• 482E+04
6	264.26	•885E+04	•104E+05
7	325.11	•131E+05	•145E+05
8	388.19	•190E+05	.199E+05
9	451.49	•255E+05	•279E+05
10	480.98	. 2025+05	.3355+05

1

## COMPOSICION DE LAS DOS FASES :

х	1	0.0819	0.0253	0.0637	0.0970	0 • 7 3 2 1
Х	2	0.0730	0.0239	0.0686	0.1614	0 • 67 31
Х	3	0.0693	0.0222	0.0548	0.2051	0.6386
Х	4	0.0680	0.0215	0.0622	0.2405	0.6078
X	5	0.0692	0.0221	0.0647	0.2948	0.5492
Х	6	0.0152	0.0131	0.0685	0`•5073	0.3959
Х	7	0.0019	0.0042	0.0361	0.4654	0.4923
Х	8	0.0002	0.0011	0.0142	0.3062	0 • 6782
Х	9	0.0000	0.0003	0.0048	0.1615	0.8334
х	10	0.0000	0.0001	0.0014	0.0702	0.9283
Y	1	0.8263	0.0688	0.0679	0.0316	0.0054
Y	2	0.7709	0.0713	0.0852	0.0653	0.0073
Y	3	0 • 7435	0.0691	0.0864	0.0924	0.0085
Y	4	0.7272	0.0674	0.0844	0.1122	0.0088
Y	5	0.7145	0.0663	0.0829	0.1290	0.0073
Y	6	0 • 1735	0.0552	0.1578	0.5753	0.0382
Y	7	0.0242	0.0208	0.1075	0.7440	0 • 1035
Y	8	0.0030	0.0064	0.0540	0.6572	0.2794
Y	9	0.0003	0.0016	0.0202	0.4085	0.5694
Y	10	0.0000	0.0003	0.0056	0.1834	0.8106

BALANCE DE MATERIA :

J	F	Т	V	L	SV	SI	J
1	30.000	128.067	0.000	41.512	95.000	0.000	1
2	0.000	145.511	106.512	45.137	0.000	0.000	2
3	0.000	155.310	110.137	47.711	0.000	0.000	3
4	0.000	158.976	112.711	50.230	0.000	0.000	4
5	100.000	153.784	115.230	56.150	0.000	0.000	5
6	0.000	264.256	21.150	91.383	0.000	0.000	6
7	0.000	325.110	56.383	100.674	0.000	0.000	7
8	0.000	388 • 189	65.674	103.710	0.000	0.000	8
9	0.000	451.487	68:710	107.046	0.000	15.000	9
10	0.000	480.980	87.046	0.000	0.000	20.000	10
BALANCE DE ENERGIA :

J	F .HF	Q	V•HV	L.HL.	SV.HV	SL . HL	J
1	+414E+05	0.	0.	•136E+06	•377E+06	0.	1
2	0•	0.	•469E+06	•182E+06	0.	0.	2
3	0•	0•	•516E+06	.212E+06	0•	0.	3
4	0•	0.	•545E+06	•227E+06	0.	0.	4
5	:313E+06	0.	•556E+06	•226E+06	0.	0.	5
6	0•	0.	•219E+06	.809E+06	0•	0.	6
7	0.	0.	.817E+06	•132E+07	0.	0.	7
8	0.	0.	.131E+07	.197E+07	0.	0.	8
9	0.	0.	•191E+07	.273E+07	0.	•383E+06	9
10	0.	•769E+06	•292E+07	0.	0.	•583E+06	10

RESUMEN DE LA CORRIDA :

CRITERIO DE CONVERGENCIA .1000000E-04 = NUMERO MAXIMO DE ITERACIONES 20 = NORMA EUCLIDIANA .68103229E-02 = ERROR MAXIMO EN LOS BALANCES .69945566E-01 = NUMERO DE ITERACIONES REQUERIDAS= 1 TIEMPO DE PROCESADOR UTILIZADO = 28.42 SEGS. TIEMPO DE ENTRADA / SALIDA = 1.42 SEGS.

1

. 1

## 5.5.2 Comparación de Resultados.

	HOLLAND (14)	OTTO E ISHI (24)	C. NORIEGA
Plato	T( <sup>O</sup> F)	· т( <sup>о</sup> г)	T( <sup>o</sup> F)
1	129.4	128.1	128.1
2	147.2	141.1	145.5
3	157.2	<b>1</b> 45.8	155.3
4	161.1	143.9	159.0
5	156.3	131.5	153.8
6	268.3	235.3	264.3
7	331.3	290.0	325.1
8	394.2	348.8	388.2
9	455.5	425.9	451.5
10	495.3	487.9	481.0
Plato	V (Lb-mol/hr)	V (Lb-mol/hr)	V (Lb-mol/hr
1	95.0	95.0	05.0
2	106.8	104 0	95.0
3	110.5	106.4	110.5
4	113.1		110.1
5	115.6	110 1	112.7
6	21.4	16 1	21.15
7	57.0	40.6	21.15
8	67.0	40.0	56.4
9	70.0	50 5	65.7
10	84 6	62 7	08./
	04.0	03.1	8/.0

Tabla 5.5 Comparación de los resultados del caso 3

- 106 -

PLATO



D.HOLLAND X OTTO E ISHII C.NORIEGA O т

FIGURA 5-5a Comparación de los resultados (Tj) del caso 3.

PLATO



D.HOI	الل	AND	'
OTTO	Е	ISHII	
C.NOI	RIF	EGA	e

FIGURA 5-5b Comparación de los resultados (Vj) del caso 3.

- 108 -

## 5.6 Caso 4.- (Destilación).

Este es un problema de destilación de una mezcla benzeno-tolueno, fomado de Mc Cabe (20). A diferencia de todos los demás casos que se presentan, el problema presentado por Mc Cabe no es uno de simulación, sino de diseño de una columna, para obtener una separación específica.

Con objeto de validar el programa, con un problema que incluyera componentes con propiedades cercanas a la rea lidad, se efectuó el cálculo de esta columna. Así mismo, dado que en este caso se suponía que de la columna dis<u>e</u> ñada mediante el método de Mc Cabe-Thiele, debería obt<u>e</u> nerse la separación deseada, fué posible verificar los resultados del programa, comparando las composiciones calculadas contra las especificadas en el enunciado. Otro elemento de evaluación fueron las cargas térmicas tanto del condensador, como del rehervidor.

Para el cálculo de esta columna, los valores iniciales de Vj se estimaron suponiendo flujo de vapor constante. Para los valores de Tj se emplearon los valores de temperatura de ebullición del benzeno y del tolueno puros, considerando una distribución lineal en las dos secciones de la columna.

Los resultados obtenidos para este problema, son muy satisfactorios pues permiten comprobar la bondad del

-109

programa, pues en este caso se emplean prácticamente todas las rutinas del mismo.

En este, como en todos los problemas de destilación, se calculan en el programa, las cargas térmicas del condensador y del rehervidor.

# 5.6,1 Resultados del Programa.

PROBLEMA TIPO DESTILACION

LIMITES PARA LAS VARIABLES :

TEMPERATURA MAXIMA	=	500.0
TEMPERATURA MINIMA	=	1.0
FLUJO DE VAPOR MAX	=	1100.0
FLUJO DE VAPOR MIN	=	100.0
SV1 MAXIMA	=	0.0

EL NUMERO MAXIMO DE ITERACIONES ES 15

CRITERIO DE CONVERGENCIA :

1-1-0

NORMA MENOR O IGUAL A .10E-04

EL CAMBIO MAXIMO PERMITIDO EN CADA VARIABLE ES 0.25

ESPECIFICACIONES DEL PROBLEMA :

NUMERO DE COMPONENTES = 2
NUMERO DE ETAPAS = 13
EQUIPO CON REHERVIDOR
SALIDA DE VAPOR SV1 SE ESPECIFICA
RELACION DE COMPONENTES :
COMPONENTE NOMBRE CLAVE
1 BENZENE 40
2 TOLUENE 41
LA PRESION DE LA COLUMNA ES 14.70 PSIA
CORRIENTES DE ALIMENTACION :
J TIPO F(J) HF(J) TF(J) I FC(I,J)
8 2 385.000589E+04 202.719 1 0.440 2 0.560
RELACION DE REFLUJO L/D = 3.50
CORRIENTES LATERALES :
J SV(J) SL(J)
1 168.000 0.000

- 113

## VALDRES ESTIMADOS DE TEMPERATURA Y FLUJOS :

J

176       000         1779       800         188       6000         188       6000         199       6000         188       6000         188       6000         188       6000         188       6000         188       6000         199       6000         100       6000         110       6000         111       700         112	

## CONSTANTES DE EQUILIBRIO :

1	1 0316	0 /113/
2	1.0662	0.4283
3	1.1261	0.4544
4	1.2193	0.4953
2	1 • 27992	0.2705
ž	1.5972	0.6650
8	1.6859	0.7057
- 2	• 8491	0.7771
11	2 1083	0 9031
12	2.1941	0.9440
13	2.2502	0.9707

## ENTALPIAS UNITARIAS :

 XXXXXXXXXXXXXX

# - 116

1

\*\*\*\*\*

123456789 01231256789 0123

## COMPOSICION DE LAS DOS FASES :

BALANCE DE MATERIA :

-

J	F	Т	V	L	SV	SL.	J
1	0.000	178.041	0.000	588,000	168,000	0.000	1
2	0.000	180.191	756.000	581.728	0.000	0.000	2
3	0.000	183.784	749.728	572,708	0.000	0.000	3
4	0.000	189.073	740.708	562.124	0.000	0.000	4
5	0.000	195.583	730.124	552.313	0.000	0.000	5
6	0.000	202.172	720,313	545.353	0.000	0.000	6
7	0.000	207.647	713.353	541.444	0.000	0.000	7
8	385.000	211.496	709.444	920.779	0.000	0.000	8
9	0.000	217.828	703.779	917.678	0.000	0.000	9
10	0.000	223,527	700.678	916,973	0.000	0.000	10
İ1	0.000	227.933	699.973	917.613	0.000	0.000	11
12	0.000	230.959	700.613	919.923	0.000	0.000	12
13	0.000	232.890	702.923	0.000	0.000	217,000	13

BALANCE DE ENERGIA :

J	F.HF	Q	V.HV	L.HL	SV.HV	SL.HL	J
1	0.	748E+07	0.	408E+07	949E+06	0.	1
2	0.	0.	.435E+07	399E+07	0.	0	2
3	0.	0.	.444E+07	384E+07	0.	0.	3
4	0.	0.	.459E+07	365E+07	0.	0.	4
5	0.	0.	.478E+07	343E+07	0.	0.	5
6	0.	0.	.500E+07	323E+07	0.	0,	6
7	0.	0.	.520E+07	307E+07	0.	0.	7
8	227E+07	0.	.536E+07	506E+07	0.	0.	8
9	0.	0.	.564E+07	477E+07	0.	0.	9
10	0.	0.	.593E+07	452E+07	0,	0.	10
11	0.	0.	.618E+07	433E+07	0.	0.	11
12	0.	0.	.637E+07	418E+07	0.	0.	12
13	0.	.972E+07	.651E+07	0.	0.	- 965E+06	13

RESUMEN DE LA CORRIDA :

CRITERIO DE CONVERGENCIA	=	.1000000E=04
NUMERO MAXIMO DE ITERACIONES	=	15
NORMA EUCLIDIANA	=	.46733997E-04
ERROR MAXIMO EN LOS BALANCES	=	.562284135-03
NUMERO DE ITERACIONES REQUERIDA	S=	'13
TIEMPO DE PROCESADOR UTILIZADO	=	64.07 SEGS.
TIEMPO DE ENTRADA / SALIDA	=	1.80 SEGS.

1

Т

# 5.6.2 Comparación de Resultados.-

Fracción mol de benzeno en el destilado:

Valor calculado = 0.9789

Vator especificado = 0.9700

Fracción mol de tolueno en los fondos:

Valor calculado = 0.9772

Valor especificado = 0.9800

Calor alimentado al rehervidor:

Valor calculado por el programa = 9.72x10<sup>6</sup> BTU's

Valor calculado por Mc Cabe  $(20) = 10.5 \times 10^6$  BTU's

Tabla 6. Comparación de los resultados del caso 4.

## 5.7 Caso 5.- (Destilación).

Este problema, es descrito por Amundson y Pontinen (1) y utilizado por Wang y Henke (36) para probar su algoritmo de matriz tridiagonal.

El sistema consiste en una columna de destilación de di<u>e</u> ciseis platos, para una mezcla de cinco componentes y con dos corrientes de alimentación.

Para hacer el cálculo de esta columna, originalmente se formaron como valores iniciales de V y T, los correspondientes a la primera iteración del cálculo de Wang y He<u>n</u> ke (36). Sin embargo, no se encontró una solución que satisfaciera el criterio de convergencia. Para encontrar la solución que se presenta, se estimaron nuevos valores para V y T, en base a los resultados de la primera corrida con ligeras modificaciones.

Finalmente, después de doce iteraciones se encuentra una solución que satisface el criterio de convergencia.

- 122 -

# 5,7,1 Resultados del Programa

# PROBLEMA TIPO DESTILACION

LIMITES PARA LAS VARIABLES :

TEMPER	RATI	JRA MA	XIMA	2	400.0
TEMPER	RATI	JRA MI	AMINA	2	50.0
FLUJO	DE	VAPOR	MAX	=	250.0
FLUJO	DE	VAPOR	MIN	=	50.0
SV1 M	AXI	1A		=	22.6

EL NUMERO MAXIMO DE ITERACIONES ES 20

CRITERIO DE CONVERGENCIA :

NORMA MENOR O IGUAL A .10E-04

EL CAMBIO MAXIMO PERMITIDO EN CADA VARIABLE ES 0.25

## ESPECIFICACIONES DEL PROBLEMA :

NUMERO DE COMPONENTES = 5

NUMERO DE ETAPAS = 16

EQUIPO SIN REHERVIDOR

1

125

1

SALIDA DE VAPOR SV1 SE ESPECIFICA

RELACION DE COMPONENTES :

	COMPONENTE	NOMBRE		CLAVE
	1	ETHANE		3
,	2	PROPANE		4
	3	N-BUTANE	•	6
•	4	N-PENTANE		8
	5	MN-HEXANE		10

LA PRESION DE LA COLUMNA ES 264.70 PSIA

CORRIENTES	DE	ALIMEN	NTACION :				
	J	TIPO	F(J)	HF(J)	TF(J)	I	FC(I,J)
	8	10	100.000	•534E+04	225.000	12	0.030
					• 1	145	0 350

RELACION	DE REF	LUJO L/D	4	6.83
CORRIEN	TES LAT	ERALES :		
**	J	SV(J)		SL(J)
	i	22 600	•	0 000

## VALORES ESTIMADOS DE TEMPERATURA Y FLUJOS :

10M45678901000456

J

- V 0.000 176.090 176.090 176.00 176.00

# CONSTANTES DE EQUILIBRIO :

к	1	2.2870	0.9339	0.3916	0.1762	0.0825
к	2	2.3673	0.9893	0.4205	0.1914	0.0906
К	3	2,4398	1.0369	0.4427	0.2026	0.0963
К	4	2,5464	1.1051	0.4727	0.2174	0.1036
к	5	2.7215	1.2183	0.5240	0.2430	0.1165
к	6	2,9820	1.3920	0.6080	0,2867	0.1392
к	7	3.3126	1.6197	0,7276	0.3522	0.1748
к	8	3.6871	1.8817	0.8790	0.4400	0.2246
К	9	3.8075	1.9728	0.9413	0.4790	0.2482
к	ĩo	3,9121	2.0540	0.9973	0.5150	0.2702
к	ī1	3,9998	2.1238	1.0461	0.5469	0.2901
к	ĩ2	4.0733	2.1834	1.0880	0.5748	0.3078
к	13	4.1402	2.2378	1.1262	0.6006	0.3242
к	14	4.2142	2.2971	1,1673	0.6286	0.3421
к	15	4.3171	2.3786	1.2231	0.6668	0.3669
к	16	4.4818	2.5103	1.3126	0.7297	0.4082

## ENTALPIAS UNITARIAS :

12	18.28	124E+03	•532E+04
345	130.10 137.43 148.90	504E+03 781E+03 124E+04	575E+04 603E+04 647E+04
0789	185.73	1950+04 2900+04 4060+04 4490+04	• 715E+04 • 807E+04 • 918E+04 • 972E+04
10	234 73	487E+04 557E+04	102E+05 106E+05

15 265.41 723E+04 129E+05 1 128 I. .

## COMPOSICION DE LAS DOS FASES :

X	1	0.0580	0,9191	0.0228	0.0001	0.0000
X	2	0.0285	0,9212	0.0500	0.0003	0.0000
x	3	0.0172	0.8806	0.1010	0.0012	0.0000
x	4	0.0127	0.7942	0.1881	0.0049	0.0000
Х	5	0.0107	0.6591	0.3125	0.0175	0.0003
X	6	0.0094	0.4939	0.4427	0.0524	0.0016
X	7	0.0084	0.3388	0,5187	0.1265	0.0076
X	8	0.0076	0.2237	0,4984	0.2419	0.0283
X	9	0.0032	0.1778	0,5438	0.2469	0.0283
Х	ī 0	0.0013	0.1337	0,5843	0.2524	0.0283
x	ĩ1	0.0005	0.0958	0.6162	0.2591	0.0284
x	ī2	5000.0	0.0657	0.6363	0.2692	0.0286
X	13	0.0001	0.0431	0.6407	0.2868	0.0293
х	ī4	0.0000	0.0268	0.6231	0.3183	0.0317
x	ĩş	0.0000	0.0155	0.5727	0.3723	0.0396
X	16	0.0000	0.0078	0.4754	0,4522	0.0646
Y	1	0.1327	0.8583	0.0089	0.0000	0.0000
Y	2	0.0676	0.9113	0.0210	0.0001	0.0000
Y	ż	0.0419	0.9131	0.0447	0.0002	0.0000
Y	4	0.0323	0.8777	0,0889	0.0011	0.0000
Y	5	0.0290	0.8029	0.1638	0.0043	0.0000
Y	6	0.0281	0.6875	0.2691	0.0150	0.0002
Y	7	0.0280	0.5488	0.3774	0.0445	0.0013
Y	8	0.0281	0.4210	0.4381	0.1065	0.0064
Y	9	0.0121	0.3507	0.5119	0.1183	0.0070
Y	īo	0.0050	0.2747	0.5827	0.1300	0.0077
Y	11	0.0020	0.2035	0.6446	0.1417	0.0082

Y	16	0.0000	0.0195	0.6241	0.3300	0.0264
Y	15	0.0000	0.0368	0.7004	0,2483	0.0145
Y	14	0.0001	0.0616	0.7274	0,2001	0.0109
Y	ī3	0.0003	0.0964	0.7216	0.1722	0.0095
Ŷ	12	0.0008	0.1434	0.6923	0.1548	0.0088

BALANCE DE MATERIA :

J	F	T	V	L	SV	SI.	J
1	0.000	118,276	0.000	154.290	22,600	0.000	1
2	0.000	124.726	176.890	153.369	0.000	0.000	2
3	0.000	130.097	175,969	149.810	0.000	0.000	3
4	0.000	137.431	172.410	143.633	0.000	0.000	4
5	0.000	148,900	166,233	135,644	0.000	0.000	5
6	0.000	165.348	158.244	127.551	0.000	0.000	6
7	0.000	185,729	150.151	120.252	0.000	0.000	7
8	100.000	208.506	142.852	209.012	0.000	0.000	8
9	0.000	217.142	131.612	213.203	0.000	0.000	9
10	0.000	224.733	135,803	217,137	0,000	0.000	10
11	0.000	231.227	139,737	220.636	0.000	0.000	11
12	0.000	236,742	143,236	223,386	0,000	0.000	12
13	0.000	241.721	145,986	225.059	0.000	0.000	13
14	0.000	247.033	147.659	225,294	0.000	0.000	14
15	0.000	254.148	147.894	223,677	0.000	0.000	15
16	0.000	265.406	146.277	0.000	0.000	77.400	16

BALANCE DE ENERGIA :

J	F.HF	Q	V.HV	L.HL	SV.HV	SL.HL	J
1	0.	843E+06	0.	.192E+05	.120E+06	0.	1
2	0.	0.	.983E+06	.489E+05	0.	0.	2
3	0.	0.	.101E+07	.755E+05	0.	0.	3
4	0.	0.	.104E+07	.112E+06	с.	0.	4
5	0.	0.	.108E+07	.169E+06	0.	Ο.	5
6	0.	0.	.113E+07	.249E+06	Ο.	0.	6
7	0.	0.	.121E+07	.349E+06	0.	0.	7
8	.534E+06	0.	.131E+07	.849E+06	0.	0.	8
9	0.	0.	.128E+07	.957E+06	0.	0.	9
10	0.	0.	.139E+07	.106E+07	0.	0.	10
11	0.	0.	.149E+07	.115E+07	0.	0.	11
12	0.	0.	.158E+07	.123E+07	0.	0.	12
13	0.	0.	.166E+07	.130E+07	0.	0.	13
14	0.	0.	.173E+07	.137E+07	0.	0.	14
15	0.	0.	.180E+07	.146E+07	0.	0.	15
16	0.	,989E+06	.189E+07	0.	0.	,559E+06	16

RESUMEN DE LA CORRIDA :

L

133

CRITERIO DE CONVERGENCIA =	.1000000E-04
NUMERO MAXIMO DE ITERACIONES =	20
NORMA EUCLIDIANA =	.28193684E-05
ERROR MAXIMO EN LOS BALANCES =	.55138185E-04
NUMERO DE ITERACIONES REQUERIDAS=	12
TIEMPO DE PROCESADOR UTILIZADO =	75.82 SEGS.
TIEMPO DE ENTRADA / SALIDA =	1.90 SEGS.

# 5.7.2 Comparación de Resultados.

	WANG Y HENKE (36)	C, NORIEGA
Plato	TCFL	T (°F)
1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16	119.02 130.1 138.1 147.0 158.1 171.9 189.3 211.5 218.8 225.7 232.3 238.7 244.9 251.9 261.2 275.7	118.28 $124.73$ $130.10$ $137.43$ $148.90$ $165.4$ $185.7$ $208.5$ $217.1$ $224.7$ $231.2$ $236.7$ $241.7$ $247.0$ $254.2$ $265.4$
Plato	V (Lb-mol/hr)	V (Lb-mol/hr)
1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16	$\begin{array}{c} 22.6\\ 176.9\\ 178.14\\ 175.14\\ 169.65\\ 162.5\\ 153.9\\ 143.5\\ 129.0\\ 131.7\\ 133.9\\ 136.2\\ 138.4\\ 139.9\\ 129.8\\ 137.4\end{array}$	$\begin{array}{c} 22.6\\ 176.9\\ 176.0\\ 172.4\\ 166.2\\ 158.2\\ 150.2\\ 142.9\\ 131.6\\ 135.8\\ 139.7\\ 143.2\\ 146.0\\ 147.7\\ 147.9\\ 146.3\end{array}$

Tabla 5.7 Comparación de los resultados del caso 5.

135 -

#### PLATO



WANG Y HENKE X C.NORIEGA O т

FIGURA 5-7a Comparación de los resultados (Tj) del caso 5.

#### PLATO



WANG Y HENKE X C.NORIEGA O

FIGURA 5-7b Comparación de los resultados (Vj) del caso 5.

- 137 -

## 5.8 Caso 6.- (Destilación).

Este es el último problema que se presenta, y corresponde, como el caso 5 a un problema de destilación, descrito por Wong y Olenson (37).Tanto Wang y Henke como Otto e Ishii (24) emplean este problema para probar sus algoritmos. El sistema consta de once componentes, con veintiún etapas de equilibrio. Existen dos corrientes de alimentación y dos corrientes laterales.

Con los valores iniciales de V y T utilizados por Wang y Kenke (36), el algoritmo no converge y no se obtiene una solución. Debido al tiempo de computadora que requi<u>e</u> re este problema para su solución, no se hicieron más pruebas y únicamente se utilizó la solución de Wang\_Olenson (37) como condiciones iniciales.
5,8,1 Resultados del programa.

PROBLEMA TIPO DESTILACION

LIMITES PARA LAS VARIABLES :

TEMPERATURA MAXIMA	=	500.0
TEMPERATURA MINIMA	=	50.0
FLUJO DE VAPOR MAX	=	150.0
FLUJO DE VAPOR MIN	=	10.0
SVI MAXIMA	=	23.0

EL NUMERO MAXIMO DE ITERACIONES ES 8

CRITERIO DE CONVERGENCIA :

1

140

1

NORMA MENOR O IGUAL A .10E-04

EL CAMBIO MAXIMO PERMITIDO EN CADA VARIABLE ES 0.25

ESPECIFICACIONES DEL PROBLEMA :

NUMERO DE COMPONENTES = 11

NUMERO DE ETAPAS = 21

EQUIPO CON REHERVIDOR

SALIDA DE VAPOR SV1 SE ESPECIFICA

## RELACION DE COMPONENTES :

COMPONENTE	HOMBRE	CLAVE
1	METHANE	2
2	ETHANE	3
3	PROPYLENE	23
4	PROPANE	4
5	I-BUTANE	5
6	N-BUTANE	6
7	N-PENTANE	8
8	MIJ-HEXANE	10
9	N-HEPTANE	11
10	N-OCTANE	12
11	N-DECANE	14

LA PRESION DE LA COLUMNA ES 264.70 PSIA

CORRIENTES DE ALIMENTACION : J TIPO F(J) HF(J) TF(J) I FC(I,J) 7 4 34.500 .523E+04 121.174 1 0.058 0.300

		4 5 6 7 8 9 10 11	0 348 0 029 0 087 0 014 0 000 0 000 0 000 0 000 0 000	
13 2 65.500 .	808E+04 262.05	3 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11	0.000 0.00157 0.00157 0.00107 0.00100 0.00100 0.00100 0.0053 0.00653	
RELACION DE REFLUJO L'D = 3.12 CORRIENTES LATERALES :				
J SV(J) SL(J)				

0.000

15.000

0.000

23.000

0.000

25.000

1

4

16

142

I

J 1111115678901001

V

VALORES ESTIMADOS DE TEMPERATURA Y FLUJOS :

# CONSTANTES DE EQUILIBRIO :

К	1	6.8046	1.8558	0.7863 0.0433	0.6558 0.0231	0.3498
К	2	7.1377 0.3285	2.0766	0.9521	0.7944 0.0330	0.4371
К	3	0.0044 7.3196 0.3595	2.1768	1.0383	0.8594	0.4743
К	4	0.0050 7.4958 0.3794	2.2554	1.1127	0.9084 0.0394	0.4973
K	5	7.7548 0.4041	2.3603	1.2140	0.9725	0.5256
К	6	0.0056 8.0626 0.4356	2.4868	1.3350	1.0503	0.5620
К	7	8.3922 0.4733	2.6264	1 4681	1.1378	0.6056
К	8	0.5989 0.5989	2.9608	1.8025	1.3775	0.7494
K	9	9.01007	3.2074	2.0573	1.5556	0.8579
К	ĩo	9.7866	3.3927	2.2519	1.6905	0.9424
К	ī 1	$     \begin{array}{c}       0 & 0156 \\       10 & 1016 \\       0 & 8415     \end{array} $	3.5562	2.4205	1.8081 0.1142	1 0174
К	ī2	10.5796	3.7852	2.6534	1.9629 0.1327	1.1176
К	ī3	11 - 9498 1 - 1764	4.3935	3.2995	2.3760	1.3724
К	ī 4	12.0409	4.4636	3.3785	2.4314	1.4127
К	15	12.1480	4.5396 0.6825	3.4718 0.3717	2.4967 0.2089	1.4599
К	ī6	12.2947	4.6385	3.5936	2.5818	1.5204
к	. 17	12.4605	4.7423	3.7211 0.4308	2.6704	1.5817
к	18	12:6745	4.8698	3.8792	2.7794	1.6526

- 144

		5 E h h	• • • •	•		-
к	19	12.9978	5.0547	4.1131 0.5255	2.0389 0.3106	1.7547
к	50	13.6363	5.3945	4.5513 0.6333	3.2340	1.2293
к	21	0.0864 15.0104 2.1347	6.0670 1.3744	5.4336 0.8783	3.8405 0.5640	2.3379 0.3553

### ENTALPIAS UNITARIAS :

123456789042345678901

1

# COMPOSICION DE LAS DOS FASES :

X	1	0.0125	0.2171	0.2302	0.5210	0.0123
X	2	0.0042	0.1201	0.0000	0.6001	0.0237
Х	3	0.0032	0.0880 0.0001	0.2084	0.6232	0.0400
X	4	0.0748	0.0720	$0.1801 \\ 0.0000$	$     \begin{array}{c}       0 & 6071 \\       0 & 0000     \end{array}   $	0.0627
X	5	0.0029	$0.0641 \\ 0.0018$	0.1472 0.0000	0.5528 0.0000	0.0914
X	6	0.0029 0.2190	0.0597	$0.1197 \\ 0.0000$	$0.4811 \\ 0.0000$	0.1148
Х	7	0.0000	0.0565	0.0985	0.4082	0.1281
Х	8	0.0003	0.0178	$ \begin{array}{c} 0.0603 \\ 0.0001 \end{array} $	0.3455	0.1609
Х	9	0.0000	0.0052	6.0355 0.0004	0.2689	$   \begin{array}{c}     0 \\     0 \\     0 \\     0 \\     0 \\     0 \\     0 \\   \end{array} $
X	ĩo	0.5437	$0.0014 \\ 0.0431$	0.0221	0.2042	0.1774
X	īı	0.0000	0.0004 0.0854	0.0154 0.0073	0.1583 0.0013	0.1644
Х	12	0.0000	$0.0001 \\ 0.1479$	$0.0119 \\ 0.0352$	0.1248	0.1382
X	ī3	0.0000	0.0000 202:0	$0.0091 \\ 0.0980$	0.0946	0.0940 0.0417
X	ī4	0.0000	0.0000 0.2081	0.0056	0.0741 0.0451	0.0956
Х	ī5	0.0000	0.0000 0.2192	0.0030 0.0987	0.0518 0.0448	0.0938
X	16	0.0000	8.2438	$0.0013 \\ 0.1020$	0.0278	0.0863
Х	17	0.0000	0:2779	0.0005	0.0164	0.0753
X	ī8	0.0000	0.0000	0.0002	0.0086	0.0619

Х	19	0.0000	0.3000	0.0001	0.0042 0.0590	0.0468
X	20	0.0330	0.0000	0.0000 0.1950	0.0018	0.0310
x	21	0.0466 0.0000 0.1341	0.0000	0.0000 0.2171	0.0007	0.0182
Y	1	0.0943 0.0837 0.0017	0.3963	0.1781	0.3360	0.0042
Y	2	0 0000 0 0300 0 0056	0.2612	0.2174	0.4755	0.0103
Y	3	0.0235	$0.1917 \\ 0.0000$	0.2166	0.5359	$0.0190 \\ 0.0000$
Y	4	0.0000 0.0228 0.0285	0.1630	0.2011	0.5534	0.0313
Y	5	0.0000 0.0229 0.0568	0.1519	0.1796	0.5403	0.0483
Y	6	0.0000 0.0233 0.0944	0.1489	0.1503	0.5072	0.0648
Y	7	0.0000 0.0237 0.1373	0.1484	0.1448 0.0000	0.4648	0.0777
·Y	8	0.0000 0.0026 0.2358	0.0526	0.1034	0.4746	0.1203
Y	9	0.0000 0.0003 0.3342	0.0169	0.0726	0.4155	0.1509
Y	ī 0	0.0000 0.0000 0.4171	0.0049	0.0495	0.3439	0.1651
Y	ī1	0.0000 0.0000 0.4728	0.0013	0.0371	0.2846	0.1653
Y	12	0.0000	0.0003	0.0313 0.0086	0.2439 0.0012	0.1538
Y	ī3	0.0000 0.0000 0.4463	0.0001	0.0300 0.0324	0,2237	0.1284 0.0041
Y	ī 4	0.0011 0.0000 0.4843	0.0000 0.1345	$0.0190 \\ 0.0341$	0.1793	0.1344
Y	ī5	0.0011 0.0000 0.5233	0.0000 0.1491	0.0105	0.1289 0.0093	0.1365
Y	10	0.0012 0.0000 0.5539	0.0000	0.0045	0.0768	0.1309
Y	17	0.0013	0.0000	0.0019	0.0438	0.1189

I.

Y	18	0.0015	0.0000	0.0007	0.0238 0.0134	0.1023
Y	ī9	0.0017 0.0000 0.4689	0.0000	0.0003	0.0123	0.0824
Y	50	0.0021 0.0000 0.3756	0.0000	0.0001	0.0058	0.0604
Y	21	0.0040 0.0000 0.2694 0.0129	0.0000 0.3965	0.0000	0.0025 0.0613	0:0400
		Vaula /				

BALANCE DE MATERIA :

J	F	Т	V	L	SV	SL	J
1	0.000	32,951	0.000	71.806	23.000	0.000	1
2	0.000	101.068	94.806	72.818	0.000	0.000	2
3	0.000	109.275	95.813	72.357	0.000	0.000	3
4	0.000	115.324	95.357	55.654	0.000	15.000	4
5	0.000	122.753	93.654	53.445	0.000	0.000	5
6	0.000	131.164	91.445	51.242	0.000	0.000	6
7	34.500	140.081	89.242	48.979	0.000	0.000	7
8	6.000	163.811	52.479	49.535	0.000	0.000	8
9	0.000	180.342	53.035	49.942	0.000	0.000	9
10	0.000	192.482	53.442	49.854	0.000	0.000	. 10
11	0.000	202.328	53.354	48.359	0.000	0.000	11
12	0.000	216.143	51.859	42.687	0,000	0.000	12
13	65.500	247.463	46,187	107.785	0.000	0.000	13
14	0.000	252.387	45.785	109.752	0.000	0.000	14
15	0.000	258,189	47.752	111.760	0.000	0.000	15
16	0.000	265.650	49.760	113,609	25.000	0.000	16
17	0.000	273.264	76,609	114.391	0.000	0.000	17
18	0.000	282.411	77.391	114.660	0.000	0.000	18
19	0.000	295.386	77.660	112.881	0.000	0.000	19
20	0.000	318,197	75.831	86.401	0.000	0.000	20
21	0.000	364.079	49.401	0.000	0.000	37.000	21

BALANCE DE ENERGIA :

J	F.HF	Q	V.HV	L.HL	SV.HV	SL.HL	J
1	0.	412E+06	0.	718E+05	.932E+05	0.	1
2	0.	0.	.433E+06	412E+05	ο.	0.	2
3	0.	0.	.464E+06	226E+05	0.	0.	3
4	0.	0.	.483E+06	443E+04	0.	119E+04	4
5	0.	0.	.500E+06	.124E+05	0.	0.	5
6	0.	0.	.517E+06	.301E+05	0.	0.	6
7	.180E+00	0.	534E+06	.474E+05	0.	0.	7
8	0.	0.	.370E+06	.958E+05	0.	0.	8
9	0.	0.	.418E+06	.134E+06	0.	0.	9
10	0.	0.	.456E+06	.162E+06	0.	0.	10
11	0.	0.	.485E+06	.182E+06	0.	0.	11
12	0.	0.	.505E+06	.193E+06	0.	0.	12
13	.529E+06	0.	.516E+06	.734E+06	0.	0.	13
14	0.	0.	.528E+06	•778E+06	Ο.	0.	14
15	0.	0.	.572E+06	829E+06	0.	0.	15
16	0.	0.	.623E+06	.893E+06	.313E+06	0.	16
17	0.	0.	.100E+07	952E+06	0.	0.	17
18	0.	0.	.106E+07	.102E+07	0	0.	18
19	0.	0.	.113E+07	.112E+07	0.	0.	19
20	0.	υ.	.123E+07	.102E+07	0.	0.	20
21	0.	.528E+06	.959E+06	0.	0.	.585E+06	21

RESUMEN DE LA CORRIDA :

CRITERIO DE CONVERGENCIA	=	.1000000000-04
NUMERO MAXIMO DE ITERACIONES	=	8
NORMA EUCLIDIANA	=	.24581086E-02
ERROR MAXIMO EN LOS BALANCES	=	.83708567E-01
NUMERO DE ITERACIONES REQUERIDA	S=	8
TIEMPO DE PROCESADOR UTILIZADO	H	173.93 SEGS.
TIEMPO DE ENTRADA / SALIDA	=	2.70 SEGS.

L

5.8.2 Comparación de resultados.

	Wang y Henke (36)	Otto e Ishi (24)	C. Noriega
Plato	T(FL	TCFL	T(°F)
1	77.3	85.1	82,95
2	94.8	106.3	101.1
3	103.6	115.7	109.3
4	111.1	123.1	115.3
5	120.8	131.8	122.8
6	131.3	140.5	131.2
7	141.4	148.6	140.1
8	169.5	172.2	163.8
9	186.4	187.1	180.3
10	198.5	198.2	192.5
11	209.1	208.4	202.8
12	222.9	222.2	216.1
13	253.4	254.1	247.5
14	257.6	258.3	252.4
15	262.5	263.6	258.2
.16	269.1	270.9	265.7
17	275.4	278.1	273.3
18	282.9	286.7	282.4
19	293.3	298.7	295.4
20	309.9	319.9	318.2
21	343.3	355.6	364.1

Tabla 5.8a Comparación de los resultados del caso 6.

	Weng y Henke (36)	Otto e Ishi (24)	C. Noriega
Plato	V(Lb-mol/hr)	V(Lb-mol/hr)	V(lb-mol/hr)
1	23.0	23.0	23.0
2	94.8	94.8	94.8
3	95.3	95.0	95.8
4	94.6	94.0	95.4
5	92.7	92.0	93.6
6	90.6	89.8	91.4
7	88.7	88.1	89.2
8	52.4	52.0	52.5
9	53.9	52.3	53.0
10	54.2	52.1	53.4
11	53.8	51.4	53.4
12	52.0	49.7	51.9
13	46.6	44.4	46.2
14	44.5	42.9	45.8
15	45.8	44.0	47.8
16	46.8	45.2	49.8
17	72.7	71.3	76.6
18	72.7	71.9	77.4
19	71.8	72.1	77.7
20	69.8	71.1	75.9
21	64.6	66.3	49.4

Tabla 5.8b Comparación de los resultados del caso 6.





WANG	Y	HENKE	X
OTTO	Е	ISHII	
C.NOI	RII	EGA	o

т



- 155 -

PLATO



FIGURA 5-8b Comparación de los resultados (Vj) del caso 6.

### CONCLUSIONES

El principal objetivo que se pretendió lograr al iniciar este trabajo fué el de llegar a implementar un algoritmo ef<u>i</u> caz para la simulación de columnas complejas de separación de mezclas de hidrocarburos de manera que el cálculo pudiera hacerse mediante un programa para computadora digital.

La labor y el trabajo desarrollado tratando de alcanzar este objetivo han sido muy intensos debido a la complejidad no n<u>e</u> cesariamente aparente del problema. Diversos aspectos tuvieron que ser estudiados y analizados, con objeto de llegar a una solución integral y presentar un programa que incluyera todos los elementos necesarios para lograr, en forma autónoma, realizar el cálculo deseado. De entre dichos aspectos de<u>s</u> tacan la teoría y métodos de cálculo para procesos de separación mediante etapas de equilibrio de mezclas de multicomponentes, algoritmos y correlaciones para determinar propiedades físicas y termodinámicas de mezclas de multicomponentes, métodos numéricos para la solución de conjuntos de ecuaciones no lineales, cálculo matricial, etc. y por último la pr<u>o</u> gramación de los algoritmos, su integración e implantación en un programa para computadora digital.

Finalmente, y a pesar de las dificultades encontradas, el objetivo enunciado ha sido alcanzado.

- 157 ·

NOMENCLATURA

А,В	Definidas por la ecuación (4-3).
Ā	Matriz de jacobianos.
Ē	Aproximación a la matriz de jacobianos.
a,b,c,m	Elementos de la matriz tridiagonal (3-1).
С	Residuo de la ecuación de los balances de materia por componente, ec. (2-2).
е	Cantidad arbitrariamente pequeña.
E	Residuo de los balances de energía.
Е'	Valor normalizado del residuo de los ba-
	lances de energía.
F	Magnitud del flujo molar de una corriente de alimentación.
f	Función general.
<u>f</u> .	Vector columna definido por la ecuación (3-13).
HF	Entalpia molar de una corriente de alimenta- ción.
Н	Entalpia molar parcial.
Hm	Desviación isotérmica de la entalpia
AH	Calor de vaporización.
HL	Entalpia molar de líquido.
нν	Entalpia molar de vapor.
Ħ	Matriz de jacobianos.
h	Definida por la ecuación (4-2).
К	Relación de equilibrio.
L	Magnitud del flujo molar de líquido.
М	Residuos de los balances de materia globales; ec. (2-5).

- 158 -

N	Número de etapas de equilibrio.
NC	Número total de componentes.
n	Número de moles.
Р	Presión del sistema.
Pc	Presión crítica.
Pr ·	Presión reducida.
p	Vector definido por la ecuación (3-15).
Q	Carga térmica.
R	Constante general del estado gaseoso.
S	Residuos de las ecuaciones de suma de fracciones mol (2-4).
SV	Magnitud del flujo molar de una corriente de salìda de vapor.
SL	Magnitud del flujo molar de una corriente de salida de líquido.
т	Temperatura.
Тс	Temperatura crítica.
Tr	Temperatura reducida.
t	Factor de relajación.
v	Magnitud del flujo molar de vapor.
V*	Volumen molal.
х	Composición en la fase líquida.
Y	Composición en la fase vapor.
x	Vector columna definido por la ecuación (3-13).
Ŷ	Vector definido por la ecuación (3-18).
x	Variables de la función f.
Z	Composición de una corriente de alimentación o factor de compresibilidad.

159 .

Δ	Incremento de una variable (valor nuevo me- nos el valor anterior).
÷	Definido por la ecuación (3-22).
ø	Cuadrado de la norma euclidiana.
7'	Coeficiente de fugacidad en la fase líquida.
8	Coeficiente de actividad en una solución líquida.
¥-	Coeficiente de fugacidad en la fase de vapor.
J	Parámetro de solubilidad, ec. (4-6).
Ĵ	Valor promedio del parámetro de solubilidad; ec. (4-7).
ω	Factor acéntrico.

Sub-indices

i	número del componente.
j	Número de plato.
n	Etapa del fondo de la columna.
1	Primera etapa de la columna.

Super-indices.

k	Número de iteración.
0	Componente puro o estado ideal.

-

#### BIBLIOGRAFIA

- Amundson, N.R. y Pontinen, A.J.
   Ind. Eng. Chem., 50, 730 (1958).
- Benedict, M., Webb, G.B. y Rubin, L.C. Chem. Eng. Phys., 8, 334 (1940).
- Benedict, M. Webb, G.B. y Rubin, L.C. Chem. Eng. Progr., <u>47</u>, 419 (1951).
- 4. Bergamini, F.Petroleum Refiner, 43, 169 (1964).
- Billingsley, D.S. y Boynton, G.W.
   A.I.Ch.E. Journal, <u>17</u>, 65 (1971).
- Broyden, C.G.
   Mathematics of Computations, 19, 577 (1965).
- Burningham, D.W. y Otto, F.D.
   Hydrocarbon Process, 46, 163 (1967).
- Cavett, R.H.
   Trabajo presentado en la reunión 27 de mitad del año de API, Division of Refining, San Francisco (1962).
- Chao, K.C. y Seader, J.D.
   A.I.Ch.E. Journal, <u>1</u>, 590 (1961).
- 10. Chueh, P.L. y Prausnitz, J.M. Ind. Eng. Chem., 60, 34 (1968).

- 161 -

11. Friday, J.R. y Smith, B.D.

A.I.Ch.E. Journal, 10, 698 (1964).

- 12. Greenstadt, J.L. Bard, Y. y Morse B. Ind. Eng. Chem., 50, 1644 (1958).
- 13. Holland, C.D. "Multicomponent Distillation", Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey (1963).
- 14 Holland, C.D., Hardy, B.W., Camik, L.J. y Baumi, H.L. Petroleum Refiner, 40, 161 (1961).
- 15. Holland, C.D.

"Fundamentals and Modeling of Separation Processes", Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey (1975).

- 16. Hougen O.A., Watson, K.M. y Ragatz, R.A. "Chemical Process Principles", Part II, Thermodynamics. John Wiley & Sons, Inc. New York, (1962).
- 17. A.S. Householder.
   "Principles of Numerical Analysis",
   Pág. 125, Mc Graw-Hill, New York (1953).
- 18. Lewis, N.K., y Matheson, G.I. Ind. Eng. Chem., <u>24</u>, 494 (1932).
- 19. Lyderson, A.L. Greenkorn, R.A. y Hougen, O.A. Coll. Eng., University of Wisconsin Eng. Expt. Sta. Rept., 4, Madison, Wis. (1955).

20. Mc Cabe, W.L. y Smith, J.C.

"Operaciones Básicas de Ingeniería Química".

Pág. 587, Editorial Reverté S.A. Barcelona (1969).

21. Naphtali, L.M. y Sandholm, D.P.

A.I.Ch.E. Journal, 17, 148 (1971).

22. Newman, J.S.

Hydrocarbon Process, 42, 141 (1963).

23. N.G.P.S.A.

"Engineering Data Book", Tulsa, Oklahoma (1972).

- 24. Otto, F.D. e Ishii, Y. Can. J. of Chem. Eng., <u>51</u>, 601 (1973).
- 25. Pitzer, K.S., et al. J. Am. Chem. Soc. 77, 3433 (1955).
- 26. Pontinen, A.J., Amundson, N.R. y Tierney, J.W. A.I.Ch.E. Journal, 5, 295 (1959).
- 27. Prausnitz, J.M. y Chueh, P.L. "Computer Calculations for High-Pressure Vapor-Liquid Equlibria".

Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey (1968).

28. Prowse, D.R. y Johnson, A.I.

Can. J. Chem. Eng., 50, 281 (1972).

29. Redlich, O. y Kwong, J.N.S.

Chem. Rev., 44, 233 (1949).

163 -

30. Reid, R.C. y Sherwood, T.K. "The Properties of Gases and Liquids".

Mc Graw-Hill Book Co., New York, (1966).

- 31. Sujata, A.D. Hydrocarbon Process, 40, 137 (1961).
- 32. Thiele, E.W. y Geddes, R.L. Ind. Eng. Chem., <u>25</u>, 289 (1933).
- 33. Tierney, J.W. y Bruno, J.A.
   A.I.Ch.E. Journal, <u>13</u>, 556 (1967).
- 34. Tierney, J.W. y Yanosik, J.L. A.I.Ch.E. Journal, <u>15</u>, 897 (1969).
- 35. Tomich, J.F. A.I.Ch.E. Journal, 16, 229 (1970).
- 36. Wang, J.C. y Henke, G.E. Hydrocarbon Process, 45, 155 (1966).
- 37. Wang, J.C. y Oleson, A.P. Hydrocarbon Process, 45, 155 (1966).
- 38. Yen, L.C. y Alexander, R.E. A.I.Ch.E. Journal, <u>11</u>, 335 (1965).
- 39. Yen, L.C. y Woods, S.S. A.I.Ch.E. Journal, <u>12</u>, 95 (1966).

164 -