

00568  
2ej<sup>o</sup> 2



# Universidad Nacional Autónoma de México

FACULTAD DE QUIMICA  
DIVISION DE ESTUDIOS DE POSGRADO

## ANALISIS DE SISTEMAS DE CONTROL EN COLUMNAS DE DESTILACION

# T E S I S

Que para obtener el Grado de:  
MAESTRO EN INGENIERIA QUIMICA  
(ORIENTACION PROYECTOS)

P R E S E N T A :  
CESAR EDMUNDO FIGUEROA GUTIERREZ

México, D. F.

Junio de 1987





Universidad Nacional  
Autónoma de México



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

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

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

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

## RESUMEN

El presente trabajo consiste en el desarrollo de un método adecuado para efectuar el análisis y selección de sistemas de control en columnas convencionales de destilación mediante la aplicación de técnicas modernas.

En primer término, se presentan una serie de lineamientos que deben considerarse para establecer los objetivos de la separación e identificar las principales perturbaciones y restricciones del sistema. También se incluye un análisis de los grados de libertad y la forma en que se deben clasificar las variables en controladas y manipuladas.

Posteriormente, se analizan los sistemas básicos de control, -- sus ventajas y desventajas, con el objeto de orientar al diseñador en la aplicación de las estrategias de control más ampliamente utilizadas. Se explican desde los sistemas más convencionales, como el control de composición de un sólo producto a balance de materia o energía, hasta los más sofisticados, como el control de composición de dos productos y sistemas de control prealimentado. Se incluye la descripción de un procedimiento para determinar la localización óptima de los puntos de control, ya que es un paso muy importante en el diseño del sistema de control.

A continuación se describe la técnica de la matriz de ganancias relativas que permite determinar la interacción existente entre los circuitos de control de composición. Este método fue implementado en computadora utilizando el método corto de destilación de Smith-Brinkley y la ecuación de estado de Peng-Robinson. Adicionalmente se explica la aplicación de la técnica de desacoplamiento parcial que permite reducir el grado de interacción de las variables entre los circuitos de control de composición.

En los anexos A y B se describen los programas de computadora -- desarrollados en este trabajo.

## S U M M A R Y

This work consists in the development of a method for analysis and selection of control systems for conventional distillation columns, using advanced techniques.

Firstly, some guidelines are presented in order to define and prioritize separation objectives and identify system disturbances and restraints. Also, is included a freedom degree analysis and how system's variables must be classified in controlled and manipulated ones.

Basic control systems advantages and disadvantages are analyzed in order to guide design engineers in most common control strategies application. It is explained from the more conventional systems (balance or energy control of single composition product) to more sophisticated ones (dual composition and feedforward controls). Also, it is discussed a procedure to determine the optimum composition control point, because it is a very important step in control system design.

Relative gain matrix technique for determining interaction degree among composition control loops is described, besides a computer program has been developed using Smith-Brinkley shortcut distillation method and Peng-Robinson's equation of state. Additionally, it is discussed the partial decoupling technique which permits the application of dual composition control for reducing natural interaction between composition control loops.

A and B annexes describe the computer programs developed in this work.

# I N D I C E

	PAGINA
CAPITULO 1 OBJETIVOS.	1
CAPITULO 2 INTRODUCCION.	3
CAPITULO 3 OBJETIVOS DE LA SEPARACION, RESTRICCIONES Y PERTURBACIONES.	8
3.1 Clasificación de Variables y Grados de Libertad.	10
CAPITULO 4 ESQUEMAS BASICOS DE CONTROL.	14
4.1 Control de Composición de Domos.	17
4.2 Control de Composición de Fondos.	20
4.3 Control de Composición de Ambos Productos.	22
4.4 Control de Presión.	24
4.5 Sistema de Control Prealimentado.	34
4.6 Efecto del Control sobre el Proceso.	44
CAPITULO 5 SELECCION DE LOS PUNTOS DE CONTROL DE COMPOSICION.	50
CAPITULO 6 EVALUACION DE LA CONTROLABILIDAD DE LA COLUMNA.	54
6.1 Arreglo de Ganancias Relativas.	54
CAPITULO 7 DESACOPLAMIENTO.	62
CAPITULO 8 CASOS DE ESTUDIO.	69
8.1 Caso A: Torre Desbutanizadora.	69
8.2 Caso B: Torre Desisopentanizadora.	74
CAPITULO 9 CONCLUSIONES.	78
CAPITULO 10 BIBLIOGRAFIA.	82
ANEXO A ECUACION DE ESTADO DE PENG-ROBINSON.	85
ANEXO B MODULOS DE CALCULO.	92

## CAPITULO 1

### OBJETIVOS

La implementación de los Sistemas de Control para un proceso determinado se ha estado basando principalmente en la experiencia con que cuenta el diseñador, en técnicas de control utilizadas en equipos o procesos similares y en reglas o lineamientos generales que se mencionan en la literatura abierta, sin embargo, siempre queda la incertidumbre de que el sistema de control propuesto mantenga las variables del proceso en su valor seleccionado sin presentar grandes desviaciones cuando se presentan perturbaciones en el sistema.

Por otra parte, en las Plantas Químicas que se encuentran actualmente en operación no es difícil encontrar varios controladores en posición manual, permitiendo que la pureza de los productos varfe conforme las perturbaciones actúan sobre el sistema, o bien utilizando técnicas de "sobrefraccionamiento" y consumiendo más energía de la requerida. Esto se debe generalmente a que la interacción de las variables del sistema es tal, que los controladores al tratar de ajustar algunas condiciones de operación, desajustan otras, de tal manera que las condiciones del proceso empiezan a oscilar.

Los dos puntos mencionados anteriormente, aunados a la existencia de técnicas avanzadas de control y a la exigencia de procesos cada vez más eficientes, constituyen las principales motivaciones para el desarrollo de este trabajo.

El objetivo principal consiste en desarrollar un método adecuado para el análisis, selección e implementación del sistema de control para columnas de destilación convencionales mediante la aplicación de técnicas

modernas.

Se ha seleccionado el proceso de destilación por ser una de las - operaciones unitarias más utilizadas en la Industria, además de que consu me mucha energía (se ha estimado del orden de 40 % de la energía utilizada en las Plantas Químicas) y por ser un proceso multivariable, no lineal y fuertemente interaccionante.

Cabe mencionar también que las técnicas modernas utilizadas en -- este trabajo no son exclusivas a columnas de destilación, por lo que su - aplicación puede extenderse a cualquier proceso multivariable.

Mediante la aplicación de este método durante el desarrollo de la Ingeniería Básica de un Proyecto se pretende lograr las siguientes ventajas:

- +) Mejor calidad o rendimiento de los productos.
- +) Operación más estable.
- +) Reducir en lo posible producto fuera de especificación.
- +) Consumir únicamente la energía necesaria.
- +) Reducir la cantidad de contaminantes que se envían al medio ambiente.

## CAPITULO 2

### INTRODUCCION

La destilación es una de las operaciones unitarias más utilizadas en los procesos industriales para separar una mezcla de compuestos miscibles y volátiles en componentes individuales o, en algunos casos, en grupos de componentes.

La separación de alcohol y agua de su mezcla; la del aire líquido en Nitrógeno, Oxígeno y Argón; y la del Petróleo Crudo en Gasolina, Turbosina, Diesel y Gasóleo, son algunos ejemplos de Destilación.

Para aplicar el proceso de Destilación es necesario que el vapor que se forma a partir de una mezcla inicial difiera en composición, es decir, que exista una diferencia en las volatilidades de los componentes -- que constituyen la mezcla.

Un sistema típico de Destilación se muestra en la figura 2.1. La columna que se indica, está constituida por varios dispositivos llamados platos, que proporcionan un contacto íntimo entre el líquido y el vapor. Otro tipo de dispositivos que se utilizan frecuentemente para el mismo -- fin son los empaques.

La alimentación, constituida por la mezcla de componentes que se desean separar, se introduce en uno o varios puntos de la columna. Debido a la diferencia de densidades entre las fases líquida y vapor, el líquido va descendiendo de un plato a otro a lo largo de la columna, mientras que el vapor va ascendiendo entrando en contacto con el líquido en cada plato. El líquido que alcanza el fondo de la columna se vaporiza -- parcialmente en el rehervidor para proveer el vapor que se retorna a la --



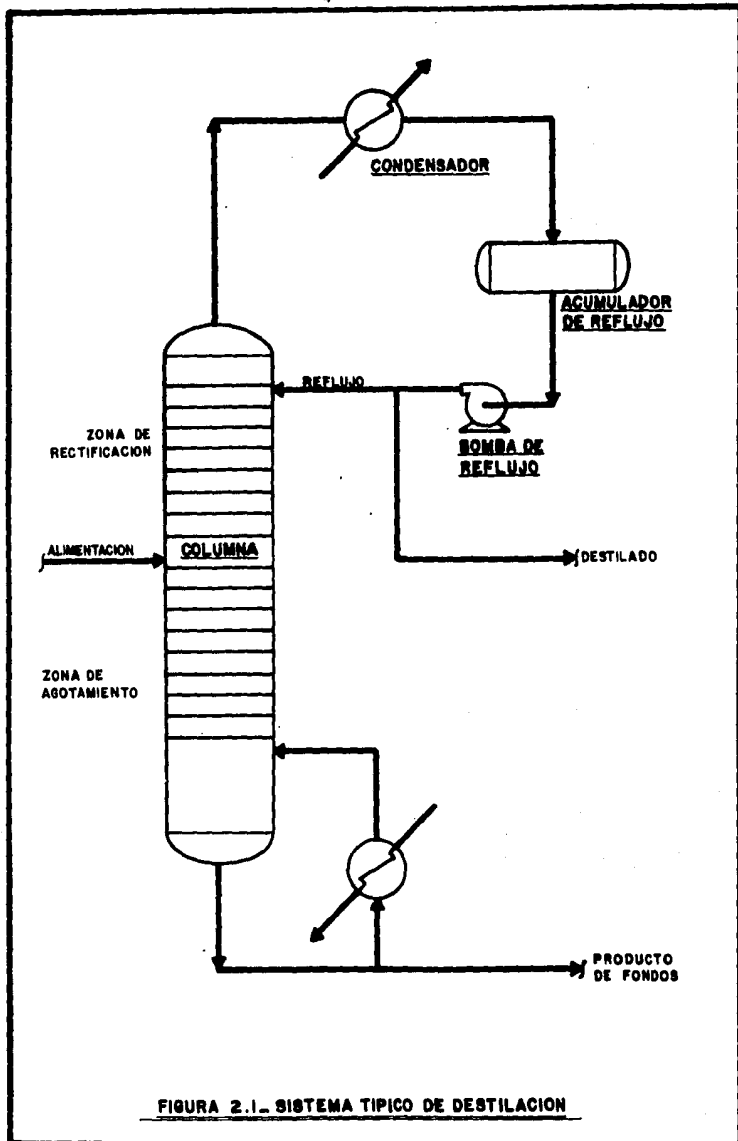


FIGURA 2.1.- SISTEMA TÍPICO DE DESTILACION

columna y el líquido remanente se extrae como producto de fondos. El vapor que llega al domo de la columna cambia de fase en un condensador y el líquido se recupera en un tanque acumulador. Una parte de este líquido se bombea a la columna como reflujo y la otra parte se obtiene como producto destilado.

El arreglo interno de la columna permite un contacto a contracorriente entre el líquido que baja y el vapor que sube y en cada una de las etapas de contacto, las composiciones del líquido y del vapor se aproximan al equilibrio, de tal manera que los componentes más volátiles se van concentrando en la fase vapor a medida que asciende en la columna y los componentes menos volátiles se van acumulando en la fase líquida.

El resultado final es que el vapor de domos está enriquecido con componentes ligeros y el líquido de fondos está constituido principalmente por componentes pesados.

La separación global que se alcanza en la columna depende principalmente de las volatilidades relativas, el número de etapas de contacto y la relación de reflujo.

El sistema de control que se implemente en la columna de destilación tendrá como objetivo principal cuidar que la pureza de los productos obtenidos cumpla con las especificaciones solicitadas, respondiendo adecuadamente ante aquellas perturbaciones que entren al sistema, característica que debe tenerse en mente durante el proceso de selección. Además, sería deseable que la columna cumpliera su objetivo con el mínimo consumo de energía.

En esta tesis se presentan los aspectos principales que deben -- considerarse para la selección del esquema básico de control y cómo pueden estos analizarse mediante el uso del arreglo de ganancias relativas en estado estacionario. De hecho, se pretende establecer una metodología

que permita evaluar y seleccionar aquellos sistemas que resulten más convenientes, de acuerdo con el grado de interacción y sensibilidad que presenten las variables del proceso, en cada una de las alternativas propuestas.

Actualmente, el diseño de la columna se realiza mediante el uso de programas de computadora que efectúan los balances de materia y energía en estado estacionario y el comportamiento hidráulico de los platos. Estos mismos programas pueden utilizarse para efectuar la selección de los esquemas de control de acuerdo al procedimiento que se describe en esta tesis.

Ahora bien, para el desarrollo de este trabajo, se implementaron programas de computadora para el cálculo de propiedades termodinámicas mediante la ecuación de estado de Peng-Robinson y algunos módulos de cálculo adicionales que se requieren, tales como evaluación de temperaturas de rocío y burbuja, equilibrio de fases y para simular la columna de destilación se implementó el método corto de Smith-Brinkley. Estos programas, que representan la herramienta fundamental de cálculo se describen con detalle en los anexos.

Aunque si bien el método de Smith-Brinkley para columnas de destilación no es riguroso, nos permite manejar mezclas multicomponentes, lo que representa una mejora al procedimiento utilizado por Shinskey o a los descritos en la literatura, que consideran únicamente mezclas binarias.

El procedimiento de selección del sistema de control propuesto consiste en realizar los siguientes pasos:

- 1) Definir los objetivos de la separación, identificar las principales perturbaciones y restricciones del sistema.

- 2) Proponer los sistemas básicos de control.
- 3) Localizar los puntos de control de composición.
- 4) Evaluar la controlabilidad de la columna.

Se pretende que este procedimiento de selección se considere como parte integral en el diseño de nuevas columnas, durante el desarrollo de la Ingeniería Básica y que se utilice además como un sistema de verificación de diseños propuestos.

En los capítulos subsecuentes se desarrollan y detallan cada uno de los pasos que constituyen el procedimiento de selección sugerido.

### C A P I T U L O 3

#### OBJETIVOS DE LA SEPARACION, RESTRICCIONES Y PERTURBACIONES

Como primer paso para la implementación del sistema de control, - deben analizarse los objetivos de la separación, así como las restricciones de la columna y las principales perturbaciones que alteran al sistema.

Generalmente los objetivos de una separación determinada se establecen en términos de especificaciones sobre la composición de uno o ambos productos de la columna, por ejemplo: impurezas del componente clave pesado en el destilado y del componente clave ligero en fondos, recuperación aceptable de alguno de los productos, temperatura final de ebullición, etc. Otros aspectos que deben tenerse en cuenta son los siguientes:

- a) La composición del producto más importante de mantener en el caso que se presenten perturbaciones.
- b) Variación en composición aceptable para cada producto.

En lo que respecta a las restricciones del sistema, deben obtenerse los flujos máximos y mínimos para la columna mediante cálculos de -- flexibilidad e inundación de los platos y también, las cargas térmicas - máximas de operación del rehervidor y del condensador. Esto nos permitirá conocer, tanto la capacidad, como la limitación que tiene el sistema - de destilación para variar sus condiciones de operación y corregir las -- desviaciones en separación que sean causadas por alguna perturbación.

El siguiente paso consiste en analizar las perturbaciones principales del sistema, con el objeto de reducir al máximo los efectos que és-

tas puedan causar; por ejemplo, si se espera que la entalpia de la alimentación cambie constantemente, es posible reducir las consecuencias de este cambio, colocando un precalentador de la corriente de alimentación y un controlador de temperatura; si es la composición de la alimentación, - la que se espera que varfe fuertemente, la columna puede diseñarse para recibir la alimentación en varios platos, dependiendo de su composición.

También podría instalarse un controlador de flujo en el vapor para el rehervidor, con el objeto de reducir los efectos de la variación de presión en el cabezal de vapor.

En algunos casos, en los que se tenga un diseño similar a alguna planta existente, sería posible contar con información de la magnitud y frecuencia de ocurrencia de estas perturbaciones, información que sería muy útil en el análisis dinámico del sistema.

Las principales perturbaciones que se presentan en la Destilación son las siguientes:

- a) Flujo de la alimentación.
- b) Composición de la alimentación.
- c) Entalpia de la alimentación.
- d) Presión del cabezal del vapor (o variaciones en el sistema de calentamiento).
- e) Condiciones ambientales (lluvia, presión atmosférica, etc.).
- f) Temperatura o flujo del medio de enfriamiento.

En este punto es importante recordar que simplemente por el hecho de que una corriente se encuentre a control de flujo, no asegura que ese flujo nunca vaya a cambiar, ya que pueden realizarse cambios en los puntos de ajuste de los controladores que resultarían ser las perturbaciones

más frecuentes y severas para la columna.

Cabe mencionar que cualquier variable independiente que pueda alterar el sistema, aunque ésta ya se encuentre controlada, puede representar una de las principales perturbaciones al sistema.

### 3.1 Clasificación de variables y grados de libertad.

Una columna de destilación es un sistema multivariable, no lineal e interaccionante, en el cual se requieren controlar de 4 a 5 variables - mediante la manipulación de un número igual de válvulas. En vista de que la cantidad total de configuraciones diferentes para el sistema de control varía factorialmente con el número de variables controladas, es necesario realizar una selección sistemática que permita identificar los posibles sistemas de control. Por ejemplo, para un sistema de 4 variables -- controladas se tendrán 24 arreglos posibles para el sistema de control, - mientras que para uno de 5 variables, se tendrían 120 alternativas.

De acuerdo a lo anterior, resulta conveniente analizar las variables principales del sistema de destilación desde el punto de vista de -- control, y reconocer los grados de libertad que presenta el sistema ya diseñado, ya que estos representan el número de variables independientes - que pueden modificarse durante la operación de la columna para que se obtenga la separación deseada.

Cabe hacer notar que al implementar circuitos de control a un sistema, se pretende reducir los grados de libertad, "forzando" al sistema para que alcance las condiciones deseadas, de tal manera que un proceso 100 % automatizado será aquel que tenga cero grados de libertad, ésta pretende ser la meta global de la automatización. Por el contrario, mientras más grados de libertad se tengan para un proceso determinado, más difícil será de operarlo.

En la figura 3.1 se muestra un sistema de destilación convencional en donde se indican las variables dependientes e independientes más importantes.

Como se puede apreciar en este sistema existen 18 variables independientes que representarán los grados de libertad del sistema en operación. Sobre la mayoría de estas variables se implementa un circuito de control, mientras que otras son consideradas como perturbaciones al sistema, o simplemente su valor depende de las etapas anteriores o posteriores al sistema de destilación.

Resulta conveniente reclasificar las variables del sistema, tomando en cuenta el análisis realizado sobre los objetivos, las restricciones y las perturbaciones de la separación y las características particulares del sistema:

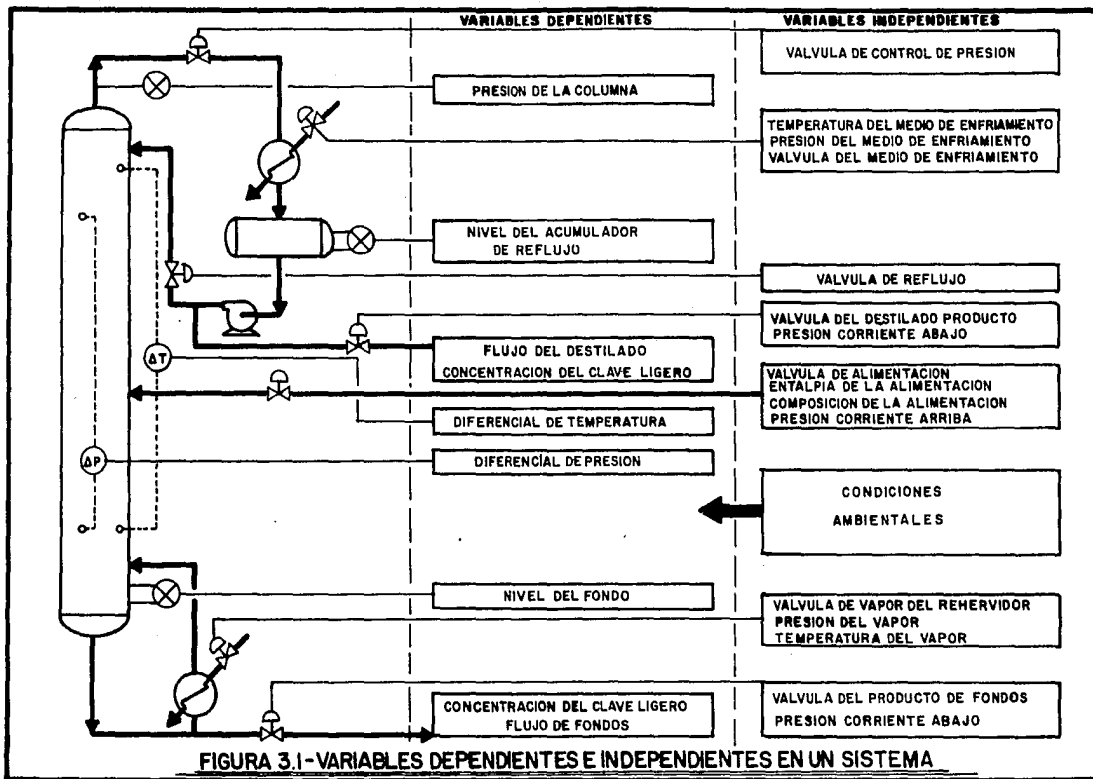
#### Variables controladas.

Se escogerán entre las variables dependientes aquellas con las que se pueda cuidar mejor los objetivos de la separación, generalmente estarán incluidas algunas de las mencionadas en la figura 3.1.

#### Variables manipuladas.

Las variables manipuladas serán todas aquellas variables independientes que sea posible manejar. En algunas ocasiones, una de las variables dependientes se asocia con la variable independiente y se refiere a la variable dependiente asociada como la variable manipulada, por ejemplo: es frecuente decir que la temperatura de domos de la columna se regula manipulando el flujo de destilado, aunque estrictamente la variable manipulada es precisamente la válvula de control colocada en esta corriente. - Esto ocurre también cuando se manejan controles en cascada.





De acuerdo a la nueva clasificación de las variables, puede plantearse el siguiente arreglo para el sistema mostrado en la figura 3.1.

RECLASIFICACION DE LAS VARIABLES MOSTRADAS EN LA FIGURA 3.1.

VARIABLES CONTROLADAS	VARIABLES MANIPULADAS	PERTURBACIONES
Presión de la columna.	Válvula de presión.	Medio de enfriamiento: temperatura, -- presión y flujo.
Flujo de destilado.	Válvula del producto de domos.	Presión corriente - abajo del destilado.
Composición del clave ligero en domos.	Válvula de reflujo.	Condiciones atmosféricas.
Nivel del acumulador.	Válvula de vapor al rehervidor.	Presión del vapor al rehervidor
Nivel en el fondo de la columna.	Válvula del producto de fondos.	Temperatura del vapor al rehervidor.
Flujo de fondos.		Presión corriente - abajo de fondos.
Composición del clave pesado de fondos.		Alimentación: flujo, presión, composición y temperatura.

## CAPITULO 4

### ESQUEMAS BASICOS DE CONTROL

Una vez que se han identificado las variables más importantes del sistema que podrán utilizarse para mantener el control de la columna, habrá que seleccionar qué variable será controlada con qué variable manipulada. Para esto conviene mencionar los arreglos típicos mencionados en la literatura, sus características, sus ventajas y desventajas de cada uno de ellos.

El principal trabajo que el sistema de control va a desempeñar, es ajustar la separación entre el destilado y el fondo, controlando el flujo de una u otra corriente.

La relación de destilado a alimentación  $D/F$  (o del producto de fondos a alimentación  $B/F$ ) es el parámetro ajustable más importante en el sistema de destilación, el cual está asociado directamente con el balance de materia.

La separación alcanzada también depende de la pendiente de la línea de operación  $L/V$  (flujo interno de líquido/flujo interno de vapor) en cada sección de la columna, por lo que la relación del flujo de vapor interno al flujo de alimentación  $V/F$  es un segundo parámetro importante que debe ajustarse. Este parámetro está directamente relacionado con el balance de energía.

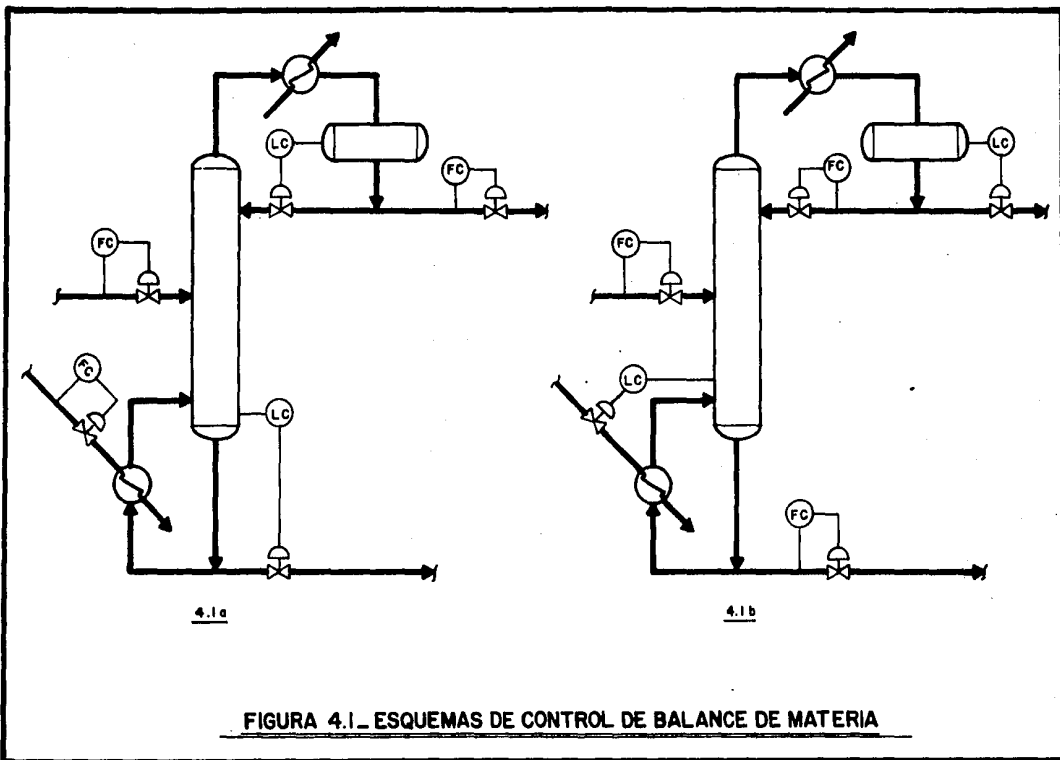
A partir de consideraciones de balance de materia, es posible afirmar que existe un rango estrecho de flujos de destilado a alimentación ( $D/F$ ) que permite obtener productos de alta pureza, para una alimen-

tación dada. Por ejemplo, si consideramos una alimentación a la columna de 100 lb mol/h, que contiene 50 % de Benceno y 50 % de Tolueno y en la cual se desea obtener un 98 % de pureza para ambos productos, los valores normales del producto destilado D y el producto de fondos B será de 50 -- lb mol/h, si D se incrementa a 52, la pureza del producto de domos debe caer a menos de 96 %, ya que la cantidad total de Benceno presente en la alimentación es únicamente 50 lb mol/h y además existirá cierta cantidad de benceno en fondos.

Una buena pureza del producto de domos puede obtenerse fácilmente si se extrae un flujo de destilado pequeño, por ejemplo; 40 ó 45 lb mol/h, pero en este caso, el producto de fondos será muy impuro y además, el porcentaje de recuperación de benceno también disminuye.

Si el flujo y composición de la corriente de alimentación son casi constantes, se puede tener un control satisfactorio utilizando un controlador de flujo para regular ya sea D ó B. Con control de flujo sobre el destilado, el flujo de fondos puede regularse manteniendo un nivel -- constante en el fondo de la columna como se muestra en la figura 4.1a. - Con control directo del flujo de fondos, entonces el flujo de destilado - puede regularse por el nivel del acumulador de reflujo tal como en la figura 4.1b. Si se controla directamente el flujo de ambos productos puede hacer al sistema sobre-determinado y esto puede ocasionar una operación - inestable, ya que la suma de los flujos de los productos no coincidirán - exactamente con el flujo de alimentación.

También debe evitarse sobre-determinar el sistema en ambos extremos de la columna, teniendo en mente las ecuaciones de balance de materia; por ejemplo, el flujo del líquido que sale del último plato debe ser -- igual al flujo de fondos más el flujo de vapor que retorna a la columna. De esta manera, el flujo de vapor suministrado al rehervidor, el cual determina el flujo de vapor a la columna, no puede controlarse directamente



**FIGURA 4.1\_ ESQUEMAS DE CONTROL DE BALANCE DE MATERIA**

en caso de que se utilice un control de flujo directo en el producto de fondos.

En la mayoría de los sistemas de destilación, la separación entre los productos de domos y fondos se ajusta automáticamente manteniendo una temperatura o composición constante de un producto en algún punto de la columna; si el producto de domos es más importante que el de fondos, el elemento sensor de composición se coloca preferentemente en la sección de rectificación y las disminuciones de pureza se corrigen disminuyendo el flujo de destilado y a la inversa; cuando la pureza del producto de fondos es más importante, el elemento sensor se coloca en la sección de agotamiento y entonces el flujo de fondos se disminuye cuando la pureza media también disminuye. Para cualquier caso, el flujo del producto puede controlarse directamente utilizando una válvula de control en la línea del producto o puede controlarse indirectamente cambiando ya sea el reflujo o el flujo de vapor al rehervidor.

De las consideraciones mencionadas anteriormente, surgen los sistemas típicos que son más frecuentemente utilizados y que se mencionan a continuación:

#### 4.1 Control de composición de domos.

Control directo de balance de materia.

Los tres métodos más comunes para controlar la composición de domos  $x_D$  se muestran en la figura 4.2. En cada uno de estos esquemas, puede implementarse también un controlador de flujo en la alimentación. El esquema más directo para controlar la composición de domos  $x_D$ , es utilizar la señal del controlador de composición para ajustar directamente el flujo de destilado. El reflujo será ajustado por balance de materia con el controlador de nivel del acumulador de reflujo. El flujo del producto de fondos se extrae a control de nivel del fondo de la columna, para cum-

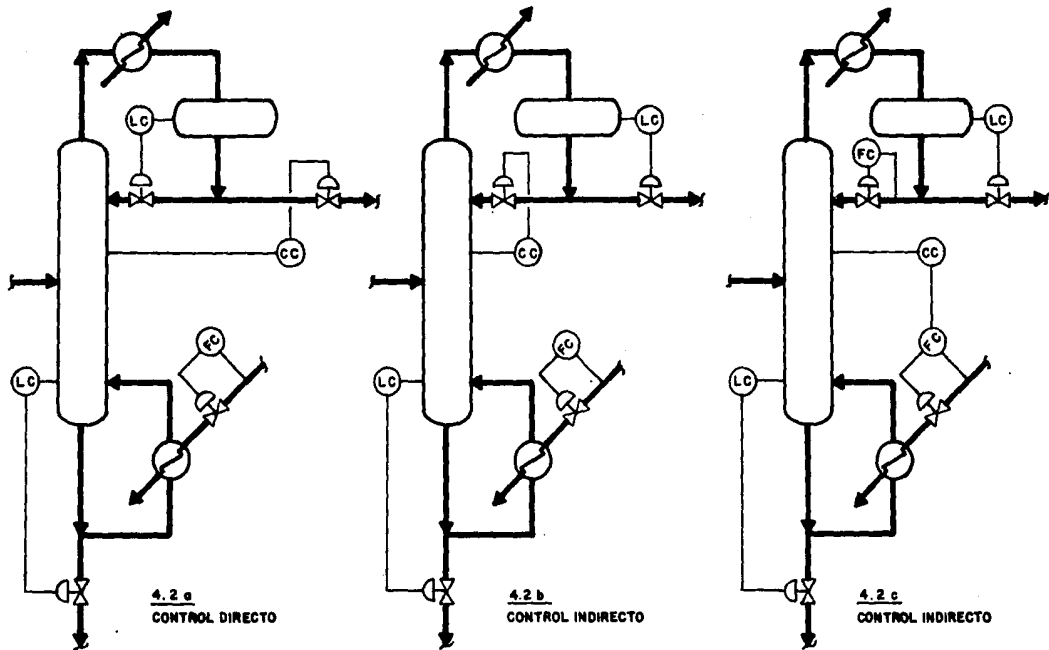


FIGURA 4.2 \_ CONTROL DE COMPOSICION DE DOMOS.

plir el balance de materia global y la cantidad de vapor interno, se mantiene casi constante regulando el flujo o presión del vapor al rehervidor. Este esquema descrito se puede apreciar en la figura 4.2a.

#### Control de balance de energía.

En lugar de controlar D directamente, el controlador de composición puede ajustar el reflujo R, y entonces el controlador de nivel puede ajustar D como se muestra en la figura 4.2b. Este método ha sido más popular que el primer esquema, pero aparentemente no tiene ventajas. Este sistema se vuelve muy sensitivo cuando se tienen relaciones de reflujo -- muy grandes; por ejemplo, si el vapor interno en la columna  $V=550$  lb mol/h, y el reflujo  $R=500$  lb mol/h y el destilado es  $D=50$  lb mol/h un cambio ligero en V a 560 llevaría a  $D = 60$ , se tendría un 20 % más alto que el flujo deseado hasta que el controlador de composición detecte el cambio e incremente el reflujo. Con el primer esquema, el flujo extra de vapor será regresado a la columna como reflujo sin modificar el flujo del producto. Se menciona también que este sistema puede a su vez ser más sensible a cambios en la temperatura del reflujo.

#### Control directo de V/F.

El tercer método utilizado para controlar la composición de Domo se muestra en la figura 4.2c y consiste en modificar el vapor interno de la columna, disminuyendo éste cuando la pureza de Domo cae, manipulando directamente el vapor suministrado al rehervidor. El flujo del reflujo se mantiene en un valor fijo, así que valores bajos del vapor interno V significan también un valor bajo para D. La separación tan amplia que existe entre el elemento sensor de composición y el flujo controlado es mala, desde el punto de vista dinámico y el sistema es de respuesta más lenta que los otros dos si el elemento sensor está casi en el Domo de la columna, sin embargo, si el sensor de composición está localizado varios pla--



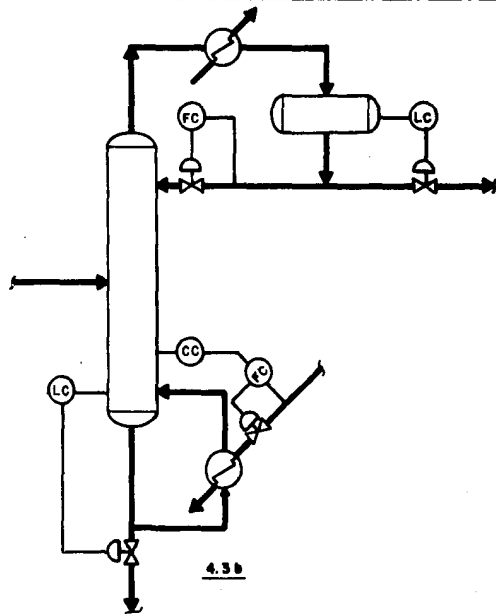
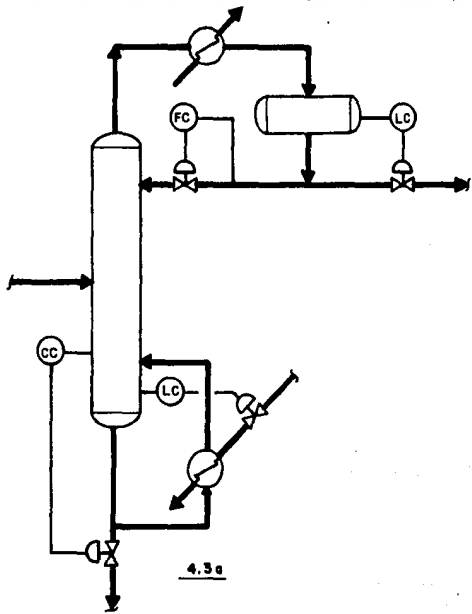
tos abajo del Domo, este esquema es más rápido ya que un cambio en el flujo de vapor es transmitido a través de la columna, mucho más rápido que el cambio en el flujo del líquido. Un sistema en cascada, con el controlador de composición modificando el punto de ajuste de un controlador de flujo de vapor, se utiliza algunas veces en este tercer esquema para minimizar las perturbaciones al sistema debidas al cabezal de vapor.

#### 4.2 Control de la composición de fondos.

Los métodos más utilizados para controlar la composición del producto de Fondos se muestran en la figura 4.3. Estos métodos se utilizan cuando el producto de Fondos es el más valioso y conviene cuidar su composición, por lo que el elemento sensor de composición se localiza en la zona de agotamiento y el flujo controlado es ahora el producto de fondos, ya sea directa o indirectamente. Cuando el control es directo, es decir, que el elemento sensor controla directamente el producto de fondos (fig. 4.3a.), el flujo de vapor al rehervidor se regula mediante el controlador de nivel del fondo de la columna, el reflujo se mantiene constante y el destilado se extrae a control de nivel del acumulador de reflujo completando el balance de materia.

El segundo esquema 4.3h, muestra al control indirecto del producto de Fondos. El controlador de composición regula el vapor al rehervidor y el producto de Fondos se extrae a control de nivel del fondo de la columna.

El sistema análogo al de la figura 4.2c, en este caso no se utiliza, ya que existe un tiempo bastante grande para que cambios en el reflujo sean notados en el fondo de la columna. Esto es debido principalmente al tiempo de residencia del líquido en los platos y en las bajantes.



**FIGURA 4.3—CONTROL DE COMPOSICION DE FONDOS**

#### 4.3 Control de composición de ambos productos.

Cuando se requiere controlar la composición de ambos productos, se presenta el caso más difícil para diseñar el sistema de control, debido principalmente a la fuerte interacción entre los circuitos de control de composición; de hecho, existen referencias bibliográficas, inclusive hasta de 1978, que recomiendan implementar un sólo sistema de control de composición (presumiblemente el más importante) y permitir que la composición del otro extremo de la columna varíe con cualquier cambio en condiciones, por ejemplo, si el plato de alimentación está correctamente localizado para una alimentación normal, un cambio en la composición de la alimentación, significa que la alimentación se está introduciendo ahora muy arriba o muy abajo en la columna, la cual tiende a disminuir la separación especificada. Sin embargo, las purezas de los productos de Domos y Fondos son ambas frecuentemente importantes; además de que las fluctuaciones de composición en cualquier extremo pueden causar variaciones en las unidades de proceso subsecuentes o conducir a productos fuera de especificación. Estos casos generalmente han sido resueltos mediante las siguientes prácticas:

- Diseñar las torres con más platos que los requeridos para la operación normal, de tal manera que la pureza de la corriente que no se controla sea buena aún bajo condiciones adversas.
- Operar las columnas a relaciones de reflujo más altas de las que se requieren para la operación normal.
- Instalar grandes tanques de almacenamiento para atenuar las perturbaciones en la alimentación o grandes tanques de almacenamiento para mezclar producto fuera de especificación.
- Instalar otras columnas para afinar la pureza de los produc--

tos. Otro factor que contribuyó a evitar este tipo de control, - es que frecuentemente se presentaban problemas cuando se intentaba controlar ambas composiciones.

Existen muchas razones por las cuales un sistema de control presenta inestabilidades y comportamiento pobre (por ejemplo, inversión en la acción de control debido a no linealidades), pero se ha identificado - que las principales dificultades se deben a las interacciones entre los - circuitos de control de separación.

Cambios en el vapor interno que maneja la columna V para controlar la composición de Fondos  $x_B$ , también afecta la composición de Domos -  $x_D$ . Así como un cambio en el flujo del Reflujo R para controlar  $x_D$ , afecta también a  $x_B$ .

Por otra parte, estudios recientes han demostrado que si se seleccionan las variables manipuladas mediante un análisis adecuado de la interacción de las variables del sistema y utilizando técnicas modernas de control, como sería el uso de desacopladores o compensación del punto de ajuste, resulta más ventajoso usar el control de ambos productos. Shinsky menciona que el grado de interacción que presente el sistema depende de - la selección de las variables manipuladas, y que este grado de interacción es predecible a través de ganancias relativas, de tal manera que es posible cuantificar la sensibilidad del sistema y determinar si es o no posible utilizar el control de composición sobre ambos productos, ya sea con o sin el uso de desacopladores.

Thurston menciona que se ha implementado con bastante éxito el -- control de composición de dos productos cuando se ha detectado por ganancias relativas que el sistema puede funcionar y también que algunas instalaciones han fallado cuando el análisis de ganancias relativas predice -- que pueden esperarse problemas.

Algunas de las ventajas que se obtienen al implementar un sistema de control de dos composiciones, cuando es posible, son las siguientes:

- El sistema consume la mínima energía requerida para llevar a cabo la separación. Esto resulta particularmente importante, ya que se ha estimado que los procesos de destilación consumen en promedio el 40 % de la energía utilizada en plantas químicas.
- Reduce la variación en la composición de ambas corrientes haciendo que la separación sea más fácil de controlar.
- Siempre se obtiene la máxima recuperación posible de ambos productos.
- El proceso resulta más económico debido a la reducción en el consumo de energía y la mayor recuperación de los productos.

Existen varios arreglos propuestos para implementar este sistema de control, los cuales incluyen principalmente a las siguientes variables manipuladas: Destilado, Reflujo, Vapor Interno, Producto de Fondos y la Relación de Reflujo a vapor interno (R/V). Pero la selección de cualquiera de estas variables manipuladas está en función del análisis de ganancias relativas, por lo que este tipo de control se tratará más adelante.

#### 4.4 Control de presión.

El control de presión de la columna se trata independientemente del control de separación, debido a que generalmente se toma a la temperatura o directamente a la composición como la variable principal para controlar la separación, por esto es que la mayoría de los métodos existentes pretenden únicamente mantenerla constante. Cualquier variación en la presión produce cambios en las condiciones de equilibrio del material en

la columna y altera por lo tanto el sistema de control.

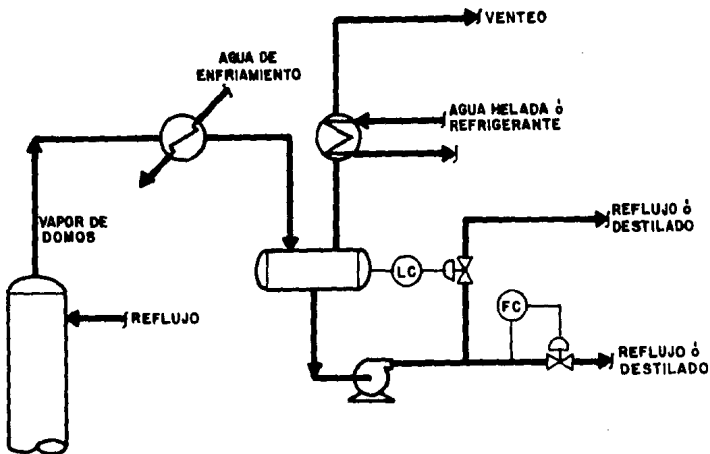
El punto de ajuste del controlador de presión en la columna es un compromiso entre dos extremos; deber ser lo suficientemente alta para permitir condensación de los vapores de domos y por otro lado, debe ser lo suficientemente baja para permitir vaporización del líquido de fondos.

La presión de la columna es una medida de la cantidad de materia presente en fase vapor; si la alimentación de la columna, su destilado y el producto de fondos son corrientes líquidas, entonces únicamente la energía que se suministra en el rehervidor o la que se extrae en el condensador afectará significativamente la cantidad de materia presente en fase vapor.

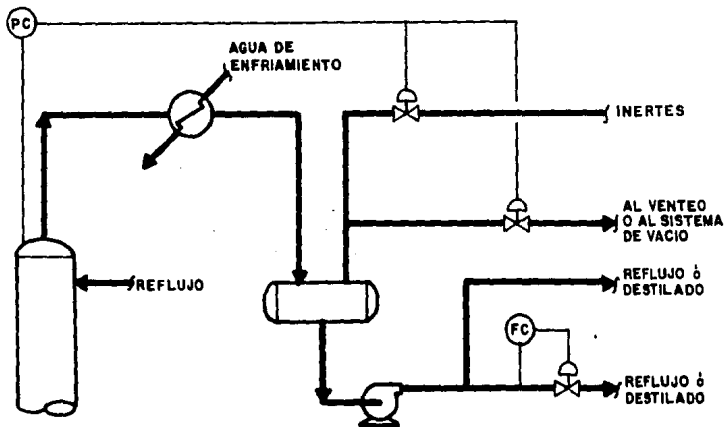
Para controlar la presión de la columna generalmente se manipula la carga térmica del condensador, a menos que represente la capacidad limitante del sistema o que utilice un servicio más costoso que el rehervidor. La manera que puede utilizarse para alterar la carga térmica del condensador depende principalmente de la presión de operación de la columna.

Para columnas que operan esencialmente a condiciones atmosféricas, frecuentemente se utiliza un venteo para controlar la presión, la carga térmica del condensador se afecta entonces por la presencia de incondensables en el sistema, los cuales entran y salen automáticamente del condensador conforme la presión de la columna varía. En algunas ocasiones puede justificarse un condensador adicional en el venteo, que maneje niveles de temperaturas menores, con el objeto de reducir las pérdidas de producto, como se muestra en la figura 4.4.

Si el producto es muy flamable o puede contaminarse con aire puede implementarse un sistema de admisión y expulsión de gas inerte, operan



**FIGURA 4.4 - CONTROL DE PRESION PARA UNA COLUMNA ATMOSFERICA MEDIANTE VENTEO DE INCONDENSABLES.**



**FIGURA 4.5 - SISTEMA DE CONTROL DE PRESION EN RANGO DIVIDIDO CON ADMISION Y VENTEO DE GASES INERTES.**

do en rango dividido. Este sistema se presenta en la figura 4.5. El -- traslape del rango de operación de las dos válvulas debe minimizarse para evitar el consumo excesivo de gas inerte; sin embargo tampoco es conve--- niente tener un claro entre sus rangos de operación, ya que ocasionan una banda muerta alrededor del punto de ajuste del controlador de presión.

Cuando la columna opera a vacío, el venteo se conecta a alguna -- fuente de vacío, tal como un sistema de eyectores o una bomba de vacío; - frecuentemente se utiliza el mismo arreglo de la figura 4.5 para contro-- lar la presión. Si la alimentación a la columna contiene una gran cantidad de incondensables, entonces la inyección de gas inerte puede no reque-- rirse. Por otro lado, si la presión de la columna es muy baja (menor a - 50 mm Hg) la válvula de venteo puede eliminarse para reducir la caída de presión en la línea, utilizando únicamente la inyección de gas inerte. - En las líneas de domos muy grandes, los cambios en las pérdidas de calor durante tormentas causan una severa variación en la presión, para estas - columnas se hace necesario la inyección de gas inerte antes del condensador para lograr un mejor control. Aunque este sistema de control de admi-- sión y expulsión de gas inerte provee una respuesta rápida y un buen control, puede causar grandes pérdidas de producto y se recomienda utilizarlo únicamente cuando es la única alternativa factible.

Otro método de control que se utiliza regularmente es cuando la - válvula de control se coloca del lado del agua de enfriamiento que sale - del condensador (figura 4.6). Este sistema puede aplicarse únicamente -- cuando el agua de enfriamiento está suficientemente tratada para prevenir incrustación en los tubos, aún en el caso de que se presenten temperatu-- ras altas en los tubos del condensador; la velocidad del agua debe ser ma-- yor a 4.5 fps y debe tener un tiempo de residencia menor a 45 segundos; - si el tiempo de residencia del agua se incrementa, el sistema de control operará con retraso. Este método puede utilizarse también para sistemas a presión.



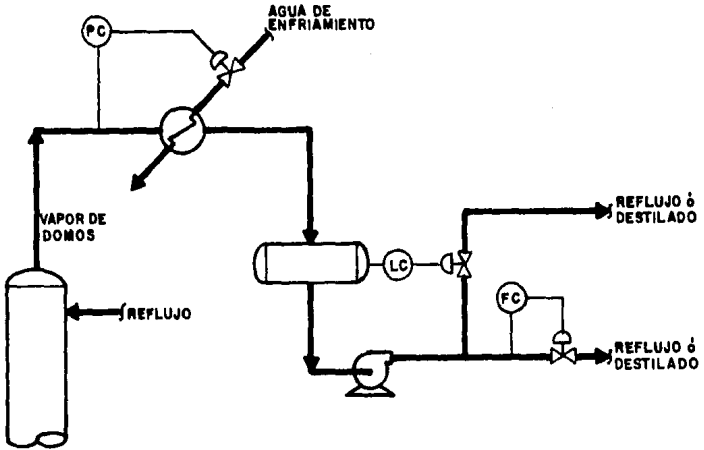


FIGURA 4.6-CONTROL DE PRESION MEDIANTE LA MANIPULACION DEL FLUJO DEL MEDIO DE ENFRIAMIENTO.

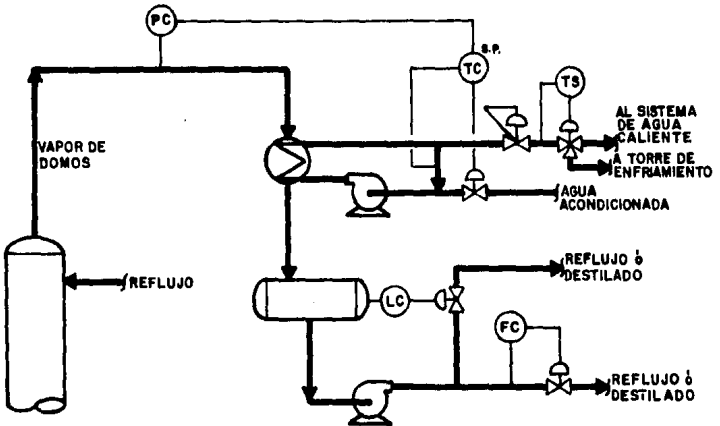
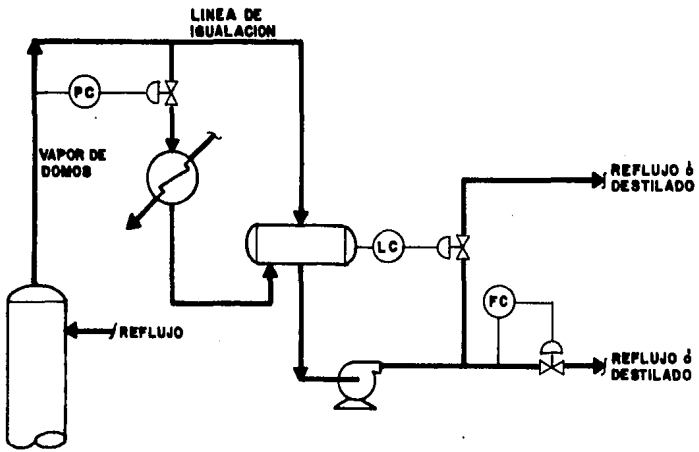


FIGURA 4.7-CONTROL DE PRESION MEDIANTE LA MANIPULACION DE LA TEMPERATURA DEL MEDIO DE ENFRIAMIENTO.

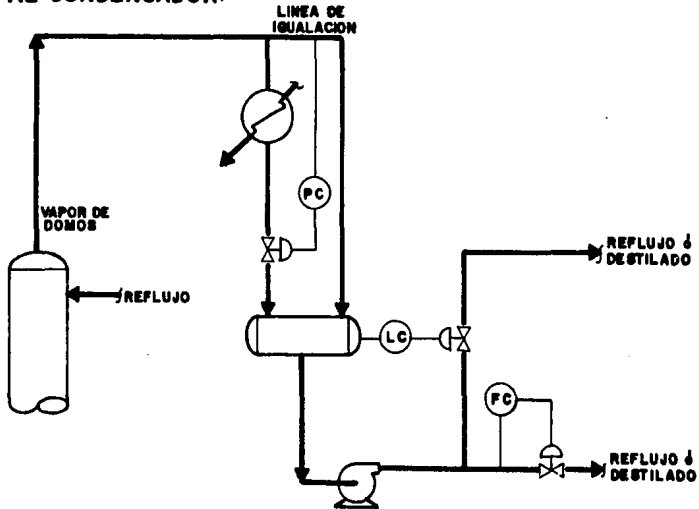
Shinsky comenta que el método descrito anteriormente presenta -- desventajas, porque además del requerimiento mencionado, la respuesta de la velocidad de condensación a las variaciones en el flujo de agua de enfriamiento es lenta y no lineal y además, la velocidad de respuesta varía con el flujo de enfriamiento causando inestabilidades al circuito de control y propone otro arreglo que resuelve los problemas antes mencionados, que consiste principalmente en modificar la temperatura del medio de enfriamiento en vez de su flujo (figura 4.7) resultando en un sistema lineal y eficiente. Para esto se utiliza una bomba para mantener un flujo constante a través del condensador y la remoción de calor puede modificarse manipulando la válvula de agua fría directamente o modificando el punto de ajuste de un controlador de temperatura por el controlador de presión que toma la señal de las condiciones de la columna. El ajuste de temperatura en cascada mejora la velocidad de respuesta del primer circuito de control. La ventaja de este método es su flexibilidad, su linealidad, su confiabilidad y además, su característica principal es su capacidad de recuperar energía; mientras que los demás métodos de control tienden a reducir la eficiencia del condensador, éste disminuye el consumo de agua de enfriamiento. Otra característica importante es que maximiza la temperatura de salida del agua de enfriamiento. Este método es mejor para columnas atmosféricas que el dejar que la presión varíe con un cabezal de venteo o introducir gases no condensables al sistema.

Existen también otros métodos de control de presión para columnas que operan a presiones por arriba de la atmosférica, además de los ya mencionados, de inyección y venteo de gas inerte o control del flujo o temperatura del medio de enfriamiento; en las figuras 4.8 se muestran algunos métodos comunes para cuando hay poca cantidad de incondensables en el sistema. Estos sistemas realizan el control de presión llenando con líquido una parte de la superficie de condensación.

En el método de la figura 4.8a se coloca una línea de igualación



**FIGURA 4.8a-SISTEMA DE CONTROL DE PRESION CON LINEA DE IGUALACION Y VALVULA LOCALIZADA EN LA ALIMENTACION AL CONDENSADOR.**

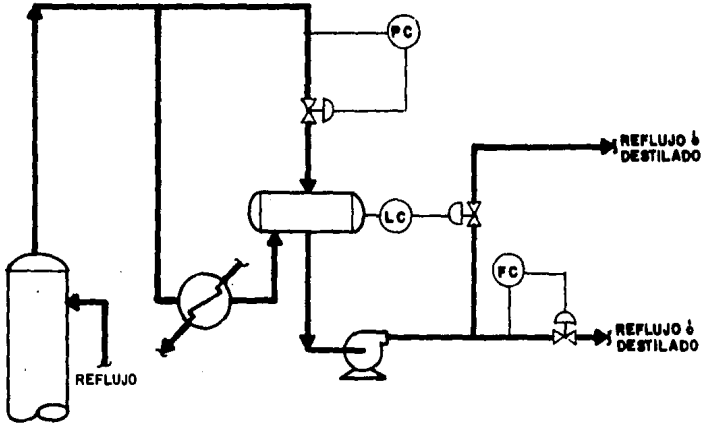


**FIGURA 4.8b-SISTEMA DE CONTROL DE PRESION CON LINEA DE IGUALACION Y VALVULA LOCALIZADA EN LA SALIDA DEL CONDENSADOR.**

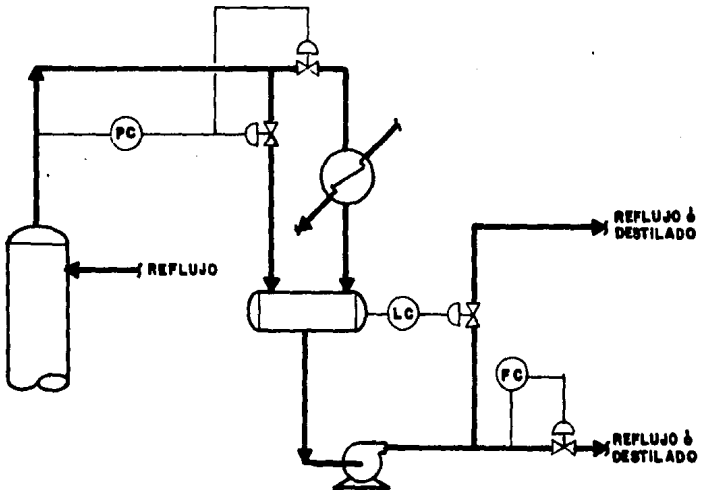
entre la torre y el acumulador, de tal manera que éste último opera a la misma presión de la columna. La válvula de control se coloca sobre la línea que va al condensador y el condensado debe fluir por gravedad al acumulador, por lo que se requiere una atención especial a la elevación del condensador, al dimensionamiento y localización de la válvula de control y de la tubería. El condensado debe entrar al acumulador de reflujo por abajo del nivel del líquido, de manera que al realizar cambios en la presión del condensador, mediante la válvula de control, se afecte el nivel del líquido en el condensador y varíe el área de condensación. Cuando el condensador es un soloaire o cuando la condensación se lleva a cabo en -- los tubos, se prefiere tener un sólo paso por los tubos e inclinar el - equipo.

Un arreglo más utilizado que el anterior, consiste en colocar la válvula de control a la salida del condensador, como se muestra en la figura 4.8b, ya que, además de ser más fácil de entender, requiere una válvula de control más pequeña y se evitan interacciones entre el nivel del acumulador y la presión, ya que el condensado puede entrar al acumulador por arriba del nivel del líquido. En este método se debe colocar la válvula de control tan cerca como sea posible del acumulador para asegurar - la máxima cabeza estática que promueva el flujo de condensado y minimizar los efectos de su flujo en la tubería vertical que está corriente abajo - de la válvula de control.

Otra variación consiste en colocar la válvula de control en la línea de igualación tal como se muestra en la figura 4.8c, este método se - conoce como "by pass caliente" o "condensador sumergido". El condensador se coloca cerca del nivel de piso y tiene un nivel de condensado, mientras que el acumulador de reflujo se coloca por arriba del condensador, lo suficientemente alto para suministrar el NPSH de la bomba de reflujo. La - superficie del líquido en el tanque está más fría que en el condensador, lo que permite suficiente diferencia en las presiones de vapor para mover



**FIGURA 4.8c- SISTEMA DE CONTROL DE PRESION MEDIANTE LINEA DE DESVIO Y CONDENSADOR SUMERGIDO.**



**FIGURA 4.8d- SISTEMA DE CONTROL DE PRESION CON LINEA DE DESVIO, DOBLE VALVULA DE CONTROL Y CONDENSADOR COLOCADO POR ARRIBA DEL ACUMULADOR.**

el condensado hacia el acumulador, esta diferencia de presiones es normalmente de 3 psi o menos. Si la presión de la columna disminuye, el controlador de presión incrementa el flujo de vapor a través de la línea de desvío, haciendo que la superficie del líquido aumente su temperatura y su presión de vapor, lo que causa un incremento del nivel del líquido en el condensador, disminuyéndose el área disponible para condensación. Este último efecto reduce la velocidad de condensación y tiende a restaurar la presión de la columna.

Este arreglo tiene las siguientes ventajas: el condensador está bastante accesible para mantenimiento y reparación, el soporte estructural del condensador es más barato que para un condensador elevado y la válvula de control es más pequeña que para otros métodos. Sin embargo, el condensador requiere de un sobrediseño debido al área de subenfriamiento requerida, lo que lo hace más caro que un condensador elevado para iguales capacidades de condensación, pueden ocurrir interacciones severas entre el controlador de presión con el de nivel del acumulador, el diseño de la línea de desvío es empírico y por último algunas instalaciones han fallado.

Otra modificación al sistema de línea de desvío de vapores calientes, es el arreglo que se presenta en la figura 4.8d, en el cual se colocan dos válvulas de control de presión que se operan simultáneamente pero con acción inversa (una cerrando y la otra abriendo) el condensador se monta por arriba del acumulador y la línea de condensado se prolonga en el interior del acumulador hasta el nivel mínimo. Shinsky comenta que este sistema opera más satisfactoriamente que el anterior y que las dos válvulas se requieren para darle la suficiente flexibilidad al sistema, ya que aún con la válvula de desvío completamente abierta pasa flujo a través del condensador, el cual puede estar lo suficientemente frío para mantener la presión, el vapor que fluye a través de la línea de desvío puede condensar también en las paredes del acumulador, lo cual puede acelerarse si el líquido proveniente del condensador viene extremadamente --

subenfriado, de tal manera que el efecto del control se pierde; al colocar la válvula en la línea de desvío se suprime esta limitación. Chin menciona que el colocar la válvula a la salida del condensador en lugar de a la entrada, también resulta en un arreglo satisfactorio pues tiene la ventaja de reducir el tamaño de esta válvula.

#### 4.5 Sistema de control prealimentado.

El control prealimentado es una de las técnicas de control avanzado más importantes y puede definirse como: "Un sistema de control en el cual se utiliza la información de una o más condiciones que pueden perturbar la variable controlada, como una acción correctiva, con el objeto de minimizar las desviaciones de la variable controlada"; es decir, se hace una medición de la variable que puede perturbar al sistema y, antes de -- que la operación de la columna se desajuste por la presencia de la perturbación, se toma una acción correctiva sobre las variables manipuladas del sistema.

El sistema de control prealimentado se ha utilizado en columnas de destilación, principalmente para minimizar las perturbaciones que pueden presentarse en la corriente de alimentación.

Para implementar este sistema de control se utiliza fundamentalmente el balance de materia y energía de la columna. Si  $F$ ,  $D$  y  $B$  representan los flujos de alimentación, destilado y fondos, respectivamente y " $z$ ", " $y$ ", " $x$ " sus composiciones, entonces el balance global de la columna será:

$$F = D + B$$

y para el componente clave ligero se tendría el siguiente balance:

$$Fz = Dy + Bx$$

tomando simultáneamente las dos ecuaciones anteriores y despejando D se obtiene:

$$D = \left( \frac{z - x}{y - x} \right) F$$

Esta ecuación determina el flujo de destilado producto en términos del flujo de alimentación F y de la composición del clave ligero en la alimentación "z", que son variables independientes; sin embargo, la relación contiene a "x" y "y", que son las composiciones del clave ligero en los productos y su valor actual no puede utilizarse como prealimentación ya que constituyen las variables controladas del modelo retroalimentado, representan las salidas del sistema y sus valores se ven afectados cuando se modifica D. En su lugar, los valores que se utilizan en la ecuación son los puntos de ajuste, es decir, los valores "deseados" en la separación para la composición del clave ligero en los productos. Estos valores se distinguen con un asterisco en la ecuación:

$$D^* = F \left( \frac{z^* - x^*}{y^* - x^*} \right)$$

y puede simplificarse de la siguiente manera:

$$D^* = m F z$$

en donde:



$$m = \frac{(z - x^*) / (y^* - x^*)}{z}$$

La constante "m" en la ecuación, que representa un factor de recuperación, puede ajustarse manualmente, o bien, por un control de composición de algún producto (que representaría una retroalimentación al modelo prealimentado).

Analizando la ecuación para "m", se puede decir que cuando  $x^*$  se aproxima a cero, la exactitud del modelo prealimentado mejora, ya que "m" se reduce a:

$$m = \frac{z}{y^*} F$$

y a fin de cuentas, el objetivo del modelo prealimentado es minimizar las variaciones en "m" (la retroalimentación).

Para sistemas en donde se manejen mezclas multicomponentes "z" de be incluir a todos los componentes ligeros que se obtienen por el domo de la torre, además del clave ligero.

Por otra parte, si se requiere una separación constante, resulta conveniente ajustar la cantidad de calor suministrado a la columna de -- acuerdo a las variaciones de la corriente de alimentación, es decir, mantener la relación V/F constante:

$$Q = k F$$

En donde  $Q$  es la cantidad de calor proporcionada en el rehervidor y está directamente relacionada con  $V$ , que es el vapor generado en el mismo rehervidor y se alimenta al fondo de la columna.

Una aplicación del sistema prealimentado se muestra en la figura 4.9. En este sistema se mide la composición del componente clave ligero (o ligeros totales que se obtienen por el domo) ( $z$ ) mediante un analizador en línea y se multiplica por el flujo de alimentación a la columna ( $F$ ), señal que ha sido previamente linealizada por un extractor de raíz cuadrada.

El factor de corrección " $m$ " se introduce mediante un controlador de temperatura que toma su señal en un plato de domos y su señal de salida se multiplica por la salida del primer multiplicador para completar el desarrollo de la ecuación  $D^* = mFz$  y esta señal que representa a  $D$ , se envía directamente al controlador de flujo de destilado como punto de ajuste.

La señal de flujo de alimentación se utiliza también para ajustar el flujo de vapor al rehervidor mediante un controlador de relación, en donde se multiplica  $F$  por la relación  $V/F$  que es fijada manualmente por el operador.

Algunas variaciones pueden aplicarse al sistema de control mostrado en la figura anterior, dentro de las más importantes se encuentran las siguientes:

A) En sistemas en donde la composición de la corriente de alimentación ( $z$ ) es bastante constante, o bien cambia muy lentamente, es posible implementar únicamente un sistema prealimentado sobre el flujo de alimentación y el modelo respondería a la siguiente ecuación:  $D^* = mF$ , eliminando el analizador de composición de la alimentación.

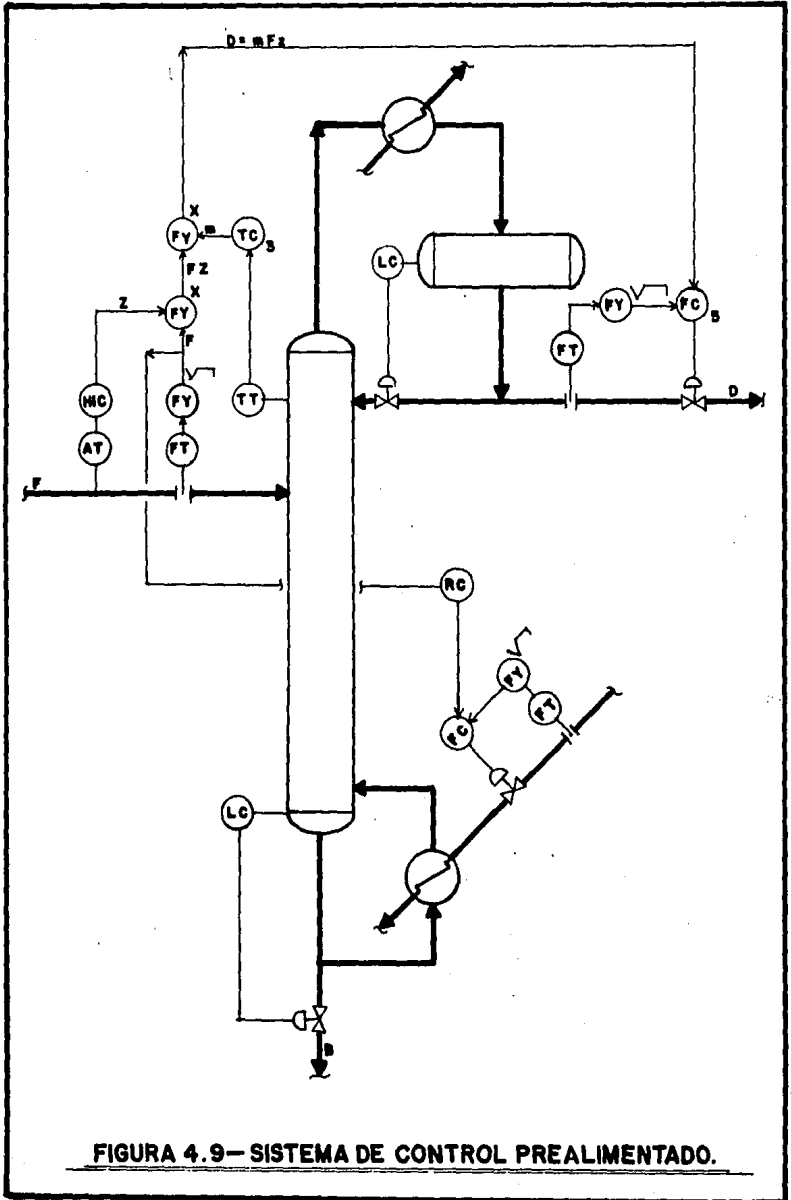


FIGURA 4.9— SISTEMA DE CONTROL PREALIMENTADO.

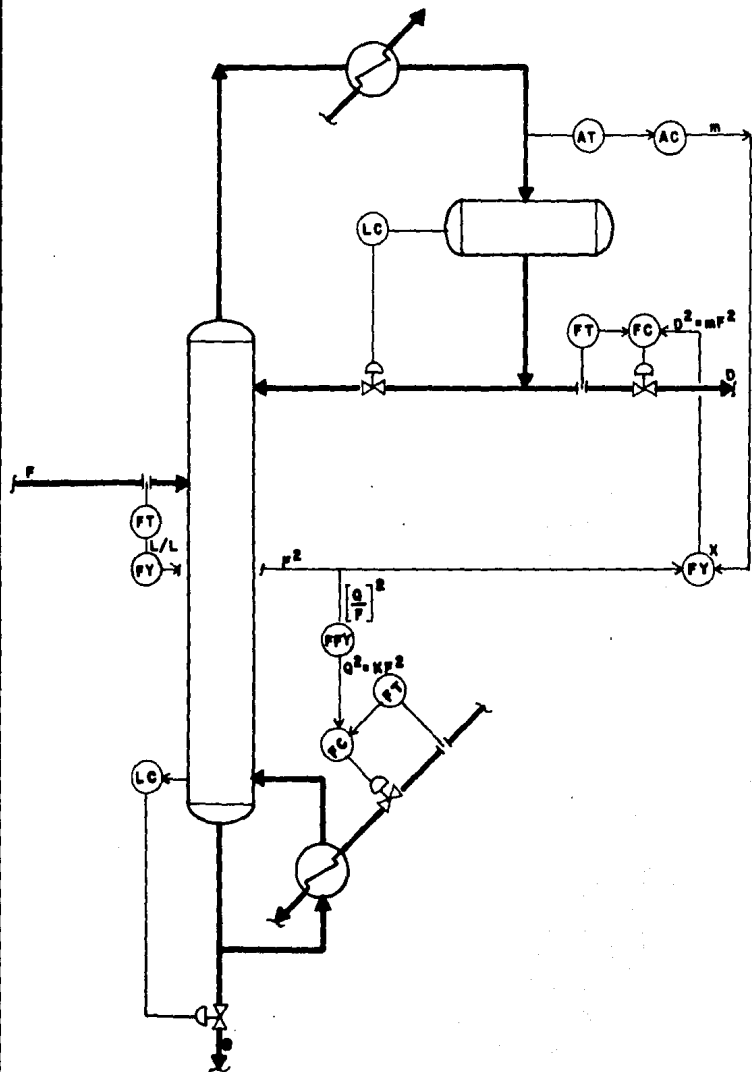
B) En los casos en donde se emplean transmisores de presión diferencial para medir flujo, puede no efectuarse la linealización de las señales, eliminando los extractores de raíz cuadrada, utilizándose el siguiente modelo:  $D^2 = m F^2$  y  $Q^2 = k F^2$ .

C) Introducir elementos de adelanto-atraso para las señales prealimentadas. De hecho, estos elementos se hacen necesarios para cualquier columna, ya que adaptaría el control prealimentado de acuerdo con la respuesta dinámica del sistema.

La figura 4.10 muestra un sistema de control que incluye las tres modificaciones anteriores, eliminando la prealimentación de la composición de la alimentación, los extractores de raíz cuadrada e implementando elementos de adelanto-atraso.

D) Máxima Recuperación: Cuando en el sistema de control prealimentado se mantiene constante la relación  $V/F$  como en los dos casos anteriores, la columna se comporta de tal manera que proporciona una "separación constante". En muchos procesos petroquímicos y químicos, los productos obtenidos son más valiosos que la energía requerida para purificarlos a la máxima recuperación posible. Esto requiere que la columna opere a máxima separación todo el tiempo, lo cual se obtiene manteniendo el vapor y el reflujo a los valores máximos que permite la capacidad de la columna. En este caso no se mantiene constante la relación  $V/F$  sino que se mantiene constante el vapor generado en el rehervidor  $V$ , de tal manera que si el flujo de alimentación  $F$  disminuye, la relación  $V/F$  aumenta mejorando la recuperación y la separación (pureza) de los productos.

En resumen, si se controla a  $V/F$  constante, se obtiene una separación constante con ahorro de energía cuando la alimentación disminuye; si se controla a  $V$  constante siempre se introduce la mayor cantidad de energía al sistema, mejorando la recuperación y la separación de los produc--



**FIGURA 4.10- USO DE LA MEDICION DIRECTA DE PRESION DIFERENCIAL EN UN SISTEMA DE CONTROL PREALIMENTADO.**

tos cuando la alimentación disminuye.

Aunque esta forma de control elimina un circuito de control prealimentado ( $Q = mF$ ), complica el otro circuito. La manipulación del caudal suministrado ya no es requerida, pero el tener separación variable -- significa que "x" varíe mientras "y" es controlada o viceversa, por lo que el modelo lineal  $D = mF$  ya no es aplicable.

Debido a que la recuperación del producto aumenta a flujos reducidos, la relación D/F debe incrementarse cuando F disminuye y "y" es controlada o debe disminuirse cuando "x" es controlada. La relación exacta que deben guardar F y D/F para mantener la máxima recuperación se encuentra de la siguiente manera: a varios valores de V/F se calculan los valores correspondientes de D/F que se obtienen cuando se mantiene constante V. Shinsky presenta un ejemplo para una columna que separa propano-propileno que se reproduce a continuación:

V	F	V/F	"y"	"x"	"z"	D/F	D
5.2	1.0	5.2	0.98	0.103	0.5	0.452	0.452
	0.75	6.9		0.021		0.499	0.374
	0.5	10.4		0.003		0.509	0.255
	0.38	13.8		0.001		0.510	0.191

En este caso se está controlando la concentración del clave ligero en domos "y" a un valor de 0.98 y puede notarse que cuando disminuye el flujo de alimentación "F", las relaciones V/F y D/F aumentan (aunque V permanece constante) recuperando siempre la mayor cantidad del componente clave ligero como puede observarse en los valores obtenidos para "x". La recuperación para esta columna ( $D/Fz$ ) es máxima a  $x = 0$ , siendo  $1/y$  ó 1.02 y sería alcanzada cuando F se aproxima a cero.

A partir de los datos tabulados se adapta un modelo prealimentado

que ajuste de manera razonable el destilado requerido con respecto a la alimentación, el modelo más simple es una ecuación parabólica:

$$D^* = mF - bF^2$$

La exactitud de este modelo parabólico aplicado al ejemplo, para  $m = 0.568$  y  $b = 0.116$  es la siguiente:

F	D	D*	(D-D*)/D, %
1.0	0.452	0.452	0.0
0.75	0.374	0.361	-3.5
0.50	0.255	0.255	0.0
0.38	0.191	0.197	2.9

Un sistema de control prealimentado adaptado para máxima separación se muestra en la figura 4.11.

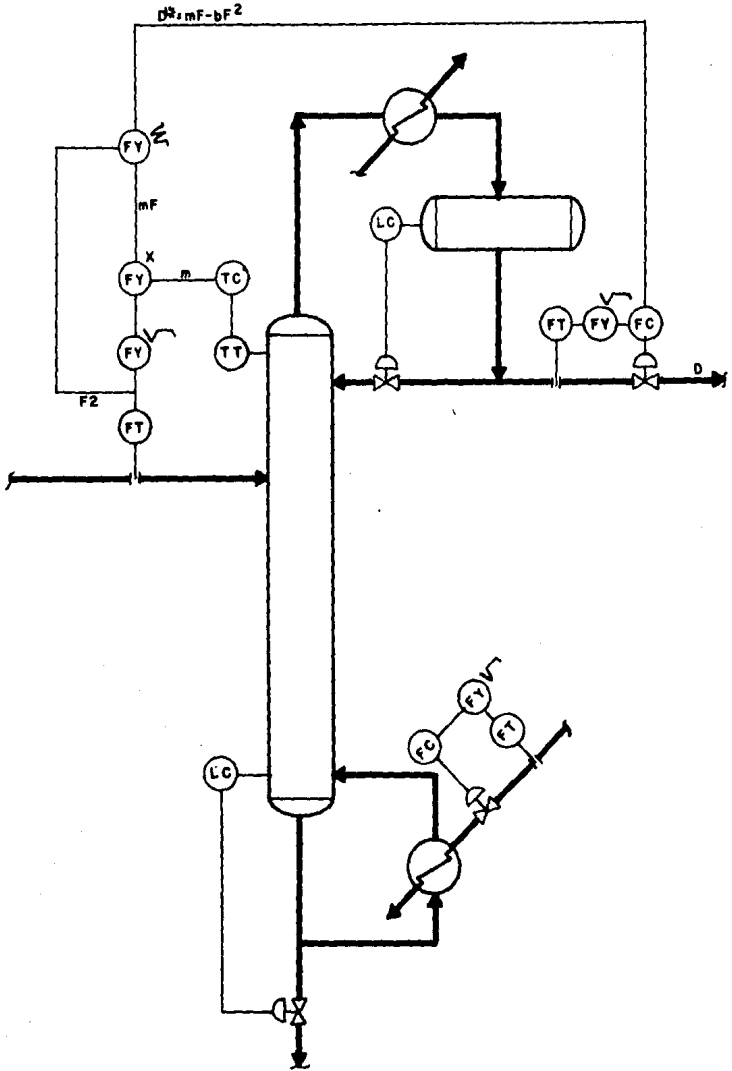


FIGURA 4.II - MAXIMA SEPARACION.



#### 4.6 Efecto del control sobre el proceso.

En esta sección se discute brevemente el efecto que presenta el control sobre el proceso cuando la variable manipulada se ve modificada por el circuito de control.

Para simplificar el análisis, se considera un sistema de destilación binario, aunque los resultados son aplicables en términos generales a sistemas multicomponentes, particularmente aquellos que pueden tratarse como pseudobinarios.

##### Manipulación del reflujo o vapor al rehervidor.

Refiriéndonos a la figura 4.12 en donde se presentan las variables principales de una columna de destilación que permiten establecer el balance de materia, consideremos la región superior de rectificación encerrada con una línea punteada, un flujo de vapor  $V_j$  entra a esta región mientras que dos flujos de líquido  $L_{j+1}$  y  $D$  salen de la misma, de tal manera que la ecuación de balance de materia para el componente más volátil sería

$$V_j Y_j = L_{j+1} X_{j+1} + D X_D \quad (4.6.1)$$

Donde:

$V_j$  = (moles/min) flujo de vapor efluente del plato  $j$ .

$Y_j$  = fracción mol del componente más volátil en  $V_j$ .

$L_{j+1}$  = (moles/min) flujo del líquido que sale del plato  $(j + 1)$ .

$X_{j+1}$  = fracción mol del componente más volátil en  $L_{j+1}$ .

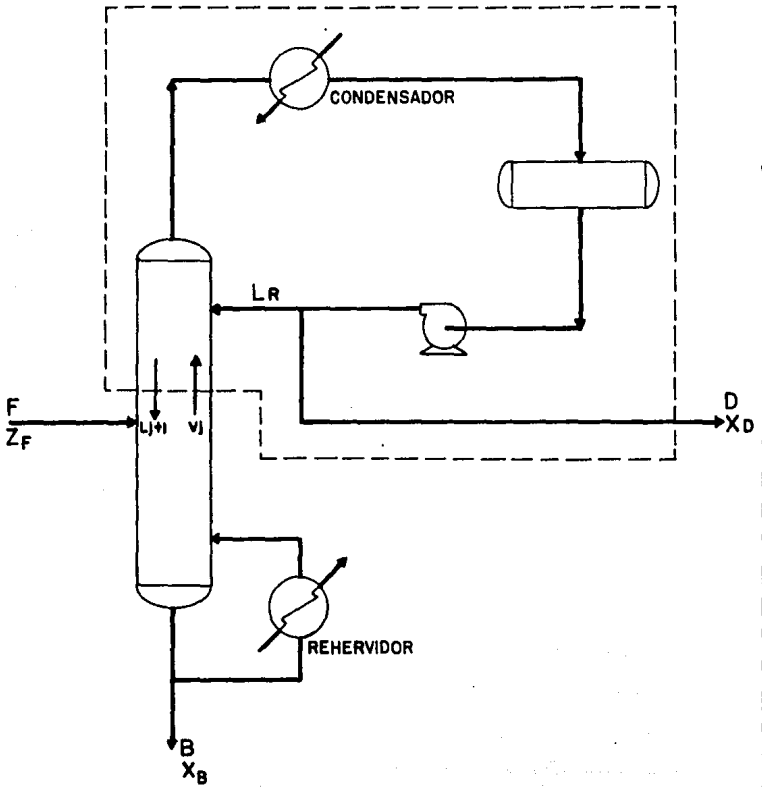


Fig. 4.12 BALANCE DE MATERIA PARA UNA COLUMNA DE DESTILACION CONVENCIONAL

D = (moles/min) flujo de destilado removido de la columna,

$X_D$  = fracción mol del componente más volátil en D.

La ecuación anterior puede rearrreglarse de la siguiente manera:

$$Y_i = \frac{L_j + 1}{V_j} (X_j + 1) + \frac{D}{V_j} X_D \quad (4.6.2)$$

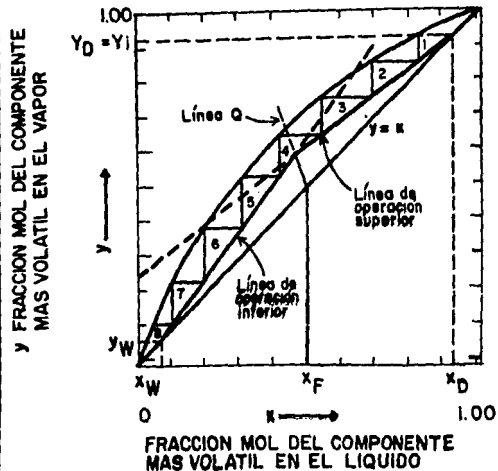
Esta ecuación define la línea de operación de la sección de rectificación. Si se consideran flujos equimolares de líquido y vapor en el interior de la columna, se puede decir que la pendiente de la línea de operación es la relación L/V. Si el producto se encuentra fuera de especificación, los sistemas de control que manipulan el reflujo, el vapor al rehedvidor, o bien la relación L/V, afectan la pendiente de la línea de operación. Por ejemplo, el efecto que ocasiona una disminución en la relación L/V puede apreciarse al comparar las composiciones terminales -- ( $X_D$  y  $X_W$ ) de las figuras 4.13 y 4.14. La relación es más pequeña en la figura 4.14 por lo que se reduce la pureza del producto de domos.

#### Manipulación del Destilado.

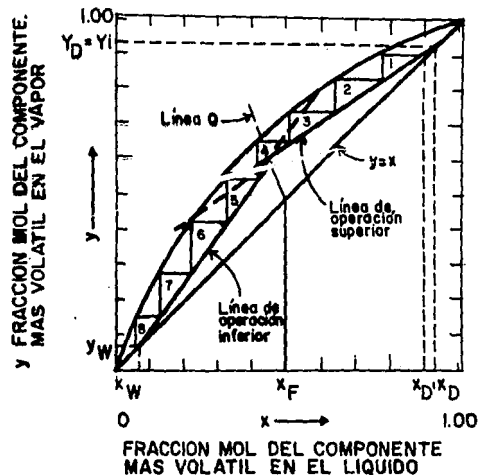
Los sistemas de control de "balance de materia directo" manipulan una corriente producto directamente. La manipulación del destilado también ajusta la relación L/V a través del controlador de nivel del acumulador de reflujo. La relación entre el reflujo L y el destilado D es expresada por

$$V = L + D \quad (4.6.3)$$

Para el caso en que V permanece constante el controlador de nivel



**Fig. 4.13 METODO DE McCABE-THIELE PARA COLUMNAS DE DESTILACION.**



**Fig. 4.14 MODIFICACION DE LA PENDIENTE DE LA LINEA DE OPERACION. SECCION DE RECTIFICACION.**

disminuye el flujo del reflujo L si el flujo de destilado D se incrementa.

El control manipulando el flujo de destilado está fundamentado en lo siguiente: una columna de destilación debe separar la alimentación en al menos dos corrientes producto de composición especificada. Si la separación no se efectúa correctamente los productos estarán fuera de especificación.

Esto se demuestra por:

$$F = D + B \quad (4.6.4)$$

Donde:

F = flujo de alimentación.

D = flujo de destilado.

B = flujo de fondos.

Para el componente clave ligero:

$$Fz = D_y + B_x \quad (4.6.5)$$

Donde:

z, y y x = fracción mol del componente clave ligero en la alimentación, destilado y fondos, respectivamente.

En vista de que F es una carga variable y D es la principal variable manipulada, B debe controlarse por control de nivel de tal manera que:

$$B = F - D \quad (4.6.6)$$

sustituyendo esta ecuación en la (4.6.5) y despejando D/F tenemos:

$$\frac{D}{F} = (z - x)/(y - x) \quad (4.6.7)$$

En esta ecuación puede apreciarse que si z cambia, la fracción de la alimentación tomada como producto de domos debe cambiar (D/F). Debe también cambiar si "y" y "x" varían. También puede notarse que la separación de productos es únicamente dependiente de las composiciones de la alimentación y de los productos. Esto únicamente es cierto en sistemas controlados a balance de materia directo.

## CAPITULO 5

### SELECCION DE LOS PUNTOS DE CONTROL DE COMPOSICION

Para seleccionar la localización de los elementos sensores de control de composición debe considerarse tanto el comportamiento estático como el dinámico de la columna.

Desde el punto de vista dinámico, los elementos sensores de temperatura (que son una medida indirecta de composición) deben colocarse de tal manera que minimizen el número y la magnitud de tiempos muertos en -- el circuito de control. Si el controlador ajusta el flujo del reflujo, -- el sensor debe colocarse en el plato superior de la sección de rectificación, donde los cambios en el flujo del reflujo son detectados inmediatamente. Si el sensor se coloca en la línea de vapor de domos, se introduce un pequeño retraso y también hace más grande la constante de tiempo -- del sensor. Colocando el sensor varios platos abajo del plato superior -- se introduce un retraso hidráulico por cada plato y el sistema de control tiene una respuesta mucho más lenta. Si el sensor se coloca cerca de la mitad de la columna detectará más rápido los cambios en composición de la alimentación pero esta ventaja no compensa los períodos de oscilación demasiado grandes.

En la práctica, muy pocas columnas se controlan mediante la temperatura del plato superior. El sensor de temperatura se coloca varios platos abajo del plato superior, en una región donde los cambios de temperatura de plato a plato son bastante grandes.

Tolliver menciona que la localización óptima del sensor se puede determinar corriendo casos paramétricos con el balance de materia y ener-

gía resultante del mismo programa utilizado en el diseño.

Si el control de composición está en domos, se varía el destilado en más-menos 5 % manteniendo constante la carga térmica del rehervidor; si el control de composición se efectúa en fondos, se realiza la misma varia ción pero manteniendo constante el flujo del reflujo. En otras palabras, los casos paramétricos deben simularse manteniendo constante la variable que se mantiene fija en el esquema de control que se esté evaluando.

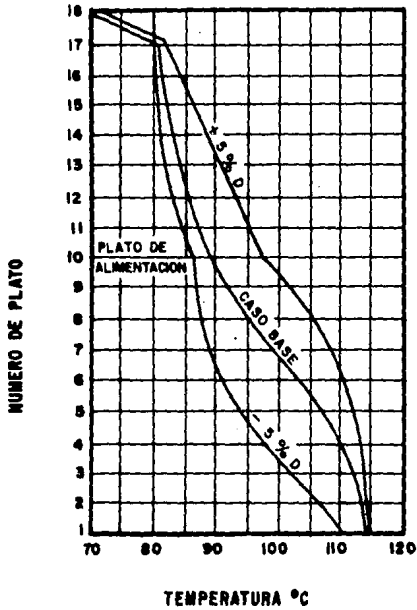
El caso base y los dos casos paramétricos permiten la evaluación de la sensibilidad de la columna al balance de materia. El perfil de tem peraturas resultante de cada caso, se grafica de la manera mostrada en la figura 5.1. La localización óptima del elemento sensor es en donde existe la mayor diferencia simétrica de temperaturas, por ejemplo para la columna caracterizada en la figura 5.1 la localización óptima del elemento sensor sería la etapa siete.

La mayor diferencia de temperaturas asegura la máxima sensibili-- dad a los cambios de composición. La distancia igual a cada lado del caso base asegura una respuesta más lineal, tanto en magnitud como en tiempo transcurrido. Además si el elemento sensor se localiza de la manera - descrita, tendrá una respuesta dinámica al menos tan rápida como cualquier otro plato en la columna.

En la destilación de multicomponentes, las mediciones de temperatura no son específicas para composición y por esto, la presencia de los componentes no clave debe ser otra consideración. Si cantidades significantes de otros componentes están presentes en el plato de control, ent onces se pueden utilizar casos paramétricos adicionales en donde se varfe - la composición de la alimentación (manteniendo la relación de componentes clave) y evaluar su efecto sobre la temperatura del plato de control. - Cuando las variaciones de temperatura sobre el plato de control son signi



ficantes no debe utilizarse a la temperatura para controlar la composición de los productos o la separación.



**FIGURA 5.1-PERFILES TERMICOS CARACTERISTICOS DE UNA COLUMNA**

## C A P I T U L O 6

### EVALUACION DE LA CONTROLABILIDAD DE LA COLUMNA

Hasta esta etapa ya se han definido algunos esquemas de control - que podrían ser aplicables a una columna de destilación determinada, haciendo uso principalmente de información de literatura.

Ahora deberán analizarse los diferentes sistemas con el objeto de determinar cuál es el más adecuado, investigando además, si es posible -- controlar la composición de los dos productos que, como ya se mencionó, - resultaría más ventajoso, ya que además de controlar pureza, se controla recuperación.

Para realizar esta selección se utilizará el concepto de ganancias relativas propuesto por Bristol y desarrollado por Shinskey. Esta - técnica nos permitirá evaluar el comportamiento de varias configuraciones de los sistemas de control y nos dará una buena medida del grado de interacción que presentarían las variables con determinado arreglo. A continuación se describen las características principales de esta técnica.

#### 6.1 Arreglo de ganancias relativas.

Este método consiste en comparar la ganancia del proceso para un par de variables manipulada y controlada, cuando todos los demás lazos de control se encuentran abiertos contra la ganancia que tendría el proceso con todos los demás lazos de control cerrados.

La relación de estas dos ganancias es un término adimensional de-

finido como GANANCIA RELATIVA.

Si  $C_i$  es una variable controlada y  $m_j$  es una variable manipulada, entonces la ganancia del proceso causada por este par de variables será:

$$\text{Ganancia} = \frac{\partial C_i}{\partial m_j}$$

cuando esta ganancia se evalúa con todos los demás lazos de control abiertos, significa que las demás variables manipuladas en el proceso se mantienen constantes. Cuando la ganancia se evalúa con los demás lazos de control cerrados, entonces las variables controladas del proceso son las que se mantienen constantes.

Al tomarse la relación de estas dos ganancias, nos indicaría qué tanto se afecta la ganancia del proceso, actuando únicamente la variable  $m_j$  para controlar  $C_i$ , al cerrar los demás circuitos de control y permitirles que también actúen en el proceso.

Matemáticamente la ganancia relativa puede expresarse como:

$$\lambda_{ij} = \frac{\left( \frac{\partial C_i}{\partial m_j} \right)_m}{\left( \frac{\partial C_i}{\partial m_j} \right)_c}$$

En donde:

$\lambda_{ij}$  = Ganancia relativa de la variable controlada  $C_i$  a la variable manipulada  $m_j$ .

$m_j$  = Variables manipuladas constantes.

$C_i$  = Variables controladas constantes.

Las ganancias relativas para un conjunto de variables manipuladas y controladas se arreglan en una matriz cuadrada, tal como se muestra enseguida:

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{cccccc}
 & M_1 & M_2 & M_3 & \dots\dots & M_j \\
 C_1 & \lambda_{11} & \lambda_{12} & \lambda_{13} & \dots\dots & \lambda_{1j} \\
 C_2 & \lambda_{21} & \lambda_{22} & \lambda_{23} & \dots\dots & \lambda_{2j} \\
 C_3 & \lambda_{31} & \lambda_{32} & \lambda_{33} & \dots\dots & \lambda_{3j} \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\
 C_5 & \lambda_{i1} & \lambda_{i2} & \lambda_{i3} & \dots\dots & \lambda_{ij}
 \end{array}
 & = & \Lambda
 \end{array}$$

Este arreglo tiene como propiedad importante que la suma de cada renglón o cada columna es 1.

Si una  $\lambda_{ij}$  es 1, no existe interacción en el proceso, ningún par de variables manipulada-controlada afecta el comportamiento del circuito de control  $i$ - $j$ . A medida que  $\lambda$  se aleja de 1 en cualquier dirección, -- existe un incremento en la interacción de variables.

Cuando  $\lambda_{ij}$  es 0 (cuando el numerador es igual a cero) indica -- que  $C_i$  no puede controlarse con  $m_j$  ya que no se afecta por ella.

De acuerdo a lo anterior, pares de variables (manipulada-controlada) que tienen ganancias relativas cercanas a uno, representan combinaciones controlables, mientras que aquellas que tienen ganancias relativas -- aproximándose a cero no lo son.

Cuando  $\lambda_{ij}$  se aproxima a infinito, quiere decir que el denominador se aproxima a cero, entonces el par de variables es controlable únicamente cuando todos los demás circuitos de control se encuentran abiertos. Al cerrar los otros circuitos se reduce la ganancia del proceso a cero. Además, la presencia de  $\infty$  en una localización del arreglo requiere dos ganancias adicionales de  $-\infty$  y otra de  $+\infty$ , para que todos los renglones y columnas sumen uno. Consecuentemente, la interacción que hay en el proceso, en este caso previene que ambos circuitos de control sean cerrados al mismo tiempo.

El concepto de ganancias relativas, además de aplicarse al estado estacionario, puede utilizarse también en procesos dinámicos, pero entonces las ganancias relativas deben evaluarse al mismo periodo de frecuencia para que puedan ser comparadas. Tampoco se limita la aplicación de este concepto a columnas de destilación.

#### Descomposición del arreglo de ganancias relativas.

Para una columna de destilación el arreglo de ganancias relativas podría quedar de la siguiente manera:

VARIABLES MANIPULADAS

		D	R	V	B
VARIABLES CONTROLADAS	y	$\lambda_{yD}$	$\lambda_{yR}$	$\lambda_{yV}$	$\lambda_{yB}$
	x	$\lambda_{xD}$	$\lambda_{xR}$	$\lambda_{xV}$	$\lambda_{xB}$
	b	$\lambda_{bD}$	$\lambda_{bR}$	$\lambda_{bV}$	$\lambda_{bB}$
	p	$\lambda_{pD}$	$\lambda_{pR}$	$\lambda_{pV}$	$\lambda_{pB}$

En donde:

- D = Flujo del destilado.
- R = Flujo del reflujo.
- V = Vapor generado en el rehervidor.
- B = Flujo del producto de fondos.
- y = Fracción mol del componente clave ligero en el destilado.
- x = Fracción mol del componente clave ligero en fondos.
- b = Nivel del líquido en el fondo de la columna.
- p = Presión de la columna.

Shinsky propone descomponer este arreglo de 4 x 4 (ó 5 x 5), en arreglos significantes de 2 x 2, y entonces, comparar los términos de cada uno de los nuevos arreglos con los otros. Menciona que esto es posible en control de columnas de destilación, si se escogen las variables de composición "x" y "y", ya que éstas responden al menos un orden de magnitud más lentamente que las variables "de inventario" (niveles de líquido y presión), de tal manera que son apenas capaces de alterar los circuitos más rápidos, aunque pueden interaccionar fuertemente una con otra.

La estrategia utilizada sería entonces, evaluar arreglos de 2 x 2 que contengan las composiciones "x" y "y". El par de variables manipuladas seleccionadas para controlar "x" y "y" diferirán para cada caso examinado, y consecuentemente las ganancias relativas también serán diferentes.

Otra ventaja que se tiene al analizar arreglos de 2 x 2, es que únicamente se requiere evaluar un término del arreglo de ganancias relativas; por ejemplo, si se quiere analizar el arreglo, en donde el flujo de destilado D y el vapor generado en el rehevridor V se escogen como variables manipuladas para controlar "y" y "x". (Esto, presupone que el nivel del fondo de la columna se controla satisfactoriamente por el flujo del producto de fondos, el reflujo controla el nivel del acumulador y la presión se controla adecuadamente modificando de alguna manera el intercambio térmico del condensador). El arreglo quedaría entonces:

$$\Delta_{DV} = \begin{matrix} & \begin{matrix} D & V \end{matrix} \\ \begin{matrix} y \\ x \end{matrix} & \begin{bmatrix} \lambda_{yD} & 1 - \lambda_{yD} \\ 1 - \lambda_{yD} & \lambda_{yD} \end{bmatrix} \end{matrix}$$

Para calcular el arreglo de ganancias relativas, es necesario, seleccionar un par de variables manipuladas que controlen las composiciones en domos y fondos "y" y "x" respectivamente; para ilustrar el procedimiento de cálculo, se escogerán el reflujo R y el flujo de vapor generado en el rehevridor V. Si el reflujo se utiliza para controlar la composición del destilado, entonces el término de ganancia relativa quedará expresado como:

$$\lambda_{yR} = \frac{\left(\frac{\partial y}{\partial R}\right)_V}{\left(\frac{\partial y}{\partial R}\right)_X}$$



Para calcular el numerador de la ecuación se realiza un cambio -- pequeño en el reflujo, manteniendo constante el flujo de vapor. Note que a partir de un balance de materia global en el domo de la columna (ver figura 6.1) si  $V$  es constante,  $V'$  debe serlo también y ya que:

$$V' = R + D$$

si  $R$  cambia,  $D$  debe cambiar también para mantener  $V$  constante.

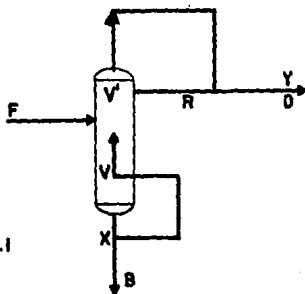


Fig. 6.1

Para evaluar el término que aparece en el denominador, se mantiene el mismo cambio en el reflujo  $R$  pero se varía  $V$  hasta que la concentración del clave ligero en fondos  $x_b$  permanezca constante. Este cálculo se realiza por prueba y error con el programa de Smith Brinkley, debido a -- que  $x_b$  es una variable implícita, utilizando el método de convergencia de

regula-falsi.

Un procedimiento similar al descrito es llevado a cabo con diferentes variables manipuladas seleccionadas para controlar separación, con el objeto de compararlas. Las diferentes parejas de variables manipuladas -- que han sido implementadas en el programa son las siguientes:

R	V
D	V
R	B

## CAPITULO 7

### DESACOPAMIENTO

En el punto 4.3 que trata sobre el control de composición de ambos productos se ha mencionado la conveniencia, y a veces la necesidad, de controlar la composición de ambos productos. Las ventajas que se presentan con el uso de este sistema de control son las siguientes: el sistema consume la mínima energía requerida para llevar cabo la separación, siempre se obtiene la máxima recuperación de ambos productos y la separación es más fácil de controlar ya que se reduce la variación de la composición de ambos productos. Debido a que las ventajas mencionadas conducen a un proceso más económico, la aplicación comercial de implementar un sólo circuito de control de composición se hace cada vez menos atractiva con los costos de energía constantemente aumentando.

Conviene recordar también, que los circuitos de control de composición presentan problemas de interacción y que el arreglo de ganancias relativas nos permite "medir" la interacción existente y seleccionar la configuración de control más adecuada. Ahora bien, una técnica que nos permite reducir la interacción existente es precisamente el uso de DESACOPLADORES.

El desacoplamiento es una aproximación que se ha utilizado en la industria para poder utilizar el control de composición de dos productos, aún en los casos en donde se presenten fuertes interacciones. Con esta técnica es posible separar los dos circuitos de control de composición de tal manera que estos se comporten de manera simple e independiente.

Jafarey y Mc Avoy demostraron que en la práctica no es posible -- realizar un desacoplamiento completo entre ambos circuitos de control de

composición para una columna de destilación y Shinsky comenta que al tratar de desacoplar completamente el sistema, únicamente lo complica y además, que representa una oportunidad para que se desestabilice la operación de la columna. Por esta razón, se presenta en este trabajo la técnica de desacoplamiento parcial.

Supongamos, por ejemplo, que el reflujo y el vapor al rehervidor son las variables manipuladas seleccionadas para controlar las composiciones de domos y fondos. Al modificar el reflujo, ambas composiciones, de domos y fondos, se ven alteradas; lo mismo sucede al variar el vapor al rehervidor. Un desacoplador parcial evitaría, ya sea que al modificar el reflujo sólo se modifique la composición de domos, sin alterar la composición de fondos, o bien, que al modificar el vapor al rehervidor sólo se altere la composición del fondo, sin alterar la de domos. Un desacoplador total incluiría las dos acciones mencionadas al mismo tiempo.

Una decisión importante que debe tomarse, es determinar cuál de los dos desacopladores implementar, y para hacerlo, habrá que tomar en cuenta cuál de las dos variables controladas es más importante. Si la composición de domos es más importante, entonces se seleccionará aquel que evite que se altere la composición de domos al modificar el vapor al rehervidor.

El diseño, implementación y ajuste de un desacoplador parcial es muy similar al control prealimentado y se tendrá que desarrollar una ecuación que cancele la interacción natural que existe en el proceso, independizando los circuitos de control.

La secuencia que debe utilizarse para implementar un desacoplador parcial se presenta en el siguiente ejemplo:

Supongamos que las variables manipuladas seleccionadas para con--

trolar la composición del producto de domos y fondos, son el reflujo y el vapor al rehervidor respectivamente, siendo esto seleccionado de antemano mediante un análisis por ganancias relativas. Si tomamos la pureza del producto de fondos como la más importante, habrá que evitar que las modificaciones en el flujo del reflujo efectuadas para controlar la composición del producto de domos alteren también la del producto de fondos.

Por lo anterior, se escoge a "E" como una variable manipulada, -- que sustituye al vapor del rehervidor, de tal manera, que la composición del producto de fondos ( $x_b$ ) únicamente dependa de ella, esto es:

$$x_b = f(E)$$

De modo que si "E" se mantiene constante también  $x_b$ . Para determinar la función anterior se procede de la siguiente manera: haciendo uso de un programa que resuelva la columna en estado estacionario y manteniendo  $x_b$  en un valor constante (preferentemente su valor de diseño), se realizan variaciones en el reflujo, determinando para cada caso, cuál es el valor que debe de tener el vapor al rehervidor para que  $x_b$  no se altere. Este procedimiento es similar al cálculo del denominador de  $\lambda_{xD, R}$ . O sea:

$$\lambda_{xD, R} = \left( \frac{\partial x_D}{\partial R} \right)_{x_b}$$

Si  $x_b$  se mantiene constante, entonces el reflujo (R) y el vapor al rehervidor (V) deben modificarse simultáneamente, existiendo una relación entre ellas, tal como la mostrada en la figura 7.1. En esta figura se ha graficado la relación V/R contra R/F siendo F la alimentación.

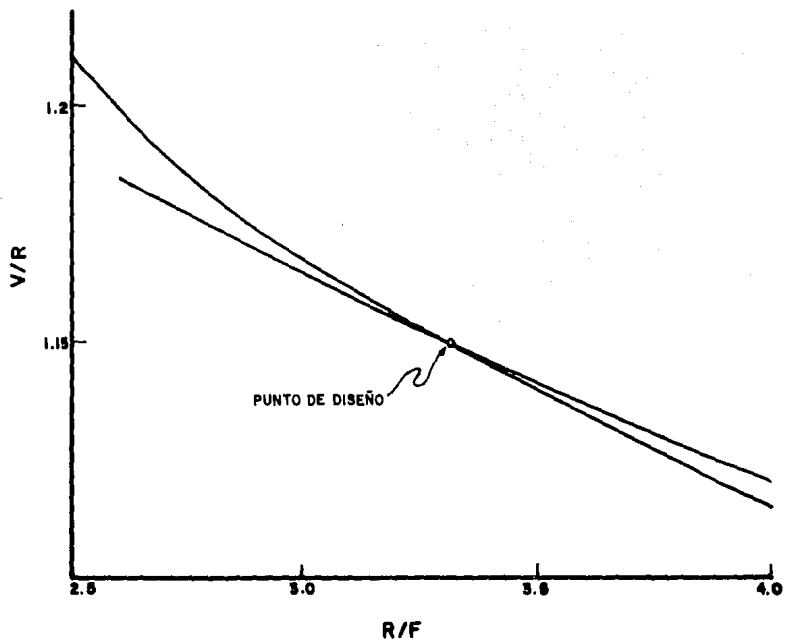


FIGURA 7.1-  $V/R$  vs  $R/F$  PARA  $X_b$  CTE.

Para determinar "E", se obtiene una tangente a la curva en el punto de diseño y la ecuación resultante que relaciona V/R con R/F es:

$$\frac{V}{R} = a - b \frac{R}{F}$$

en donde "a" y "b" son las constantes de la recta tangente en el punto de diseño.

"E" se puede expresar como:

$$E = \frac{V}{R} + b \frac{R}{F} - a$$

Entonces el punto de ajuste que debe enviarse al vapor al rehervidor puede despejarse de la ecuación anterior:

$$V^* = R (E + a) - \frac{b R^2}{F}$$

De acuerdo a lo anterior, el esquema de control queda implementado de la manera mostrada en la figura 7.2. Se toma la señal de "R" que sale del controlador de domos, así como la de "F" y la de "E", que sería la señal de salida del controlador de fondos. Estas tres señales se envían a un controlador no lineal que efectúa el cálculo del vapor al rehervidor - "V" que debe suministrarse como punto de ajuste al controlador de flujo -- que se encuentra localizado en la línea de suministro.

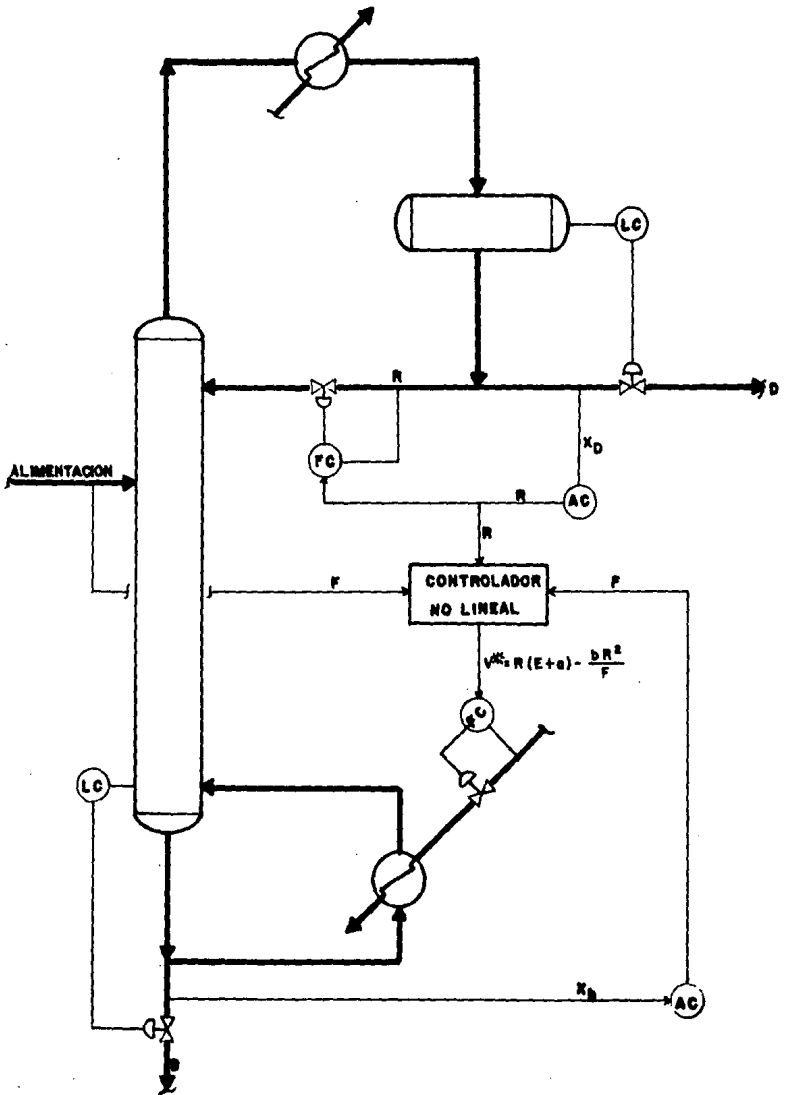


FIGURA 7.2- SISTEMA DE CONTROL CON DESACOPLAMIENTO



De la manera descrita, el sistema de control se ha implementado para mantener preferentemente la pureza del producto de fondos que es la más importante, considerando las variaciones en el flujo de alimentación, en el reflujo y en la misma composición del producto de fondos. Al efectuar un cambio en el reflujo para corregir la pureza del producto de fondos, el producto de fondos permanece inalterable en base a una modificación efectuada en el vapor suministrado al rehervidor y así, se ha evitado parcialmente la interacción existente entre los circuitos de control de composición.

En este ejemplo se ha asumido por conveniencia que el flujo de vapor al rehervidor es igual al vapor generado en la columna, pero si esta relación se conoce puede considerarse en el algoritmo de cálculo.

Un procedimiento similar al descrito puede utilizarse para implementar un desacoplador, considerando otro par de variables manipuladas y de esta manera, mejorar en buena medida la respuesta del sistema de control implementado.

## CAPITULO 8

### CASOS DE ESTUDIO

#### 8.1 Caso A: Torre Desbutanizadora.

Con el objeto de ejemplificar el uso del método de ganancias relativas para la selección del sistema de control, a continuación se presenta un caso de estudio que tiene las siguientes características:

Corriente de alimentación:

Componente	Fracción mol
Propano	0.05
Isobutano	0.15
N-butano	0.25
Isopentano	0.20
N-pentano	0.35
Flujo:	100 lb mol/h
Plato de alimentación:	5
Presión de domos:	120 psias
Destilado líquido:	48.9 lb mol/h
Relación de reflujo:	2.579

Dado que la simulación en estado estacionario está realizada con el método corto de Smith Brinkley, utilizando la ecuación de estado de -- Peng-Robinson, se presenta en primer término en la tabla 8.1 los resultados obtenidos con este método corto comparados contra los que se obtienen empleando un método riguroso (Simulador General de Procesos del IMP --

"SIMPROC". Los métodos de cálculo empleados en ambas simulaciones son -- los siguientes:

Propiedad	Método Corto	Método Riguroso
Entalpía	Peng-Robinson	Soave
Constantes de Equilibrio	Peng-Robinson	Soave
Densidad	Peng-Robinson	Lu-R.K.

TABLA 8.1 COMPARACION DE RESULTADOS DEL METODO CORTO DE DESTILACION CONTRA UN METODO RIGUROSO

METODO COMPONENTE	ALIMENTACION % MOL	DESTILADO LIQ.		FONDOS	
		CORTO % MOL	RIGUROSO % MOL	CORTO % MOL	RIGUROSO % MOL
Propano	5	10.2	10.2	0.0	0.0
Isobutano	15	29.3	30.4	1.3	0.3
N-butano	25	44.7	48.6	6.2	2.5
Isopentano	20	8.4	6.3	31.1	33.0
N-pentano	35	7.4	4.5	61.4	64.2
Presión (psia)	120	120	120	120	120
Temperatura (°F)	180	145	143	226	230
Flujo lb mol/h	100	48.88	48.87	51.12	51.13
Densidad lb/ft <sup>3</sup>	33.50	33.47	33.50	32.59	34.59

Continuación Tabla 8.1

METODO	CORTO	RIGUROSO
Flujos internos (lb mol/h)		
Vapor en rectificación	175	170
Líquido en rectificación	126	122
Vapor en agotamiento	175	170
Líquido en agotamiento	226	221
Temperaturas (°F)		
Condensador	145	143
Domos	164	160
Plato de alimentación	208	202
Fondos	226	230
Cargas térmicas MMBTU/h		
Condensador	1.351	1.429
Rehervidor	1.362	1.485

De acuerdo a los resultados obtenidos que se muestran en la tabla anterior puede concluirse que el método corto concuerda bastante bien con el riguroso y algunas diferencias pueden adjudicarse a los métodos de cálculo de propiedades utilizadas en cada simulación.

Cabe hacer notar que se realizaron pruebas comparativas adicionales para verificar los resultados obtenidos, sobre todo en lo que respecta al cálculo de propiedades termodinámicas, equilibrio de fases con multicomponentes, balances de energía y el mismo proceso de destilación, obteniéndose resultados satisfactorios.

Por otra parte, el arreglo de ganancias relativas obtenido para este caso se muestra en la tabla 8.2.

TABLA 8.2 ARREGLO DE GANANCIAS RELATIVAS

VARIACION	POSITIVA		NEGATIVA	
	R	V	R	V
Y	14.5	-13.5	29.6	-28.6
X	-13.5	14.5	-28.6	29.6
	D	V	D	V
Y	0.56	0.44	0.54	0.46
X	0.44	0.56	0.46	0.54
	R	B	R	B
Y	1.0	0.0	0.99	0.01
X	0.0	1.0	0.01	0.99

Componente clave ligero: N-butano

V : Vapor generado en el rehervidor.

D : Destilado.

B : Producto de fondos.

Y : Composición clave ligero en domos.

X : Composición clave ligero en fondos.

En la tabla 8.2, se muestra en primer término el arreglo de ganancias relativas que se ha obtenido cuando se escogen como variables manipuladas el reflujo y el vapor generado en el rehervidor, como se puede apreciar la ganancia relativa  $\lambda_{YR}$  es bastante mayor de 1, lo que nos indica -- que existe una fuerte interacción entre las variables manipuladas seleccionadas para controlar separación. Estos resultados concuerdan con datos de literatura que mencionan que esta selección presenta la mayoría de las veces ganancias relativas mayores de 1.

Cuando se seleccionan como variables manipuladas el flujo del -- destilado y el vapor generado en el rehervidor, la ganancia relativa  $\lambda_{DV}$  es de 0.56 y 0.54, muy cercana a 0.5, lo que indica también la existencia de interacción si se selecciona este par de variables manipuladas.

Por último, se presenta el arreglo de ganancias relativas cuando se manipula el reflujo y el producto de fondos, puesto que el resultado - obtenido es 1, indica que puede realizarse en la columna un control de - dos variables para la separación, esto es, si se selecciona el reflujo y el producto de fondos para controlar las composiciones de domos y fondos respectivamente, no existirá interacción de variables y por lo tanto será un buen sistema de control.

Nótese que en la tabla se presenta, para cada caso una variación positiva y otra negativa, de la variable manipulada, ya que en algunas - ocasiones se obtienen resultados inversos tal como los mostrados en la ta - bla 8.3.

TABLA 8.3 DEGENERACION DEL ARREGLO DE GANANCIAS  
RELATIVAS

	CAMBIO POSITIVO		CAMBIO NEGATIVO	
	D	V	D	V
y	0.299	0.701	0.679	0.321
x	0.701	0.299	0.321	0.679
	R	F	R	F
y	0.330	0.670	0.709	0.291
x	0.670	0.330	0.291	0.709

Para un cambio positivo en el flujo del destilado las ganancias relativas sugieren controlar el producto de domos manipulando el vapor, - mientras que para un cambio negativo, los mismos cálculos sugieren controlar el producto de domos con el flujo de destilado. Thurston menciona - que cuando existe esta "degeneración del arreglo de ganancias relativas", un sólo punto de control es todo lo que se necesita para mantener una especificación bastante cerrada en ambos extremos de la columna.

### 8.2 Caso B: Torre Desisopentanizadora.

El segundo caso de estudio seleccionado es una torre desisopentanizadora que presenta las siguientes características:

Corriente de alimentación:

Componente		% mol
N-butano		0.042
Isopentano		41.500
N-pentano		43.785
N-hexano		14.673
Flujo:	430.177	lb mol/h
Presión:	88.3	Psias
Temperatura:	215.0	°F (líquido saturado)
Número de platos:	35	
Plato de alimentación:	26	
Presión de domos:	43.3	Psias
Destilado líquido:	75.035	lb mol/h
Relación de reflujo:	21.5	

Los resultados obtenidos de la simulación estática se presentan en la tabla 8.4 y el arreglo de ganancias relativas se muestra en la tabla 8.5.

TABLA 8.4 RESULTADOS DE LA SIMULACION ESTATICA DEL CASO DE ESTUDIO B:  
TORRE DESISOPENTANIZADORA

	ALIMENTACION	DESTILADO LIQUIDO	FONDOS
Componente	% mol	% mol	% mol
N-butano	0.042	0.2	0.0
Isopentano	41.500	97.1	29.8
N-pentano	43.785	2.7	52.4
N-hexano	14.673	0.0	17.8
Presión (psia)	88.3	38.3	50.3
Temperatura (°F)	215.0	139.0	175.0
Flujo lb mol/h	430.177	75.019	355.158
Densidad lb/ft <sup>3</sup>	34.09	37.22	36.27
FLUJOS INTERNOS (lb mol/h):			
Vapor en rectificación		1688.287	
Líquido en rectificación		1613.252	
Vapor en agotamiento		1688.287	
Líquido en agotamiento		2043.429	
TEMPERATURAS (°F):			
Condensador		139.0	
Domos		147.0	
Plato de alimentación		158.0	
Fondos		175.0	
Q condensador MMBTU/h		16.688	
Q rehedidor MMBTU/h		16.439	



TABLA 8.5 CASO DE ESTUDIO B: TORRE DESISOPENTANIZADORA  
ARREGLO DE GANANCIAS RELATIVAS

	CAMBIO POSITIVO		CAMBIO NEGATIVO	
	R	V	R	V
y	30.56	-29.56	45.74	-44.74
x	-29.56	30.56	-44.74	45.74
	D	V	D	V
y	0.09	0.91	0.09	0.91
x	0.91	0.09	0.91	0.09
	R	B	R	B
y	1.13	- 0.13	1.0	0.0
x	-0.13	1.13	0.0	1.0

Componente clave ligero: Isopentano.

R : Reflujo.

V : Vapor generado en el rehervidor.

D : Destilado.

B : Producto de fondos.

y : Composición del clave ligero en domos.

x : Composición del clave ligero en fondos.

En este caso, el arreglo de ganancias relativas nos indica que pueden seleccionarse como variables manipuladas los dos arreglos siguientes: el primero de ellos sería controlar la composición de domos con el vapor al rehervidor y la composición de domos con el vapor al rehervidor y la composición del producto de fondos con el flujo de destilado; este -

arreglo tendría ganancias relativas de 0.91 indicativo de que existe poca interacción, sin embargo, desde el punto de vista dinámico, este arreglo no resulta adecuado debido al gran tiempo de respuesta que tiene el circuito de control de la composición de fondos. El otro arreglo que también presenta poca interacción entre los dos circuitos de control, es controlar la composición de domos con el reflujó y la composición de fondos con el flujo del producto de fondos, el cual también resulta adecuado desde un punto de vista dinámico.

Cuando se seleccionan el reflujó y el vapor al rehervidor como - variables manipuladas para los circuitos de control de composición se presenta una fuerte interacción, al igual que en el caso anterior.

## C A P I T U L O 9

### CONCLUSIONES

Durante el desarrollo de este trabajo, que tiene como principal - objetivo la implementación de técnicas o métodos que permitan realizar un análisis y selección adecuada de los esquemas de control, se han obtenido las siguientes conclusiones:

1) Se identificó el proceso de destilación como uno de los más ampliamente utilizados en la Industria para llevar a cabo la purificación de materias primas o productos, además de que resulta ser una operación - fuertemente consumidora de energía, por lo que la aplicación de mejores - técnicas de control puede representar grandes beneficios económicos, tanto en columnas existentes como en nuevos diseños.

2) Debido a la situación actual de México en la que se exigen - diseños que contemplen la mejor integración térmica y ahorro de energía, el sistema de control debe ser acorde con estos principios, ya que mucho se puede hacer en este sentido durante la operación de la columna. Esto representa una razón más para que el diseñador enfoque sus esfuerzos al - desarrollo e implementación de técnicas de control cada vez más eficientes.

3) Se encontró que la implementación del sistema de control depende en gran medida de los objetivos que se tengan para realizar la separación, así como también de las principales perturbaciones que se presentan en el sistema, por lo que un análisis de estos, se propone como primer paso en el procedimiento de selección.

4) En lo que respecta a los esquemas básicos de control presentados en la literatura y que son ampliamente utilizados, pueden destacarse los siguientes puntos:

- El sistema de control a balance de materia directo resulta el más adecuado para controlar una sola composición, ya que proporciona mayor sensibilidad y estabilidad a la operación de la columna. La acción del control conviene realizarla sobre el producto más importante en la separación, o bien, sobre el más pequeño de los flujos.

- El uso del control a balance de energía queda restringido únicamente a aquellos casos en los que se tenga una relación de reflujo baja.

- Para el sistema de control de presión de la columna existen varios métodos, cada uno de ellos presenta sus ventajas y desventajas, su selección final dependerá en gran medida de las características del sistema de destilación en particular.

- La localización de los elementos sensores de composición resulta un paso muy importante en la implementación del sistema de control, debiéndose tomar en cuenta aspectos tanto estáticos como dinámicos de la columna. Resulta muy conveniente hacer uso del perfil de temperaturas o composiciones en la columna y de su variación cuando se extrae mayor o menor cantidad de producto destilado.

5) El uso de un sistema de control prealimentado es recomendable casi para cualquier columna, ya que minimiza las variaciones de las variables controladas y se hace indispensable para columnas que tienen perturbaciones grandes y frecuentes, sobre todo en la corriente de alimentación.

6) Se ha visto que el uso de un sistema de control de dos composiciones presenta grandes ventajas sobre el sistema de control de una sola composición, sin embargo, es el caso en donde se presenta mayor interacción. Mediante las técnicas del arreglo de ganancias relativas y desacoplamiento que han sido implementadas en esta tesis, se hace posible su aplicación, ya que la primera de ellas permite determinar el grado de interacción existente entre los circuitos de control de composición, permitiendo seleccionar el más conveniente y la segunda de las técnicas permite reducir la interacción existente del sistema seleccionado.

7) El método de ganancias relativas que se ha implementado en este trabajo utilizando el método corto de destilación de Smith Brinkley y la ecuación de estado de Peng-Robinson, presenta ventajas sobre el que maneja Shinsky, o sobre algunos métodos para columnas binarias presentados en la literatura, ya que resulta más preciso al evaluar la separación y además, permite manejar sistemas multicomponentes.

8) Se identificó a la técnica de desacoplamiento parcial como la más adecuada para utilizarse en el proceso de destilación y su implementación debe efectuarse de manera similar al control prealimentado, midiendo la interacción natural que existe en el proceso.

9) En los desarrollos realizados en este trabajo, en lo que respecta al uso de las técnicas de ganancias relativas e implementación de desacopladores se ha puesto especial atención en reducir el tiempo requerido por el Ingeniero de Proceso para llevar a cabo la selección e implementación del sistema de control. Se considera que únicamente 4 ó 6 horas-hombre serían necesarias para realizar esta actividad, teniéndose ya seleccionadas las condiciones de diseño de la columna.

10) El conocimiento de las técnicas de ganancias relativas y desacoplamiento y su aplicación al proceso de destilación, hacen más fácil -

extender su aplicación a otros procesos multivariables.

11) Se considera que resultaría muy conveniente aplicar mayores esfuerzos en este campo, sobre todo al análisis dinámico del sistema. Podría pensarse en la preparación de un simulador dinámico generalizado que permitiera:

- Comprobar la estabilidad y respuesta del sistema de control seleccionado.
- Utilizar desacopladores dinámicos.
- En conjunto con el uso de Control Digital Directo, aplicar técnicas de optimización para diferentes funciones objetivo.

En lo que respecta a los diferentes objetivos que se pueden presentar en columnas de destilación, se pueden mencionar los siguientes:

- Maximizar rendimientos de los componentes más valiosos.
- Maximizar la pureza de un producto.
- Minimizar el consumo de energía.
- Optimizar el consumo de energía contra el valor del producto recuperado.
- Maximizar la producción de destilado.
- Optimizar o maximizar el flujo de alimentación contra recuperación.

C A P I T U L O 10

BIBLIOGRAFIA

- 1) SHINSKEY F.G. "DISTILLATION CONTROL FOR PRODUCTIVITY AND ENERGY CONSERVATION". MCGRAW-HILL, NUEVA YORK, 1977.
- 2) SHINSKEY F.G. "PROCESS CONTROL SYSTEMS". MCGRAW-HILL, NUEVA YORK, 1967.
- 3) HARRIOTT P. "PROCESS CONTROL". MCGRAW-HILL, 1964.
- 4) SMITH B. "DESIGN OF EQUILIBRIUM STAGE PROCESSES". MCGRAW-HILL, NUEVA YORK, 1963.
- 5) OGATA K. "INGENIERIA DE CONTROL MODERNA". EDITORIAL PRENTICE HALL INTERNACIONAL, ESPAÑA, 1980.
- 6) BUCKLEY P.S., "TECHNIQUES OF PROCESS CONTROL". ROBERT E. KRIEGER PUBLISHING COMPANY, NUEVA YORK, 1979.
- 7) HARMON R.W., "ADVANCED PROCESS CONTROL". MCGRAW-HILL, 1981.
- 8) SMITH J.M., VAN NISS H.C., "INTRODUCTION TO CHEMICAL ENGINEERING THERMODYNAMICS". TERCERA EDICION, MCGRAW-HILL, 1975.
- 9) HOLMAN J.P., "TERMODINAMICA". SEGUNDA EDICION, MCGRAW-HILL, 1975.
- 10) MICHLEY S.H., SHERWOOD K.T., REED E.C., "APPLIED MATHEMATICS IN CHEMICAL ENGINEERING". SEGUNDA EDICION, NUEVA YORK, 1957.
- 11) REID R.C., PRANSNITZ J.M., SHERWOOD T.K., "THE PROPERTIES OF GASES AND LIQUIDS". MCGRAW-HILL.
- 12) SHINSKEY F.G., "SEMINARIO DE CONTROL DE COLUMNAS DE DESTILACION", 25 y 26 DE SEPTIEMBRE DE 1980. INSTITUTO MEXICANO DEL PETROLEO.

- 13) WANG J.C. "RELATIVE GAIN MATRIX FOR DISTILLATION CONTROL A RIGOROUS COMPUTATIONAL PROCEDURE INSTRUMENTATION IN THE CHEMICAL AND PETROLEUM INDUSTRIES". PROCEEDINGS OF THE 1979 ISA SPRING CONFERENCE. VOL. 15, NUEVA ORLEANS, ABRIL DE 1979, PAGES. 61-70.
- 14) THRUSTON C.W., "COMPUTER-AIDED DESIGN OF DISTILLATION COLUMN CONTROLS. PART I". HYDROCARBON PROCESSING, VOL. 60, No. 7, JULIO DE 1981, PAGES. 125-130.
- 15) THRUSTON C.W. "COMPUTER-AIDED DESIGN OF DISTILLATION COLUMN CONTROLS. PART II". HYDROCARBON PROCESSING. VOL. 60, No. 8, AGOSTO DE 1981, PAGES. 135-140.
- 16) LIEBERMAN L.P., "CHANGE CONTROLS TO SAVE ENERGY". HYDROCARBON PROCESSING. VOL. 57, No. 2, FEBRERO DE 1978, PAGES. 93-98.
- 17) SHINSKEY F.G. "PREDICCIÓN DE LA RESPUESTA DE COLUMNAS DE DESTILACIÓN USANDO GANANCIAS RELATIVAS". INGENIERIA QUIMICA, ESPAÑA, AGOSTO DE 1981, PAGES. 69-75.
- 18) SHINSKEY F.G., "STABLE DISTILLATION CONTROL THROUGH PROPER PAIRING OF VARIABLES". ISA TRANSACTIONS. VOL. 10, No. 4, PAGES. 403-407, 1971.
- 19) TOLLIVER T.L., McCUNE L.C. "DISTILLATION CONTROL DESIGN BASED ON STEADY-STATE SIMULATION". ISA TRANSACTIONS. VOL. 17, No. 3, PAGES. 3-10, 1978.
- 20) SHINSKEY F.G., "PREDICT DISTILLATION COLUMN RESPONSE USING RELATIVE GAINS". HYDROCARBON PROCESSING. VOL. 60, No. 5, MAYO DE 1981, PAGES. 196-200.
- 21) SHINSKEY F.G., "THE VALUES OF PROCESS CONTROL". THE OIL AND GAS JOURNAL. FEBRERO 18, 1974, PAGES. 80-83.
- 22) RYSKAMP C.J., "NEW STRATEGY IMPROVES DUAL COMPOSITION COLUMN CONTROL". HYDROCARBON PROCESSING. VOL. 59, No. 6, JUNIO DE 1980, PAGES. 51-59.
- 23) McAVOY T.J., "INTERACTING CONTROL SYSTEMS: STEADY-STATE TREATMENT OF DUAL COMPOSITION CONTROL IN DISTILLATION COLUMNS". ISA TRANSACTIONS. VOL. 16, No. 4, PAGES. 83-90.



- 24) PENG D., ROBINSON D.B. "A NEW TWO-CONSTANT EQUATION OF STATE". IND. ENG. CHEM. FUNDAM., VOL. 15, No. 1, 1976. PAGES. 59-64.
- 25) JAFAREY A., DOUGLAS J.M., McAVOY T.J. "SHORT-CUT TECHNIQUES FOR DISTILLATION CONTROL DESIGN AND CONTROL COLUMN DESIGN". IND. ENG. CHEM. FUNDAM., VOL. 18, No. 2, 1979, PAGES. 197-201.
- 26) BERTRAND L., JONES J. B. "CONTROLLING DISTILLATION COLUMNS". CHEMICAL ENGINEERING. 20 DE FEBRERO DE 1961, PAGES. 139-144.
- 27) SMITH D. E., STEWART W.S., GRIFFIN D.E. "DISTILL WITH COMPOSITION CONTROL". HYDROCARBON PROCESSING. VOL. 57, No. 2, FEBRERO DE 1978 , PAGES. 99-107.
- 28) ECKERT E., HLAVACEK V. "CALCULATION OF MULTICOMPONENT DISTILLATION OF NON-IDEAL MIXTURES BY SHORT-CUT METHOD". CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE. VOL. 33, No. 1, 1978, PAGES. 77-81.
- 29) CHIN T.G., "GUIDE TO DISTILLATION PRESSURE CONTROL METHODS". HYDROCARBON PROCESSING. VOL. 58, No. 10, OCTUBRE DE 1979, PAGES. 145-153.
- 30) MILLER J.A., MURRILL P.W., SMITH C.L., "HOW TO APPLY FEED-FORWARD CONTROL". HYDROCARBON PROCESSING. VOL. 48, No. 7, JULIO DE 1969, PAGES. 165-172.
- 31) LUYBEN W.L., "DISTILLATION DECOUPLING". AIChE JOURNAL, MARZO DE 1970, PAGES. 198-203.
- 32) GALLIER P.W., McCUNE L.C. "SIMPLE INTERNAL REFLUX CONTROL". CHEMICAL ENGINEERING PROGRESS. VOL. 70, No. 9, SEPTIEMBRE DE 1974. PAGES. 71-76.

A N E X O A

ECUACION DE ESTADO DE PENG/ROBINSON

Para calcular las propiedades requeridas en el estudio estático, se implementó la ecuación de estado de Peng-Robinson. Esta ecuación cúbica de dos parámetros, es una mejora de la ecuación de estado de Soave, en cuanto a la predicción de densidades de la fase líquida y equilibrios de hidrocarburos líquidos con agua.

La ecuación puede expresarse como:

$$P = \frac{RT}{v - b} - \frac{a}{v(v + b) + b(v - b)} \quad (A.1)$$

para mezclas, los parámetros a y b son expresados como:

$$a = \sum_i \sum_j x_i x_j (1 - \delta_{ij}) a_i^{1/2} a_j^{1/2}$$

$$b = \sum_i x_i b_i$$

en donde:

$$a_i = a(T_c)_i \alpha_i$$

$$a(Tc)_i = 0.45724 \frac{R^2 T_{c_i}^2}{P_{c_i}}$$

$$\alpha_i^{1/2} = 1 + K(1 - T_{Ri}^{1/2})$$

$$b_i = 0.07780 \frac{R T_{c_i}}{P_{c_i}}$$

$$K = 0.37464 + 1.54226 w_i - 0.26992 w_i^2$$

$P_c, T_c$  = Propiedades críticas.

$w_i$  = Factor acéntrico.

$R$  = Constante universal de los gases.

Expresada en términos del factor de compresibilidad la ecuación - puede escribirse de la siguiente manera:

$$Z^3 + (B - 1)Z^2 + (A - 3B^2 - 2B)Z - (AB - B^2 - B^3) = 0$$

(A.2)

en donde:

$$Z = \frac{Pv}{RT}$$

$$A = \frac{aP}{R^2 T^2}$$

$$B = \frac{bP}{RT}$$

La ecuación (A.2) tiene tres raíces, la mayor se toma como el factor de compresibilidad de la fase vapor y la raíz positiva menor se toma como factor de compresibilidad de la fase líquida.

#### COEFICIENTE DE FUGACIDAD.

El coeficiente de fugacidad del componente  $i$  en la mezcla puede calcularse a partir de la expresión.

$$\ln \phi_i = \ln \frac{f_i}{x_i p} = \frac{b_i}{b} (Z - 1) - \ln(Z - B) - \frac{A}{2\sqrt{2}B} \left( \frac{2 \sum_k x_k a_{ik}}{a} - \frac{b_i}{b} \right) \ln \left( \frac{Z + 2.414 B}{Z - 0.414 B} \right) \quad (A.3)$$

#### ENTALPIA.

La desviación de la entalpia ideal se expresa mediante la ecuación:

$$(H - H^*) = RT(Z - 1) + \left( \frac{T \left( \frac{da}{dT} \right)}{2\sqrt{2} b} - a \right) \ln \left( \frac{Z + 2.414 B}{Z - 0.414 B} \right) \quad (A.4)$$

obtención del término  $\frac{da}{dT}$

$$a = \sum_i \sum_j x_i x_j (1 - \delta_{ij}) a_i^{1/2} a_j^{1/2} ;$$

$$a_i^{1/2} = a(Tc)_i^{1/2} \left( 1 + K_i \left( 1 - \sqrt{\frac{T}{Tc_i}} \right) \right)$$

$$a_j^{1/2} = a(Tc)_j^{1/2} \left( 1 + K_j \left( 1 - \sqrt{\frac{T}{Tc_j}} \right) \right)$$

$$a = \sum_i \sum_j x_i x_j (1 - \delta_{ij}) a(Tc)_i^{1/2} a(Tc)_j^{1/2}$$

$$\left( 1 + K_i \left( 1 - \sqrt{\frac{T}{Tc_i}} \right) \right) \left( 1 + K_j \left( 1 - \sqrt{\frac{T}{Tc_j}} \right) \right)$$

$$\frac{d_{uv}}{dx} = v \frac{du}{dx} + u \frac{dv}{dx}$$

$$u = 1 + K_i \left( 1 - \sqrt{\frac{T}{Tc_i}} \right) = \alpha_i^{1/2} ;$$

$$v = 1 + K_j \left( 1 - \sqrt{\frac{T}{Tc_j}} \right) = \alpha_j^{1/2}$$

$$du = - \frac{K_i}{2 T c_i^{1/2}} T^{-1/2} \quad dv = - \frac{K_j T^{-1/2}}{2 T c_j^{1/2}}$$

$$\frac{da}{dT} = \sum_i \sum_j x_i x_j (1 - \delta_{ij}) a(Tc)_i^{1/2} a(Tc)_j^{1/2}$$

$$(vdu + udv)$$

$$\frac{da}{dT} = \sum_i \sum_j x_i x_j (1 - \delta_{ij}) a(Tc)_i^{1/2} a(Tc)_j^{1/2}$$

$$\left( - \frac{\alpha_j^{1/2} K_i}{2 T c_i^{1/2} T^{1/2}} - \frac{\alpha_i^{1/2} K_j}{2 T c_j^{1/2} T^{1/2}} \right)$$

$$\frac{da}{dT} = \sum_i \sum_j \frac{x_i x_j (1 - \delta_{ij})}{2} - K_i \sqrt{\frac{a(Tc)_i}{Tc_i} \frac{a(Tc)_j}{T} \alpha_j}$$

$$- K_j \sqrt{\frac{a(Tc)_i}{Tc_i} \frac{a(Tc)_j}{T} \alpha_i} \quad (A.5)$$

Con base en los principios anteriores se implementaron las siguientes subrutinas:

A) SUBROUTINA B DATOS.

Esta subrutina funciona como un Banco de datos en la cual se tienen almacenadas las propiedades de diez componentes: metano, etano, propano, isobutano, n-butano, isopentano, n-pentano, isohexano, n-hexano y agua. De aquí son tomadas las propiedades de los componentes que conforman la mezcla que desea simularse, tales como: Peso molecular, Presión crítica, Temperatura crítica, Factor ascéntrico y los parámetros de interacción de la ecuación de Peng-Robinson.

Esta subrutina puede ser ampliada o modificada, dependiendo de los componentes presentes en el sistema a estudiar.

B) SUBROUTINA D 10.

Esta subrutina asigna los parámetros de interacción de la subrutina B DATOS a la mezcla de componentes que constituyen el sistema a simular.

C) SUBROUTINA ESTPAR.

Esta subrutina estima los parámetros de la ecuación de Peng-Robinson para cada componente y de acuerdo con las reglas de mezclado -- mencionadas obtiene los parámetros de la mezcla de componentes.

D) SUBROUTINA ZETA.

En esta subrutina se resuelve la ecuación cúbica para calcular el factor de compresibilidad. Para esto, se ha implementado el método de solución general de una ecuación cúbica y además dado que la ecuación tiene tres raíces, se le asigna la mayor a la fase vapor y la raíz positiva menor a la fase líquida.

E) SUBROUTINA FUGA.

Calcula el coeficiente de fugacidad de cada componente a partir de la expresión (A.3).

F) SUBROUTINAS ENTAL Y HID.

La subrutina ENTAL calcula la desviación de la entalpía ideal mediante las ecuaciones (A.4) y (A.5) y la subrutina HID calcula la entalpía ideal de la mezcla. El estado de referencia es 25 °C.

A continuación se presentan los listados de cada una de las subrutinas mencionadas.



## A N E X O B

### MODULOS DE CALCULO

El programa fue implementado en forma modular, de tal manera que el usuario pueda arreglar la simulación más convenientemente de acuerdo - al tipo de problema.

Existe un programa central que se encarga de organizar todos los cálculos solicitados, direccionando al sistema hacia los diferentes módulos de cálculo e imprimiendo las corrientes de salida de cada módulo y -- los resultados requeridos.

Los módulos que fueron necesarios desarrollar son los siguientes:

- 1) Cálculo de la temperatura de burbuja.
- 2) Cálculo de la temperatura de rocío.
- 3) Cálculo de equilibrio de fases.
- 4) Método corto de destilación de Smith-Brinkley con opción para calcular el arreglo de ganancias relativas.

Todos los módulos operan a través de corrientes de entrada y salida, por ejemplo, para realizar el cálculo de una temperatura de burbuja, a la corriente de entrada se le asigna el número "cero" y se le alimenta externamente la composición, flujo, presión y una temperatura supuesta. - Se tendrán dos corrientes de salida, una de ellas define la corriente de alimentación como líquido saturado a su temperatura de burbuja, mientras que la otra corriente define la composición y propiedades del vapor en -- equilibrio con el líquido. Las corrientes de salida son almacenadas en -- una subrutina llamada ARRAN que tiene capacidad para almacenar las últi--

mas diez corrientes, las cuales pueden ser utilizadas en módulos subsecuentes como corrientes de alimentación. De tal forma que pueden realizarse cálculos de manera integrada, pudiéndose simular inclusive trenes de fraccionamiento o la misma columna a diferentes condiciones de operación.

### B.1 TEMPERATURA DE BURBUJA.

Para efectuar el cálculo de la temperatura de burbuja se empieza con los valores dados de presión y composición de la fase líquida, debido a que para evaluar las funciones termodinámicas se requiere conocer la temperatura, se empieza con una temperatura supuesta que también es suministrada como dato. Como siguiente paso se estiman las fugacidades de los componentes en la fase líquida a temperatura supuesta, como la composición del vapor no se conoce, las fugacidades del vapor se igualan a la unidad para iniciar los cálculos. Se hace el primer estimado de la composición del vapor:

$$y_i = \frac{f_{iL} x_i}{f_{iv}}$$

Las composiciones obtenidas se normalizan y con estas últimas se calculan las fugacidades del vapor hasta que la  $y_i$  no cambie, si esta sumatoria de composiciones del vapor es diferente de uno habrá que reajustar la temperatura y empezar con los cálculos de las fugacidades de la fase líquida a esa nueva temperatura. Un esquema simplificado del algoritmo de cálculo descrito se presenta en la figura B.1

El ajuste de la temperatura de burbuja se hace por Regula-Falsi que ha dado buenos resultados cuando se hace una buena suposición inicial de la temperatura. El programa maneja hasta 50 iteraciones y si no logra

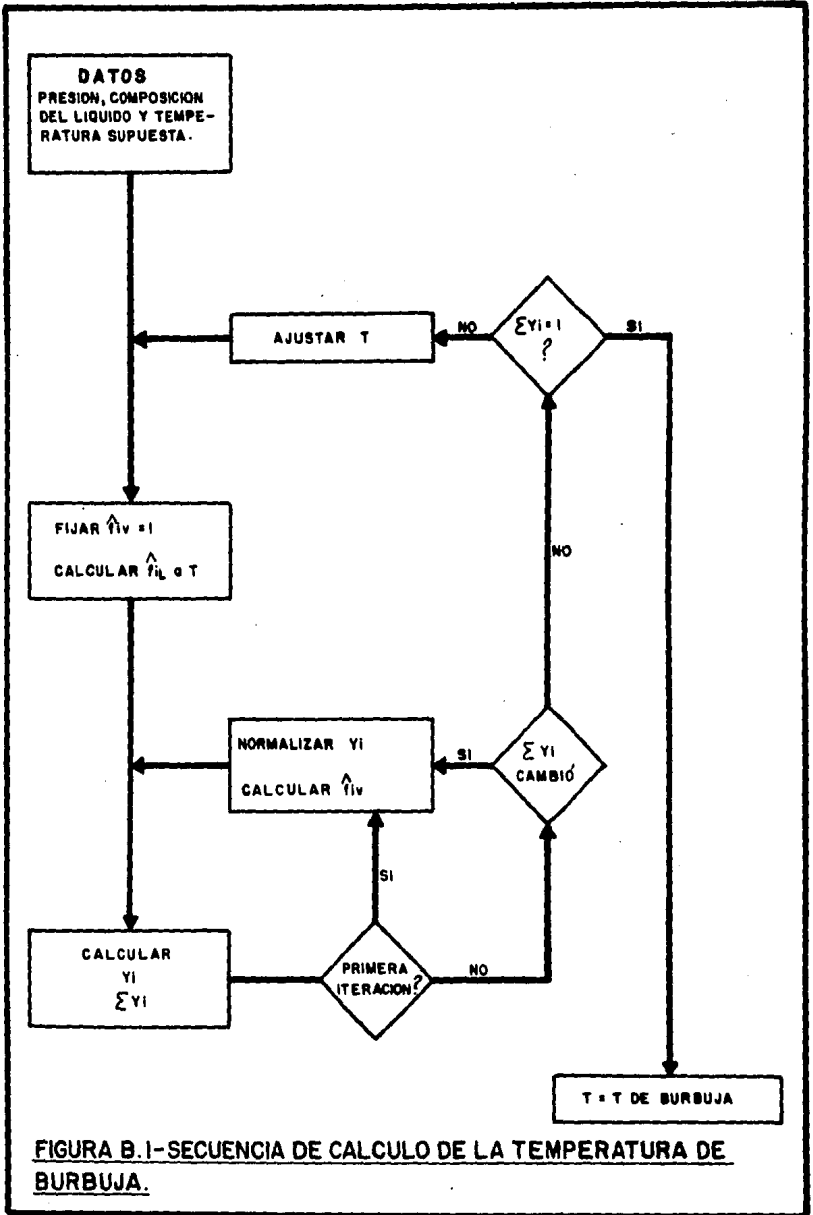


FIGURA B.1-SECUENCIA DE CALCULO DE LA TEMPERATURA DE BURBUJA.

la convergencia se suspenden los cálculos de este módulo reportando los últimos valores encontrados y un mensaje de no convergencia. Se considera que el programa converge cuando:

$$\sum y_i - 1 \leq 0.001$$

### B.2 TEMPERATURA DE ROCÍO.

La secuencia de cálculo de la temperatura de rocío es muy similar al de la temperatura de burbuja, sólo que la composición inicial se le asigna a la fase vapor y son las que se evalúan primero a la temperatura supuesta e igualando las fugacidades de los componentes de la fase líquida a uno, se hace el primer estimado de la composición del líquido. En este caso la variable de prueba es  $x_i$ .

### B.3 EQUILIBRIO LIQUIDO-VAPOR.

La existencia de dos fases se verifica en primer término, utilizando las ecuaciones para el punto de rocío y de burbuja y contando con los datos de equilibrio a la presión y temperatura especificada. Las ecuaciones a utilizar son las siguientes:

Punto de burbuja:

$$f_b = \sum x_i k_i$$

Punto de rocío:

$$f_r = \sum y_i / k_i$$

en donde  $x_i$  es la composición de la fase líquida,  $y_i$  es la composición de la fase vapor y  $k_i$  es la constante de equilibrio

$$k_i = \frac{\phi_i}{\phi_v} \quad \text{y } \phi_i \text{ las fugacidades}$$

Los valores de composición apropiados para utilizarse en estas ecuaciones son las composiciones  $z_i$  de la alimentación, de tal manera que para el punto de burbuja  $x_i = z_i$  y para el de rocío  $y_i = z_i$ .

Si definimos que:  $FB = \sum x_i k_i - 1$

$$FR = \sum y_i / k_i - 1$$

se tendrá la siguiente condición de la alimentación para los diferentes valores de  $f_b$ ,  $f_r$ ,  $FB$  y  $FR$ .

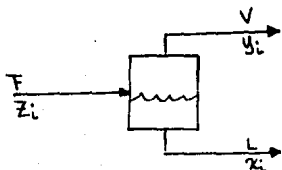
	$f_b = \sum x_i k_i$	$FB = \sum x_i k_i - 1$	$f_r = \sum z_i / k_i$	$FR = \sum z_i / k_i - 1$
Líquido subenfriado	< 1	< 0	> 1	> 0
Punto de burbuja	= 1	= 0	> 1	> 0
Dos fases	> 1	> 0	> 1	> 0
Punto de rocío	> 1	> 0	= 1	= 0
Vapor sobrecalentado	> 1	> 0	< 1	< 0

de acuerdo a lo anterior, para que existan dos fases es necesario que: -  $FR$  y  $FB$  sean mayores que cero.

Si:  $FR > 0$  } se trata de un líquido  
 $FB \leq 0$  }

Si: 
$$\left. \begin{array}{l} FR \leq 0 \\ FB > 0 \end{array} \right\} \text{ se trata de un vapor}$$

Una vez que se ha verificado la existencia de dos fases, se procede a realizar el balance:



Adicionalmente a las  $c + 2$  ecuaciones requeridas para establecer el equilibrio entre las fases líquido y vapor, se cuenta con  $c$  balances de materia por componente. Estas ecuaciones independientes son las siguientes:

Relaciones de equilibrio:

$$y_i = k_i x_i \quad (i = 1, 2, \dots, c) \quad (B.1)$$

$$\sum_{i=1}^c y_i = 1 \quad (B.2)$$

$$\sum_{i=1}^c x_i = 1 \quad (B.3)$$

Balance de materia por componente:

$$F Z_i = V y_i + L x_i \quad (i = 1, 2, \dots, c) \quad (B.4)$$

Entonces se tiene un sistema de  $2c + 2$  ecuaciones con  $2c + 2$  incógnitas ( $V, L, y_i, y x_i$ ).

Este sistema puede reducirse a una ecuación con una incógnita -- (digamos  $V$ ) de la siguiente manera, primero, se puede observar que la ecuación de Balance de Materia global (que es dependiente) puede obtenerse sumando término a término las  $c$  expresiones de la ecuación (B.4):

$$F \sum_{i=1}^c Z_i = V \sum_{i=1}^c y_i + L \sum_{i=1}^c x_i$$

$$F = V + L \quad (B.5)$$

Si eliminamos las  $y_i$ 's de la expresión (B.4) mediante el uso de la primera ecuación y reorganizando tenemos:

$$F Z_i = V k_i x_i + L x_i$$

$$x_i = \frac{F Z_i}{L + V k_i}$$

$$x_i = \frac{Z_i}{\frac{L}{F} + \frac{V}{F} k_i} \quad (B.6)$$

Si eliminamos L con la ecuación (B.5) y si  $\bar{V}$  es V/F, tenemos:

$$x_i = \frac{Z_i}{1 - V(1 - k_i)} \quad (B.7)$$

Cuando todos los términos de la ecuación anterior se suman y se restan de uno, se obtiene la siguiente forma funcional:

$$P(\bar{V}) = \sum_{i=1}^C \frac{Z_i}{1 - V(1 - k_i)} - 1$$

y su derivada

$$P'(\bar{V}) = \sum_{i=1}^C \frac{Z_i (1 - k_i)}{[1 - V(1 - k_i)]^2}$$

Se ha demostrado ampliamente que el método Newton-Ralphson siempre converge si se toma un valor inicial de  $V = 1$ .

$$\bar{V}_{n+1} = \bar{V}_n - \frac{P(\bar{V}_n)}{P'(\bar{V}_n)}$$

#### B.4 METODO CORTO DE DESTILACION DE SMITH-BRINKLEY CON OPCION PARA EL CALCULO DE GANANCIAS RELATIVAS.

El método corto de destilación de Smith-Brinkley resulta muy adecuado para el cálculo del arreglo de ganancias relativas dadas sus características. Las variables que deben especificarse para que el método fun



cione son las siguientes:

- ) Número total de platos (teóricos).
- ) Número de plato de alimentación.
- ) Flujo de destilado.
- ) Relación de reflujo.
- ) Caída de presión por plato.
- ) Caída de presión en el condensador.
- ) Presión del domo.
- ) Temperaturas supuestas del domo y del fondo de la columna.
- ) Número ordinal del componente clave ligero.
- ) Porcentaje de variación de la variable manipulada para el cálculo del arreglo de ganancias relativas.

Además, la corriente de alimentación debe estar completamente de finida mediante alguno de los módulos anteriores (temperatura de rocío, burbuja o equilibrio de fases).

Este método está basado en encontrar de manera iterativa la temperatura del plato de alimentación, la cual es utilizada para calcular las constantes de equilibrio promedio para cada componente presente en las zonas de rectificación y agotamiento.

La constante de equilibrio  $k_i$  se representa por medio de la ecuación de Antoine:

$$k_i = \exp \left( A_i + \frac{B_i}{T + C_i} \right)$$

y las constantes de equilibrio promedio en las secciones de rectificación y agotamiento  $k_{Ti}$  y  $k_{Bi}$  respectivamente, están expresadas por:

$$K_{Ti} = \exp \left( A_i + \frac{B_i}{0.5 (T_T + T_F) + C_i} \right)$$

$$K_{Bi} = \exp \left( A_i + \frac{B_i}{0.5 (T_B + T_F) + C_i} \right)$$

en donde  $T_T$ ,  $T_B$  y  $T_F$  son las temperaturas de domos, fondos y alimentación, respectivamente. El algoritmo de cálculo es el siguiente:

1) Realizar todos los cálculos preliminares: Cálculo de los -- flujos internos de vapor y líquido en cada sección, cálculo de las presiones en el sistema y se realiza además un primer estimado de las composiciones de domos y fondos.

2) Tomando como base la composición supuesta del producto de domos y fondos, se calcula la temperatura de rocío en el domo  $T_T$  y la temperatura de burbuja en el fondo  $T_B$ .

3) Cálculo de la temperatura del plato de alimentación. En la primera iteración se realiza una interpolación lineal entre  $T_B$  y  $T_T$  en - las siguientes iteraciones se utiliza el método de Newton para hacer un - nuevo estimado de TF.

Si  $D_s$  y  $D_c$  representan los flujos del producto de domos supuesto y calculado respectivamente, entonces el error E expresado como:

$$E = \frac{D_s - D_c}{D_s}$$

mide la desviación que tienen los cálculos y se toma como función de convergencia. Para una temperatura  $T_F$  correcta  $E=0$ . Entonces, de acuerdo a la fórmula de Newton, el nuevo estimado de  $T_F$  queda expresado como:

$$T_F^{K+1} = T_F^K - \frac{E^K (T_F^{K-1} - T_F^K)}{E^{K-1} - E^K}$$

Si  $E^K$  es más chica que una tolerancia fijada (en este caso 0.0005) se considera que la columna ha sido resuelta y los cálculos terminan.

4) Cálculo de las constantes  $A_i^*$  y  $B_i^*$  y de las constantes de equilibrio promedio  $K_{T_i}^*$  y  $K_{B_i}^*$ .

Las constantes de equilibrio que se calculan con la ecuación de Peng-Robinson para calcular las temperaturas de rocío en el domo y burbuja en el fondo son utilizadas para calcular las constantes  $A_i$  y  $B_i$  de la ecuación de Antoine para la constante de equilibrio. Estos coeficientes pueden expresarse como:

$$A_i^* = \ln K_{B_i}^* - \ln \frac{K_{T_i}^*}{K_{B_i}^*} / \left( (T_B + C_i^*) / (T_T + C_i) - 1 \right)$$

$$B_i^* = \ln \frac{K_{T_i}^*}{K_{B_i}^*} / \left( (1/T_T + C_i^*) - (1/T_B + C_i) \right)$$

Se ha visto que considerando  $C_i^* = -43.15$  para hidrocarburos, los

resultados son bastante buenos.

Se calculan también los factores efectivos de agotamiento y rectificación para cada componente  $S_{ni}$  y  $S_{mi}$  respectivamente:

$$S_{ni} = \frac{K_{Ti}^* V}{L} \quad S_{mi} = \frac{K_{Bi}^* V'}{L'}$$

en donde  $V$  y  $L$  representan los flujos internos de vapor y líquido en cada sección.

5) Cálculo del factor  $H_i$ , el cual depende de la naturaleza de la alimentación. Cuando la alimentación es más similar a la fase líquida.

$$H_i = \frac{K_{Bi}^* L}{K_{Ti}^* L'}$$

y cuando es más similar a la fase vapor

$$H_i = \frac{L}{L'}$$

6) Cálculo de la recuperación de cada componente.

La fracción de cada componente  $f_i$  que es recuperado en el fondo de la columna se calcula mediante la siguiente expresión:

$$f_i = \frac{(1-S_{ni}^{N-M}) + R(1-S_{ni})}{(1-S_{ni}^{N-M}) + R(1-S_{ni}) + H_i S_{ni}^{N-M} (1-S_{mi}^{m+1}) (1-S_{ni}) (1-S_{mi})}$$

en donde:

N = Número total de platos.

M = Número de etapas abajo de la etapa de alimentación.

Los valores  $f_i$  dan las recuperaciones de cada componente que deja la columna:

$$BX_{Bi} = FX_{Fi} f_i$$

$$DX_{Di} = FX_{Fi} - BX_{Bi}$$

7) Se regresa al punto 2.

Después de que se ha convergido la columna se calculan las características de las corrientes resultantes, las cargas térmicas y el arreglo de ganancias relativas.

#### B.5 LECTURA DE DATOS.

Tarjetas 1 a 4 - Tarjetas de control.

Tarjeta 5 - Namelist \$SISTEM.

NC - Número de componentes en el sistema.

IDENT - Número de identificación de cada uno de los componentes:

IDENTIFICACION	COMPONENTE
1	Metano
2	Etano
3	Propano
4	Isobutano
5	N-butano
6	Isopentano
7	N-pentano
8	Isohexano
9	N-hexano
10	Agua

Tarjeta 6 - Se leen las siguientes variables:

VARIABLE	FORMATO	SIGNIFICADO
ILEC	I1	Indice de lectura. ILEC = 1 Se proporciona otro módulo de cálculo. ILEC = 2 Se termina la simulación.
IMOD	I1	Número de módulo a simular: IMOD = 1 Equilibrio de fases. IMOD = 2 Temperatura de rocío. IMOD = 3 Temperatura de burbuja. IMOD = 4 Módulo de prueba de propiedades. IMOD = 5 Módulo de destilación y ganancias relativas.

VARIABLE	FORMATO	SIGNIFICADO
N1, N2, N3 y N4	412	Número de identificación de las corrientes de alimentación y salida - del módulo.  En la mayoría de los módulos:  N1 - Corriente de alimentación. N2 - Corriente de destilado líquido. N3 - Corrientes de fondos. N4 - Si N4 = 0 únicamente se calcula la columna.  Si N4 = 1 se calcula la columna y adicionalmente el arreglo de ganancias relativas.

Tarjeta 7 - Namelist \$ COMP (únicamente se lee cuando N1 = 0).

X = Composición de cada componente en fracción mol (en el mismo orden - que la variable IDENT).

Se tiene capacidad para manejar hasta 10 componentes.

FF = Flujo de la corriente en lbmol/h.

Tarjeta 8 - Namelist \$ DATOS.

PF = Presión de la corriente en psias.

TF = Temperatura en grados Fahrenheit.

IEQP = Índice de rastreo del módulo. Si IEQP = 1, se rastrean algunas variables importantes del módulo para analizar su convergencia. Si -

IEQP = 0 no rastrea.

Tarjeta 9 - Namelist \$DATA.

En el caso de utilizar el módulo 5 de Destilación, no se leen las tarjetas 7 y 8, ya que la corriente de alimentación debe estar definida - previamente, en este caso, se lee el Namelist \$DATA para proporcionar los datos de la columna.

- NP = Número total de platos ideales.
- NPA = Número de plato de alimentación.
- DESL = Flujo del destilado líquido en lbmol/h.
- RR = Relación de reflujo (R/DL).
- DPP = Caída de presión en psi.
- P = Presión en el domo de la columna psias.
- TDS = Temperatura del domo supuesta (Temperatura de rocío) °F.
- TBS = Temperatura del fondo supuesta (Temperatura de burbuja) °F.
- IEQP = Índice de rastreo.
- NOR = Número ordinal del componente clave ligero.
- PVARI = Porcentaje de variación de la variable manipulada para el cálculo del arreglo de ganancias relativas.
- DPC = Caída de presión en el condensador psi.

Una vez que se ha introducido la lectura completa de un módulo, - se regresa a la tarjeta #6 para introducir el siguiente y cuando se quiera terminar la simulación se hace ILEC = 2.



```
C  PROGRAMA CENTRAL
   DIMENSION IDENT(10),X(10),PC(10),TC(10),OMEGA(10),PM(10),COMPON(10
1),DIJ(10)
   COMMON/O M G/IDENT
   COMMON/CEF/PC,TC,OMEGA,DIJ
   COMMON/CAL/PM
   COMMON/INC/COMPON
   COMMON/DATAS/MP,NFA,DESL,RR,DPP,P,TDS,TBS,NOR,PVARI,DPC
   COMMON/RAS/IEQP
   NAMELIST/SYSTEM/MC,IDENT
   NAMELIST/COMP/X,FF
   NAMELIST/DATOS/FF,TF,IEQP
   NAMELIST/DATA/MP,NPA,DESL,RR,DPP,P,TDS,TBS,IEQP,NOR,PVARI,DPC
   READ(5,SYSTEM)
   CALL BDATOS(MC)
   WRITE(6,400)
400  FORMAT(4X,"N=",2X,"COMPONENTE",3X,"PM",11X,"TC",10X,"PC",11X,"FA",
+10X,"DIJ")
   16 DO 1 I=1,NC
   1  WRITE(6,15)I,COMPON(I),PM(I),TC(I),PC(I),OMEGA(I),DIJ(I)
   15  FORMAT(4X,I2,5X,A3,5(5X,F7.3))
   10  READ(5,100)ILEC,IP00,N1,N2,N3,N4
100  FORMAT(I1,I1,4I2)
   IF(ILEC.EQ.2)GO TO 11
   IF(N1.EQ.0)GO TO 5
   GO TO 6
   5  READ(5,COMP)
   F=FF+453.59237
   6  IF(N1.NE.0)CALL ARRAN (N1,NC,N2,P1,T1,F,Z1,H1,ITF1)
   IF(IMOD.EQ.5)GO TO 7
   READ(5,DATOS)
   P=PF/14.696
   T=((TF-32.)/1.8)+273.16
   IF(IMOD.EQ.1)GO TO 2
   IF(IMOD.EQ.2)GO TO 3
   IF(IMOD.EQ.4)GO TO 26
   IF(IMOD.NE.3)WRITE(6,300)
   4  CALL BUBBLE(NC,R2,N3,N4,P,T,X,F)
   GO TO 10
300  FORMAT("MODULO NO ESPECIFICADO")
   2  CALL DFASES(NC,N2,N3,N4,P,T,X,F)
   GO TO 10
   7  READ(5,DATA)
   DESL=DESL+453.59237
   DPP=DPP/14.696
```

```
P=P/14.696
DPC=DPC/14.696
TDS=((TDS-32.)/1.E)4273.16
TBS=((TBS-32.)/1.F)4273.16
CALL DESTIL(NC,N2,N3,N4,X,F,H1)
GO TO 10
3 CALL DEWPT(NC,N2,N3,N4,P,T,X,F)
GO TO 10
26 CALL PRUE(NC,N2,N3,P,T,X,F)
GO TO 10
11 CALL IMPRE(NC)
STOP
END
```

```
SUBROUTINE BDATOS (NC)
DIMENSION PM(10), PC(10), TC(10), OMEGA(10), DIJ(10,10), DIJD(10), IDENT
*(10), COMPON(10), PA(10), TA(10), OMEGE(10), PZ(10), COPPOA(10)
COMMON/ORG/IDENT
COMMON/CEF/PC, TC, OMEGA, DIJ
COMMON/INTER/DIJD
COMMON/CAL/PM
COMMON/INC/COMPON
DATA PA/45.8, 48.3, 42.0, 36.0, 37.5, 32.9, 33.3, 30.0, 29.9, 217.6/TA/190.
17, 305.4, 369.9, 408.1, 425.2, 460.4, 469.5, 498.1, 507.3, 647.1/OMEGA/G.00
27, 0.091, 0.145, 0.176, 0.193, 0.227, 0.251, 0.275, 0.296, 0.348/PZ/16.042.
330.068, 44.094, 58.12, 58.12, 72.146, 72.146, 86.172, 86.172, 18.016000000
4/COMPOA/'C1', 'C2', 'C3', 'IC4', 'NC4', 'IC5', 'NC5', 'IC6', 'NC6', 'N20'/
DO 1 I=1, NC
J=IDENT(I)
PC(I)=PA(J)
TC(I)=TA(J)
COMPON(I)=COMPO(J)
OMEGA(I)=OMEGA(J)
PM(I)=PZ(J)
1 CONTINUE
CALL D10(NC, DIJ)
RETURN
END
```

```
SUBROUTINE D10(NC, DIJ)
DIMENSION DIJ(10,10), DIJD(10), IDENT(10)
COMMON/INTER/DIJD
COMMON/ORG/IDENT
DO 1 I=1, NC
J=IDENT(I)
IF(J.EQ.10) GO TO 2
1 CONTINUE
GO TO 4
2 II=I
DO 3 I=1, NC
J=IDENT(I)
DIJ(I, II)=DIJD(J)
DIJ(II, I)=DIJ(I, II)
3 CONTINUE
4 RETURN
END
```

```
C SUBROUTINE ESTPAR (NC, X, AMEZ, BMEZ, P, T)
SUBROUTINA QUE ESTIMA LOS PARAMETROS DE LA ECUACION DE PENK-ROBINSON
DIMENSION PM(10), PC(10), TC(10), OMEGA(10), DIJ(10,10), X(10), A(10), B(
+10), ATC(10), VKA(10), TR(10), ALFA(10), AIJ(10,10)
COMMON/PROP/ATC, VKA, ALFA
COMMON/AA/AIJ
COMMON/CEF/PC, TC, OMEGA, DIJ
COMMON/CAL/PM
COMMON/ENT/BM, AP
COMMON/PAR/B
COMMON/RAS/IEQP
R=0.0820597
IF(IJ.GT.0)60 TO 22
DO 21 I=1,NC
B(I)=0.0778*R*TC(I)/PC(I)
ATC(I)=0.45724*(R)**2*(TC(I))**2/PC(I)
VKA(I)=0.37464+1.54226*OMEGA(I)-0.26992*OMEGA(I)**2
21 CONTINUE
22 BMEZ=0.
AMEZ=0.
DO 1 I=1,NC
TR(I)=T/TC(I)
RALFA=1.+VKA(I)*(1.-SQRT(TR(I)))
ALFA(I)=RALFA**2
A(I)=ALFA(I)*ATC(I)
BMEZ=BMEZ+X(I)*B(I)
1 CONTINUE
DO 3 I=1,NC
DO 2 J=1,NC
AIJ(I,J)=(1-DIJ(I,J))*SQRT(A(I)*A(J))
AMEZ=AMEZ+X(I)*X(J)*AIJ(I,J)
2 CONTINUE
3 CONTINUE
AM=AMEZ*P/(R*T)**2
BM=BMEZ*P/(R*T)
IJ=IJ+1
IF(IEQP.EQ.1)60 TO 5
GO TO 20
5 WRITE(6,100)AM, BM, PP(1), PC(1), TC(1), AMEZ, BMEZ, IJ
100 FORMAT(
20 RETURN
END
```

```
SUBROUTINE ZETA(AP,BM,ZZ,ITF)
DIMENSION AA(3),Z(3),X(3)
COMMON/RAS/IEQP
AA(1)=BM-1.0
AA(2)=AM-BM*(3.*BF+2.)
AA(3)=BM*(BM*BM+BF-AM)
Q=(3.*AA(2)-AA(1)**2)/9.
RR=(9.*AA(1)*AA(2)-27.*AA(3)-2.*AA(1)**3.)/54.
D=(Q**3.)+(RR**2)
IF(IEQP.EQ.1)GO TO 60
GO TO 61
60 WRITE(6,110)AM,BM,(AA(I),I=1,3),Q,RR,D
110 FORMAT(
61 IF(D)1,2,3
1 CORT=SQRT(RR**2/(-Q**3))
TETA=ACOS(CORT)
X(1)=2.*SQRT(-Q)*(COS(TETA/3.))
PIEN=3.141593/180.
RA120=120.*PIEN
RA240=240.*PIEN
X(2)=2.*SQRT(-Q)*(COS(TETA/3.+RA120))
X(3)=2.*SQRT(-Q)*(COS(TETA/3.+RA240))
IF(RR.LE.0.)GO TO 50
GO TO 5
50 DO 51 I=1,3
X(I)=-X(I)
51 CONTINUE
05 DO 52 I=1,3
Z(I)=X(I)-AA(I)/3.
52 CONTINUE
GO TO 4
2 S=(ABS(RR))**(1./3.)
IF(RR.LT.0.)S=-S
Z(1)=2.*S-(AA(1)/3.)
Z(2)=-S-(AA(1)/3.)
Z(3)=Z(2)
GO TO 4
3 IF(ABS(D).LT..0(DC5))GO TO 2
S=(ABS(RR+SQRT(D))**(1./3.))
T=(ABS(RR-SQRT(D))**(1./3.))
IF((RR+SQRT(D)).L1.0.)S=-S
```

```
IF((RR-SQRT(D)).LT.O.)Y=-T
Z(1)=S+T-(AA(1)/3.)
Z(2)=0.
Z(3)=0.
ZZ=Z(1)
IF(ITF.EQ.O.)GO TO 32
GO TO 10
4 IF(ITF.NE.O.)GO TO 30
ZZ=Z(1)
DO 6 J=2,3
IF(Z(J).GT.ZZ)ZZ=Z(J)
6 CONTINUE
32 IF(ZZ.LT.O.33)GO TO 9
GO TO 13
30 ZZ=Z(1)
DO 8 JJ=2,3
IF(Z(JJ).LE.O.)GO TO 8
IF(Z(JJ).LT.ZZ)ZZ=Z(JJ)
8 CONTINUE
10 IF(ZZ.LE.O.)GO TO 9
IF(ZZ.GT.O.33)GO TO 9
GO TO 13
9 ZZ=O.33
WRITE(6,100)
100 FORMAT(5X,"ADVERTENCIA SE TOMA Z=Z CRITICA",J)
13 IF(IEQP.EQ.1)WRITE(6,120)ZZ,ITF
120 FORMAT(
RETURN
END
```

```
SUBROUTINE FUGA(FIG,X,AMEZ,BMEZ,Z,NC)
DIMENSION FUG(1C),X(10),AIJ(10,10),B(10)
COMMON/AA/AIJ
COMMON/PAR/B
COMMON/ENT/BM,AF
COMMON/RAS/IEQP
C1=1.+SQRT(2.)
C2=2.-C1
C3=-(C2-C1)

IF(IEQP.EQ.1)GO TO 20
GO TO 21
20 WRITE(6,110)B(1),EM,BMEZ,Z
110 FORMAT(
21 IF(BM)67,67,69
69 IF(BM.GE.2)GO TO 67
80 DO 1 I=1,NC
FUG(I)=0.0
1 CONTINUE
70 ALN=-ALOG(Z-BM)
BLN=AM*ALOG((Z+(1*BM)/(Z+C2*BM)))/(BM*C3)
DO 2 K=1,NC
4 ALNFXP=ALN+(Z-1.)*B(K)/BMEZ
SUMA=0.0
DO 3 I=1,NC
IF(X(I))3,3,5
5 SUMA=SUMA+X(I)*AIJ(I,K)
3 CONTINUE
S=SUMA*2./AMEZ-E(K)/BMEZ
ALNFXP=ALNFXP-BLN+S
FUG(K)=EXP(ALNFXP)
2 CONTINUE
GO TO 68
67 WRITE(6,101)
WRITE(6,100)BMEZ,FM,Z
WRITE(6,102)
WRITE(6,103)(X(I),I=1,NC)
Z=0.33
GO TO 80
68 CONTINUE
IK=IK+1
IF(IEQP.EQ.1)GO TO 23
GO TO 200
23 WRITE(6,110)FUG(1),C1,C2,C3,ALN,BLN,ALNFXP,S,IK
100 FORMAT(10X,'BMEZ,EM,Z,SON',3E15.4)
101 FORMAT(/10X,'LOS CALCULOS SON IMPOSIBLES. 2<6M Z=2C+ '/')
102 FORMAT(10X,'LAS FRACCIONES MOL SON',/)
103 FORMAT(10X,F7.4)
100 RETURN
END
```

```
SUBROUTINE MENTAL (NC, P, T, X, H, Z)
DIMENSION ATC(10), VKA(10), ALFA(10), PM(10), PC(10),
*TC(10), OMEGA(10), BIIJ(10, 10), X(10)
COMMON /PROP/ ATC, VKA, ALFA
COMMON /ENT/ BM, AP
COMMON /CEF/ PC, TC, OMEGA, BIIJ
COMMON /CAL/ PM
R=0.0820597
DADT=0.
CALL ESTPAR (NC, X, /MEZ, BMEZ, P, T)
DO 1 I=1, NC
DO 2 J=1, NC
VAR2=ALFA(I)+ATC(I)+ATC(J)/(TC(J)+T)
VARQ=-SQRT(VAR2)*VKA(J)
VAR3=ALFA(J)+ATC(I)+ATC(J)/(TC(I)+T)
VARP=-SQRT(VAR3)*VKA(I)
DADT=DADT+(X(I)*X(J)*(1-BIIJ(I, J))/2.)*(VARQ+VARP)
2 CONTINUE
1 CONTINUE
DADTT=DADT
BMULT1=(SQRT(2.)+1.)*BM
BMULT2=(1-SQRT(2.))*BM
TMULT=ALOG((2+BMULT1)/(2+BMULT2))
TPOR=(T*DADTT-AP*Z)*TMULT/(2.*SQRT(2.)*BMEZ)
DH=R*T*(Z-1.)+TPOR
CALL HENTID (NC, T, HID)
H=HID+(DH*.0961(4 5*453.59237)
RETURN
END
```



```
SUBROUTINE HENTID(MC,T,HID)
DIMENSION HFOR(10),AH(10),BH(10),CH(10),DH(10),IDENT(10),X(10),
*HF06(10),AG(10),BE(10),CE(10),DE(10)
COMMON/ORG/IDENT
COMMON/COMP/X
DATA HF06/-17.85,-20.24,-24.82,-32.15,-30.15,-36.52,-35.,-41.66,-3
*9.96,-57.8/AG/4.558,1.292,-1.009,-.332,2.266,-2.275,-.866,-2.524,-
*1.054,7.701/BG/.01245,.04254,.07315,.09189,.07913,0.121,0.1164,0.1
*477,.139,.4595E-01/CG/.286E-05,-.1657E-04,-.3789E-04,-.4409E-04,-
*2647E-04,-.6519E-04,-.6163E-04,-.8533E-04,-.7449E-04,.2521E-05/DE/
*-.2703E-08,.2081E-08,.7678E-08,.6915E-08,-.0674E-08,.1367E-07,.126
*7E-07,.1931E-07,.1551E-07,-.859E-09/
ITER=ITER+1
IF(ITER.NE.1)GO TO 11
DO 10 J=1,MC
K=IDENT(J)
HFOR(J)=HF06(K)
AH(J)=AG(K)
BH(J)=BG(K)
CH(J)=CG(K)
DH(J)=DE(K)
10 CONTINUE
11 HIL=0.
DO 1 I=1,MC
IF(X(I).EQ.0.)GO TO 1
CPP=X(I)*(AH(I)*(1-298.)+BH(I)*(T**2-298.**2)/2.+CH(I)*(T**3-298.
*1**3)/3.+DH(I)*(T**4-298.**4)/4.)
HIL=HIL+CPP+(HFOR(I)*X(I))
1 CONTINUE
HID=HIL*453.59237/252.
RETURN
END
```

```
SUBROUTINE PRUE(NC,N2,N3,P,T,X,F)
DIMENSION FIL(10),X(10),FIV(10)
COMMON/ENT/BM,AP
CALL ESTPAR(NC,X,AMEZ,BMEZ,P,T)
CALL ZETA(AH,BM,ZV,0)
CALL FUGA(FIV,X,AMEZ,BMEZ,ZV,NC)
CALL MENTAL(NC,F,T,X,HV,ZV)
CALL ARRAN(N3,NC,X,1,P,T,F,ZV,HV,0)
CALL ZETA(AH,BM,ZL,1)
```

```
CALL FUGA(FIL,X,AMEZ,BMEZ,ZL,NC)
CALL MENTAL(NC,P,T,X,HL,ZL)
CALL ARRAN(N2,NC,1,1,P,T,F,ZL,HL,1)
RETURN
END
```

```
SUBROUTINE ARRAN(N1,NC,Y, JT,P,T,F,Z,H,ITF)
DIMENSION XX(10,10),X(10),PG(10),TG(10),FG(10),NE(10),HG(10),ZG(10)
*)ITFG(10),PM(10),DEN(10),PMM(10)
COMMON/JIN/XX,PG,TG,FG,ICORR,NE,HG,ZG,ITFG,ICONT,PMM,DEN
COMMON/CAL/PM
IF(JT.EQ.1)GO TO 1
DO 2 I=1,ICORR
IF(NE(I).EQ.N1)GO TO 10
2 CONTINUE
10 DO 11 J=1,NC
X(J)=XX(I,J)
11 CONTINUE
P=PG(I)/14.696
T=((TG(I)-32.)/1.8)+273.16
F=FG(I)*453.59237
H=HG(I)
Z=ZG(I)
ITF=ITFG(I)
GO TO 3
1 IF(N1.EQ.0)GO TO 3
ICORR=ICORR+1
ICONT=ICONT+1
PMNT=0.
DO 4 J=1,NC
PMNT=PMNT+X(J)*PM(J)
XX(ICORR,J)=X(J)
4 CONTINUE
PG(ICORR)=P*14.696
TG(ICORR)=(T-273.16)*1.8+32.
FG(ICORR)=F/453.59237
HG(ICORR)=H
ZG(ICORR)=Z
ITFG(ICORR)=ITF
PMM(ICORR)=PMMT
DEN(ICORR)=P*PMNT+28.31(05/(2*.0820597*T+453.59237)
NE(ICORR)=N1
IF(ICONT.EQ.5)GO TO 3(
GO TO 3
30 CALL IMPRE(NC)
ICONT=0
IF(ICORR.EQ.10)ICORR=C
3 RETURN
END
```

```
SUBROUTINE IMPRE(IC)
DIMENSION XX(10,1),PG(10),TG(10),FG(10),COMPON(10),NE(10),HG(10),
*ZG(10),ITFG(10),PPM(10),DEN(10)
COMMON/JIN/XX,PE,IG,FG,ICORR,NE,HG,ZG,ITFG,ICONT,PPM,DEN
COMMON/INC/COMPON
IN=ICORR-ICONT+1
WRITE(6,100)(NE(I),I=IN,ICORR)
100 FORMAT(1H1,3(/),5,'CORRIENTE NO.',11X,5(6X,12,4X))
DO 1 I=1,MC
1 WRITE(6,200)COMPON(I),(XX(J,I),J=IN,ICORR)
200 FORMAT(9X,A3,12),5(6X,F7.3))
WRITE(6,300)(PG(I),I=IN,ICORR)
WRITE(6,400)(TG(I),I=IN,ICORR)
WRITE(6,500)(FG(I),I=IN,ICORR)
WRITE(6,540)(PPM(I),I=IN,ICORR)
WRITE(6,550)(DEN(I),I=IN,ICORR)
WRITE(6,510)(ZG(I),I=IN,ICORR)
WRITE(6,520)(HG(I),I=IN,ICORR)
WRITE(6,530)(ITFG(I),I=IN,ICORR)
300 FORMAT(4X,'PRESION(PSIA)',11X,5(6X,F7.3))
400 FORMAT(4X,'TEMPERATURA(GF)',9X,5(6X,F7.3))
500 FORMAT(4X,'FLUJO(LBMOL/H)',10X,5(6X,F7.3))
510 FORMAT(4X,'FACTOR DE COMPRESIBILIDAD',1X,5(6X,F7.3))
520 FORMAT(4X,'ENTALPIA(BTU/LBMOL)',5X,5(3X,F10.0))
530 FORMAT(4X,'FASE 0=V,1=L,2=MEZ',6X,5(8X,I1,4X))
540 FORMAT(4X,'PESO MOLECULAR',10X,5(5X,F8.4))
550 FORMAT(4X,'DENSIDAD(LB/FT3)',7X,5(6X,F7.4))
RETURN
END
```

```
SUBROUTINE BUBBLE (NC,N2,N3,N4,P,T,X,F)
DIMENSION FIV(10),XL(10),X(10),VV(10),FIL(10),CKB(10)
COMMON/ALIM/VAP
COMMON/ENT/BM,AM
COMMON/RAS/IEQP
COMMON/SMITZ/CKE
IT=1
JT=1
52 CALL ESTPAR(NC,1,AMEZ,BMEZ,P,T)
DO 3 I=1,NC
FIV(I)=1.
XL(I)=X(I)
3 CONTINUE
CALL ZETA(AM,BM,ZL,1)
CALL FUGA(FIL,XL,AMEZ,BMEZ,ZL,NC)
50 SVV=0.
DO 1 I=1,NC
YV(I)=FIL(I)*XL(I)/FIV(I)
SVV=SVV+YV(I)
1 CONTINUE
IF(IT.EQ.1)GO TO 10
IF(ABS(SVV-VSY).LE..001)GO TO 11
IF(IT.EQ.50.)GO TO 12
10 DO 2 I=1,NC
YV(I)=YV(I)/SVV
2 CONTINUE
IF(IEQP.EQ.1)GO TO 30
GO TO 31
30 WRITE(6,110)VSY,SVV,FIL,FIV,T,IT,JT
110 FORMAT(
31 VSY=SVV
CALL ESTPAR(NC,VV,AMEZ,BMEZ,P,T)
CALL ZETA(AM,BM,ZV,0)
CALL FUGA(FIV,VV,AMEZ,BMEZ,ZV,NC)
IT=IT+1
GO TO 50
```

```
11 IF(ABS(SYV-1.)).LE..00001)GO TO 13
   IF(JT.EQ.1)GO TO 32
51 IF(JT.EQ.50.)GO TO 12
   JT=JT+1
   PEND=(SYV-SYVV)/(T-TV)
   TV=T
   SYVV=SYV
   T=((1.-SYV)/PEND)+T
   GO TO 52
32 TV=T
   SYVV=SYV
   REG=1.1
   IF(SYV.GT.1.)REG=1./REG
   T=T*REG
   JT=JT+1
   GO TO 52
12 WRITE(6,100)T,SYV
100 FORMAT(1H1,10(/),25X,"NO CONVERGE LA TEMPERATURA DE BURBUJA",2(/),
+25X,"ULTIMA SUPOSICION",2(/),25X,"T=",F8.0,5X,"ERROR=",F8.0)
13 DO 80 I=1,NC
   CKB(I)=FIL(I)/FIV(I)
80 CONTINUE
   CALL HENTAL(NC,P,T,XL,H2,ZL)
   CALL HENTAL(NC,F,T,YV,H4,ZV)
   CALL ARRAN(N2,NC,3L,1,P,T,F,ZL,H2,1)
   CALL ARRAN(N3,NC,M,1,P,T,F,ZL,H2,1)
   FV=0.
   CALL ARRAN(N4,NC,TV,1,P,T,FV,ZV,H4,0)
   VAP=0.
   RETURN
END
```

```
SUBROUTINE DEMPT(NC,N2,N3,N4,P,T,X,F)
DIMENSION FIL(10),XV(10),X(10),FIV(10),YL(10),CKD(10)
COMMON/ALIM/VAP
COMMON/ENT/BR,AP
COMMON/RAS/IEQP
COMMON/SMIT1/CKD
IT=1
JT=1
60 CALL ESTPAR(NC,X,AMEZ,BMEZ,P,T)
DO 3 I=1,NC
FIL(I)=1.
XV(I)=X(I)
3 CONTINUE
CALL ZETA(AM,BM,ZV,0)
CALL FUGA(FIV,XV,AMEZ,BMEZ,ZV,NC)
50 SYL=0.
DO 1 I=1,NC
YL(I)=FIV(I)+XV(I)/FIL(I)
SYL=SYL+YL(I)
1 CONTINUE
IF(IT.EQ.1)GO TO 10
IF(ABS(SYL-CLSY).LE..001)GO TO 11
IF(IT.EQ.50)GO TO 12
10 DO 2 I=1,NC
YL(I)=YL(I)/SYL
2 CONTINUE
IF(IEQP.EQ.1)GO TO 4
GO TO 5
4 WRITE(6,200)SYL,CLSY,FIL,FIV,T,IT,JT
200 FORMAT()
5 CLSY=SYL
CALL ESTPAR(NC,YL,AMEZ,BMEZ,P,T)
CALL ZETA(AM,BM,ZL,1)
CALL FUGA(FIL,YL,AMEZ,BMEZ,ZL,NC)
IT=IT+1
GO TO 50
11 IF(ABS(SYL-1.).LE..00001)GO TO 13
IF(JT.EQ.1)GO TO 20
```

```
15 IF(JT.EQ.50)GO TO 12
   JT=JT+1
   PEND=(SYL-SYLV)/(1-TV)
   TV=T
   SYLV=SYL
   T=((1.-SYL)/PEND)+T
   GO TO 60
20 TV=T
   SYLV=SYL
   REG=1.1
   IF(SYL.GT.1)REG=1./REG
   T=T*REG
   JT=JT+1
   GO TO 60
12 WRITE(6,100)T,SYL
100 FORMAT(1H1,5(/),25X,"NO CONVERGE LA TEMPERATURA DE ROCIO",2(/),25X
  +,"ULTIMA SUPOSICION",2(/),25X,F8.0,5X,F8.0)
13 FL=0.
   DO 80 I=1,NC
   CKD(I)=FIL(I)/FIV(I)
80 CONTINUE
   CALL MENTAL(NC,P,T,XV,H2,ZV)
   CALL MENTAL(NC,P,T,YL,H3,ZL)
   CALL ARRAN(N2,NC,YV,1,P,T,F,ZV,H2,0)
   CALL ARRAN(N3,NC,YL,1,P,T,FL,ZL,H3,1)
   CALL ARRAN(N4,NC,YV,1,P,T,F,ZV,H2,0)
   VAP=1.
   RETURN
END
```



```
SUBROUTINE DFASES (NC,N2,N3,N4,P,T,Z,F)
DIMENSION FIV(10),XL(10),Z(10),CK(10),FIL(10),YV(10)
COMMON/ENT/BM,AP
COMMON/RAS/IEQP
COMMON/ALIM/VAP
IT=1
JT=1
CALL ESTPAR(NC,Z,AMEZ,BMEZ,P,T)
CALL ZETA(AM,BM,ZL,1)
CALL FUGA(FIL,Z,AMEZ,BMEZ,ZL,NC)
DO 1 I=1,NC
FIV(I)=1.
1 CONTINUE
2 SYV=0.
DO 3 I=1,NC
YV(I)=FIL(I)*Z(I)/FIV(I)
SYV=SYV+YV(I)
3 CONTINUE
IF(IT.EQ.1)GO TO 4
IF(ABS(SYV-VSY).LE..0001)GO TO 5
IF(IT.EQ.50)GO TO 6
4 DO 7 I=1,NC
YV(I)=YV(I)/SYV
7 CONTINUE
CALL ESTPAR(NC,YV,AMEZ,BMEZ,P,T)
CALL ZETA(AM,BM,ZV,0)
CALL FUGA(FIV,YV,AMEZ,BMEZ,ZV,NC)
IT=IT+1
VSY=SYV
GO TO 2
5 FB=0.
DO 8 I=1,NC
CK(I)=FIL(I)/FIV(I)
8 FB=FB+Z(I)*CK(I)
IF(IEQP.EQ.1)WRITE(6,200)(CK(I),I=1,NC),ZL,ZV
FBFT=FB-1.
CALL ESTPAR(NC,Z,AMEZ,BMEZ,P,T)
```

```
CALL ZETA(AM,BM,ZV,0)
CALL FUGA(FIV,2,APEZ,BMEZ,ZV,NC)
DO 17 I=1,NC
FIL(I)=1.
17 CONTINUE
18 SYL=0.
DO 19 I=1,NC
XL(I)=FIV(I)+Z(I)/FIL(I)
SYL=SYL+XL(I)
19 CONTINUE
IF(JT.EQ.1)GO TO 20
IF(ABS(SYL-SYLV).LE..0001)GO TO 21
IF(JT.EQ.50)GO TO 6
20 DO 22 I=1,NC
XL(I)=XL(I)/SYL
22 CONTINUE
CALL ESTPAR(NC,XL,AMEZ,BMEZ,P,I)
CALL ZETA(AM,BM,ZL,1)
CALL FUGA(FIL,XL,AMEZ,BMEZ,ZL,NC)
JT=JT+1
SYLV=SYL
GO TO 18
21 FR=0.
DO 23 I=1,NC
CK(I)=FIL(I)/FIV(I)
FR=FR+Z(I)/CK(I)
23 CONTINUE
```

```
IF(IEQP.EQ.1)WRITE(6,200)(CK(I),I=1,NC),ZL,ZV
FRFT=FR-1.
IF(FBFT.GT.0.)GO TO 9
ITF=1
VAP=0.
CALL MENTAL(NC,F,T,Z,H2,ZL)
CALL ARRAN(N2,NC,I,1,P,T,F,ZL,H2,ITF)
CALL ARRAN(N3,NC,Z,1,P,T,F,ZL,H2,ITF)
GO TO 100
9 IF(FRFT.GT.0.)GO TO 10
ITF=0
VAP=1.
CALL MENTAL(NC,F,T,Z,H4,ZV)
CALL ARRAN(N2,NC,I,1,P,T,F,ZV,H4,ITF)
CALL ARRAN(N4,NC,Z,1,P,T,F,ZV,H4,ITF)
GO TO 100
10 VAP=1.0
KT=1
11 SUMX=0.
DXL=0.
DO 12 I=1,NC
FAC=1-VAP*(1-CK(I))
XL(I)=Z(I)/FAC
SUMX=SUMX+XL(I)
DXL=DXL+XL(I)*(1-CK(I))/FAC
12 CONTINUE
PBV=SUMX-1.
IF(ABS(PBV).LE..0001)GO TO 13
IF(KT.GT.50)GO TO 30
VAP=VAP-PBV/DXL
KT=KT+1
DO 14 I=1,NC
14 YV(I)=CK(I)*XL(I)
```

```
GO TO 11
13 CALL ESTPAR(NC,XL,AMEZ,BMEZ,P,T)
   CALL ZETA(CM,BM,ZL,7)
   CALL FUGA(FIL,XL,AMEZ,BMEZ,ZL,NC)
   CALL ESTPAR(NC,YV,AMEZ,BMEZ,P,T)
   CALL ZETACM,BM,ZV,0)
   CALL FUGA(FIV,YV,AMEZ,BMEZ,ZV,NC)
   DO 15 I=1,NC
   CK(I)=FIL(I)/FIV(I)
15 CONTINUE
   FV=F+VAP
   FL=F-FV
   IF(IEOP.EQ.1)WRITE(6,200)(CK(I),I=1,NC),ZL,ZV
   CALL MENTAL(NC,P,T,XL,H3,ZL)
   CALL MENTAL(NC,F,T,YV,H4,ZV)
   H2=H3+H4
   ZFA=0.
   CALL ARRAN(N2,NC,1,1,P,T,F,ZFA,H2,2)
   CALL ARRAN(N3,NC,ZL,1,P,T,FL,ZL,H3,1)
   CALL ARRAN(N4,NC,YV,1,P,T,FV,ZV,H4,0)
   GO TO 100
6 WRITE(6,201)
201 FORMAT(5X,"NO CONVERGE LA NORMALIZACION")
200 FORMAT(5X,"K(I)S, ZETA Y ZETA V",/,5X,12(1X,F7.4))
30 WRITE(6,202)VAP,SUMX,PBV
202 FORMAT(6,202)VAP,SUMX,PBV,SON",3(1X,F7.4))
100 RETURN
END
```

```
      SUBROUTINE DESTIL (NC,N2,N3,N4,Z,F,HAL)
C   METODO CORTO DE SMITP BRINKLEY
      DIMENSION Z(10),XI(10),XB(10),B(10),CKD(10),CKB(10),A(10),CKDM(10)
      1,CKBM(10),SN(10),P(10),FI(10),DBX(10),DXD(10),SM(10),FDL(10),FBV(1
      20)
      COMMON/DATAS/NP,NFA,DESL,RR,DPP,P,TDS,TBS,NOR,PVAFI,DPC
      COMMON/ALIM/VAP
      COMMON/ENT/BM,AP
      COMMON/SMITZ/CKE
      COMMON/SMIT1/CKD
      COMMON/RAS/IEQP
C   BALANCE INTERNO
      VAP1=VAP
      NPAG=NP-NPA+1
      16 DOL=DESL*RR
      VB=DESL+DOL
      VF=VB-(F+VAP1)
      FL=DOL+(F*(1.-VAP1))
      PF=(NP+DPP)+P
      PCOM=P-DPC
      CI=-43.15
C   COMPOSICION SUPLESTA EN DOMOS
C   PRIMER ESTIMADO DE LAS CONSTANTES DE EQUILIBRIO
C   CORRIENTE DE BOPOS
      36 CALL ESTPAR(NC,Z,APEZ,BMEZ,P,TDS)
      CALL ZETA(AM,BM,ZCL,1)
      CALL FUGA(FDL,Z,APEZ,BMEZ,ZDL,NC)
      CALL ZETA(AM,BM,ZDV,0)
      CALL FUGA(FDV,Z,APEZ,BMEZ,ZDV,NC)
      DO 20 I=1,NC
      20 CKD(I)=FDL(I)/FBV(I)
C   CORRIENTE DE FONDOS
      CALL ESTPAR(NC,Z,APEZ,BMEZ,PF,TBS)
      CALL ZETA(AM,BM,ZFL,1)
      CALL FUGA(FDL,Z,APEZ,BMEZ,ZFL,NC)
      CALL ZETA(AM,BM,ZFV,0)
      CALL FUGA(FDV,Z,APEZ,BMEZ,ZFV,NC)
      DO 21 I=1,NC
      21 CKB(I)=FDL(I)/FBV(I)
      TF=TDS+((TBS-TDS)*NPA/NP)
      ICONT=0
      ICONI=0
      INDI=0
      GO TO 8
```

```

C   CALCULO DE LAS TEMPERATURAS DE ROCIO Y BURBUJA
5   IF(INDI.LE.1)GO TC 7
    CALL DEMPT(NC,0,0,0,P,TDS,XD,DCALC)
    CALL BUBBLE(NC,C,C,G,FF,TBS,XB,BCALC)
7   E=(DESL-DCALC)/DESL
    IF(ABS(E).LE..0005)GO TO 11
    IF(ICONT.GT.50)GO TO 12
90  DE=EV-E
    EV=E
    DT=TFV-TF
    TFV=TF
    TF=TF-((E*DT)/DE)
    IF(ICONT.LE.1)TF=TFV+0.99
C   CALCULO DEL FACTOR DE SEPARACION
8   TDM=0.5*(TDS+TF)
    TBM=0.5*(TBS+TF)
    DCALC=0.
    BCALC=0.
    DO 9 I=1,NC
      B(I)=ALOG(CKB(I)/CKB(I))/((1./(TDS+CI))- (1./(TBS+CI)))
      A(I)=ALOG(CKB(I))-(B(I)/(TBS+CI))
      CKDM(I)=EXP(A(I)+ (B(I)/(TDM+CI)))
      CKBM(I)=EXP(A(I)+ (B(I)/(TBM+CI)))
      SM(I)=CKDM(I)*VF/ROL
      SH(I)=CKBM(I)*VF/FL
      H(I)=DOL/FL
      IF(VAP1.LE.0.5)H(I)=H(I)*CKDM(I)/CKBM(I)
      FNU=(1-(SM(I)**(NPA)))+(RR*(1.-SM(I)))
      FDEN=FNU+(H(I)*(SN(I)**(NPA))*(1.- (SM(I)**(NPA))))*(1.-SM(I))
1(I))
      FI(I)=FNU/FDEN
      BXB(I)=F+Z(I)*FI(I)
      DXD(I)=F+Z(I)-BXB(I)
      DCALC=DCALC+DXD(I)
      BCALC=BCALC+BXB(I)
9   CONTINUE
    DO 10 I=1,NC
      XD(I)=DXD(I)/DCALC
10  XB(I)=BXB(I)/BCALC
      ICONT=ICONT+1
      ICONI=ICONI+1
      IF(IEOP.EQ.2)GO TC 35
      GO TO 5
35  WRITE(6,100)DCALC,XD,XB,TDS,TBS,TF
100 FORMAT(
GO TO 5
12  WRITE(6,110)
110 FORMAT(15X,"NO CONVERGE LA TEMPERATURA DEL PLATO DE ALIMENTACION")
GO TO 13
11  INDI=INDI+1
    IF(INDI.GT.2)GO TO 50
    RELT=(TF-TDS)/(TBS-TDS)
    TDVI=TDS
    TBVI=TBS

```

```

CALL DEMPT(NC,0,0,0,P,TDS,XD,DCALC)
CALL BUBBLE(NC,0,0,0,PF,TBS,XB,BCALC)
TF=(TDS+RELT*(TBS-TDS))*4*(TDVI-TDS)+(TBVI-TBS)
ICOMI=0
GO TO 8
50 IF(IGAN.EQ.1)GO TO 37
   IF(IGAN.EQ.2)GO TO 38
   IF(IGAN.EQ.3)GO TO 40
   IF(IGAN.EQ.4)GO TO 41
   IF(IGAN.EQ.5)GO TO 43
CALL ESTPAR(NC,XD,AMEZ,EMEZ,P,TDS)
CALL ZETA(AM,BM,ZD,0)
CALL MENTAL(NC,P,TDS,XD,HDO,ZD)
TDCQ=TDS*.95
CALL BUBBLE(NC,0,0,0,PCCN,TDCQ,XD,DCALC)
CALL ESTPAR(NC,XD,AMEZ,EMEZ,PCON,TDCQ)
CALL ZETA(AM,BM,ZDC,1)
CALL MENTAL(NC,PCON,TCC,XD,HDOC,ZDC)
CALL ARRAN(NZ,NC,XD,1,P(ON,TDCQ,DCALC,ZDC,HDOC,1)
CALL ESTPAR(NC,XB,AMEZ,EMEZ,PF,TBS)
CALL ZETA(AM,BM,ZF,1)
CALL MENTAL(NC,PF,TBS,XE,HFO,ZF)
CALL ARRAN(N3,NC,XB,1,PF,TBS,BCALC,ZF,HFO,1)
QC=(HDO-HDOC)*VD/453.59237
QR=QC+(HDOC*DCALC+HFO*B(CALC-F*HAL))/453.59237
VDI=VD/453.59237
DOLI=DOL/453.59237
VFI=VF/453.59237
FLI=FL/453.59237
TDSI=(TDS-273.16)*1.8+32
TBSI=(TBS-273.16)*1.8+32
TFI=(TF-273.16)*1.8+32
TDCOI=(TDCQ-273.16)*1.8+32
PI=P*14.696
PCONI=PCON*14.696
PFI=PF*14.696
WRITE(6,120)ICONT,VDI,D(LI,VFI,FLI,PI,PFI,PCONI,TDCOI,TDSI,TFI,TBS
11,QC,QR
120 FORMAT(1H1,///,10X,'RESULTADOS DEL MODULO DE DESTILACION
9      ',///,15X,'NUMERO DE ITERACIONES',12X,I2,///,15X,'FLUJOS INTE
1RNOS (LBMOL/H)',///,20X,'VAPOR DE DOMOS',10X,F10.3,///,20X,'LIQUIDO
2 DE DOMOS',8X,F10.3,///,20X,'VAPOR DE FONDOS',9X,F10.3,///,20X,'LIQU
3IDO DE FONDOS',7X,F10.3,///,15X,'PRESIONES (PSIA)',///,20X,'DOMOS',1
49X,F10.3,///,20X,'FONDOS',18X,F10.3,///,20X,'CONDENSADOR ',12X,F10.3
5,///,15X,'TEMPERATURAS (EF)',///,20X,'CONDENSADOR',13X,F10.3,///,20X,
6'DOMOS',19X,F10.3,///,20X,'ALIMENTACION',12X,F10.3,///,20X,'FONDOS',
718X,F10.3,///,15X,'CARGAS TERMICAS (BTU/H)',///,20X,'CONDENSADOR',1
82X,F10.1,///,20X,'REHERVIDOR',13X,F10.1)
IF(N4.NE.0)GO TO 14
GO TO 13
14 DOLDIS=DOL
   DESDIS=DCALC
   VDDIS=VD
   VFDIS=VF
   FLDIS=FL
   BDIS=BCALC
   XDDIS=XD(NOR)

```

```
XBDIS=XB(NOR)
C CALCULO DE LOS FLUJCS INTERNOS
DOL=DOL+PVARI
IGAN=7
DESL=VDDIS-DOL
FL=DOL+(F*(1-VAP1))
GO TO 36
37 GANUM=XD(NOR)-XBDIS
VFB=VF
XBV=XB(NOR)
VF=FL-BDIS
VD=VF+(F*VAP1)
DESL=VD-DOL
IGAN=2
GO TO 36
38 IF(ABS(XB(NOR)-XBDIS).LE-.001)GO TO 39
PEND=(XB(NOR)-XBV)/(VF-VFB)
XBV=XB(NOR)
VFB=VF
VF=VF-((XB(NOR)-XBDIS)/PEND)
VD=VF+(F*VAP1)
DESL=VD-DOL
GO TO 36
39 GADEN=XD(NOR)-XBDIS
GARV=GANUM/GADEN
WRITE(6,130)DESL,ECALC,DOL,FL,VF,VD,GANUM,GADEN,GARV,ICONT
130 FORMAT(
C CALCULO DEL ARREGLO D,V
DESL=DESDIS+PVARI
VD=VDDIS
DOL=VD-DESL
```



```
FL=DOL*(F*(1-VAF1))
VF=VFDIS
IGAN=3
GO TO 36
40 GANUM=XD(NOR)-XBDIS
VFV=VF
XBV=XB(NOR)
VF=FL-BDIS
VD=VF*(F+VAP1)
DOL=VD-DESL
FL=DOL*(F*(1-VAF1))
IGAN=4
GO TO 36
41 IF(ABS(XB(NOR)-XBDIS).LE..001)GO TO 42
PEND=(XB(NOR)-XEV)/(VF-VFV)
XBV=XB(NOR)
VFV=VF
VF=VF-((XB(NOR)-XBDIS)/PEND)
VD=VF*(F+VAP1)
DOL=VD-DESL
FL=DOL*(F*(1-VAF1))
GO TO 36
42 GADE=XD(NOR)-XDDIS
GADV=GANUM/GADE
WRITE(6,130)DESL,FCALC,DOL,FL,VF,VD,GANUM,GADE,GADV,ICONT
C CALCULO DEL ARREGLO R,B
DESL=DESDIS
DOL=DOLDIS*PVAR1
VD=DOL+DESL
VF=VD-(F+VAP1)
FL=DOL*(F*(1-VAP1))
IGAN=5
GO TO 36
43 GANUM=XD(NOR)-XEDIS
GARB=GANUM/GABE
WRITE(6,140)DESL,FCALC,DOL,FL,VF,VD,GANUM,GABE,GARB,ICONT
WRITE(6,140)NOR,GARV,GADV,GARB
140 FORMAT(1H1,///,3X,"ANALISIS DE GANANCIAS RELATIVAS",///,37X,"COMP
10SICION DEL COMPONENTE NO.",12,///,26X,"VARIABLES MANIPULADAS",4X,
2"GANANCIA RELATIVA",//,30X,"REFLUJO-VAPOR",8X,"LXD-R",3X,F8.2,//,3
30X,"DESTILADO-VAPOR",7X,"LXD-B",3X,F8.2,//30X,"REFLUJO-FONDOS",8X,
4"LXD-R",3X,F8.2)
13 RETURN
END
```

EBBB\*CFGDATA1) .PENGDATOS(6)

```

1  @RUN CFGD10.E1222/EC8CEG, EC80671,3,200 . EDUARDO FIGUEROA .EXT 2410
2  @LOG SIPPI AB REFTES1222CF
3  @PRT,5 EBBB*CFGDATA.PENGDATOS
4  @XQT_EBBB@ABNHAIABS.CFGPE NG
5  @SISTEM NC=5,IDENT=3,4,5,6,7,$END
6  1300010708
7  $COMP X=.05,,15,,25,,2,,35,FF=100.,$END
8  $DATOS PF=12C.,TF=187.,$END
9  1501020301
10 @DATA NP=10.,NPA=5,DESL=8.9,PR=2.579,DPE=0.,P=120.,TDS=104.,
11 TBS=230.,IEQP=0,NOR=3,PVARI=1.01,DPC=0.,$END
12 2
13 @FIN.
```

@XQT\_EBBB@ABNHAIABS.CFGPE NG

N.	COMPONENTE	PH	YC	PC	FA	OIJ
1	C3	44.094	369.900	42.000	.145	.000
2	IC4	58.120	400.100	36.000	.176	.000
3	NC4	58.120	425.200	37.500	.193	.000
4	ICS	72.146	460.400	32.900	.227	.000
5	NCS	72.146	469.500	33.300	.251	.000

CORRIENTE NO.	1	7	8	2	3
C3	.050	.050	.143	.102	.000
IC4	.150	.150	.230	.293	.013
NC4	.250	.250	.307	.447	.062
ICS	.200	.200	.128	.084	.311
NCS	.350	.350	.191	.074	.614
PRESTION(P/PSIA)	120.000	120.000	120.000	120.000	120.000
TEMPERATURA (GF)	180.335	180.335	180.335	145.659	226.209
FLUJO(LBMOL/H)	100.000	100.000	.000	48.877	51.123
PESO MOLECULAR	65.1330	65.1330	60.6010	58.9022	71.0899
DENSIDAD (LB/FT3)	33.5037	33.5037	1.2685	33.4668	32.5937
FACTOR DE COMPRESIBILIDAD	.03396	.03396	.83459	.03251	.03556
ENTALPIA(BTU/LBMOL)	-8931.	-8931.	-604.	-8314.	-9302.
FASE 0=V, 1=L, 2=MEZ	1	1	0	1	1

RESULTADOS DEL MODULO DE DESILACION

NUMERO DE ITERACIONES ..... 28

FLUJOS INTERNOS (LBMOL/H)

VAPOR DE DOMOS ..... 175.013

LIQUIDO DE DOMOS ..... 126.113

VAPOR DE FONDOS ..... 175.013

LIQUIDO DE FONDOS ..... 226.113

PRESIONES (PSIA)

DOMOS ..... 120.000

FONDOS ..... 120.000

CONDENSADOR ..... 120.000

TEMPERATURAS (GF)

CONDENSADOR ..... 145.659

DOMOS ..... 164.776

ALIMENTACION ..... 208.552

FONDOS ..... 226.209

CARGAS TERMICAS (BTU/H)

CONDENSADOR ..... 1351110.5

REMERVIDOR ..... 1362362.1

ANALISIS DE GANANCIAS RELATIVAS

COMPOSICION DEL COMPONENTE NO. 3

VARIABLES MANIPULADAS	GANANCIA RELATIVA	
REFLUJO-VAPOR	LXD-R	14.08
DESTILADO-VAPOR	LXD-D	.56
REFLUJO-FONDOS	LXD-R	1.00