

00579.
1 lej

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

**FACULTAD DE QUIMICA
DEPARTAMENTO DE INGENIERIA QUIMICA
DIVISION DE ESTUDIOS DE POSGRADO**



**SOLUCION DE PROBLEMAS DE DESTILACION DE
MEZCLAS ALTAMENTE NO-IDEALES Y/O DE
CONVERGENCIA DIFICIL, APLICANDO EL
METODO DE BROYDEN-SCHUBERT**

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:
MAESTRO EN CIENCIAS
ESPECIALIDAD: INGENIERIA QUIMICA (PROCESOS)
P R E S E N T A

HUMBERTO CORTEZ CASILLAS

MEXICO, D. F.:

1984

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**



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

Se establece el modelo matemático para columnas de separación de etapas de equilibrio vapor-líquido al estado estacionario, en función de $NP(2NC+1)$ ecuaciones independientes. Los balances se hacen alrededor de cada plato, y las ecuaciones se -- agrupan por etapa. El sistema no-lineal resultante se resuelve por aplicación del Método de Broyden-Schubert.

La solución de los sistemas lineales que se tienen entre iteraciones, se obtiene aplicando eliminación Gaussiana con - pivoteo parcial por tamaño. El manejo de las matrices jaco-- biano, se hace utilizando técnicas adecuadas para matrices - dispersas.

Esta formulación se aplicó a 24 problemas típicos selectos, de donde se obtienen conclusiones importantes sobre la - aplicabilidad, estabilidad y convergencia del método. En todos los casos se presentan los enunciados de los problemas y los resultados obtenidos.

CONTENIDO

CAPÍTULO I. INTRODUCCIÓN.	1
I.1. <i>Objetivo.</i>	1
I.2. <i>Significado.</i>	3
I.3. <i>Nomenclatura del Capítulo I.</i>	3
CAPÍTULO II. ESTUDIO DE LA LITERATURA.	4
II.1. <i>Algoritmos que Usan Convergencia Secuencial.</i>	6
II.2. <i>Algoritmos que Resuelven 2NP Ecuaciones Simultáneamente.</i>	13
II.3. <i>Algoritmos que Resuelven NP(2NC+1) Ecuaciones Simultáneamente y Modificaciones.</i>	17
II.4. <i>El Algoritmo de Boston-Sullivan.</i>	22
II.5. <i>Nomenclatura del Capítulo II.</i>	24
CAPÍTULO III. MODELADO MATEMATICO,	26
III.1. <i>Modelado.</i>	28
III.2. <i>Casos Especiales.</i>	33
III.3. <i>Estructura del Jacobiano.</i>	39
III.4. <i>Protección Contra Flujos Negativos, Escalamiento de Variables y Funciones.</i>	40
III.5. <i>Nomenclatura del Capítulo III.</i>	44

CAPÍTULO IV. SOLUCIÓN DE ECUACIONES NO-LINEALES.	47
IV.1. Método de Broyden.	48
IV.2. Modificación de Schubert.	50
IV.3. Aproximación al Jacobiano.	51
IV.4. Selección de $\alpha^{(k)}$.	52
IV.5. Nomenclatura del Capítulo IV.	55
CAPÍTULO V. SOLUCIÓN DE ECUACIONES LINEALES.	57
V.1. Eliminación Gaussiana.	58
V.2. Pivoteo Parcial por Tamaño.	59
V.3. Escalamiento de Columnas y Renglones.	60
V.4. Descomposición Triangular.	60
V.5. La Variante de Crout.	62
V.6. La Variante de Cholesky.	65
V.7. Procedimiento Iterativo.	65
V.8. Nomenclatura del Capítulo V.	66
CAPÍTULO VI. TECNICAS PARA MANEJAR MATRICES DISPERSAS.	67
VI.1. Almacenamiento Estático.	69
VI.2. Almacenamiento Dinámico.	70
VI.3. Algoritmo para Obtener la Transpuesta Permutada de una Matriz Dispersa.	75

CAPÍTULO VII. PROBLEMAS RESUELTOS.	79
VII.1. Comentarios Adicionales.	81
VII.2. Ejemplos 1-11. Problemas de Destilación, Soluciones de Hidrocarburos.	83
VII.3. Ejemplos 12-17. Problemas de Destilación, Soluciones Altamente No-ideales.	116
VII.4. Ejemplos 18-24. Problemas de Absorción y Agotamiento.	134
 CAPÍTULO VIII. CONCLUSIONES.	 157
VIII.1. Recomendaciones.	158
 REFERENCIAS.	 161
 APÉNDICE A.	
Inicialización de Variables, Método I.	167
 APÉNDICE B.	
Inicialización de Variables, Método II.	169
 APÉNDICE C.	
Método Modificado de Thomas.	171

CAPÍTULO I INTRODUCCIÓN

1.1. *Objetivo.*

El desarrollo de este trabajo tiene como objetivo la -- programación y análisis del comportamiento del algoritmo -- "Almost-Band", con aplicación del método de Broyden-Schubert (Schubert, 1971), para resolver las NP(2NC+1) ecuaciones simultáneas que resultan del modelado de columnas de separación vapor-líquido, cuando se aplican en forma exacta métodos del tipo Newton-Raphson a problemas cuyas relaciones termodinámicas dependen de las composiciones.

Se hace una descripción y análisis breve de los métodos propuestos hasta la fecha. Se desarrollan las ecuaciones -- del modelo general de columna y se reportan los valores de -- referencia utilizados para escalar variables y funciones, -- así como el criterio de convergencia utilizado.

Se incluye un capítulo donde se muestra el planteamiento del Método de Broyden (1965) para resolver sistemas de -- ecuaciones no-lineales, y la modificación de Schubert (1971) en la aplicación de este método cuando se obtienen jacobianos de estructura dispersa. Se presenta también la técnica utilizada para evaluar el jacobiano y el criterio para selec

cionar un tamaño de paso adecuado para prevenir la divergencia.

El sistema de ecuaciones lineales que resulta a cada -- iteración, se resuelve por eliminación Gaussiana usando la -- variante de Cholesky (Stewart, 1973) con pivoteo parcial por tamaño, como lo recomienda Wilkinson (1965). Previamente se escalan los renglones para reducir los errores de redondeo. Adicionalmente se reportan las técnicas de almacenamiento usadas, así como un algoritmo para obtener la transpuesta permutada de matrices dispersas almacenadas en forma empacada.

Finalmente se presentan 24 problemas resueltos con este método. Estas pruebas se seleccionaron de dos fuentes: a) - de la literatura, y b) de una colección de problemas de aplicación industrial difíciles. Estos problemas incluyen columnas de destilación con condensador parcial o total, sin condensador, con o sin rehervidor, con alimentaciones múltiples y extracciones laterales; columnas de absorción y agotamiento, con o sin rehervidor, con intercambios térmicos y extracciones laterales, y con presaturador. También se probaron - problemas con soluciones altamente no ideales como son los - de destilación extractiva.

En los apéndices se muestra la forma de inicializar las variables de iteración.

1.2. Significado.

En este trabajo se muestra la aplicación satisfactoria de métodos del tipo cuasi-Newton, para resolver problemas de destilación, cuyas relaciones termodinámicas dependen fuertemente de composiciones, evitándose el cálculo analítico de las derivadas parciales y la evaluación del jacobiano a cada iteración. Este algoritmo, como otros que aplican el Método de Newton-Raphson a las formulaciones NP(2NC+1), requiere un gasto excesivo de memoria, sobre todo en casos que se tiene un gran número de componentes. Encuentra su mayor aplicación en problemas de convergencia difícil, como son los de destilación azeotrópica y extractiva, manejo de soluciones cerca del punto crítico como son las separaciones criogénicas en columnas desmetanizadoras y desetanizadoras, y cierto tipo de columnas agotadoras.

Por otra parte, estos esquemas son competitivos con otros planteamientos, cuando se tienen columnas con muchos platos y pocos componentes, debido a la forma de agrupar las ecuaciones del modelo matemático.

1.3. Nomenclatura.

NC - Número de componentes.

NP - Número total de etapas de equilibrio, incluyendo condensador y rehervidor.

CAPÍTULO II

ESTUDIO DE LA LITERATURA

Las columnas de separación de etapas de equilibrio son los equipos empleados más frecuentemente en plantas de refinación y petroquímica, ya sean de destilación, absorción, extracción u otras operaciones similares. Para su diseño adecuado es de gran importancia poder evaluar varias alternativas en forma rápida y precisa, requiriéndose entonces de métodos de cálculo rigurosos y confiables. Esto presenta un problema de cierta complejidad, ya que las ecuaciones que constituyen el modelo de una columna de separación son de naturaleza no-lineal, siendo entonces necesaria la aplicación de técnicas numéricas de tipo iterativo.

Gracias al gran desarrollo que se ha tenido en el campo de las computadoras en los últimos años, y a su extensa aplicación como herramienta de cálculo, ha sido posible la aparición de una variedad de métodos, capaces de simular las columnas o arreglos de columnas más sofisticadas. Esto se ha logrado también gracias al progreso obtenido en la predicción de propiedades termofísicas, empleándose actualmente correlaciones rigurosas y complejas.

Los procesos de separación vapor-líquido al estado es-

tacionario, están descritos por cinco conjuntos básicos de ecuaciones algebraicas independientes, las que deben satisfacerse simultáneamente para cada etapa. Estas son: ecuaciones de equilibrio (EQ), restricciones de suma de las fracciones molares, para las corrientes de líquido y vapor (FML y FMV), balances de material por componente (BMC) y balances de energía (BE). Frecuentemente se utilizan otros conjuntos de ecuaciones en combinación, o en lugar de algunos de los anteriores, como son: balances totales de material (BM), y restricciones de temperatura de burbuja (TB) y de rocío (TR). Como variables independientes se manejan -- los flujos totales de líquido y vapor; para ambos conjuntos, sus composiciones respectivas, y las temperaturas. También se utilizan ampliamente los flujos individuales por componente en lugar de las composiciones.

Los algoritmos para resolver problemas de separación de mezclas multicomponentes en columnas de múltiples etapas, varían en los métodos aplicados para resolver las ecuaciones de modelado. Los planteamientos más simples usan convergencia del tipo secuencial, es decir, las ecuaciones se van satisfaciendo por grupos. Se suponen temperaturas y -- flujos de vapor para toda la columna, y se calculan las -- constantes de equilibrio en cada etapa. Con esta información se resuelven las matrices tridiagonales que resultan --

de los BMC, para encontrar un conjunto de composiciones. -- Con éstas se corrige el perfil de temperaturas. Finalmente se calcula el nuevo perfil de flujos de vapor por medio de los BE.

Si las relaciones termodinámicas son independientes, o aproximadamente independientes de composiciones, las ecuaciones se reducen rigurosamente a $2NP$ ecuaciones simultáneas no-lineales, resolviéndose alguna función modificada de TB y los BE, para corregir al mismo tiempo un conjunto de los flujos totales o su relación, y temperaturas. Estos planteamientos aplican también los BMC para encontrar nuevos conjuntos de composiciones, resultando un esquema de -- cálculo muy similar al anterior.

El planteamiento más general resulta cuando se eliminan de la formulación los flujos totales, obteniéndose un sistema de $NP(2NC+1)$ ecuaciones no-lineales y lineales. Si los balances se hacen por etapa y las ecuaciones se agrupan también por etapa, al aplicar el Método de Newton-Raphson, se obtiene un jacobiano con una estructura fácil de resolver.

II.1. Algoritmos que Usan Convergencia Secuencial.

En la década de los treinta aparecieron los primeros métodos sistemáticos para el cálculo de columnas de destila

ción. Lewis y Matheson (1932) propusieron un método para resolver el problema de diseño. Posteriormente Thiele y Geddes (1933) hicieron ver la necesidad de disponer de métodos de cálculo que permitieran evaluar el comportamiento de una columna dada. Con este enfoque, propusieron un método que difiere del primero en variables de iteración seleccionadas. En el primer caso, las variables a converger son las contaminaciones permitidas en los productos, y en el segundo el perfil de temperaturas de la columna. Ambos métodos hacen los cálculos plato a plato, desde los dos extremos de la columna hasta el punto de alimentación. Su implementación en computadora los hace susceptibles a problemas de tipo numérico, haciéndolos inestables. Holland (1963) propuso la aplicación de un multiplicador, θ , seleccionado de forma tal que se cumpla el balance global por componente a cada iteración, además de otras técnicas numéricas adecuadas para estabilizar ambos métodos. Con esto se obtuvieron métodos adecuados para resolver problemas de destilación. Sin embargo, presentan los siguientes problemas: al manejar varias alimentaciones deben seleccionarse los puntos donde se van a juntar los balances de material, hechos desde ambos extremos de la columna, que normalmente se hacen en los platos de alimentación. Si se desea reducir los problemas de redondeo, no se deben usar el mismo punto para todos los

componentes. Las extracciones laterales ocasionan problemas similares, así como los componentes no distribuidos. Finalmente, para problemas del tipo absorción se observa que con vergen lentamente, o no lo hacen en muchos casos.

Amundson y Pontinen (1958) sugieren que el problema se reduce a resolver un conjunto de ecuaciones algebraicas, -- las cuales se pueden expresar en forma matricial. Las ecua ciones que hay que resolver en forma secuencial son los BMC y los BE para corregir X y V, conteniendo T como parámetro. En el cálculo de X se invierten las matrices que resultan - de los BMC, y para V se invierte la matriz de BE. Para cal cular las T se aplica el Método de Newton-Raphson a las -- ecuaciones TB. Estos autores al invertir las matrices ex-- plicitamente no aprovechan sus estructuras tridiagonal y bi diagonal para resolverlas. Esto los lleva a requerir una - gran cantidad de memoria, un alto consumo de tiempo de cál- culo y problemas de redondeo, lo que en ocasiones conduce a predecir composiciones negativas. Por otra parte, esta for mulación permite manejar fácilmente varias alimentaciones y extracciones laterales.

Friday y Smith (1964) establecen que la solución se en contrará de la toma de seis decisiones principales. La pri- mera y segunda se refieren a la forma de agrupar las ecua ciones y la secuencia de solución de éstas. La tercera con

siste en definir qué conjunto de ecuaciones se va a aplicar para determinar cada conjunto de variables. En esta parte se hace ver que para problemas de destilación las ecuaciones adecuadas para calcular \underline{T} y \underline{V} son \underline{TB} y \underline{BE} , respectivamente. Este arreglo recibe el nombre de método BP (cálculo de temperaturas por puntos de burbuja). Para problemas de absorción es más conveniente calcular \underline{V} por suma de los flujos individuales y \underline{T} con los \underline{BE} . Este esquema lo propusieron independientemente el primero de los autores, y Sujata (1962), recibiendo el nombre de Método SR (cálculo de los flujos totales por suma de los flujos individuales). La cuarta decisión se refiere al método numérico aplicado para resolver las matrices resultantes de los \underline{BMC} y obtener \underline{X} o \underline{f} . En esta parte se sugiere un método que involucra una serie de productos de los factores de agotamiento para cada etapa, donde no se efectúa ninguna resta en todo el planteamiento, eliminándose los problemas de redondeo, y donde no hay ninguna dificultad al manejar varias alimentaciones y extracciones laterales. Las decisiones quinta y sexta son la selección de los métodos numéricos necesarios para resolver las ecuaciones seleccionadas en los arreglos BP o SR, y encontrar los nuevos perfiles de \underline{V} y \underline{T} . Finalmente presentan un estudio de la región de convergencia de ambos métodos, observando que el método BP es estable y convergente -

cuando se manejan soluciones con una $\Delta_{DB} < 150^\circ F$ (Δ_{DB} es la diferencia entre las temperaturas de rocío y de burbuja de las alimentaciones). El método SR es estable cuando el número de etapas es menor a 9. Además se dan argumentos de tipo físico, explicando por qué el método BP no funciona para absorción y el método SR para destilación.

Wang y Henke (1966) plantearon un algoritmo en que las matrices tridiagonales que se obtienen en los BMC, se resuelven aplicando fórmulas recursivas que resultan al utilizar eliminación Gaussiana. De esta forma se aprovecha la estructura de las matrices tridiagonales, reduciéndose el tiempo de cálculo, el gasto de memoria y eliminando los problemas de redondeo. Las ecuaciones de TB se resuelven utilizando el método de Muller para evitar el cálculo de las derivadas necesarias en el algoritmo de Newton-Raphson ya que la solución se obtiene ajustando una serie de ecuaciones cuadráticas para cada temperatura.

Billingsley (1966) propuso un método donde los BMC se plantean en la forma propuesta por Ball (1961), en la que se calcula y, aplicando también eliminación Gaussiana. De un análisis de la exactitud numérica de este cálculo, basado en los órdenes de magnitud de las cantidades involucradas, este autor concluyó que el error de cálculo computacional no es significativo, obteniéndose un algoritmo estable y muy preciso.

Los dos métodos anteriores se aplicaron al arreglo BP. Burningham y Otto (1967) aplicaron el mismo algoritmo para las matrices tridiagonales que resultan del arreglo SR, acelerando el cálculo.

La parte esencial de estos esquemas es el cálculo de las composiciones (o flujos individuales) a partir de las matrices tridiagonales resultantes de los BMC. Cuando se aplica eliminación Gaussiana a matrices tridiagonales, se obtienen fórmulas recursivas, necesitando sólo dos vectores del tamaño del orden de la matriz, para almacenar la información. Estas fórmulas se conocen como algoritmo de Thomas. Este algoritmo, generalmente evita errores de redondeo, ya que en ninguno de los pasos se restan cantidades prácticamente iguales.

Boston y Sullivan (1972) demostraron que la única posibilidad de error en el cálculo anterior surge cuando se manejan columnas con un gran número de etapas, con componentes cuyos factores de absorción son menores a la unidad en una sección de la columna, y mayores que uno en otra sección. Cuando se presentan estos casos difíciles, los mismos autores proponen un nuevo arreglo del algoritmo de Thomas, donde no se hace ninguna resta en todo el proceso, ni se tienen que calcular productos del tipo propuesto por -- Friday y Smith.

Billingsley (1970a) aplica el concepto de volatilidades relativas para evitar el proceso iterativo en el cálculo de \underline{T} (Método Kb) y usa el multiplicador θ propuesto por Holland (1963) para poner en balance por componente la columna entre iteraciones. Este mismo autor (1970b) estableció matemáticamente las propiedades de convergencia del multiplicador θ . Reporta haber resuelto problemas con soluciones moderadamente no-ideales, y otros con una Δ_{DB} hasta de 300°F. Para problemas muy difíciles aplica el Método de Newman (1963) para calcular \underline{T} , aclarando que éstos representan sólo el 2% de los casos probados, lo que demuestra la efectividad del método Kb.

El algoritmo de Newman para el cálculo de \underline{T} , es una aplicación del Método de Newton-Raphson a una función modificada de \underline{TB} , en el cual el nuevo perfil cumple con las siguientes condiciones: a) se satisfacen los balances de material por componente y las relaciones de equilibrio, y b) la suma de los flujos por componente en cada etapa es igual a los flujos totales supuestos.

Holland y Pendon (1974) propusieron una técnica muy similar al planteamiento de Billingsley.

Estos algoritmos obtienen una convergencia rápida y estable para problemas cuyo comportamiento de las soluciones es aproximadamente ideal. El arreglo BP resuelve satisfacto

riamente problemas de destilación. Sin embargo, requiere un número excesivo de iteraciones para problemas con mezclas - altamente no-ideales, o con muy amplios rangos de ebullición ($\Delta_{DB} > 300^\circ\text{F}$), así como absorbedores y agotadores. El -- arreglo SR se aplica a problemas de absorción que no contengan ni condensador ni rehervidor. Por otra parte, estos -- planteamientos se restringen a un limitado número de especificaciones para la columna, como lo hacen notar Henley y -- Seader (1981). Otra característica de estos planteamientos es el bajo consumo de memoria de computadora.

II.2. Algoritmos que Resuelven 2NP Ecuaciones Simultáneamente.

Debido a que los métodos de solución eran distintos - para resolver problemas de destilación y de absorción, surgió la necesidad de desarrollar nuevos planteamientos que - pudieran manejar indistintamente ambos casos, así como columnas con rehervidor solamente. Friday y Smith sugirieron en su artículo corregir simultáneamente T y V, resolviendo TB y BE por el Método de Newton-Raphson.

Tierney, Bruno y Yanosik (1967, 1969) reportan la aplicación del Método de Newton-Raphson para corregir simultáneamente T y V, usando cálculo de matrices para evaluar las derivadas parciales. La matriz resultante de tamaño 2NP se considera que está formada por cuatro submatrices, cada una

de las cuales representa procesos límites. Por ejemplo, la primera submatriz representa la variación de una función -- del balance de material con respecto a temperatura, a flu-- jos constantes, lo que físicamente sería un problema con -- flujos molares constantes. Esta parte es prácticamente -- igual al método de Newman para calcular temperaturas. La -- submatriz (1,2) representa la variación de la función de ba-- lance de material con respecto a flujo, a temperatura cons-- tante, lo que físicamente se aproxima al problema de extrac-- ción líquido-líquido. Las otras submatrices son variacio-- nes de los balances de entalpía con respecto a T y V. En to-- dos los casos estos autores observaron convergencia cuadrá-- tica cerca de la solución. Reportan haber resuelto satis-- factoriamente problemas de destilación, extracción líquido- líquido, absorción y agotamiento.

Tomich (1970) basado en el esquema de cálculo de Wang y Henke, propuso un algoritmo para corregir simultáneamente T y V en base a las ecuaciones TB y BE. Sugiere que para - mejorar el comportamiento del Método de Newton-Raphson se - aplique el Método de Broyden. Esto permite tener las si- guientes ventajas: no se necesitan las expresiones analíti- cas de las derivadas parciales, no es necesario resolver a cada iteración un sistema de ecuaciones lineales, y lejos - de la solución se puede evitar la divergencia del método.

Otra variación de estos métodos es el algoritmo propuesto por Orbach, Crowe y Johnson (1972), en el que se aplica el método modificado de Newton-Raphson para resolver las 2NP ecuaciones que se obtienen en el Método de Tomich. Los autores reportan que la selección de este método de convergencia se basa en el hecho de que Tierney y Yanosik observaron que en la región de convergencia, el jacobiano casi no cambia. Aproximan el jacobiano numéricamente y definen un índice de comportamiento para detectar si un jacobiano está prediciendo una buena dirección de búsqueda. Además, acotan el cambio de las variables entre iteraciones, permitiendo una variación máxima de 10%. Reportan también la aplicación satisfactoria de este algoritmo a un problema de destilación, que obtiene un producto de pureza alta, en el cual el Método de Tomich falla.

Boynton (1970) resuelve las 2NP ecuaciones resultantes de la siguiente manera: se hace T dependiente de L y se resuelve TB primeramente, por aplicación del Método de Newton-Raphson. Esto resulta igual al Método de Newman. Enseguida se corrige L utilizando BE , también por el Método de Newton-Raphson, tomando en cuenta la dependencia implícita de T . En ambas etapas se aplica cálculo de matrices para evaluar las derivadas parciales.

Billingsley y Boynton (1971) plantean, en forma general,

una serie de métodos que son aplicaciones del Método de --- Newton-Raphson para resolver 2NP ecuaciones, dentro de los cuales el Método de Boynton es un caso particular. Sugieren que para mejorar este método se usen derivadas aproximadas numéricamente, y utilizar L/V en lugar de L .

Holland, Pendon y Gallun (1975) aplican una técnica si-
milar a la de Boynton, pero para satisfacer los BMC definen un multiplicador Θ para cada etapa (método multiteta). Sus variables de iteración son Θ y T . En la primera parte se calcula Θ y en la segunda T . Este planteamiento cae también dentro de los propuestos por Billingsley y Boynton, re-
comendándolo para problemas de absorción.

Estos dos últimos métodos resuelven matrices de tamaño NP. Ambos trabajos reportan su aplicación a todo tipo de -
problemas de absorción, demostrando estabilidad y convergen-
cia.

Hess y colaboradores (1977 a,b) propusieron resolver -
la matriz completa de tamaño 2NP que resulta de la formula-
ción del método multiteta. Estos autores aplicaron tres --
técnicas numéricas distintas para resolver las 2NP ecuacio-
nes, que son: el Método de Newton-Raphson con expresiones -
analíticas de las derivadas parciales, el Método de Broyden,
y la implementación del Método de Bennett (1965) para actua-
lizar las matrices triangulares que se obtienen en la inver-

sión del jacobiano en el Método de Broyden. Presentan resultados que demuestran su estabilidad y rapidez, en particular cuando se aplica el tercer método.

La aplicación de este esquema de cálculo es la formulación exacta del Método de Newton-Raphson para el caso en que las constantes de equilibrio no dependen de composición (Holland, 1981). Cuando éstas dependen fuertemente de composiciones es necesario introducir otro ciclo interno para ir las actualizando, lo que en ocasiones hace lenta la convergencia del método.

Estas formulaciones que manejan matrices de tamaño $2NP$, se recomiendan para resolver problemas de columnas que no tengan ambos, condensador y rehervidor, como son absorbedores, absorbedores con rehervidor, agotadores, etc. (Holland, 1981). También se recomiendan para problemas de destilación con muy amplio rango de temperaturas de ebullición (King, 1981). Estos planteamientos requieren un área de almacenamiento mayor que los métodos BP y SR.

II.3. Algoritmos que Resuelven $NP(2NC+1)$ Ecuaciones Simultáneamente, y Modificaciones.

Los dos planteamientos anteriores tienen el inconveniente de no tener las composiciones de las corrientes en el punto en que se hace necesario calcular las constantes -

de equilibrio. Cuando éstas dependen fuertemente de las composiciones, como en el caso de destilación azeotrópica y extractiva, ambas formulaciones convergen lentamente o no convergen (Holland, 1981).

Los métodos más generales son los algoritmos conocidos como "Almost-Band", los cuales resuelven rigurosamente las ecuaciones de modelado, y aumentan la velocidad de convergencia de problemas difíciles. En seguida se describen los métodos más importantes de este tipo.

Naphtali y Sandholm (1971) propusieron el siguiente esquema de cálculo: por sustitución adecuada de las restricciones de suma, se eliminan de la formulación los flujos totales (L y V), reduciendo el sistema a $NP(2NC+1)$ ecuaciones simultáneas (BMC , EQ , BE) con las variables independientes f , y , y T . Este sistema se resuelve por aplicación del Método de Newton-Raphson, empleando expresiones analíticas para el cálculo de las derivadas parciales. Las ecuaciones del modelo se agrupan por etapa, de donde al hacer los balances para cada plato, resulta un jacobiano de estructura tridiagonal a bloques. Esto permite aplicar un algoritmo análogo al método de Thomas, pero donde los elementos de la matriz son submatrices. Con este planteamiento se maneja la eficiencia de plato en forma rigurosa, y las constantes de equilibrio se calculan con las composiciones de la itera

ción actual. Su desventaja es el gasto de memoria de computadora, y lo complejo de las derivadas parciales, particularmente las que se hacen con respecto a composición. Pero se ha demostrado ampliamente la convergencia del método en todo tipo de problemas.

Gallun (1979) aplica el planteamiento anterior, pero introduce una variación en la forma de manejar los balances, haciéndolos desde el fondo de la columna. Por una partición de matrices reduce el tamaño de la matriz a $NP(NC+1)$. Para resolver estas matrices usa técnicas para matrices dispersas.

Otra variante a la formulación propuesta por Naphtali y Sandholm, es la aplicación del método de Broyden-Schubert (Schubert, 1971) para resolver el sistema de ecuaciones (Gallun, 1979). Además se propone otra modificación al método de Broyden para aplicarlo al mismo caso (Gallun y Holland, 1980). Estas técnicas evitan evaluar analíticamente las derivadas parciales. El manejo de las matrices se hace en la misma forma que el caso anterior.

Bruno, Yanosik y Tierney (1972) aplicaron el Método de Newton-Raphson con expresiones analíticas, a un sistema de ecuaciones de tamaño $NP(NC+2)$, (BMC, FML, BM), con las variables independientes X, T y V. Reportan su aplicación a un problema de destilación extractiva, mostrando convergencia en pocas iteraciones.

Gallun y Holland (1976) propusieron resolver simultáneamente EQ, FML y BE, con \underline{L} , \underline{L} y \underline{T} como variables independientes. En este caso también plantean los balances desde el fondo de la columna, y aplican el Método de Newton-Raphson. Para las ecuaciones lineales se aplican técnicas para matrices dispersas. Esta forma de plantear los balances pierde su atractivo cuando se tienen extracciones laterales, apareciendo bandas en el jacobiano.

Christiansen y colaboradores (1979) plantean los balances plato a plato, y resolviendo BMC, TB y BE en función de \underline{L} , \underline{T} y \underline{V} simultáneamente, resulta un sistema de ecuaciones cuya matriz es tridiagonal a bloques al hacer los balances por plato.

Las formulaciones que manejan matrices de tamaño $NP(NC+2)$, son rigurosas cuando el comportamiento de las corrientes en fase vapor es ideal o aproximadamente ideal. El tiempo de cómputo se reduce a 1/4, en relación a la formulación exacta de $NP(2NC+1)$ ecuaciones. Sin embargo, cuando la fase vapor presenta un comportamiento no-ideal, o cuando se manejan eficiencias de plato, la convergencia se ve afectada adversamente, por lo que se hace necesario resolver las $NP(2NC+1)$ ecuaciones simultáneamente (Christiansen, 1979).

Un planteamiento muy interesante es el propuesto por -

Ishi y Otto (1973), el cual resuelve simultáneamente - NP(NC+2) ecuaciones (BMC, TB, BE) por aplicación del Método de Newton-Raphson, para corregir X, T y V. En el planteamiento de las ecuaciones se toma en forma rigurosa la dependencia de composiciones de constantes de equilibrio y entalpías, pero en el cálculo de las derivadas parciales, suponen que la composición de la fase vapor no afecta las constantes de equilibrio, y que las entalpías son sólo función de temperatura y presión. Esto permite tener un jacobiano con una estructura adecuada para resolverse por eliminación en bloques, de una serie de matrices diagonales, bi- y tri-diagonales, con lo que se reduce el tamaño de la matriz hasta 2NP. Presentan resultados donde se observa que es muy rápido y estable para columnas de destilación, absorción -- con y sin rehervidor. Sin embargo, se espera que este método falle cuando se aplique a soluciones altamente no ideales, debido a las simplificaciones introducidas en las derivadas parciales (Gallun y Holland, 1976).

Goldstein y Stanfield (1970) proponen una técnica muy similar a la anterior, y la recomiendan para resolver problemas con muchos componentes y pocos platos, como son los problemas de tipo absorción.

Estas formulaciones pueden resolver cualquier problema de separación vapor-líquido, sin importar el comportamiento

no-ideal de las soluciones, o el rango de temperaturas de ebullición. Su gran desventaja es que no obstante la aplicación de técnicas que han permitido reducir el consumo de memoria, sus requerimientos siguen siendo grandes.

II.4. El Algoritmo de Boston-Sullivan (1974).

Este planteamiento usa una serie de variables definidas por los autores como parámetros de volatilidad y energía (parámetros EVP). Estos parámetros se usan como variables de iteración. Una característica importante es su funcionalidad poco dependiente de otras variables, para las que las suposiciones iniciales pueden ser muy alejadas de la solución, como son temperaturas de etapa, flujos y composiciones de líquido y vapor. Los EVP son realmente variables independientes, en el sentido de que sus valores actuales dependen solamente de los valores supuestos en la iteración anterior, aún para sistemas no-ideales.

El algoritmo consta de dos ciclos principales. En el ciclo más interno se manejan como variables de iteración -- unas variables denominadas parámetros S relativos (S_R), que son factores de agotamiento normalizados por otro parámetro, S_b . Este último se selecciona de forma tal que entre iteraciones siempre se tenga la columna en balance de material. -- Los parámetros S_R pueden visualizarse como combinaciones --

Únicas de temperaturas y flujos totales de vapor y líquido, lo que en esencia elimina las interacciones entre estas variables. Cuando se manejan condensadores parciales se define otra variable adicional con el mismo objetivo que S_b . -- Dentro de este ciclo se calculan los f_i usando el método modificado de Thomas (Boston-Sullivan, 1972). Las composiciones X_i se obtienen por normalización aplicando f_i . Por la -- restricción de punto de burbuja se calculan las T_i , aplicando las volatilidades relativas que se usan como parámetros de iteración. Para esto se usa un modelo para la K_b (componente base), parecido a la ecuación de Antoine, cuyos coeficientes se van actualizando junto con los parámetros EVP. -- Con BE se corrige L y con BM se calcula V . En este punto -- se calculan nuevamente los parámetros S_R , si su diferencia con los valores supuestos es menor que una tolerancia, se -- obtuvo la convergencia en este ciclo. De no ser así se -- aplica un método modificado de Broyden para corregirlos.

En el ciclo externo se calcula Y aplicando los valores de f_i y las volatilidades relativas. Se evalúan las constantes de equilibrio y entalpías. Se calculan los nuevos parámetros EVP, y si no están dentro de una tolerancia dada, se usa el método de sustituciones sucesivas con un coeficiente de relajación seleccionado entre 0.5 y 1. Con este esquema se obtiene convergencia en forma rápida, ya que se minimiza

el tiempo total de cómputo, debido a que las constantes de equilibrio y entalpías se evalúan sólo una vez por cada ite ración externa.

Este algoritmo está planteado en base al arreglo BP, - pero se puede establecer un arreglo similar al SR, utilizan do los mismos criterios (Boston, 1970).

Este método es estable, convergente y muy rápido para todo tipo de problemas de separación vapor-líquido, inclu-- yendo soluciones altamente no ideales y absorción (Gupta y Gallier, 1979). Boston y Sullivan reportan también que es posible utilizar estas mismas variables para problemas de - extracción líquido-líquido y equilibrio en tres fases (lí- quido-líquido-vapor).

II.5. Nomenclatura.

K_b - Constante de equilibrio del componente base, pa
ra obtener volatilidades relativas.

$\underline{l} = \{l_{ij}\}_{i=1,NC}$ Flujos individuales por componente
 $j=1,NP$ para las corrientes líquido.

$\underline{L} = \{L_j\}_{j=1,NP}$ Flujos totales de líquido.

NC - Número de componentes.

NP - Número total de etapas, incluyendo condensador
y rehervidor.

$\underline{T} = \{T_j\}_{j=1, NP}$ Temperaturas de etapa.

$\underline{V} = \{v_{ij}\}_{\substack{i=1, NC \\ j=1, NP}}$ Flujos individuales por componente para las corrientes vapor.

$\underline{V} = \{V_j\}_{j=1, NP}$ Flujos totales de vapor.

$\underline{X} = \{X_{ij}\}_{\substack{i=1, NC \\ j=1, NP}}$ Composiciones en fracciones molares para las corrientes líquido.

$\underline{Y} = \{Y_{ij}\}_{\substack{i=1, NC \\ j=1, NP}}$ Composiciones en fracciones molares para las corrientes vapor.

Δ_{DB} - Diferencia entre las temperaturas de burbuja y de rocío de las alimentaciones combinadas.

$\underline{\Theta} = \{\Theta_j\}_{j=1, NP}$ Multiplicadores seleccionados de manera que se cumpla el balance de material para cada etapa.

CAPÍTULO III

MODELADO MATEMÁTICO

En esta parte se presenta el modelado de columnas de separación, haciéndose hincapié en las etapas que tienen alguna modificación como son, condensadores parciales y totales, y rehervidores, en los que se hace un intercambio de variables, para calcular otras que tradicionalmente se tienen fijas en etapas intermedias.

Las ecuaciones de modelado de columnas de etapas de equilibrio al estado estacionario son los balances de material y de energía, así como las relaciones de equilibrio vapor-líquido planteados para cada etapa.

El modelo general de columna se muestra en la figura 3.1 Una columna tiene NP etapas de equilibrio incluyendo un condensador, ya sea parcial o total, y un rehervidor. Las etapas se numeran de arriba hacia abajo, siendo el condensador la número 1, y el rehervidor la NP.

Cada etapa puede tener una alimentación, ya sea líquido, vapor, o mezcla de ambos. Se considera que las extracciones laterales tienen la misma composición y condiciones térmicas que las corrientes de donde se extraen. Las corrientes de líquido y vapor que salen lo hacen en equilibrio. Fi

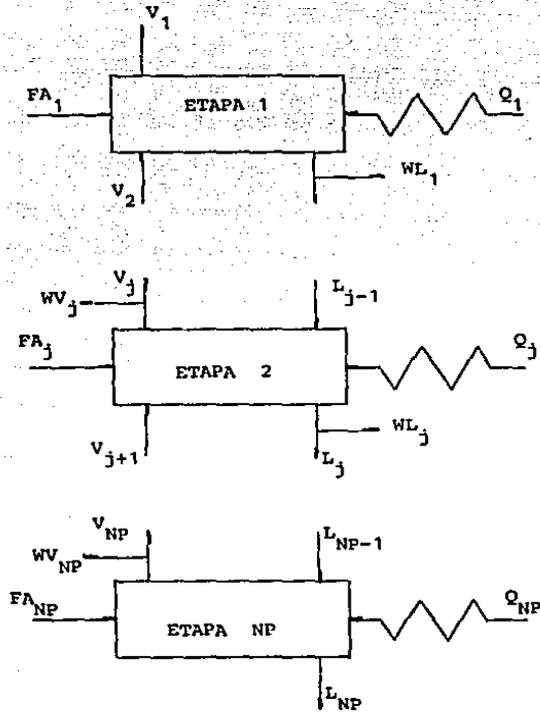


Figura 3.1. Modelo General de Columna.

nalmente, se considera mezclado perfecto en la fase líquida.

Los casos particulares de columnas se consiguen haciendo de cero las corrientes o cantidades que no existen.

III.1. Modelado.

La columna mostrada en la figura 3.1, queda especificada por las siguientes ecuaciones:

Relaciones de Equilibrio.

$$Y_{ij} = K_{ij} X_{ij} \quad i=1,2, \dots, NC$$

donde $K_{ij} = K_{ij}(T_j, P_j, X_{ij}, Y_{ij}) \quad j=1,2, \dots, NP$ (3.1)

$$\sum_{i=1}^{NC} X_{ij} = 1 \quad j=1,2, \dots, NP$$
 (3.2)

$$\sum_{i=1}^{NC} Y_{ij} = 1 \quad j=1,2, \dots, NP$$
 (3.3)

Balances de Material por Componente.

$$FA_j Z_{ij} + V_{j+1} Y_{i,j+1} + L_{j-1} X_{i,j-1} - (V_j + WV_j) Y_{ij} - (L_j + WL_j) X_{ij} = 0 \quad i=1,2, \dots, NC$$

j=1,2, \dots, NP

 (3.4)

Balances de Energía.

$$FA_j HF_j + V_{j+1} H_{j+1} + L_{j-1} h_{j-1} - (V_j + WV_j) H_j - (L_j + WL_j) h_j + Q_j = 0 \quad j=1,2, \dots, NP$$
 (3.5)

donde $h_j = h_j(T_j, P_j, X_{ij})$, $H_j = H_j(T_j, P_j, Y_{ij})$

En total se tienen NP(2NC+3) ecuaciones independientes.

Fijando las siguientes variables:

Alimentaciones, FA_j : Flujo, composición y condiciones térmicas.

Extracciones laterales, WL_j, WV_j : Flujo.

Intercambios térmicos, Q_j : Carga.

Presión de la columna, P_j

Número de etapas, NP

se obtiene un sistema de ecuaciones consistente con las siguientes variables independientes:

X_{ij}	$i=1, NC, \quad j=1, NP$	
Y_{ij}	$i=1, NC; \quad j=1, NP$	
L_j	$j=1, NP$	
V_j	$j=1, NP$	
T_j	$j=1, NP$	
<hr style="width: 100%; border: 0.5px solid black;"/>	<hr style="width: 100%; border: 0.5px solid black;"/>	
Total	NP(2NC+3)	(3.6)

Escribiendo ahora las ecuaciones en función de flujos individuales por componente, y sustituyendo las ecuaciones (3.2) y (3.3) en el resto del sistema con el fin de eliminar del planteamiento los flujos totales, se obtiene:

$$\frac{v_{ij}}{\sum_{i=1}^{NC} v_{ij}} - K_{ij} \frac{l_{ij}}{\sum_{i=1}^{NC} l_{ij}} = 0 \quad i=1, NC; \quad j=1, NP \quad (3.7)$$

$$fa_{ij} + v_{i,j+1} + \ell_{i,j-1} - \left(1 + \frac{WV_j}{NC}\right) v_{ij} - \left(1 + \frac{WV_j}{NC}\right) \ell_{ij} = 0$$

$$i=1, NC; j=1, NP \quad (3.8)$$

$$FA_j HF_j + \left(\sum_{i=1}^{NC} v_{i,j+1}\right) H_{j+1} + \left(\sum_{i=1}^{NC} \ell_{i,j-1}\right) h_{j-1} - \left(1 + \frac{WV_j}{NC}\right) H_j$$

$$- \left(1 + \frac{WL_j}{NC}\right) h_j + Q_j = 0 \quad j=1, NP \quad (3.9)$$

De esta forma se obtienen NP(2NC+1) ecuaciones en función de NP(2NC+1) variables independientes:

$$v_{ij}, \ell_{ij}, T_j \quad i=1, NC; j=1, NP \quad (3.10)$$

Las 2NP ecuaciones restantes permiten calcular los flujos totales una vez conocidos los flujos individuales por componente:

$$L_j = \sum_{i=1}^{NC} \ell_{ij} \quad j=1, NP \quad (3.11)$$

$$V_j = \sum_{i=1}^{NC} v_{ij} \quad j=1, NP \quad (3.12)$$

Si se escriben las ecuaciones en forma de funciones de discrepancia se obtiene:

$$f_{ij} = \frac{v_{ij}}{\sum_{i=1}^{NC} v_{ij}} - K_{ij} \frac{\ell_{ij}}{\sum_{i=1}^{NC} \ell_{ij}} \quad i=1, NC; j=1, NP \quad (3.13)$$

$$m_{ij} = fa_{ij} + v_{1,j+1} + \ell_{1,j-1} - \left(1 + \frac{WV_j}{\sum_{i=1}^{NC} v_{ij}}\right) v_{ij} - \left(1 + \frac{WL_j}{\sum_{i=1}^{NC} \ell_{ij}}\right) \ell_{ij} \quad i=1, NC; j=1, NP \quad (3.14)$$

$$G_j = FA_j HF_j + \left(\sum_{i=1}^{NC} v_{i,j+1}\right) H_{j+1} + \left(\sum_{i=1}^{NC} \ell_{i,j-1}\right) h_{j-1} - \left(1 + \frac{WV_j}{\sum_{i=1}^{NC} v_{ij}}\right) \left(\sum_{i=1}^{NC} v_{ij}\right) H_j - \left(1 + \frac{WL_j}{\sum_{i=1}^{NC} \ell_{ij}}\right) \left(\sum_{i=1}^{NC} \ell_{ij}\right) h_j + Q_j \quad j=1, NP \quad (3.15)$$

La solución de este sistema de ecuaciones se encuentra por aplicación del Método de Newton-Raphson, o por un Método cuasi-Newton como en este trabajo. Ordenando adecuadamente las variables y funciones, se obtiene una matriz jacobiana de estructura dispersa y tridiagonal a bloques. Este orden es la secuencia en que se tomarán las derivadas parciales en el método de convergencia seleccionado, y es el siguiente:

$$\underline{X} = \{(v_{1j} \ v_{2j} \dots \ v_{NCj} \ T_j \ l_{1j} \ l_{2j} \dots \ l_{NCj})_{j=1, NP}\}^T \quad (3.16)$$

$$\underline{F} = \{(f_{1j} \ f_{2j} \dots \ f_{NCj} \ G_j \ m_{1j} \ m_{2j} \dots \ m_{NCj})_{j=1, NP}\}^T$$

donde el subíndice $j=1, NP$, quiere decir que el argumento -- dentro del paréntesis se repite para $j=1, 2, \dots, NP$.

En el cálculo de las constantes de equilibrio y las en talpias, las fracciones mol. deben sumar la unidad, esta -- condición se satisface usando las siguientes expresiones en tre iteración e iteración:

$$x_{ij} = \frac{l_{ij}}{\sum_{i=1}^{NC} l_{ij}} \quad y_{ij} = \frac{v_{ij}}{\sum_{i=1}^{NC} v_{ij}} \quad (3.17)$$

Para las etapas en que se tienen extracciones latera-- les, es conveniente introducir una nueva variable y una nuee va función de discrepancia:

$$F\phi_j = \frac{\phi_j \sum_{i=1}^{NC} l_{ij}}{WL_j} - 1 \quad (3.18)$$

y/o

$$F\psi_j = \frac{\psi_j \sum_{i=1}^{NC} v_{ij}}{WC_j} - 1$$

Esto hace que las ecuaciones de balance de material y

energía sean más lineales al no aparecer los flujos individuales en el denominador. Cuando este es el caso, el orden de las variables y funciones para el plato p en que se hace la extracción es:

$$\begin{aligned} & \text{-----} l_{NC-p} \quad l_{NCp} \quad \phi_p \quad v_{i,p+1} \text{-----} \\ & \text{-----} m_{NC-p} \quad m_{NCp} \quad F\phi_p \quad f_{i,p+1} \text{-----} \end{aligned} \quad (3.19)$$

En algunos casos es conveniente intercambiar variables no especificadas por el mismo número de variables especificadas. Por ejemplo, fijar el reflujo en el caso de destilación, permite usar la carga térmica como variable independiente, y el mismo caso se tiene para el rehervidor cuando se fija el producto de fondos. En seguida se plantean las funciones de discrepancia para los condensadores parcial y total, rehervidores, y el caso de presaturadores en el caso de absorción.

III.2. Casos Especiales.

Condensador parcial.

a) Especificaciones: Q_1, FA_1, WL_1

VARIABLES: ϕ_1 (δL_1 si $WL_1=0$), l_{i1}, v_{i1}, T_1

Total: $2NC+2$

Funciones:

$$f_{i1} = \frac{v_{i1}}{\sum_{i=1}^{NC} v_{i1}} - K_{i1} \frac{\ell_{i1}}{\sum_{i=1}^{NC} \ell_{i1}} \quad i=1,2,\dots,NC \quad (3.20)$$

$$m_{i1} = f_{a_{i1}} + v_{i2} - v_{i1} - (1 + \phi_1) \ell_{i1} \quad i=1,2,\dots,NC \quad (3.21)$$

$$G_1 = F_{A_1} H_{F_1} + \left(\sum_{i=1}^{NC} v_{i2} \right) H_2 - \left(\sum_{i=1}^{NC} v_{i1} \right) H_1 - (1 + \phi_1) \left(\sum_{i=1}^{NC} \ell_{i1} \right) h_1 - Q_1 \quad (3.22)$$

$$F\phi_1 = \frac{\phi_1 \sum_{i=1}^{NC} \ell_{i1}}{WL_1} - 1 \quad (3.23)$$

Total: 2NC+2

$$\text{Si } WL_1 = 0, \text{ se introduce } S_1 = \frac{\sum_{i=1}^{NC} \ell_{i1}}{L_1} = -1 \quad (3.24)$$

El orden de las variables y funciones es:

$$\underline{X} = \{ \phi_1 \delta L_1 v_{11} v_{21} \dots v_{NC1} T_1 \ell_{11} \ell_{21} \dots \ell_{NC1} \dots \}^T \quad (3.25)$$

$$\underline{F} = \{ F\phi_1 \delta S_1 F_{11} F_{21} \dots F_{NC1} G_1 m_{11} m_{21} \dots m_{NC1} \dots \}^T$$

b) Especificaciones: L_1, FA_1, WL_1

Variables: $Q_1, \ell_{i1}, v_{i1}, T_1$

Total : $2NC+2$

En este caso $\phi_1 = L_1/WL_1$ está especificada, por tanto $F\phi_1$ nunca existirá, en su lugar estará siempre S_1 . Las funciones son las mismas que en el caso anterior, con S_1 en el primer lugar, y Q_1 tomará el lugar de L_1 .

Condensador Total.

a) Especificaciones: Q_1, FA_1 y WL_1 por balance total de la columna.

Variables: $L_1/WL_1, \ell_{i1}, Y_{i1}, T_1$

Total : $2NC + 2$

El modelo de condensador total impone la restricción de que el destilado se obtenga en su punto de burbuja.

$$f_{i1} = \frac{Y_{i1}}{\sum_{i=1}^{NC} Y_{i1}} - K_{i1} \frac{\ell_{i1}}{\sum_{i=1}^{NC} \ell_{i1}} \quad i=1,2,--,NC \quad (3.26)$$

$$m_{i1} = fa_{i1} + v_{i2} - \left(1 + \frac{WL_1}{L_1}\right) \ell_{i1} \quad i=1,2,--,NC \quad (3.27)$$

$$G_1 = FA_1 HF_1 + \left(\sum_{i=1}^{NC} v_{i2}\right) H_2 - \left(1 + \frac{WL_1}{L_1}\right) \left(\sum_{i=1}^{NC} \ell_{i1}\right) h_1 - Q_1 \quad (3.28)$$

$$S_1 = \sum_{i=1}^{NC} Y_{i1}^{-1} \quad (3.29)$$

Total: $2NC+2$

El orden de las variables y funciones es:

$$\underline{X} = \{L_1/WL_1, Y_{11}, Y_{21}, \dots, Y_{NC1}, T_1, \ell_{11}, \ell_{21}, \dots, \ell_{NC1}, \dots\}^T \quad (3.30)$$

$$\underline{F} = \{S_1, f_{11}, f_{21}, \dots, f_{NC1}, G_1, m_{11}, m_{21}, \dots, m_{NC1}, \dots\}^T$$

b) Especificaciones: $L_1/WL_1, FA_1$ y WL_1 por balance global de la columna.

Variables: $Q_1, \ell_{11}, Y_{11}, T_1$

Total: $2NC+2$

Las funciones de discrepancia son las mismas que en el caso anterior, sólo el vector de variables se ve afectado por el cambio de L_1/WL_1 por Q_1 .

c) Reflujo subenfriado.

Cuando se tiene este caso se restan los grados de subenfriamiento a la temperatura de saturación, y la entalpía del reflujo se calcula con la temperatura resultante.

d) Reflujo con temperatura fija.

Si se fija la temperatura del reflujo, se eliminan de la formulación las relaciones de equilibrio, y se introduce la función de discrepancia.

$$S_1 = T_1 - T_{\text{reflujo}} \quad (3.31)$$

El orden de las variables y funciones es:

$$\underline{X} = \{Q_1 \ell_{11} \ell_{21} \dots \ell_{NC1} T_1 v_{12} \dots\}^T \quad (3.32)$$

$$\underline{F} = \{S_1 m_{11} m_{21} \dots m_{NC1} G_1 f_{12} \dots\}^T$$

Si se fija la carga térmica, se reemplaza ésta con el reflujo en el vector de variables.

Presaturador.

a) Especificaciones: $T_{\text{fija}}, FA_1, WL_1$

Variables: $\ell_{11}, v_{11}, T_1, Q_1$ (ϕ_1 si $WL_1 \neq 0$).

Total: $2NC+2$

(si $WL_1 \neq 0$, se tienen $2NC+3$ variables).

Este caso se modela como una etapa de equilibrio con un intercambio térmico, por lo que las funciones de discrepancia son iguales a las de un condensador parcial, con la excepción de S_1 , que en este caso se reemplaza por la ecuación (3.31).

b) Especificaciones: Q_1, FA_1, WL_1

Variables: $\ell_{11}, v_{11}, T_1, Q_1$ (ϕ_1 si $WL_1 \neq 0$).

Total: $2NC+2$

Este es el caso de una etapa normal, por lo que no se repetirán las ecuaciones.

Rehervidor.

a) Especificaciones: Q_{NP} , FA_{NP} , WV_{NP}

Variables: L_{NP} , ℓ_{iNP} , v_{iNP} , T_{NP} , ψ_{NP}

Total: $2NC+3$ ($2NC+2$ si $WV_{NP} = 0$)

$$f_{iNP} = \frac{v_{iNP}}{\sum_{i=1}^{NC} v_{iNP}} - K_{iNP} \frac{\ell_{iNP}}{\sum_{i=1}^{NC} \ell_{iNP}} \quad i=1,2,\dots,NC \quad (3.33)$$

$$m_{iNP} = fa_{iNP} + \ell_{iNP-1} - \ell_{iNP} - (1+\psi_{NP})v_{iNP} \quad i=1,2,\dots,NC \quad (3.34)$$

$$G_{NP} = FA_{NP} HF_{NP} + \left(\sum_{i=1}^{NC} \ell_{iNP-1} \right) h_{NP-1} - \left(\sum_{i=1}^{NC} \ell_{iNP} \right) h_{NP} - (1+\psi_{NP}) \left(\sum_{i=1}^{NC} v_{iNP} \right) h_{NP} + Q_{NP} \quad (3.35)$$

$$F_{NP}^{\psi} = \frac{\psi_{NP} \sum_{i=1}^{NC} v_{iNP}}{WV_{NP}} - 1 \quad (3.36)$$

$$S_{NP} = \frac{\sum_{i=1}^{NC} \ell_{iNP}}{L_{NP}} - 1 \quad (3.37)$$

Total: $2NC+3$ (6 $2NC+2$ si $WV_{NP} = 0$)

el orden de las variables y funciones es

$$\underline{X} = \{--v_{1NP} \ v_{2NP} \ --v_{NCNP} \ T_{NP} \ \ell_{1NP} \ \ell_{2NP} \ \dots \ \ell_{NCNP} \ \psi_{NP} \ L_{NP}\}^T$$

$$\underline{F} = \{--f_{1NP} \ f_{2NP} \ --F_{NCNP} \ G_{NP} \ m_{1NP} \ m_{2NP} \ \dots \ m_{NCNP} \ F_{\psi NP} \ S_{NP}\}^T \quad (3.38)$$

b) Especificaciones: L_{NP} , FA_{NP} , WV_{NP}

Variables: Q_{NP} , ℓ_{1NP} , v_{1NP} , T_{NP} , ψ_{NP}

Total: $2NC+3$ (6 $2NC+2$ si $WV_{NP} = 0$)

Este caso se cubre reemplazando L_{NP} por Q_{NP} en el vector de variables independientes.

III.3. Estructura del Jacobiano.

El Método de Newton-Raphson está dado por

$$\underline{J}^{(K)} \Delta \underline{X}^{(K)} = -\underline{F}^{(K)} \quad (3.39)$$

$$\underline{X}^{(K+1)} = \underline{X}^{(K)} + \alpha^{(K)} \Delta \underline{X}^{(K)}$$

donde \underline{J} está dado por

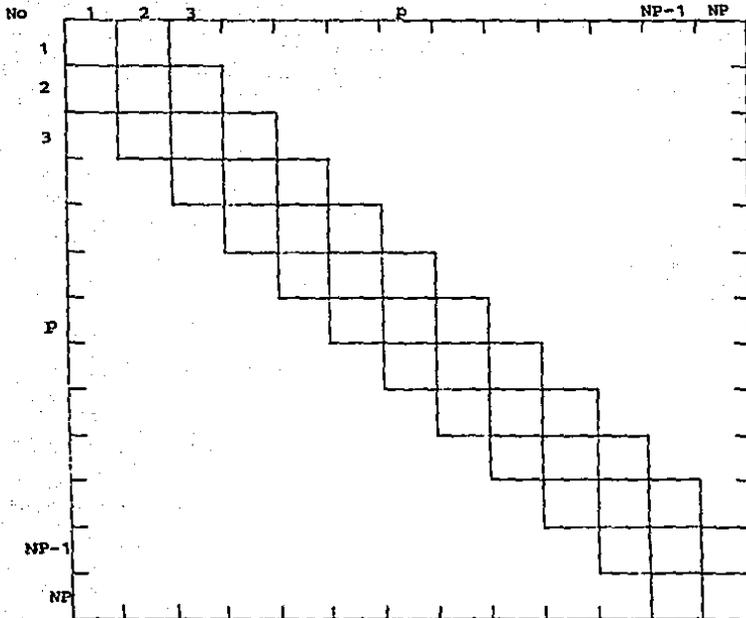
$$\underline{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_N} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & & \frac{\partial f_2}{\partial x_N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_N}{\partial x_1} & \frac{\partial f_N}{\partial x_2} & & \frac{\partial f_N}{\partial x_N} \end{bmatrix}$$

Para el caso particular en que \underline{X} y \underline{F} están dados por las expresiones en (3.16), la estructura que toma el jacobiano se muestra en las figuras 3.2 y 3.3.

III.4. Protección Contra Flujos Negativos Escalamiento de Variables y Funciones.

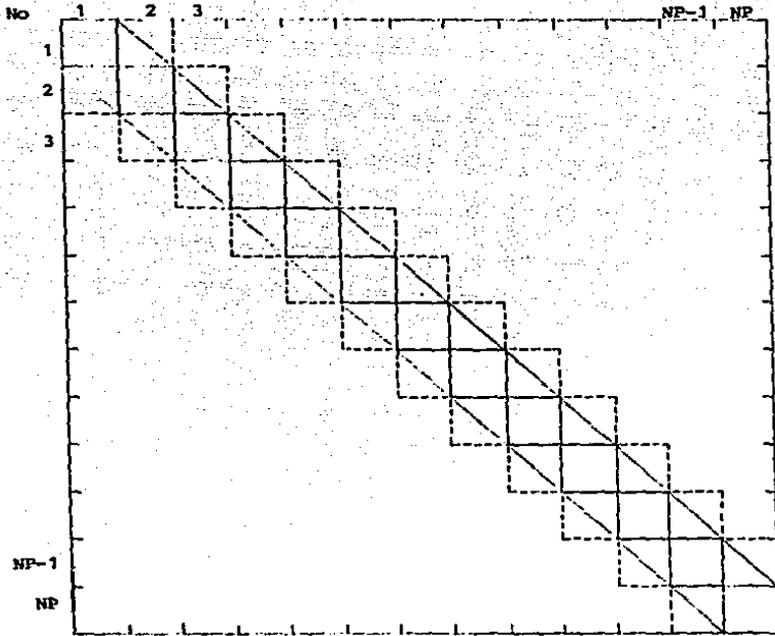
Algunas veces cuando la suposición inicial de las variables se encuentra lejos de la solución, el procedimiento (3.39) predice flujos negativos, lo que no tiene significado físico, entonces se usa la siguiente técnica para delimitar la región factible. Se selecciona $\alpha^{(K)}=1$, si la condición anterior no se cumple, entonces $\alpha^{(K)}$ se va reduciendo sucesivamente por un factor de 1/2, hasta que todos los flujos son positivos. Es decir, $\alpha^{(K)}=1, 1/2, 1/4, 1/8, \dots$.

Los errores de redondeo ocasionados por el manejo de las matrices se mantienen a un nivel bajo usando escalamiento de variables y funciones. Para esto es conveniente utili



- Notas: 1 - Todos los elementos fuera de la zona cuadrículada son cero.
2 - El tamaño de los bloques es $(2NC+1)$ por $(2NC+1)$, excepto para las etapas 1, P y NP, que es $(2NC+2)$ por $(2NC+2)$.

Figura 3.2. Matriz jacobiano para una columna que tiene condensador, - rebovidor y una extracción lateral en el plato p.



- Notas: 1 - Todos los elementos diferentes de cero están contenidos dentro de la banda simétrica.
2 - Algunos de los elementos contenidos en esa zona también son ceros.

Figura 3.3. Matriz jacobiano para una columna de separación mostrando la zona donde se encuentran los elementos diferentes de -cero.

zar potencias de dos, con lo que se elimina el redondeo durante el proceso de escalar y des-escalar (Forsythe y Moler, 1967).

La idea para el escalamiento es manejar cantidades de forma tal que se alimentara un mol. a la columna. Además, - los términos que aparecen en los balances de entalpia deben ser de orden 1. Las variables se escalan dividiendo entre un valor de referencia.

Los factores de escalamiento utilizados son:

Entalpías	8192 BTU/lbmol.
Temperaturas	256°F
Cargas térmicas	(8192) (Esc. de Flujos) BTU/h
Flujos	Alimentación mayor, lbmol/h

Un flujo se considera negativo si el valor absoluto de la variable escalada es mayor de 0.01. De otra manera se hace igual a cero.

El criterio de convergencia seleccionado es:

$$c = \frac{\sum_{n=1}^N (f_n^{(K)})^2}{N} < 10^{-5}$$

donde N es el número total de ecuaciones, y $f_n^{(K)}$ es el -- n-ésimo componente del vector $\underline{F}^{(K)}$, definido por (3.16), escalado.

III.5. Nomenclatura.

- \underline{F} Vector de funciones de discrepancia.
- f_{ij} Función derivada de las relaciones de equilibrio para el componente i en la etapa j .
- fa_{ij} Flujo del componente i en la alimentación a la etapa j .
- FA_j Flujo de alimentación a la etapa j .
- $F\phi_j$ Función para la extracción lateral de líquido a la etapa j .
- $F\psi_j$ Función para la extracción lateral de vapor a la etapa j .
- G_j Función derivada del balance de energía en la etapa j .
- h_j Entalpía de la corriente líquido de la etapa j .
- H_j Entalpía de la corriente vapor de la etapa j .
- HF_j Entalpía de la alimentación al plato j .
- \underline{J} Matriz jacobiano.
- K_{ij} Constante de equilibrio vapor-líquido para el componente i en la etapa j .
- ℓ_{ij} Flujo del componente i en la corriente de líquido en la etapa j .
- L_j Flujo de líquido en la etapa j .
- m_{ij} Función derivada del balance de material por componente para el componente i en la etapa j .

- N Número total de funciones de discrepancia.
- NC Número total de componentes.
- NP Número total de etapas de equilibrio incluyendo condensador y rehervidor.
- P_j Presión en la etapa j.
- Q_j Carga térmica intercambiada en la etapa j.
- S_1, S_{NP} Funciones de suma en las etapas 1 y NP.
- T_j Temperatura de la etapa j.
- v_{ij} Flujo del componente i en la corriente de vapor en la etapa j.
- V_j Flujo de vapor en la etapa j.
- WL_j Extracción lateral de líquido en la etapa j.
- WV_j Extracción lateral de vapor en la etapa j.
- \underline{X} Vector de variables independientes.
- x_{ij} Composición en fracción mol, del componente i en la etapa j.
- Y_{ij} Composición en fracción mol, del componente i en la etapa j.
- Z_{ij} Composición en fracción mol, del componente i en la alimentación a la etapa j.
- $\alpha^{(K)}$ Tamaño de paso en la iteración K del Método de Newton-Raphson.
- $\Delta \underline{X}^{(K)}$ Incremento de las variables \underline{X} en la iteración K del Método de Newton-Raphson.

ϕ_j Variable asociada con la extracción lateral de líquido de la etapa j.

ψ_j Variable asociada con la extracción lateral de vapor de la etapa j.

CAPÍTULO IV SOLUCIÓN DE ECUACIONES NO-LINEALES

La solución de las ecuaciones de modelado de columnas de -- destilación al estado estacionario, se obtiene resolviendo finalmente el sistema de ecuaciones simultáneas no-lineales y lineales. Para el esquema propuesto se ha aplicado el Método de Newton-Raphson con muy buenos resultados (Gallun, - 1979). Este método requiere de las expresiones analíticas para las distintas derivadas parciales, lo que es un problema serio debido a la complejidad de las funciones termodinámicas, requeridas en las relaciones de equilibrio y las -- ecuaciones de balance de energía, además, su evaluación puede consumir una gran cantidad de tiempo de máquina. Este -- problema se puede evitar aproximando numéricamente las derivadas parciales requeridas en el Método de Newton-Raphson, o usando un método cuasi-Newton. Una técnica de este tipo se debe a Broyden (1965), en donde se usa una aproximación al jacobiano o a su inversa. En las iteraciones subsecuentes se va revisando esta aproximación en base a la información generada durante la iteración en la dirección de la corrección.

Quando el jacobiano es una matriz dispersa, su actualización

zación se hace en forma más eficiente usando la modificación de Schubert (1971), el Método de Broyden. La principal desventaja de estos métodos con respecto al de Newton-Raphson es una reducción en la velocidad de convergencia cerca de la solución.

En esta parte se presenta el planteamiento del Método de Broyden y la modificación de Schubert, para la solución de las ecuaciones del modelo planteado en el Capítulo III.

IV. 1 Método de Broyden.

El problema de resolver un sistema de ecuaciones no-lineales es encontrar una solución a

$$\underline{F}(\underline{X}) = \underline{0} \quad (4.1)$$

Sea $\underline{x}^{(K)}$ la K-ésima aproximación a la solución de (4.1), y $\underline{p}^{(K)}$ definido por

$$\underline{p}^{(K)} = - \{ \underline{g}^{(K)} \}^{-1} \underline{F}^{(K)} \quad (4.2)$$

Entonces una modificación simple al método de Newton-Raphson para obtener $\underline{x}^{(K)}$ es:

$$\underline{x}^{(K+1)} = \underline{x}^{(K)} + \alpha^{(K)} \underline{p}^{(K)} \quad (4.3)$$

El escalar $\alpha^{(K)}$ se selecciona de manera que se reduzca alguna norma a cada iteración.

$\underline{g}^{(K+1)}$ se selecciona de manera que se satisfaga la ecuación

$$\underline{y}^{(k)} = \underline{F}^{(k+1)} - \underline{F}^{(k)} = \alpha^{(k)} \underline{G}^{(k+1)} \underline{p}^{(k)} \quad (4.4)$$

y además se requiere que $\underline{G}^{(k+1)}$ prediga el mismo cambio en \underline{F} , en una dirección $\underline{q}^{(k)}$ ortogonal a $\underline{p}^{(k)}$, que el jacobiano $\underline{G}^{(k)}$. Simbólicamente esto es

$$\underline{G}^{(k+1)} \underline{q}^{(k)} = \underline{G}^{(k)} \underline{q}^{(k)} \quad \underline{q}^{(k)T} \underline{p}^{(k)} = 0 \quad (4.5)$$

Estas dos condiciones son suficientes para definir $\underline{G}^{(k+1)}$ en forma única de la siguiente manera:

$$\underline{G}^{(k+1)} = \underline{G}^{(k)} + \frac{\{\underline{y}^{(k)} - \alpha^{(k)} \underline{G}^{(k)} \underline{p}^{(k)}\} \underline{p}^{(k)T}}{\alpha^{(k)} \underline{p}^{(k)T} \underline{p}^{(k)}} \quad (4.6)$$

Si se almacena la matriz $\underline{G}^{(k)}$, es necesario resolver un sistema de ecuaciones lineales para calcular $\underline{p}^{(k+1)}$ en (4.2), pero si se almacena la inversa de la matriz, esta operación se reduce a una multiplicación matriz-vector. Por esta razón es más conveniente ir actualizando la inversa de $\underline{G}^{(k+1)}$ a partir de la inversa de $\underline{G}^{(k)}$. Para obtener la expresión que permita actualizar la inversa, se aplica la fórmula de Householder (Broyden, 1965). Esta establece que si \underline{A} es una matriz no-singular y \underline{z} y \underline{w} son vectores de orden N , y si $(\underline{A} + \underline{z} \underline{w}^T)$ es no singular, luego

$$(\underline{A} + \underline{z} \underline{w}^T)^{-1} = \underline{A}^{-1} - \frac{\underline{A}^{-1} \underline{z} \underline{w}^T \underline{A}^{-1}}{1 + \underline{w}^T \underline{A}^{-1} \underline{z}} \quad (4.7)$$

Aplicándola a (4.6), y definiendo

$$\underline{H}^{(K)} = - \{ \underline{G}^{(K)} \}^{-1} \quad (4.8)$$

se obtiene

$$\underline{H}^{(K+1)} = \underline{H}^{(K)} - \frac{ \{ \alpha^{(K)} \underline{P}^{(K)} + \underline{H}^{(K)} \underline{Y}^{(K)} \} \underline{P}^{(K)} \underline{H}^{(K)} }{ \underline{P}^{(K)T} \underline{H}^{(K)} \underline{Y}^{(K)} } \quad (4.9)$$

IV.2. Modificación de Schubert.

Cuando $\underline{G}^{(K)}$ es una matriz dispersa, es más conveniente actualizar $\underline{G}^{(K+1)}$ que $\underline{H}^{(K+1)}$, debido a que generalmente la inversa de una matriz dispersa es una matriz llena. Esto hace necesario resolver a cada iteración el sistema lineal (4.2), aunque cuando se tiene un jacobiano bandeado, como es el caso de torres de etapas de equilibrio, esto no consume mucho más tiempo que la multiplicación

$$\underline{P}^{(K)} = \underline{H}^{(K)} \underline{F}^{(K)} \quad (4.10)$$

Por otra parte Schubert propone además que $\underline{G}^{(K+1)}$ tenga el mismo esquema disperso que $\underline{G}^{(K)}$, manteniendo la dispersidad del jacobiano original. De esta forma se obtiene una actualización análoga a (4.6), pero renglón por renglón.

$$\underline{q}_i^{(K+1)} = \underline{q}_i^{(K)} + \frac{\{f_i^{(K+1)} - (1 - \alpha^{(K)}) f_i^{(K)}\} \hat{\underline{p}}^{(K)T}}{\alpha^{(K)} \hat{\underline{p}}^{(K)T} \hat{\underline{p}}^{(K)}} \quad (4.11)$$

donde $\underline{q}_i^{(K+1)}$ es el renglón i de $\underline{G}^{(K)}$, $\hat{\underline{p}}^{(K)}$ es un vector columna derivado de $\underline{p}^{(K)}$, pero en el que se hacen cero los -- elementos de $\underline{p}^{(K)}$ que correspondan a un elemento de $\underline{q}_i^{(K)}$ -- que sea una constante conocida, y $f_i^{(K)}$ es el i -ésimo componente del vector $\underline{F}^{(K)}$. Nótese que si $\hat{\underline{p}}^{(K)}$ es el vector cero, el renglón $\underline{q}_i^{(K)}$ no se corrige.

IV.3. Aproximación al Jacobiano.

Para el estimado inicial del jacobiano se hace uso de la expresión

$$\frac{\partial f_i}{\partial x_j} = \frac{f_i(\underline{X} + h \underline{e}_j) - f_i(\underline{X})}{h} \quad (4.12)$$

para aproximar los elementos $\partial f_i / \partial x_j$ de la matriz. La selección de h se tomó en este caso como $0.001 x_j + 0.001$.

Claramente de (4.12) se ve que para evaluar el jacobiano es necesario evaluar $N+1$ veces las funciones. Pero cuando se conoce la forma de la matriz, como en este caso, en que se sabe que el jacobiano es bandedado, se puede economizar el número de llamadas a \underline{F} , como lo sugieren Curtis, Powell y Reid (1974).

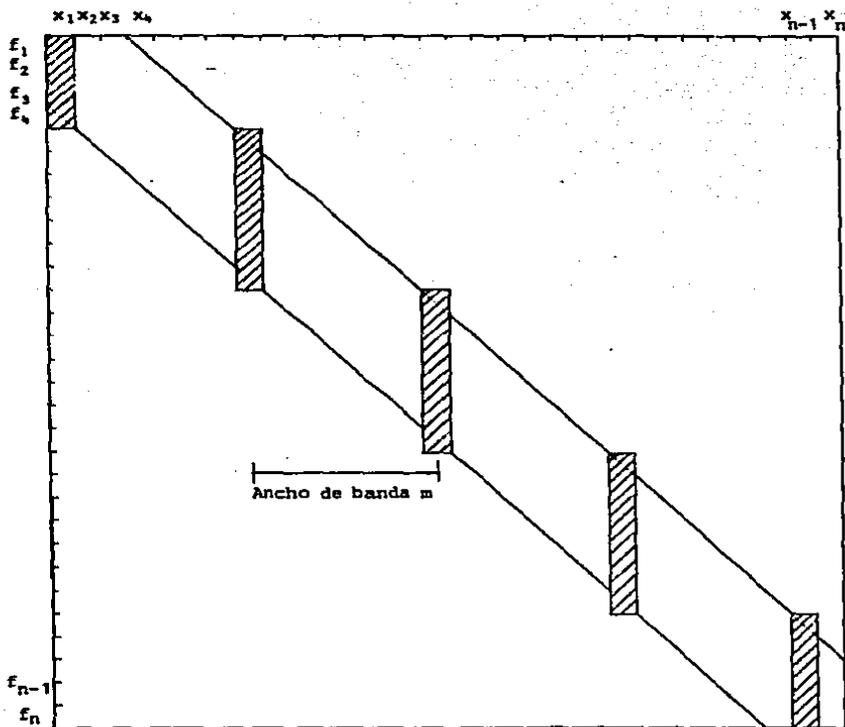
"Si \underline{J} es una matriz bandeda con un ancho de banda $m=2p-1$, luego la diferencia (4.12) es cero si $|i-j| \geq p$; de esto se sigue que podemos encontrar simultáneamente aproximaciones a las columnas $j+Km$, $K=0,1,2, \dots$, de \underline{J} , usando la diferencia $\underline{F}(\underline{X} + \sum_K \underline{e}_{j+Km}) - \underline{F}(\underline{X})$. De esta manera el número total de llamadas a la subrutina que calcula \underline{F} , se reduce de $N+1$ a $m+1$ ". Esta estrategia se muestra gráficamente en la figura 4.1.

IV.4. Selección de $\alpha^{(K)}$.

Para la selección de este escalar se sigue básicamente la estrategia propuesta por Broyden.

Sea $\phi(0)$ el cuadrado de la norma euclídeana de $\underline{F}^{(K)}$, o sea el error en el punto inicial de la iteración, y $\phi(1)$ el cuadrado de la norma euclídeana de $\underline{F}^{(K+1)}$, o sea el error predicho con $\alpha^{(K)}=1$, que es el valor tomado en forma natural en el Método de Newton-Raphson. Si se tiene $\phi(1) < \phi(0)$, el error disminuye, y de esta forma se procede a actualizar el jacobiano $\underline{g}^{(K+1)}$ para predecir un nuevo paso.

Si se tiene $\phi(1) > \phi(0)$, entonces se ajusta el valor de $\alpha^{(K)}$ de acuerdo con el siguiente criterio. Si el error presentara un mínimo en $\alpha^{(K)}=1$, se puede suponer que tuviera una funcionalidad cuadrática en $\alpha^{(K)}$, teniendo el valor de cero en $\alpha^{(K)}=1$. Y como esta función no puede ser negativa,



Notas: 1 - Todos los elementos fuera de la zona bandeada son cero.
2 - Las columnas correspondientes a las zonas sombreadas se evalúan simultáneamente.

Figura 4.1. Evaluación numérica del Jacobiano.

debe tener pendiente cero en $\alpha^{(K)}=1$. Denotando esta funcionalidad cuadrática ideal por $\phi_q(\alpha^{(K)})$ se tiene para el caso que se cumplan las condiciones anteriores:

$$\phi_q(\alpha^{(K)}) = \{1-2\alpha^{(K)} + (\alpha^{(K)})^2\} \phi(0) \quad (4.13)$$

En la práctica por supuesto, el cuadrado de la norma euclídeana en $\alpha^{(K)}=1$ casi nunca es cero. Se supone ahora que esto se debe a la presencia de un término cúbico adicional. De esto se propone ahora que la función ϕ se aproximará con la siguiente expresión:

$$\phi_c \equiv \phi_q + C (\alpha^{(K)})^3 \quad (4.14)$$

si $\alpha^{(K)}=1$, entonces $C = \phi(1) - \phi_q(1)$ y de aquí

$$\phi_c = \{1-2\alpha^{(K)} + (\alpha^{(K)})^2\} \phi(0) + (\alpha^{(K)})^3 \phi(1) \quad (4.15)$$

y ahora se tomará para $\alpha^{(K)}$ el valor que minimice ϕ_c . Diferenciando (4.15), igualando a cero y seleccionando la raíz que cae entre cero y uno se obtiene

$$\alpha_c^{(K)} = \frac{(1+6\eta)^{1/2} - 1}{3\eta} \quad (4.16)$$

donde

$$\eta = \phi(1)/\phi(0) \quad (4.17)$$

Es necesario hacer notar que la segunda derivada de --

(4.15) es positiva, con lo que se predice un mínimo en el error.

Si el nuevo error predicho con $\alpha_C^{(K)}$ resulta mayor o igual que $\phi(0)$, se aproximará ahora una función cuadrática con los puntos $(0, \phi(0))$, $(1, \phi(1))$, $(\alpha_C^{(K)}, \phi(\alpha_C^{(K)}))$:

$$\phi(\alpha_q^{(K)}) = a (\alpha_q^{(K)})^2 + b \alpha_q^{(K)} + c \quad (4.18)$$

Si $a > 0$, se calcula el mínimo de (4.18). Si $a \leq 0$ ó $a > 0$, pero el error no disminuye, entonces se evaluará nuevamente el jacobiano en el punto con el menor error.

Aquí es necesario aclarar que, como la estrategia seguida cuando en alguna iteración se presentaron flujos negativos, es reducir el tamaño de paso a la mitad en forma sucesiva hasta que todos los flujos sean positivos, entonces es necesario escalar el valor de $\alpha_C^{(K)}$, cuando no se obtuvo disminución en el error. Es decir, el valor obtenido por (4.16) se debe multiplicar por el primer valor obtenido para $\alpha^{(K)}$ ($\alpha^{(K)} = 1, 1/2, 1/4, \dots$, etc.).

IV.5. Nomenclatura.

- e_j Columna j de la matriz identidad.
- f_i i -ésimo elemento del vector \underline{F} .
- \underline{F} Vector de funciones de discrepancia.

- g_i i -ésimo renglón de la matriz \underline{G} .
- \underline{G} Aproximación al jacobiano.
- h Perturbación para las variables.
- \underline{H} Inversa negativa de la matriz \underline{G} , ecuación (4.8)
- \underline{J} Matriz jacobiano.
- N Número de variables independientes.
- \underline{p} Vector de incrementos de las variables, ecuación (4.2).
- $\underline{\beta}$ Vector derivado de \underline{p} , en la modificación de Schubert.
- \underline{X} Vector de variables independientes.
- \underline{Y} Ecuación (4.4)
- $\alpha^{(K)}$ Tamaño de paso en la iteración K
- ϕ Error =
$$\sum_{i=1}^N f_i^2$$

CAPÍTULO V

SOLUCIÓN DE ECUACIONES LINEALES

Cuando se aplican métodos del tipo Newton-Raphson a la solución de sistemas de ecuaciones no-lineales, es necesario generalmente, resolver el sistema de ecuaciones lineales que se obtiene a cada iteración.

En este trabajo, la técnica utilizada para resolver -- los sistemas lineales es, eliminación Gaussiana usando la variante de Cholesky con pivoteo parcial por tamaño (Wilkinson, 1965). Previamente a la eliminación Gaussiana, se escalan los renglones. Finalmente, se aplica un procedimiento iterativo para obtener mayor precisión en el cálculo.

Estas técnicas son útiles cuando se manejan matrices llenas; sin embargo, por su exactitud y rapidez se recomiendan ampliamente para manejar matrices dispersas (Tewarson, 1973).

Los métodos aplicados, así como otros también importantes, están contenidos totalmente en dos textos excelentes que cubren ampliamente las técnicas de eliminación Gaussiana (Wilkinson, 1965; Forsythe y Moler, 1967).

Únicamente para claridad de esta parte se describe a continuación el planteamiento utilizado.

V.1. Eliminación Gaussiana.

La solución al sistema de ecuaciones lineales

$$\underline{A} \underline{X} = \underline{b} \quad (5.1)$$

se encuentra en forma rápida y precisa, por aplicación de las técnicas de eliminación de Gauss. La idea básica de estos métodos es encontrar dos matrices, una triangular inferior, $\underline{L} = \{m_{ij}\}$ con $\{m_{ij}\}=1$, y otra triangular superior $\underline{U} = \{U_{ij}\}$, tales que $\underline{L} \underline{U} = \underline{A}$.

Entonces el sistema (5.1) se puede reescribir

$$\underline{L} \underline{U} \underline{X} = \underline{b} \quad (5.2)$$

y de esta manera la solución se obtiene resolviendo los dos sistemas triangulares

$$\underline{L} \underline{Y} = \underline{b} \quad \text{y} \quad \underline{U} \underline{X} = \underline{Y} \quad (5.3)$$

Los elementos de la solución intermedia \underline{Y} , pueden obtenerse directamente del primer sistema, ya que la primera ecuación involucra sólo Y_1 , la segunda Y_1 e Y_2 , y así sucesivamente. En forma similar se obtienen los componentes de \underline{X} del segundo sistema, en el orden X_N, X_{N-1}, \dots, X_1 .

El cálculo de \underline{L} y \underline{U} junto con la solución del primer sistema se llama eliminación hacia adelante. La solución del segundo sistema recibe el nombre de sustitución hacia atrás. Por último, la obtención de \underline{L} y \underline{U} es lo que se llama descomposición triangular.

La matriz \underline{U} se obtiene por triangulación de la matriz

\underline{A} , es decir, resulta de hacer cero los elementos bajo la -- diagonal de la matriz. Para esto se usan operaciones elementales de hilera. La matriz \underline{L} , resulta de almacenar los -- multiplicadores $\{m_{ij}\}$ necesarios para hacer cero los elementos bajo la diagonal de \underline{A} . Conforme se avanza en la eliminación, los elementos bajo la diagonal $\{m_{ij}\}$ de \underline{L} , se almacenan en el lugar de los elementos bajo la diagonal de \underline{A} , y los elementos m_{ij} de \underline{U} se almacenan en el lugar de los elementos de la diagonal y arriba de la diagonal de \underline{A} . Finalmente se tienen las matrices \underline{L} y \underline{U} almacenadas en el lugar de \underline{A} . La solución intermedia \underline{Y} , es simplemente la actualización de los lados derechos, al aplicarles las mismas -- transformaciones que se hicieron sobre \underline{A} , para obtener \underline{U} .

V.2. Pivoteo Parcial por Tamaño.

Para estabilidad del cálculo se deben evitar pivotes -- $a_{rr}^{(r)}$, que sean pequeños en valor absoluto. Es por esto que se seleccionan como pivotes, el mayor en valor absoluto de los números $a_{ir}^{(r)}$ ($i \geq r$), o uno de los mayores si hay varios. Entonces, a cada etapa de la eliminación se determina el -- elemento $a_{ir}^{(r)}$ que sea mayor en valor absoluto, y se intercambian los renglones r e i .

En una computadora no es necesario intercambiar los -- renglones de \underline{A} y \underline{b} . En su lugar se crea un arreglo de enteros IP_i ($i=1, \dots, N$), y se llama por $a_{IP_i, j}$ en lugar de a_{ij} .

Por tanto, estos valores del arreglo IP_i reemplazan el intercambio real.

V.3. Escalamiento de Columnas y Renglones.

El manejar cantidades del mismo orden de magnitud durante el proceso de eliminación, permite reducir los errores de redondeo. Se ha demostrado que los mejores resultados se obtienen cuando a cada etapa, el elemento de mayor valor absoluto siempre está acotado por la unidad (Wilkinson, 1965).

El procedimiento aplicado, aunque no es el óptimo, es el siguiente: se escalan las columnas y renglones de forma tal que el elemento de mayor valor absoluto en cada columna y cada renglón sea uno.

V.4. Descomposición Triangular.

En general no existe una factorización LU única de una matriz. Si $\underline{A} = \underline{L}\underline{U}$ es una factorización de \underline{A} , y \underline{D} es una matriz diagonal no singular, luego $\underline{L}' = \underline{L}\underline{D}$ es triangular inferior y $\underline{U}' = \underline{D}^{-1}\underline{U}$ es triangular superior. De aquí

$$\underline{A} = \underline{L}\underline{U} = \underline{L}'\underline{D}\underline{D}^{-1}\underline{U} = \underline{L}'\underline{U}' \quad (5.4)$$

y $\underline{L}'\underline{U}'$ es también una descomposición LU de \underline{A} . Esto sugiere la posibilidad de normalizar las descomposiciones LU de una matriz, insertando una matriz diagonal. Es decir

$$\underline{A} = \underline{L} \underline{D} \underline{U} \quad (5.5)$$

es una descomposición LDU de \underline{A} , puesto que \underline{L} es triangular inferior unitaria, \underline{D} es diagonal y \underline{U} es triangular superior unitaria.

Si se maneja la matriz diagonal en distintas formas en la descomposición LDU, se obtienen también diferentes composiciones. Hay tres variantes importantes. La primera asocia \underline{D} con la parte triangular inferior de la factorización.

$$\underline{A} = \underline{L}' \underline{U} = (\underline{L} \underline{D}) \underline{U} \quad (5.6)$$

Esta se conoce como descomposición de Crout. La segunda se llama descomposición de Doolittle, y asocia \underline{D} con la parte triangular superior

$$\underline{A} = \underline{L} \underline{U}' = \underline{L} (\underline{D} \underline{U}) \quad (5.7)$$

Cuando \underline{A} es simétrica y tiene una descomposición LDU única, la descomposición debe tener la forma

$$\underline{A} = \underline{L} \underline{D} \underline{L}^T \quad (5.8)$$

Si los elementos de la diagonal de \underline{D} son positivos, -- luego se forma la matriz $\underline{D}^{1/2} = \text{diag} (\delta_{11}^{1/2}, \dots, \delta_{NN}^{1/2})$.

Entonces \underline{A} puede escribirse como

$$\underline{A} = \underline{L}' \underline{L}'^T = (\underline{L} \underline{D}^{1/2}) (\underline{D}^{1/2} \underline{L}^T) \quad (5.9)$$

Esta variante se conoce como descomposición de Cholesky de \underline{A} (Stewart, 1973).

Cuando \underline{A} no es simétrica, se puede obtener una descomposición análoga en la forma:

$$\underline{A} = \underline{L}' \underline{U}' = (\underline{L} \underline{D}^{1/2}) (\underline{D}'^{1/2} \underline{U}) \quad (5.10)$$

y donde $\underline{D}^{1/2}$ y $\underline{D}'^{1/2}$ difieren en que si algún elemento de \underline{D} -- tiene signo negativo, la raíz cuadrada se efectúa sobre el valor absoluto, pero el signo negativo se asocia al elemento correspondiente de $\underline{D}'^{1/2}$.

V.5. La Variante de Crout.

Una forma eficiente de efectuar la descomposición --- triangular es usando la variante de Crout (Forsythe y Moler, 1967). La única diferencia con eliminación Gaussiana es el orden en que se hacen las operaciones, ya que finalmente -- son las mismas en ambos casos. Se tiene la ventaja de que nunca se tienen las matrices intermedias, y cuando se pue-- den acumular los productos internos, este método es bastante preciso (Wilkinson, 1965).

A continuación se describe el Método de Crout. La matriz \underline{U} que se forma en este caso tiene sus elementos $u_{rr}=1$, $r=1,2,--,N$. Si suponemos que se tienen ya los primeros $r-1$ renglones y columnas de \underline{L} y \underline{U} respectivamente, luego en vista de que $\underline{A} = \underline{L} \underline{U}$, y el hecho que $m_{ip}=0$ para $p>1$, $u_{pr}=0$ para $p>r$ y $u_{rr}=1$, tenemos

$$a_{ir} = m_{ir} + \sum_{p=1}^{r-1} m_{ip} u_{pr} \quad i>r \quad (5.11)$$

de donde se obtiene

$$m_{ir} = a_{ir} - \sum_{p=1}^{r-1} m_{ip} u_{pr} \quad i > r \quad (5.12)$$

Entonces se conoce ahora la columna r de \underline{L} . Similarmente - para u_{rj} , partiendo del hecho que $m_{rp}=0$ para $p > r$, tenemos:

$$a_{rj} = m_{rr} u_{rj} + \sum_{p=1}^{r-1} m_{rp} u_{pj} \quad j > k \quad (5.13)$$

de donde se obtiene la expresión deseada:

$$u_{rj} = (a_{rj} - \sum_{p=1}^{r-1} m_{rp} u_{pj}) / m_{rr} \quad j > k \quad (5.14)$$

La primera columna de \underline{L} está dada por $m_{i1} = a_{i1}$, $i = 1, \dots, N$. El primer renglón de \underline{U} , es también fácil de calcular:

$$u_{1j} = a_{1j} / m_{11} \quad j > 1 \quad (5.15)$$

Es necesario aclarar que con este método los elementos de \underline{L} son (ordinariamente) diferentes de 1.

En la figura 5.1 se muestra cómo se almacenan las matrices al inicio de la etapa r . Nótese que no se almacena la diagonal de \underline{U} . En síntesis, para determinar \underline{L} y \underline{U} completamente el orden de cálculo es como sigue: primera colum

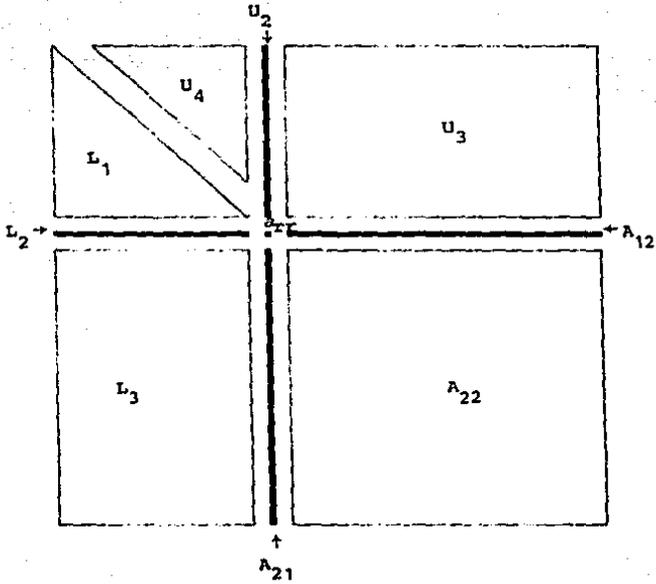


Figura 5.1. Esquema de Almacenamiento para el Método de Crout.

na de \underline{L} , primer renglón de \underline{U} , segunda columna de \underline{L} , segundo renglón de \underline{U} , y así sucesivamente.

V.6 La Variante de Cholesky.

La variante de Cholesky para el caso en que la matriz no es simétrica se obtiene en forma análoga al Método de Crout. Se tienen las siguientes diferencias.

1. Es necesario almacenar los elementos de la diagonal de \underline{U}' .
2. A cada etapa de eliminación, los elementos de la columna de \underline{U}' correspondiente, se obtiene dividiendo por la raíz cuadrada del pivote seleccionado para esa etapa.
3. Los elementos de la matriz \underline{U}' se obtienen en forma análoga al Método de Crout, pero con el elemento m_{rr} modificado en la forma descrita en el punto 2.

V.7. Procedimiento Iterativo.

No obstante que los errores de redondeo en los métodos de eliminación con intercambios para una matriz bien escalada son pequeños, algunas veces se desea una precisión mayor en la solución, particularmente cuando la matriz \underline{A} es mal condicionada. Se pueden tener tales soluciones para la mayoría de los sistemas lineales con sólo un -

modesto incremento en el tiempo (alrededor de 25%), después de haber encontrado la primera solución para \underline{x} (Forsythe, - 1967).

Esta técnica se aplica de la siguiente manera:

$$\underline{x}^{(0)} = \underline{0} \quad \underline{r}^{(0)} = \underline{b} \quad (5.16)$$

$$\underline{LUd}^{(K-1)} = \underline{r}^{(K-1)}, \quad \underline{x}^{(K)} = \underline{x}^{(K-1)} + \underline{d}^{(K-1)}, \quad \underline{r}^{(K)} = \underline{b} - \underline{A} \underline{x}^{(K)}$$

El procedimiento termina cuando se ha alcanzado la precisión deseada.

V.8. Nomenclatura.

- \underline{A} Matriz de coeficientes del sistema de ecuaciones lineales 5.1
- \underline{b} Vector de lados derechos del sistema 5.1
- \underline{d} Vector de residuos, procedimiento 5.9
- \underline{L} Matriz triangular inferior.
- N Número de variables independientes.
- \underline{r} Vector de errores, procedimiento 5.9
- \underline{U} Matriz triangular superior
- \underline{x} Vector de variables independientes
- \underline{y} Solución intermedia, procedimiento 5.3

CAPÍTULO VI

TÉCNICAS PARA MANEJAR MATRICES DISPERSAS

Las matrices jacobiano resultantes se resuelven aplicando algoritmos adecuados para matrices dispersas (Holland, -- 1981). La literatura sobre este tema es abundante; sin em bargo, las técnicas aplicadas aquí se tomaron de dos traba jos que cubren ampliamente el área de aplicación para Ingenería Química (Tewarson, 1973; Gustavson, 1980).

Los dos puntos principales sobre los que se enfocan - estos algoritmos son: a) almacenar solamente los elementos diferentes de cero, y exclusivamente hacer operaciones con éstos, ahorrando de esta manera memoria de computadora y - tiempo de ejecución; b) minimizar el llenado de las matri- ces durante el proceso de eliminación de los elementos bajo la diagonal. Esto último se puede hacer antes de la -- eliminación, simulando el proceso con matrices Booleanas, - lo que permite usar almacenamiento con localidades fijas, llamado estático, minimizándose el almacenamiento requerido (Gustavson, 1980). La otra forma de hacerlo es a cada etapa de la eliminación, seleccionando como pivote aquel - elemento que permita un llenado mínimo. Esto último re-- quiere un esquema de almacenamiento que permita adicionar

elementos que van apareciendo como consecuencia de operaciones con elementos diferentes de cero, sobre la misma columna y sobre el mismo renglón del elemento en cuestión. - Un esquema de este tipo se conoce como dinámico.

En este trabajo se usan ambos esquemas de almacenamiento, estático y dinámico, pero no se controla en forma alguna el llenado de las matrices, como consecuencia de la elección de pivoteo por tamaño.

Como los métodos directos de solución de ecuaciones lineales destruyen la matriz original, en la aplicación -- del Método de Schubert es necesario guardar una copia del jacobiano que se va actualizando. Para esto se usa almacenamiento estático. Durante el proceso de eliminación Gaussiana se usa un esquema dinámico.

La forma de evaluar el jacobiano, descrita en el Capítulo IV, obliga a guardarlo por columnas en forma permutada, ya que se evalúan varias columnas al mismo tiempo. Como es más útil en este caso tener la información almacenada por renglones, se aplica un algoritmo para obtener la - transpuesta permutada de la matriz en forma óptima (Gustavson, 1980).

En seguida se presentan estas técnicas, usando una matriz de 4×4 tomada del texto de Holland (1981).

VI. 1. Almacenamiento Estático.

La información se puede guardar por renglones o por columnas. En este caso se hará por renglones. Toda la información se tiene almacenada en tres arreglos. Renglón a renglón se van colocando los valores de los elementos diferentes de cero en el arreglo A. Los índices de las columnas correspondientes a cada elemento se van almacenando en el vector JA. En el tercer arreglo se tiene un conjunto de señaladores de renglones (IA), donde el *i*-ésimo elemento de IA es la dirección en ambos, JA y A, del primer elemento diferente de cero del *i*-ésimo renglón de la matriz.

Si denotamos por *N* el número de renglones y por *NA* el número de elementos diferentes de cero, las dimensiones de IA, JA y A, son *N*+1, *NA* y *NA*, respectivamente. En total se requieren $2NA+N+1$ localidades. Como ejemplo se almacenará la matriz MA en forma compacta.

$$\underline{MA} = \begin{bmatrix} 1 & 3 & 1 & \emptyset \\ 6 & 2 & \emptyset & \emptyset \\ \emptyset & 5 & \emptyset & 3 \\ 4 & \emptyset & 2 & 9 \end{bmatrix}$$

La representación dispersa por renglones de MA es:

<u>IA</u>	=	1			4		6		8			11
		+			+		+		+			+
<u>JA</u>	=	1	2	3	1	2	2	4	1	3	4	
<u>A</u>	=	1	3	1	6	2	5	3	4	2	9	

El cuarto renglón de MA comienza en la posición $IA(4)=8$ y termina en la posición $IA(4+1)-1=10$ de los arreglos JA y A. Por tanto el cuarto renglón de MA tiene tres elementos diferentes de cero en las posiciones (4,1), (4,3) y (4,4).

VI.2. Almacenamiento Dinámico.

Para ilustrar este esquema se almacenará la matriz MA y se mostrará la forma en que se modifica al ir haciendo su factorización LU.

Definiendo los siguientes arreglos:

IA: vector que señala las localidades de los primeros elementos de cada renglón.

JA: vector que contiene los índices de las columnas - en que se encuentran los elementos de MA.

A: vector que contiene los valores de los elementos diferentes de cero en MA.

NSL: vector que contiene las direcciones de los siguientes elementos diferentes de cero en cada renglón. Para significar que es el último elemento de cada

renglón, se almacena en ese lugar el valor de cero.

NASL: indica la siguiente localidad vacía en A.

Los arreglos A, JA y NSL deben tener localidades disponibles para almacenar los elementos, producto del llenado - por las operaciones de hilera.

						<u>IA</u>													
						3													
						1													
						8													
						7													
Localidad	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16			
<u>JA</u>	1		1	4		2	1	2		3		2				4	3		
<u>A</u>	6		1	9		3	4	5		1		2				3	2		
<u>NSL</u>	12	11	6	0	0	10	16	15	2	0	14	0	5	13	0	4			
NASL	= 9																		

El segundo renglón de MA comienza en la localidad 1, - el primer elemento se encuentra en la columna 1 ($JA(1)=1$) y su valor es 6 ($A(1)=6$), el siguiente elemento se encuentra - en la localidad 12 ($NSL(1)=12$), se encuentra en la columna - 2 ($JA(12)=2$) y su valor es 2 ($A(12)=2$), y es el último elemento de este renglón. El renglón 3 comienza en la localidad 7, y en la forma descrita anteriormente se localizan los --

elementos de ese renglón. Una vez que se han llenado las localidades necesarias para almacenar la matriz MA el primer elemento que resulte como llenado se almacenará en la localidad $NASL = 9$, y a esta variable se le asigna el valor $NSL(NASL)=2$. En esa misma forma se van guardando todos los elementos adicionales.

Este esquema necesita $3NA+N+1$ localidades de memoria.

Para efectuar la factorización LU se define el siguiente arreglo adicional:

IPV: vector que almacena el orden de pivoteo durante la factorización.

Para encontrar los factores LU se aplicará el algoritmo de Crout, descrito en el Capítulo anterior.

En primer lugar se muestra la matriz original MA con su correspondiente vector IPV:

$$\begin{array}{c} \underline{IPV} \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{array} \left[\begin{array}{cccc} 1 & 3 & 1 & \emptyset \\ 6 & 2 & \emptyset & \emptyset \\ \emptyset & 5 & \emptyset & 3 \\ 4 & \emptyset & 2 & 9 \end{array} \right] = \underline{MA}$$

Se selecciona el renglón 2 como primer pivote, y se determinan la primera columna de L y el primer renglón de U. Enseguida se muestra la matriz resultante. Los números en--

tre paréntesis, son los multiplicadores necesarios para hacer ceros los elementos que se encontraban en esas posiciones, y que son elementos de \underline{L} .

$$\begin{array}{c}
 \underline{IPV} \\
 2 \\
 1 \\
 3 \\
 4
 \end{array}
 \begin{bmatrix}
 (1) & 3 & 1 & \emptyset \\
 6 & 1/3 & \emptyset & \emptyset \\
 (\emptyset) & 5 & \emptyset & 3 \\
 (4) & \emptyset & 2 & 9
 \end{bmatrix}
 \Rightarrow
 \begin{bmatrix}
 6 & 1/3 & \emptyset & \emptyset \\
 (1) & 3 & 1 & \emptyset \\
 (\emptyset) & 5 & \emptyset & 3 \\
 (4) & \emptyset & 2 & 9
 \end{bmatrix}$$

Los elementos de \underline{IPV} denotan el reordenamiento de los renglones de \underline{MA} en la matriz transformada. A la derecha se muestra cómo sería la matriz si se hubieran hecho realmente los intercambios.

Se actualiza la segunda columna de \underline{L} y se selecciona - el renglón 3 como segundo pivote para determinar la segunda columna de \underline{L} y el segundo renglón de \underline{U} .

$$\begin{array}{c}
 \underline{IPV} \\
 2 \\
 3 \\
 1 \\
 4
 \end{array}
 \begin{bmatrix}
 (1) & (8/3) & 1 & \emptyset \\
 6 & 1/3 & \emptyset & \emptyset \\
 (\emptyset) & 5 & \emptyset & 3/5 \\
 (4) & (-4/3) & 2 & 9
 \end{bmatrix}
 \Rightarrow
 \begin{bmatrix}
 6 & 1/3 & \emptyset & \emptyset \\
 (\emptyset) & 5 & \emptyset & 3/5 \\
 (1) & (8/3) & 1 & \emptyset \\
 (4) & (-4/3) & 2 & 9
 \end{bmatrix}$$

Nótese que apareció un elemento diferente de cero en - la posición (4,2).

Se actualiza la tercera columna de \underline{L} y se selecciona el renglón 4 como tercer pivote para encontrar la tercera columna de \underline{L} y el tercer renglón de \underline{U} .

IPV

$$\begin{array}{r}
 2 \\
 3 \\
 4 \\
 1
 \end{array}
 \begin{bmatrix}
 (1) & (8/3) & (1) & \emptyset \\
 6 & 1/3 & \emptyset & \emptyset \\
 (\emptyset) & 5 & \emptyset & 3/5 \\
 (4) & (-4/3) & 2 & 49/10
 \end{bmatrix}
 \Rightarrow
 \begin{bmatrix}
 6 & 1/3 & \emptyset & \emptyset \\
 (\emptyset) & 5 & \emptyset & 3/5 \\
 (4) & (-4/3) & 2 & 49/10 \\
 (1) & (8/3) & (1) & \emptyset
 \end{bmatrix}$$

Por último se actualiza el elemento (4,4) para terminar la triangulación, obteniéndose:

IPV

$$\begin{array}{r}
 2 \\
 3 \\
 4 \\
 1
 \end{array}
 \begin{bmatrix}
 (1) & (8/3) & (1) & -13/2 \\
 6 & 1/3 & \emptyset & \emptyset \\
 (\emptyset) & 5 & \emptyset & 3/5 \\
 (4) & (-4/3) & 2 & 49/10
 \end{bmatrix}
 \Rightarrow
 \begin{bmatrix}
 6 & 1/3 & \emptyset & \emptyset \\
 (\emptyset) & 5 & \emptyset & 3/5 \\
 (4) & (-4/3) & 2 & 49/10 \\
 (1) & (8/3) & (1) & -13/2
 \end{bmatrix}$$

Nótese que apareció otro elemento diferente de cero en la posición (1,4).

A continuación se muestra cómo se van almacenando estos matrices en forma empacada, y cómo se acomodan los elementos que aparecieron:

<u>IA</u>	<u>IPV</u>	Localidad	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
3	2	<u>JA</u>	1		1	4		2	1	2	2	3		2			4	3
1	3	<u>A</u>	6		1	9	8/3	4	5	-4/3	1	1/3					3/5	2
8	1	<u>NSL</u>	12	11	6	∅	∅	10	9	15	16	∅	14	∅	5	13	∅	4
7	4	NASL =	2															

<u>IA</u>	<u>IPV</u>	Localidad	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
3	2	<u>JA</u>	1	1	4		2	1	2	2	3		2				4	3
1	3	<u>A</u>	6	1	49/10	8/3	4	5	-4/3	1	1/3						3/5	2
8	1	<u>NSL</u>	12	11	6	∅	∅	10	9	15	16	∅	14	∅	5	13	∅	4
7	4	NASL =	2															

<u>IA</u>	<u>IPV</u>	Localidad	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
3	2	<u>JA</u>	1	4	1	4		2	1	2	2	3		2			4	3
1	3	<u>A</u>	6	-13/2	1	49/10	8/3	4	5	-4/3	1	1/3					3/5	2
8	1	<u>NSL</u>	12	∅	6	∅	∅	10	9	15	16	2	14	∅	5	13	∅	4
7	4	NASL =	11															

VI.3. Algoritmo Para Obtener la Transpuesta Permutada de una Matriz Dispensa.

Una representación de \underline{A} por renglones es igual a una representación de \underline{A}^T por columnas. En seguida se describe brevemente el algoritmo, en términos de calcular una representación ordenada de \underline{A}^T a partir de una representación no-ordenada de \underline{A} .

Primero se reserva espacio para cada columna de \underline{A} (renglón de \underline{A}^T) en un arreglo de tamaño NA, definiendo para esto un arreglo de m señaladores (m es el número de columnas de la matriz \underline{A}). Este arreglo se denomina \underline{IAT} , y se obtiene de contar los índices de las columnas de \underline{A} que aparecen en cada renglón y convertir la información en señaladores -- por renglones de \underline{A}^T . El arreglo \underline{IAT} sirve para partir el -- espacio de NA localidades en espacio para m listas; cada -- lista tiene espacio para una columna de \underline{A} . En seguida, para $i=1, N$ se pasa sobre los renglones de \underline{A} en orden secuencial. Justamente antes de procesar el renglón i de \underline{A} , cada lista contiene un subconjunto ordenado de los enteros de 1 a i-1, y cada señalador tiene la información del próximo -- elemento libre en el arreglo de tamaño NA. La j-ésima lista, $1 \leq j \leq m$ contiene los índices de los renglones de la columna j de \underline{A} hasta i-1. Cuando se procesa el renglón i, cada elemento a_{ij} diferente de cero hace que i se sume a la lista j, y el señalador de la lista j se incremente. Cada una de las m listas recibe los índices en forma ordenada y secuencial, independientemente del orden original de los índices de las columnas de \underline{A} . Lo importante es que se recuperan los índices de los renglones de \underline{A} en grupos ordenados. Por último, es tan fácil calcular $(\underline{P} \underline{A})^T$ como lo es \underline{A}^T : simplemente se accesa el renglón $\underline{P}(i)$ en lugar del renglón i de \underline{A} en la etapa i.

En seguida se presenta la codificación en FORTRAN del algoritmo, donde se usa la siguiente nomenclatura:

IC Vector de permutaciones, de tamaño N

IA Vector de direcciones del primer elemento de cada renglón en A.

JA Vector de índices de columnas de A.

A Vector de valores de los elementos diferentes de cero en la matriz A.

IAT, JAT, AT, contiene información análoga a IA, JA y A respectivamente, para la matriz transpuesta.

IP, IA1, IA2, JPT, son variables enteras auxiliares.

```
DO 1 I=1, M
1 IAT (I) = 0
DO 2 JP=1,NA
J = JA(JP)
2 IAT(J) = IAT(J)+1
IAT(M+1) = NA+1-IAT(M)
DO 3 I=M,2,-1
3 IAT(I) = IAT(I+1)-IAT(I-1)
DO 4 I=1,N
IP = IC(I)
IA1 = IA(IP)
IA2 = IA (IP+1)-1
```

```
DO 4 JP = IA1, IA2
  J = JA(JP)
  JPT = IAT(J+1)
  JAT (JPT) = I
  AT (JPT) = A(JP)
4  IAT(J+1) = JPT+1
  IAT(1) = 1
END
```

Al aplicar el algoritmo anterior a la matriz MA con IC = I (matriz identidad), se obtiene:

<u>IAT</u>	1			4			7		9		11
	+			+			+		+		+
<u>JAT</u>	1	2	4	1	2	3	1	4	3	1	
<u>AT</u>	1	6	4	3	2	5	1	2	3	9	

CAPÍTULO VII

PROBLEMAS RESUELTOS

En esta parte se presenta el conjunto de problemas resueltos. La Tabla 7.1 muestra información con el nombre del problema, el número de componentes y de etapas, así como las características de las columnas en lo que se refiere a existencia y tipo de condensador, existencia de rehervidor, extracciones laterales e intercambios térmicos, así como el número de alimentaciones. En seguida se presenta el planteamiento de los problemas y los resultados obtenidos en cada caso, reportándose los perfiles de líquido, vapor y temperaturas de la columna, así como las composiciones de los productos. También se reportan las cargas térmicas de condensadores y rehervidores en los casos en que se calculan. Adicionalmente se presentan los perfiles iniciales y los métodos de cálculo de propiedades utilizados. En los casos en que se tomó el problema de alguna referencia, se indica la fuente.

La Tabla 7.2 muestra el número de iteraciones requeridas, para el grupo selecto de problemas, el error final alcanzado y el tiempo de CPU en segundos.

Todos los problemas se corrieron en una computadora -- UNIVAC 1100/82.

Finalmente la Tabla 7.3 presenta información concerniente al manejo de las matrices, para el conjunto de problemas anterior. Se muestra el número de ecuaciones resueltas, el número de elementos diferentes de cero, el llenado ocasionado por el proceso de triangulación, reportado como veces el número de elementos diferentes de cero originalmente. Adicionalmente, el número de veces que se evaluó el jacobiano y el número de iteraciones que se mantuvo constante cerca de la solución. Finalmente, se reporta el número máximo de iteraciones requeridas en cada caso, para afinar la precisión de las variables obtenidas en el proceso de eliminación Gaussiana, hasta que el valor de cada uno de los residuos sea menor que $(10)^{-9}$ por el valor de la variable.

Para el cálculo de propiedades termofísicas se utilizó el paquete de cálculo de propiedades del simulador de procesos SIMPROC, del Instituto Mexicano del Petróleo.

La inicialización de las variables de iteración, se hizo en todos los casos usando la técnica descrita en el Apéndice A, excepto para el problema 16, que se utilizó la forma del Apéndice B.

VII.1. Comentarios Adicionales.

El escalamiento de renglones durante el proceso de solución de ecuaciones lineales se implementó en la siguiente forma. Antes del proceso de eliminación se escalaron los renglones entre 0 y $1/8$.

En el esquema de almacenamiento compacto usado se guardó en una misma palabra, información para dos elementos de los vectores JA y NSL, para ahorrar memoria.

Una vez que se resolvió en la primera iteración el primer sistema de ecuaciones se ha almacenado suficiente información para resolver en forma más rápida los sistemas de ecuaciones lineales de las siguientes iteraciones. Es decir, si se utilizan los mismos pivotes que en la primera iteración, se sabe donde van a aparecer elementos diferentes de cero durante el proceso de eliminación.

Si cerca de la solución el jacobiano no cambia, esto permite acelerar el cálculo, ya que se tienen almacenados los factores LU y el problema se reduce a hacer la sustitución hacia atrás con el nuevo vector de lados derechos. Esto se detecta fácilmente, ya que al actualizar la matriz jacobiano se observa si no cambió ningún elemento.

TABLA 7.1 EJEMPLOS RESUELTOS.

No.	Descripción del Problema Título	NC	NP	Tipo de Conden- sador.	Reher- vidor.	No. Ali- menta- ciones.	Inter- cambio Térmi- co.	Extrac- ción Lateral
1	Amplio rango de T. de Eb. con un comp. intermedio	3	20	Total	Sí	1	-	-
2	Amplio rango de T. de Eb. con comps. intermedios	5	20	Total	Sí	1	-	-
3	Columna desmetanizadora I	8	15	-	Sí	2	-	-
4	Columna desmetanizadora II	11	11	-	Sí	2	-	-
5	Columna desmetanizadora III	11	21	-	Sí	2	-	-
6	Desetanizadora I	8	22	Parcial	Sí	1	-	-
7	Desetanizadora II	10	18	Total	Sí	1	-	-
8	Separación etano-etileno	5	50	Total	Sí	1	-	-
9	Despropanizadora	4	31	Total	Sí	1	-	-
10	Desbutanizadora	8	31	Total	Sí	1	-	-
11	Estabilización de gasolinas	11	13	Parcial	Sí	1	-	Sí
12	Separación acetona-agua	2	38	Total	-	2	-	-
13	Metanol puro.	3	15	Total	Sí	1	-	-
14	Destilación altamente no-ideal	4	10	Total	Sí	1	-	-
15	Separación metanol-agua	2	49	Total	Sí	1	-	-
16	Destilación extractiva.	4	50	Total	Sí	3	-	-
17	Destilación extractiva con furfural	8	15	-	Sí	2	-	-
18	Absorbedor I	14	8	-	--	2	-	-
19	Absorbedor II	20	8	-	--	2	-	-
20	Absorción de propano	21	6	-	--	2	-	-
21	Absorción con intercambio térmico	12	7	-	--	2	Sí	-
22	Absorbedor con presaturador	15	6	-	--	2	Sí	-
23	Absorbedor con rehervidor	6	11	-	Sí	2	-	-
24	Columna agotadora	13	14	-	Sí	2	-	-

VII.2. Ejemplos 1-11.

Problemas de Destilación, Soluciones de Hidrocarburos.

1. Mezcla de amplio rango de temperaturas de ebullición con un componente intermedio.

Fuente: Gupta y Gallier (1979).

Número total de etapas:	20
Condensador:	Sí, etapa 1, total.
Rehervidor:	Sí, etapa 20.
Intercambio térmico:	No.
Relación de reflujo:	200:31, líquido saturado.
Presión de la columna:	100 psia
Alimentaciones:	
Presión, psia:	100
Temperatura, °F:	Líquido saturado
Flujo, lb-mol/h:	100.0
Etapas:	10
Composición:	(fracción mol)
C_2H_6	0.30
C_3H_8	0.30
n- $C_{12}H_{26}$	0.40
Producto de fondos:	69.0 lb-mol/h

Perfiles finales de temperatura y flujos de vapor y líquido.

Etapa	Temperatura (°F)	Vapor (lb-mol/h)	Líquido (lb-mol/h)
1	-45.379	-	200.000
2	-38.433	231.000	185.029
3	-17.936	216.029	165.324
4	11.143	196.324	157.911
5	30.279	188.911	158.581
6	38.122	189.581	159.682
7	40.792	190.682	160.153
8	41.649	191.153	160.314
9	41.919	191.314	155.017
10	53.493	186.016	268.286
11	61.708	199.286	274.584
12	64.752	205.584	277.098
13	65.805	208.098	277.991
14	66.162	208.991	278.295
15	66.281	209.295	278.398
16	66.321	209.398	278.431
17	66.335	209.431	278.421
18	66.380	209.421	277.573
19	67.970	208.573	248.047
20	130.464	179.047	69.000

2. Mezcla de amplio rango de temperaturas de ebullición con componentes intermedios.

Fuente: Gupta y Gallier (1979)

Número total de etapas: 20
Condensador: Sí, etapa 1, total
Rehervidor: Sí, etapa 20
Intercambio térmico: No
Relación de reflujo: 4, líquido saturado
Presión de la columna: 14.7 psia

Alimentaciones:

Presión, psia	14.7
Temperatura, °F	Vapor saturado
Flujo lb-mol/h	100
Etapas	9
Composición	(Fracción mol)
n-C ₄ H ₁₀	0.300
n-C ₅ H ₁₂	0.100
n-C ₇ H ₁₆	0.200
n-C ₉ H ₂₀	0.100
n-C ₁₀ H ₂₂	0.300

Producto de fondos: 50. lb-mol/h

Perfiles finales de temperatura y flujos de vapor y líquido.

Etapa	Temperatura (°F)	Vapor (lb-mol/h)	Líquido (lb-mol/h)
1	53.220	-	200.00
2	135.126	250.000	166.427
3	186.575	216.427	183.029
4	196.252	233.029	187.746
5	197.822	237.745	188.481
6	158.147	238.481	188.299
7	198.579	238.299	186.165
8	201.267	236.165	173.434
9	217.591	223.434	145.364
10	227.652	95.364	151.043
11	229.113	101.043	151.894
12	229.347	101.894	152.026
13	229.393	102.026	152.040
14	229.424	102.040	152.019
15	229.511	102.019	151.917
16	229.845	101.917	151.499
17	231.181	101.499	149.901
18	236.352	99.901	144.984
19	253.318	94.984	137.029
20	288.540	87.029	50.000

Destilado líquido: 50.000 lb-mol/h

Productos

Composición	Destilado líquido (fracción-mol)	Prod. de Fondos (fracción-mol)
n-C ₄ H ₁₀	0.60000	-
n-C ₅ H ₁₂	0.20000	-
n-C ₇ H ₁₆	0.2000	0.20000
n-C ₉ H ₂₀	-	0.20000
n-C ₁₀ H ₂₂	-	0.60000

Carga térmica del condensador: -3,416,810.0 BTU/h

Carga térmica del rehervidor: 1,662,721.6 BTU/h

Comentarios

Perfiles iniciales

Temperatura: $T_1 = 50$, $T_3 = 190$, $T_{18} = 240$, $T_{20} = 290$,

perfil lineal entre éstas.

Vapor: $V_j = 250$; $j = 2, 8$; $V_j = 150$; $j = 9, 20$.

Líquido: $L_j = 200$; $j = 1, 19$; $L_{20} = 50.0$

Métodos de cálculo de propiedades.

Entalpia Ecuación de Soave

Constantes de equilibrio Ecuación de Soave

3. Columna desmetanizadora.

Número total de etapas: 15

Condensador: No

Rehervidor: Sí, etapa 15

Intercambio térmico: No

Relación de reflujo: -

Presión de la columna: 469.7 psia en el domo, con ---
una caída de 0.2 psi por etapa.

Alimentaciones:	1	2
Presión, psia	469.7	471.3
Temperatura, °F	-77.69	-54.40
Flujo, lb-mol/h	16,864.537	6121.773

Etapa	1	4
Composición	(Fracción mol)	(Fracción mol)
CH ₄	0.92915	0.42859
C ₂ H ₆	0.05830	0.24231
C ₃ H ₈	0.01124	0.20968
i-C ₄ H ₁₀	0.00051	0.02750
n-C ₄ H ₁₀	0.00071	0.05821
i-C ₅ H ₁₂	0.00005	0.01221
n-C ₅ H ₁₂	0.00004	0.01340
n-C ₆ H ₁₄	0.00001	0.00809

Destilado vapor: 19509.0 lb-mol/h

Perfiles finales de temperatura y flujos de vapor y líquido.

Etapa	Temperatura (°F)	Vapor (lb-mol/h)	Líquido (lb-mol/h)
1	-74.848	19509.0	174.418
2	-58.503	2818.881	159.656
3	-56.253	2804.119	145.759
4	-54.513	2790.222	5360.284
5	-54.494	1882.973	5361.228
6	-54.467	1883.918	5362.143
7	-54.413	1884.832	5362.952
8	-54.265	1885.642	5363.404
9	-53.788	1886.094	5362.744
10	-52.187	1885.431	5359.617
11	-46.916	1882.307	5359.930
12	-31.379	1882.620	5429.667
13	3.300	1952.357	5767.381
14	53.252	2290.071	6391.313
15	109.204	2914.003	3477.310

Productos

Composición	Destilado vapor (fracción-mol)	Prod. de Fondos (fracción-mol)
CH ₄	0.92946	0.04617
C ₂ H ₆	0.05999	0.37275
C ₃ H ₈	0.00990	0.36812
i-C ₄ H ₁₀	0.00031	0.04918
n-C ₄ H ₁₀	0.00033	0.10407
i-C ₅ H ₁₂	0.00001	0.02168
n-C ₅ H ₁₂	0.00001	0.02375
n-C ₆ H ₁₄	-	0.01429

Carga térmica de rehervidor: 19,293,009. BTU/h

Comentarios

Perfiles iniciales:

Temperatura: $T_1 = -75$; $T_{15} = -5$; perfil lineal entre -
ésta.

Vapor: $V_1 = 19509.0$, $V_j = 2814.437$, $j = 2, 4$;

$V_j = 1912.898$, $j = 5, 15$.

Líquido: $L_j = 169.974$, $j = 1, 3$; $L_j = 5390.208$, $j = 4$,

14 ; $L_{15} = 3477.310$.

Métodos de cálculo de propiedades

Entalpia

Ecuación de Soave

Constantes de equilibrio Ecuación de Soave

4. Columna desmetanizadora.

Número total de etapas: 11

Condensador: No

Rehervidor: Sí, etapa 11

Intercambio térmico: No

Relación de reflujo: -

Presión de la columna: 414.7 psia en el domo, con una caída de 0.2 psi por etapa.

Alimentaciones:	1	2
Presión, psia	414.7	415.1
Temperatura, °F	-130.04	-84.29
Flujo, lb-mol/h	7400.7	7080.8
Etapas	3	1
Composición	(Fracción mol)	(Fracción mol)
N ₂	0.00187	0.00030
CO ₂	0.00111	0.00442
CH ₄	0.95701	0.70027
C ₂ H ₆	0.03266	0.15070
C ₃ H ₈	0.00580	0.07643
i-C ₄ H ₁₀	0.00082	0.02246
n-C ₄ H ₁₀	0.00055	0.01984
i-C ₅ H ₁₂	0.00010	0.00779
n-C ₅ H ₁₂	0.00005	0.00439
n-C ₆ H ₁₄	0.00002	0.00492
n-C ₇ H ₁₆	0.00001	0.00850

Producto de fondos: 2300.0 lb-mol/h

Perfiles finales de temperatura y flujos de vapor y líquido.

Etapa	Temperatura (°F)	Vapor (lb-mol/h)	Líquido (lb-mol/h)
1	-119.508	12181.500	845.925
2	-100.059	5626.725	542.955
3	-86.211	5323.755	3693.974
4	-86.167	1393.974	3694.979
5	-86.107	1394.978	3695.365
6	-85.932	1395.365	3694.184
7	-85.239	1394.184	3686.746
8	-82.323	1386.746	3658.382
9	-70.722	1358.382	3601.769
10	-34.151	1301.768	3628.005
11	41.191	1328.006	2300.000

Productos

Composición	Destilado vapor (fracción mol)	Producto de Fondos (fracción mol)
N ₂	0.00131	-
CO ₂	0.00106	0.01159
CH ₄	0.96840	0.10626
C ₂ H ₆	0.02818	0.41978
C ₃ H ₈	0.00101	0.24861
i-C ₄ H ₁₀	0.00004	0.07160
n-C ₄ H ₁₀	0.00001	0.06277
i-C ₅ H ₁₂	-	0.02430
n-C ₅ H ₁₂	-	0.01367
n-C ₆ H ₁₄	-	0.01521
n-C ₇ H ₁₆	-	0.02620

Carga térmica del rehervidor: 10,148,195, BTU/h

Comentarios:

Perfiles iniciales

Temperatura: $T_1 = -120$, $T_9 = -70$; $T_{11} = 41$,
perfil lineal entre éstas.

Vapor: $V_1 = 12181.$, $V_j = 5865.79$, $j = 2,3$;
 $V_j = 1976.569$, $j = 4,11$

Líquido: $L_j = 1084.99$, $j = 1,2$; $L_j = 4276.569$,
 $j = 3,10$, $L_{11} = 2300.$

Métodos de cálculo de propiedades

Entalpia

Ecuación de Soave

Constantes de equilibrio

Ecuación de Soave

5. Columna desmetanizadora.

Número total de etapas: 21

Condensador: No

Rehervidor: Sí, etapa 21

Intercambio térmico: No

Relación de reflujo: -

Presión de la columna: 284.7 psia en el domo, con una caída de 0.2 psi por etapa.

Alimentaciones:	1	2
Presión, psia	284.7	285.7
Temperatura, °F	-127.45	-67.6
Flujo, lb-mol/h	1006.8	2600.3
Etapas	1	5
Composición	(Fracción mol)	(Fracción mol)
N ₂	0.00102	0.00051
CO ₂	0.00855	0.00686
CH ₄	0.052024	0.41195
C ₂ H ₆	0.36632	0.31692
C ₃ H ₈	0.09720	0.19811
i-C ₄ H ₁₀	0.00360	0.02347
n-C ₄ H ₁₀	0.00293	0.03192
i-C ₅ H ₁₂	0.00009	0.00436
n-C ₅ H ₁₂	0.00005	0.00405
n-C ₆ H ₁₄	-	0.00129
n-C ₇ H ₁₆	-	0.00056

Producto de fondos: 1906.8 lb-mol/h

Perfiles finales de temperatura y flujos de vapor y líquido.

Etapa	Temperatura (°F)	Vapor (lb-mol/h)	Líquido (lb-mol/h)
1	-114.097	1700.300	932.042
2	-99.714	1625.543	892.743
3	-88.954	1586.243	876.477
4	-82.006	1569.977	840.228
5	-70.620	1533.728	2680.945
6	-65.534	774.145	2690.575
7	-52.653	783.775	2732.603
8	-28.362	825.803	2862.309
9	0.199	955.509	3084.368
10	20.675	1177.568	3294.100
11	31.178	1387.301	3421.188
12	35.798	1516.388	3482.088
13	37.731	1575.288	3508.770
14	38.545	1601.970	3520.441
15	38.914	1613.641	3525.957
16	39.117	1619.157	3528.969
17	39.289	1622.170	3530.571
18	39.573	1623.771	3529.511
19	40.384	1622.711	3518.085
20	43.378	1611.285	3461.542
21	55.798	1554.742	1906.800

Productos

Composición	Prod. Vapor (fracción mol)	Prod. de Fondos (fracción mol)
N ₂	0.00138	-
CO ₂	0.00177	0.01229
CH ₄	0.93805	-
C ₂ H ₆	0.05713	0.57466
C ₃ H ₈	0.00165	0.32001
i-C ₄ H ₁₀	0.00001	0.03390
n-C ₄ H ₁₀	0.00001	0.04507
i-C ₅ H ₁₂	-	0.00599
n-C ₅ H ₁₂	-	0.00555
n-C ₆ H ₁₄	-	0.00176
n-C ₇ H ₁₆	-	0.00076

Carga térmica del rehervidor: 7,887,154.8 BTU/h

Comentarios.

Perfiles iniciales

Temperatura: $T_1 = -117.646$; $T_{21} = 69.523$, perfil lineal entre éstas. Posteriormente se afinó por cálculo de la temperatura de ebullición - del líquido en cada etapa.

Vapor: $V_j = 1700.3$; $j = 1, 5$; $V_j = 955.3944$; $j = 6, 21$.

Líquido: $L_j = 1006.8$; $j = 1, 4$; $L_j = 2862.1944$; $j = 5, 20$; $L_{21} = 1906.8$.

Métodos de cálculo de propiedades

Entalpia	Ecuación de Soave
Constantes de equilibrio	Ecuación de Soave

6. Columna desetanizadora.

Número total de etapas: 22

Condensador: Sí, etapa 1, parcial.

Rehervidor: Sí, etapa 22

Intercambio térmico: No

Relación de reflujo: 2.07

Presión de la columna: 414.7 psia en el domo, con una caída de 0.2 psi por etapa y 5 psi en el condensador.

Alimentaciones:

Presión, psia 414.7

Temperatura, °F 113.

Flujo lb-mol/h 2363.4

Etapas 10

Composición (Fracción mol)

C_2H_6	0.49545
C_3H_8	0.27114
$i-C_4H_{10}$	0.07804
$n-C_4H_{10}$	0.06846
$i-C_5H_{12}$	0.02659
$n-C_5H_{12}$	0.01494
$n-C_6H_{14}$	0.01665
$n-C_7H_{16}$	0.02873

Destilado vapor: 1183.2 lb-mol/h

Perfiles finales de temperatura y flujos de vapor y líquido.

Etapa	Temperatura (°F)	Vapor (lb-mol/h)	Líquido (lb-mol/h)
1	47.489	1183.200	2449.224
2	52.044	3632.424	2383.556
3	57.211	3566.756	2284.470
4	63.836	3467.670	2186.037
5	71.342	3369.237	2101.531
6	78.878	3284.731	2034.048
7	85.849	3217.248	1974.310
8	92.335	3157.510	1899.471
9	99.472	3082.670	1737.310
10	112.036	2920.910	3891.576
11	119.056	2711.376	3906.323
12	127.885	2726.123	3945.342
13	137.933	2765.143	4015.222
14	148.225	2835.022	4113.680
15	157.805	2933.480	4229.132
16	166.089	3048.933	4345.588
17	172.986	3165.389	4448.380
18	178.822	3268.180	4525.843
19	184.264	3345.643	4564.539
20	190.484	3384.339	4529.433
21	200.058	3349.233	4291.509
22	221.127	3111.309	1180.200

Productos.

Composición	Destilado Vapor (fracción mol)	Prod. de Fondos (fracción mol)
C_2H_6	0.98081	0.00885
C_3H_8	0.01917	0.52375
i- C_4H_{10}	0.00001	0.15627
n- C_4H_{10}	-	0.13709
i- C_5H_{12}	-	0.05325
n- C_5H_{12}	-	0.02992
n- C_6H_{14}	-	0.03334
n- C_7H_{16}	-	0.05753

Carga térmica del condensador: -8,964,887.8 BTU/h

Carga térmica del rehedidor: 15,887,791. BTU/h

Comentarios.

Perfiles iniciales.

Temperatura: $T_1 = 47.50$, $T_{22} = 220.70$, perfil lineal en tre éstas.

Vapor: $V_1 = 1183.2$; $V_j = 3632.424$, $j = 2, 10$;
 $V_j = 3443.524$, $j = 11, 22$.

Líquido: $L_j = 2449.224$, $j = 1, 9$; $L_j = 4623.724$,
 $j = 10, 21$; $L_{22} = 1180.2$

Métodos de cálculo de propiedades

Entalpía Ecuación de Soave

Constantes de equilibrio Ecuación de Soave

7. Desetanizadora.

Fuente: Shah y Bishnoi (1978)

Número total de etapas: 18

Condensador: Sí, etapa 1, total.

Rehervidor: Sí, etapa 18

Intercambio térmico: No

Relación de reflujo: 1.6, líquido saturado.

Presión de la columna: 460.06 psia en el domo con una caída de 0.3336 psi por etapa.

Alimentaciones:

Presión, psia	460.06
Temperatura, °F	Líquido saturado
Flujo, lb-mol/h	4450.6203
Etapas	7
Composición	(lb-mol/h)
N ₂	0.0003
CO ₂	78.31
CH ₄	56.37
C ₂ H ₆	3576.20
C ₃ H ₈	604.74
i-C ₄ H ₁₀	32.00
n-C ₄ H ₁₀	52.00
i-C ₅ H ₁₂	13.00
n-C ₅ H ₁₂	14.00
n-C ₇ H ₁₆	24.00

Producto de fondos: 779.07 lb-mol/h

Perfiles finales de temperatura y flujos de vapor y líquido.

Etapa	Temperatura (°F)	Vapor (lb-mol/h)	Líquido (lb-mol/h)
1	47.608	-	5874.480
2	51.766	9546.030	5934.936
3	53.620	9606.486	5891.361
4	55.290	9562.911	5802.812
5	57.336	9474.362	5674.348
6	60.067	9345.898	5463.278
7	64.318	9134.829	9991.999
8	65.814	9212.929	9976.454
9	67.694	9197.384	9885.416
10	70.842	9106.346	9704.102
11	76.364	8925.032	9424.448
12	85.537	8645.378	9091.968
13	99.077	8312.898	8824.496
14	116.011	8045.426	8739.632
15	133.762	7960.563	8842.701
16	150.121	8063.632	8987.476
17	165.196	8208.406	8764.105
18	184.146	7985.035	779.070

Destilado líquido: 3671.550 lb-mol/h

Productos

Composición	Destilado líquido (lb-mol/h)	Prod. de Fondos (lb-mol/h)
N ₂	0.0003	-
CO ₂	78.208	0.102
CH ₄	56.370	-
C ₂ H ₆	3513.285	62.915
C ₃ H ₈	23.635	581.105
i-C ₄ H ₁₀	0.035	31.965
n-C ₄ H ₁₀	0.016	51.984
i-C ₅ H ₁₂	-	13.000
n-C ₅ H ₁₂	-	14.000
n-C ₇ H ₁₆	-	24.000

Carga térmica del condensador: -31,537.526 BTU/h

Carga térmica del rehervidor: 33,604,347 BTU/h

Comentarios:

Perfiles iniciales

Temperatura: $T_1=47.61$, $T_{18}=184.17$, perfil lineal entre éstas. Posteriormente se modificó por cálculo de la temperatura de burbuja en cada etapa, utilizando las composiciones obtenidas con el método del Apéndice A.

Vapor: $V_j = 9546.031$, $j = 2, 18$.

Líquido: $L_j = 5874.481$, $j = 1,6$; $L_j = 10325.101$,
 $j = 7, 17$; $L_{18} = 779.07$.

Métodos de cálculo de propiedades

Entalpia

Ecuación de Soave

Constantes de equilibrio

Ecuación de Soave

8. Separador etano-etileno

Fuente: Gupta y Gallier (1979)

Número total de etapas: 50

Condensador: Sí, etapa 1, total

Rehervidor: Sí, etapa 50

Intercambio térmico: No

Relación de reflujo: 3.0, líquido saturado

Presión de la columna: 150.0 psia

Alimentaciones:

Presión, psia 150.0

Temperatura, °F Líquido saturado

Flujo, lb-mol/h 25.0

Etapas 25

Composición (lb-mol/h)

CH₄ 0.5

C₂H₄ 10.0

C₂H₆ 11.0

C₃H₈ 3.0

C₄H₁₀ 0.5

Producto de fondos: 14.5 lb-mol/h

Perfiles finales de temperatura y flujos de vapor y líquido.

Etapa	Temperatura (°F)	Vapor (lb-mol/h)	Líquido (lb-mol/h)
1	-75.326	-	31.500
2	-61.127	42.000	32.176
3	-58.763	42.676	32.186
4	-57.780	42.686	32.086
5	-56.839	42.586	31.958
6	-55.784	42.458	31.817
7	-54.615	42.317	31.669
8	-53.368	42.169	31.521
9	-52.091	42.021	31.379
10	-50.838	41.879	31.249
11	-49.656	41.749	31.134
12	-48.584	41.634	31.036
13	-47.643	41.536	30.954
14	-46.841	41.454	30.888
15	-46.175	41.388	30.835
16	-45.633	41.335	30.793
17	-45.198	41.293	30.761
18	-44.855	41.261	30.736
19	-44.587	41.236	30.717
20	-44.378	41.217	30.702
21	-44.213	41.202	30.688
22	-44.069	41.188	30.665
23	-43.861	41.165	30.585
24	-43.181	41.085	30.163
25	-39.650	40.663	55.663
26	-38.881	41.163	55.747
27	-38.633	41.247	55.752
28	-38.451	41.252	55.740
29	-38.244	41.240	55.722
30	-37.989	41.222	55.699
31	-37.670	41.199	55.670
32	-37.272	41.170	55.634
33	-36.780	41.134	55.592
34	-36.185	41.092	55.544
35	-35.478	41.044	55.488
36	-34.645	40.988	55.427
37	-33.693	40.927	55.362
38	-32.627	40.862	55.295
39	-31.467	40.795	55.229
40	-30.241	40.729	55.167
41	-28.985	40.667	55.111
42	-27.738	40.611	55.064
43	-26.536	40.564	55.025
44	-25.412	40.525	54.994
45	-24.386	40.494	54.969
46	-23.466	40.469	54.945
47	-22.618	40.445	54.893
48	-21.626	40.393	54.661
49	-19.322	40.161	53.457
50	- 9.403	38.957	14.500

Destilado líquido: 10.5 lb-mol/h

Productos:

Composición	Destilado líquido (lb-mol/h)	Prod. de Fondos (lb-mol/h)
CH ₄	0.500	-
C ₂ H ₄	9.733	0.267
C ₂ H ₆	0.267	10.733
C ₃ H ₈	-	3.000
C ₄ H ₁₀	-	0.500

Carga térmica del condensador: -206,035.97 BTU/h

Carga térmica del rehedvidor: 211,464.32 BTU/h

Comentarios:

Perfiles iniciales.

Temperatura: $T_1 = -43.85$, $T_{50} = 9.56$, perfil lineal entre éstas.

Vapor: $v_j = 42.0$, $j = 2, 50$.

Líquido: $L_j = 31.5$, $j = 1, 24$; $L_j = 56.5$, $j = 25, 49$;
 $L_{50} = 14.5$.

Métodos de cálculo de propiedades

Entalpia

Ecuación de Soave

Constantes de equilibrio

Ecuación de Soave

9. Despropanizadora.

Fuente: Orbach (1969)

Número total de etapas: 31

Condensador: Sí, etapa 1, total

Rehervidor: Sí, etapa 31

Intercambio térmico: No

Relación de reflujo: 6.0, T = 75.0°F

Presión de la columna: 290 psia

Alimentaciones:

Presión, psia 290

Temperatura, °F 195.

Flujo, lb-mol/h 200.

Etapas 14

Composición (lb-mol/h)

C_3H_8 50.

i- C_4H_{10} 50.

n- C_4H_{10} 50.

n- C_5H_{12} 50.

Producto de fondos: 150. lb-mol/h

Perfiles finales de temperatura y flujos de vapor y líquido.

Etapa	Temperatura (°F)	Vapor (lb-mol/h)	Líquido (lb-mol/h)
1	75.000	-	300.000
2	134.644	350.000	415.633
3	135.308	465.633	414.098
4	136.366	464.098	411.719
5	138.024	461.719	408.168
6	140.555	458.168	403.152
7	144.271	453.142	396.667
8	149.401	446.667	389.067
9	155.985	439.067	381.183
10	163.747	431.183	373.742
11	172.223	423.742	366.597
12	181.148	416.597	358.382
13	190.689	408.382	347.090
14	201.795	397.090	575.767
15	205.578	425.767	578.968
16	209.349	428.968	582.703
17	212.962	432.703	586.778
18	216.299	436.778	590.960
19	219.262	440.960	595.020
20	221.883	445.020	598.771
21	224.104	448.771	602.084
22	225.981	452.084	604.880
23	227.568	454.880	607.115
24	228.936	457.115	608.749
25	230.174	458.749	609.697
26	231.409	459.697	609.765
27	232.835	459.765	608.540
28	234.785	458.540	605.268
29	237.848	455.268	598.820
30	243.020	448.820	588.218
31	251.756	438.218	150.000

10. Desbutanizadora.

Fuente: Shah y Bishnoi (1978)

Número total de etapas: 31

Condensador: Sí, etapa 1, total

Rehervidor: Sí, etapa 31

Intercambio térmico: No

Relación de reflujo: 1.7235, T = 82.04 °F

Presión de la columna: 103.47 psia en el domo con una caída de 0.49313 psi por etapa.

Alimentaciones:

Presión, psia	110.
Temperatura, °F	150.8
Flujo, lb-mol/h	6657.
Etapas	15
Composición	(lb-mol/h)
C_2H_6	8.
C_3H_8	45.
i- C_4H_{10}	1603.
n- C_4H_{10}	2098.
i- C_5H_{12}	810.
n- C_5H_{12}	682.
n- C_6H_{14}	876.
TBP241	535.
(TBP=240.8, API=70.6)	
Producto de fondos:	2925. lb-mol/h

Perfiles finales de temperatura y flujos de vapor y líquido.

Etapa	Temperatura (°F)	Vapor (lb-mol/h)	Líquido (lb-mol/h)
1	82.040	-	6432.101
2	137.490	10164.100	7973.522
3	139.148	11705.521	7963.528
4	140.226	11695.528	7955.202
5	141.045	11687.201	7948.717
6	141.746	11680.716	7942.289
7	142.414	11674.288	7933.815
8	143.121	11665.814	7920.790
9	143.941	11652.789	7899.935
10	144.966	11631.934	7866.590
11	146.324	11598.589	7813.500
12	148.211	11545.499	7726.645
13	150.990	11458.644	7566.393
14	155.648	11298.393	7163.219
15	166.422	10895.218	14639.776
16	168.488	11714.776	14645.700
17	170.564	11720.699	14637.432
18	172.916	11712.432	14613.442
19	175.842	11688.442	14569.856
20	179.706	11644.856	14506.396
21	184.861	11581.396	14433.064
22	191.469	11508.064	14373.566
23	199.268	11448.566	14356.586
24	207.530	11431.586	14395.770
25	215.367	11470.769	14476.996
26	222.180	11551.996	14565.689
27	227.918	11640.689	14620.592
28	233.115	11695.592	14590.403
29	239.033	11665.403	14369.493
30	248.576	11444.493	13701.235
31	268.999	10776.235	2925.000

11. Estabilización de Gasolinas

Fuente: Holland (1981)

Número total de etapas: 13

Condensador: Sí, etapa 1, parcial

Rehervidor: Sí, etapa 13

Intercambio térmico: No

Extracción lateral: Sí, etapa 10, líquido
Flujo = 25.0 lb-mol/h

Relación de reflujo: 2.25

Presión de la columna: 300 psia

Alimentaciones:

Presión, psia 300

Temperatura, °F Líquido saturado

Flujo, lb-mol/h 100

Etapas 6

Composición (lb-mol/h)

CH₄ 2.0

C₂H₆ 10.0

C₃H₈ 6.0

C₃H₈ 12.5

i-C₄H₁₀ 3.5

n-C₄H₁₀ 15.0

n-C₅H₁₂ 15.2

n-C₆H₁₄ 11.3

n-C₇H₁₆ 9.0

n-C₈H₁₈ 8.5

TBP400 7.0

(TBP=400, API=56.5, PM=175.008)

Producto de fondos: 42.702 lb-mol/h

Perfiles finales de temperatura y flujos de vapor y líquido.

Etapa	Temperatura (°F)	Vapor (lb-mol/h)	Líquido (lb-mol/h)
1	118.070	32.298	72.670
2	145.994	104.969	71.821
3	163.309	104.119	69.604
4	177.140	101.902	65.562
5	192.439	97.860	54.531
6	224.480	86.830	179.047
7	245.852	111.345	193.470
8	262.447	125.768	202.636
9	278.238	134.934	207.816
10	296.693	140.114	183.950
11	322.269	141.248	180.213
12	357.576	137.511	167.556
13	413.524	124.854	42.702

Extracción líquida, etapa 10: 25.0 lb-mol/h

Productos:

Composición	Prod. Vapor (lb-mol/h)	Prod. de Fondos (lb-mol/h)	Ext. Lateral (lb-mol/h)
CH ₄	2.000	-	-
C ₂ H ₆	9.970	0.001	0.029
C ₃ H ₆	5.703	0.037	0.260
C ₃ H ₈	11.547	0.135	0.818
i-C ₄ H ₁₀	1.206	0.643	1.651
n-C ₄ H ₁₀	1.856	4.469	8.675
n-C ₅ H ₁₂	0.017	8.632	6.552
n-C ₆ H ₁₄	-	8.218	3.082
n-C ₇ H ₁₆	-	7.273	1.727
n-C ₈ H ₁₈	-	7.172	1.328
TBP400	-	6.122	0.878

Carga térmica del condensador: -452,558.24 BTU/h

Carga térmica del rehedidor: 1,368,898.0 BTU/h

Comentarios:

Perfiles iniciales

Temperatura: $T_1 = 120$, $T_{13} = 420$, posteriormente se -
afinó por cálculo de la T de eb. del lí-
quido en cada etapa.

Vapor: $V_1 = 32.298$, $V_j = 104.9685$, $j = 2, 13.$

Líquido: $L_j = 72.670$, $j = 1,5$; $L_j = 172.670$,
 $j = 6,12$, $L_{13} = 42.702$

Métodos de cálculo de propiedades.

Entalpia Ecuación de Soave

Constantes de equilibrio Ecuación de Soave

VII.3. Ejemplos 12-17.
Problemas de destilación, soluciones altamente no-ideales.

12. Separador acetona-agua.

Fuente: Gupta y Gallier (1979).

Número total de etapas: 38

Condensador: Sí, etapa 1, total

Rehervidor: No

Intercambio térmico: No

Relación de reflujo: 1.3, líquido saturado

Presión de la columna: 16 psia

Alimentaciones:	1	2
Presión, psia	16	80
Temperatura, °F	Líquido saturado	315.3
Flujo, lb-mol/h	77.025	35.0
Etapas	27	38
Composición	(lb-mol/h)	(lb-mol/h)
Acetona	21.159	-
Agua	55.866	35.0

Perfiles finales de temperatura y flujos de vapor y líquido.

Etapa	Temperatura (°F)	Vapor (lb-mol/h)	Líquido (lb-mol/h)
1	137.543	-	26.308
2	137.548	46.545	26.306
3	137.554	46.543	26.303
4	137.56	46.540	26.299
5	137.575	46.536	26.294
6	137.593	46.531	26.285
7	137.618	46.522	26.273
8	137.655	46.510	26.256
9	137.708	46.493	26.232
10	137.783	46.469	26.198
11	137.889	46.435	26.150
12	138.039	46.387	26.083
13	138.248	46.320	25.990
14	138.538	46.227	25.863
15	138.937	46.100	25.691
16	139.475	45.928	25.465
17	140.187	45.702	25.175
18	141.103	45.412	24.817
19	142.244	45.054	24.392
20	143.616	44.629	23.910
21	145.207	14.147	23.385
22	146.990	43.622	22.837
23	148.935	43.073	22.276
24	151.031	42.513	21.712
25	153.303	41.949	21.134
26	155.875	41.371	20.497
27	159.172	40.734	97.472
28	159.172	40.684	97.472
29	159.172	40.684	97.472
30	159.172	40.684	97.472
31	159.172	40.684	97.472
32	159.172	40.684	97.472
33	159.172	40.684	97.472
34	159.173	40.684	97.471
35	159.182	40.683	97.457
36	159.272	40.669	97.303
37	160.292	40.515	93.983
38	188.200	37.195	91.788

Destilado líquido: 20.237 lb-mol/h

Productos:

Composición	Destilado Líquido (lb-mol/h)	Prod. de Fondos (lb-mol/h)
Acetona	20.235	0.924
Agua	0.002	90.864

Carga térmica del condensador: -614,057.73 BTU/h

Comentarios:

Perfiles iniciales

Temperatura: $T_j = 140.$, $j = 1, 25$; $T_j = 149$,
 $j = 26, 35$; $T_{38} = 188.6$, perfil lineal
entre T_{35} y T_{38} .

Vapor: $V_j = 46.$, $j = 2, 38$

Líquido: $L_j = 26.$, $j = 1, 26$; $L_j = 103.025$,
 $j = 27, 37$, $L_{38} = 92.025$.

Destilado líquido: 20. lb-mol/h

Métodos de cálculo de propiedades.

Entalpia UNIFAC

Constantes de equilibrio UNIFAC

13. Metanol puro.

Número total de etapas: 15
Condensador: Sí, etapa 1, total
Rehervidor: Sí, etapa 15
Intercambio térmico: No
Relación de reflujo: 2.06, líquido saturado
Presión de la columna: 17.42 psia en el domo con una caída de 0.1422 psi en el condensador y de 0.0976 psi por etapa.

Alimentaciones

Presión, psia 17.42
Temperatura, °F 166.67
Flujo, lb-mol/h 1613.064
Etapa 12
Composición (Fracción mol)
Metanol 0.80396
Etanol 0.00051
Agua 0.19553

Destilado líquido: 1289.561 lb-mol/h

Perfiles finales de temperatura y flujos de vapor y líquido.

Etapa	Temperatura (°F)	Vapor (lb-mol/h)	Líquido (lb-mol/h)
1	155.644	-	2656.496
2	156.067	3946.057	2656.205
3	156.388	3945.767	2655.210
4	156.741	3944.771	2653.623
5	157.145	3943.184	2651.089
6	157.635	3940.650	2647.042
7	158.264	3936.603	2640.601
8	159.114	3930.163	2630.444
9	160.321	3920.005	2614.683
10	162.085	3904.244	2590.898
11	164.705	3880.459	2556.597
12	168.586	3846.158	2897.648
13	176.217	3574.145	2817.972
14	193.081	2494.469	2748.281
15	214.802	2424.777	323.503

Destilado líquido: 1289.561 lb-mol/h

Productos:

Composición	Destilado Líquido (fracción mol)	Prod. de Fondos (fracción mol)
Metanol	0.99871	0.02766
Etanol	0.00060	0.00014
Agua	0.00069	0.97219

Carga térmica del condensador: -63,160,703. BTU/h

Carga térmica del rehervidor: 43,207,891. BTU/h

Comentarios:

Perfiles iniciales

Temperatura: $T_1 = 156$, $T_{12} = 169$, $T_{15} = 215$,
perfil lineal entre éstas.

Vapor: $V_j = 3946.057$, $j = 2, 12$; $V_j = 2715.591$,
 $j = 13, 15$.

Líquido: $L_j = 2656.496$, $j = 1, 11$; $L_j = 3039.095$,
 $j = 12, 14$; $L_{15} = 323.503$.

Métodos de cálculo de propiedades.

Entalpia UNIFAC

Constantes de equilibrio UNIFAC

14. Mezcla altamente no-ideal.

Fuente: Boston (1970)

Número total de etapas: 10

Condensador: Sí, etapa 1, total

Rehervidor: Sí, etapa 10

Intercambio térmico: No

Relación de reflujo: 2.0, líquido saturado

Presión de la columna: 15.0 psia

Alimentaciones

Presión, psia 15.0

Temperatura, °F Líquido saturado

Flujo, lb-mol/h 100.0

Etapas 5

Composición (Fracción mol)

n-Hexano 0.30

Etanol 0.10

Metilciclopentano 0.30

Benceno 0.30

Destilado líquido: 50.0 lb-mol/h

Perfiles finales de temperatura y flujos de vapor y líquido.

Etapa	Temperatura (°F)	Vapor (lb-mol/h)	Líquido (lb-mol/h)
1	141.556	-	100.000
2	147.956	150.00	112.941
3	153.831	162.941	117.807
4	155.232	167.807	118.656
5	155.551	168.656	229.201
6	158.408	179.201	233.450
7	159.074	183.450	234.649
8	159.325	184.649	234.720
9	159.581	184.720	233.543
10	159.977	183.543	50.000

Destilado líquido: 50.00 lb-mol/h

Productos:

Composición	Destilado Líquido (fracción mol)	Prod. de Fondos (fracción mol)
n-Hexano	0.34156	0.25844
Etanol	0.20000	-
Metilciclopentano	0.26551	0.33449
Benceno	0.19294	0.40706

Carga térmica del condensador: -1,586,257.5 BTU/h

Carga térmica del rehedidor: 1,599,453.6 BTU/h

Comentarios:

Perfiles iniciales.

Temperatura: $T_1 = 140$, $T_{10} = 156.2$; perfil lineal entre éstas.

Vapor: $V_j = 150.0$, $j = 2, 10$

Líquido: $L_j = 100.$, $j = 1,4$; $L_j = 200.$, $j = 5,9$;
 $L_{10} = 50.$

Métodos de cálculo de propiedades

Entalpia UNIFAC

Constantes de equilibrio UNIFAC

15. Separación metanol-agua.

Número total de etapas: 49
Condensador: Sí, etapa 1, total
Rehervidor: Sí, etapa 49
Intercambio térmico: No
Relación de reflujo: 4.9583, líquido saturado
Presión de la columna: 22.21134 psia en el domo con una caída de 0.45329 psi por etapa.

Alimentaciones:

Presión, psia	29.0107
Temperatura, °F	102.7382
Flujo, lb-mol/h	15300.081
Etapas	10
Composición	(Fracción mol)
Metanol	0.62529
Agua	0.37471
Destilado líquido	9566.9894 lb-mol/h

Perfiles finales de temperatura y flujos de vapor y líquido.

Etapa	Temperatura (°F)	Vapor (lb-mol/h)	Líquido (lb-mol/h)
1	166.659	-	47435.981
2	167.679	57002.965	47455.715
3	168.693	57012.699	47451.861
4	169.711	57018.845	47451.306
5	170.754	57018.290	47438.089
6	171.860	57005.073	47400.890
7	173.100	56967.875	47318.536
8	174.612	56885.521	47152.442
9	176.655	56719.427	46835.526
10	179.716	56402.510	63510.661
11	180.604	57777.564	63534.232
12	181.480	57801.136	63557.444
13	182.344	57824.348	63580.309
14	183.195	57847.212	63602.836
15	184.036	57869.741	63625.039
16	184.865	57891.943	63646.927
17	185.684	57913.832	63668.507
18	186.492	57935.411	69689.794
19	187.290	57956.699	63710.796
20	188.078	57977.701	63731.517
21	188.857	57998.422	63751.970
22	189.626	58018.875	63772.157
23	190.386	58039.062	63792.093
24	191.137	58058.999	63811.780
25	191.880	58078.686	63831.229
26	192.614	58098.135	63850.443
27	193.340	58117.350	63869.426
28	194.058	58136.333	63888.190
29	194.769	58155.096	63906.733
30	195.471	58173.638	63925.061
31	196.167	58191.967	63943.172
32	196.855	58210.077	63961.043
33	197.536	58227.950	63978.639
34	197.211	58245.546	63995.857
35	198.881	58262.765	64012.462
36	199.547	58279.369	64027.897
37	200.213	58294.805	64040.909
38	200.887	58307.817	64048.633
39	201.590	58315.541	64044.567
40	202.366	58311.475	64014.053
41	203.314	58280.961	63978.639
42	204.665	58191.271	63995.857
43	206.947	57970.844	63204.046
44	211.407	57470.956	62159.684
45	221.020	56426.591	60411.012
46	240.738	54677.920	59223.544
47	262.449	53490.453	59465.848
48	270.250	53732.756	59665.374
49	272.104	53932.283	5733.0917

Destilado líquido: 9566.9894 lb-mol/h

Productos:

Composición	Destilado Líquido (fracción mol)	Prod. de Fondos (fracción mol)
Metanol	0.99972	0.00047
Agua	0.00028	0.99953

Carga térmica del condensador: -908,622,620. BTU/h

Carga térmica del rehedvidor: 937,322,060. BTU/h

Comentarios:

Perfiles iniciales.

Temperatura: $T_1 = 166.94$, $T_{49} = 265.92$, perfil lineal
entre éstas.

Vapor: $V_j = 57002.992$, $j = 2, 49$

Líquido: $L_j = 47436.003$, $j = 1, 9$; $L_j = 62736.084$;
 $j = 10, 48$; $L_{49} = 5733.0917$

Métodos de cálculo de propiedades.

Entalpias UNIFAC

Constantes de equilibrio UNIFAC

16. Destilación extractiva.

Fuente: Gallun (1979)

Número total de etapas: 50

Condensador: Sí, etapa 1, total

Rehervidor: Sí, etapa 50

Intercambio térmico: No

Relación de reflujo: 2.5, líquido saturado

Presión de la columna: 14.7 psia

Alimentaciones:	1	2	3
Presión, psia	14.7	14.7	14.7
Temperatura, °F	100.	170.	100.
Flujo, lb-mol/h	5.	203.25	100.
Etapas	4	6	21
Composición	(lb-mol/h)	(lb-mol/h)	(lb-mol/h)
Metanol	-	0.25	65.
Acetona	-	0.5	25.
Etanol	-	5.0	5.
Agua	5.	197.5	5.

Producto de fondos: 285. lb-mol/h

Perfiles finales de temperatura y flujos de vapor y líquido.

Etapa	Temperatura (°F)	Vapor (lb-mol/h)	Líquido (lb-mol/h)
1	134.371	-	58.126
2	136.969	81.376	56.123
3	140.705	79.373	53.315
4	146.221	76.565	56.195
5	151.166	74.445	53.181
6	160.140	71.431	253.825
7	160.149	68.825	253.817
8	160.170	68.817	253.817
9	160.193	68.817	253.810
10	160.230	68.810	253.801
11	160.284	68.801	253.709
12	160.360	68.789	253.768
13	160.476	68.768	253.740
14	160.645	68.740	253.703
15	160.887	68.703	253.652
16	161.237	68.652	253.591
17	161.733	68.591	253.539
18	162.379	68.539	253.570
19	162.842	68.570	253.885
20	161.401	68.885	255.183
21	150.455	70.183	355.437
22	150.455	70.437	355.437
23	150.455	70.437	355.437
24	150.455	70.437	355.437
25	150.455	70.437	355.437
26	150.455	70.437	355.437
27	150.455	70.437	355.437
28	150.455	70.437	355.437
29	150.455	70.437	355.437
30	150.455	70.437	355.437
31	150.455	70.437	355.437
32	150.455	70.437	355.437
33	150.455	70.437	355.437
34	150.455	70.437	355.437
35	150.455	70.437	355.437
36	150.455	70.437	355.437
37	150.455	70.437	355.437
38	150.455	70.437	355.437
39	150.455	70.437	355.437
40	150.455	70.437	355.437
41	150.456	70.437	355.436
42	150.457	70.436	355.435
43	150.463	70.435	355.431
44	150.480	70.431	355.417
45	150.536	70.417	355.374
46	150.514	70.374	355.238
47	151.287	70.238	355.844
48	153.061	69.844	353.935
49	157.817	68.935	352.612
50	168.241	67.612	285.000

Destilado líquido: 23.25 lb-mol/h

Productos:

Composición	Destilado Líquido (lb-mol/h)	Prod. de Fondos (lb-mol/h)
Metanol	0.140	65.110
Acetona	21.421	4.079
Etanol	0.782	9.218
Agua	0.906	206.594

Carga térmica del condensador: -1,113,177.5 BTU/h

Carga térmica del rehornidor. 1,179.368.4 BTU/h

Comentarios:

Perfiles iniciales

Temperatura: $T_1 = 130$, $T_{50} = 170$, perfil lineal entre éstas.

Vapor $V_j = 81.375$, $j = 2, 50$.

Líquido: $L_j = 58.125$, $j = 1,3$; $L_j = 63.125$, $j = 4,5$;
 $L_j = 266.375$, $j = 6, 20$; $L_j = 366.375$,
 $j = 21, 49$, $L_{50} = 285.0$

Se supuso la siguiente distribución en el fondo

Composición	(lb-mol/h)
Metanol	65.
Acetona	6.
Etanol	8.
Agua	206.

Se usó la inicialización del Apéndice B.

Métodos de cálculo de propiedades.

Entalpia UNIFAC

Constantes de equilibrio UNIFAC

17. Destilación extractiva con furfural.

Fuente: Gupta y Gallier (1979)

Número total de etapas: 15

Condensador: No

Rehervidor: Sí, etapa 15

Intercambio térmico: No

Relación de reflujo: -

Presión de la columna: 64.977 psia en el domo con una caída de 0.3626 psi por etapa.

Alimentaciones:	1	2
Presión, psia	64.977	67.5
Temperatura, °F	122.	149.
Flujo, lb-mol/h	100.	10.
Etapas	1	8
Composición	(Fracción mol)	(Fracción mol)
1,3 Butadieno	-	0.35
n-Butano	-	0.03
i-Buteno	-	0.03
Trans 2 Buteno	-	0.07
Cis 2 Buteno	-	0.07
1-Buteno	-	0.45
Agua	0.1	-
Furfural	0.9	-

Producto de fondos: 104. lb-mol/h

Perfiles finales de temperatura y flujos de vapor y líquido.

Etapa	Temperatura (°F)	Vapor (lb-mol/h)	Líquido (lb-mol/h)
1	148.966	6.000	110.621
2	150.377	16.621	111.178
3	150.854	17.178	111.363
4	151.203	17.363	111.491
5	151.583	17.491	111.616
6	152.182	17.616	111.784
7	153.448	17.784	112.159
8	155.618	18.159	113.414
9	156.558	9.414	113.793
10	157.034	9.793	113.985
11	157.465	9.985	114.147
12	158.154	10.147	114.315
13	161.915	10.315	114.551
14	191.340	10.551	117.664
15	302.840	13.664	104.000

Productos:

Composición	Vapor (lb-mol/h)	Líquido (lb-mol/h)
1,3 Butadieno	-	3.500
n-Butano	0.300	-
i-Buteno	0.299	0.001
Trans-2-Buteno	0.692	0.008
Cis-2-Buteno	0.688	0.012
1-Buteno	3.839	0.661
Agua	0.144	9.856
Furfural	0.039	89.961

Carga térmica del rehervidor: 604,294.10 BTU/h

Comentarios:

Perfiles iniciales

Temperatura: $T_1 = 149$, $T_{14} = 162$, $T_{15} = 262$, perfil
lineal entre T_1 y T_{14} .

Vapor $V_1 = 6$, $V_j = 20$, $j = 2, 8$; $V_j = 10$,
 $j = 9, 15$

Líquido: $L_j = 114$, $j = 1, 14$; $L_{15} = 104$.

Métodos de cálculo de propiedades.

Entalpia UNIFAC

Constantes de equilibrio UNIFAC

VII.4. Ejemplos 18-24.
Problemas de absorción y agotamiento.

18. Absorbedor.

Fuente: Holland (1981)

Número total de etapas: 8

Condensador: No

Rehervidor: No

Intercambio térmico: No

Relación de reflujo: -

Presión de la columna: 800. psia

Alimentaciones:	1	2
Presión, psia	800.	800.
Temperatura, °F	2.9	0.
Flujo, lb-mol/h	6.3092	100.
Etapas	1	8
Composición	(lb-mol/h)	(lb-mol/h)
CO ₂	-	0.4703
N ₂	-	0.1822
CH ₄	-	88.7000
C ₂ H ₆	-	6.6747
C ₃ H ₈	0.0015	2.7786
i-C ₄ H ₁₀	0.0006	0.6375
n-C ₄ H ₁₀	0.0013	0.3655
i-C ₅ H ₁₂	0.0067	0.1158
n-C ₅ H ₁₂	0.0061	0.0505
n-C ₆ H ₁₄	0.1495	0.0146
n-C ₇ H ₁₆	0.5736	0.0081
n-C ₈ H ₁₈	1.8214	0.0020
n-C ₉ H ₂₀	1.6866	-
n-C ₁₀ H ₂₂	2.0617	-

Perfiles finales de temperatura y flujos de vapor y líquido.

Etapa	Temperatura (°F)	Vapor (lb-mol/h)	Líquido (lb-mol/h)
1	28.350	88.111	10.825
2	27.135	92.626	11.358
3	24.880	93.159	11.771
4	22.640	93.573	12.175
5	20.461	93.976	12.630
6	18.144	94.437	13.273
7	15.247	95.076	14.447
8	10.577	96.247	18.198

Productos

Composición	Vapor (lb-mol/h)	Líquido (lb-mol/h)
CO ₂	0.376	0.095
N ₂	0.179	0.003
CH ₄	82.343	6.357
C ₂ H ₆	4.643	2.032
C ₃ H ₈	0.518	2.262
i-C ₄ H ₁₀	0.003	0.635
n-C ₄ H ₁₀	0.001	0.366
i-C ₅ H ₁₂	0.002	0.121
n-C ₅ H ₁₂	0.001	0.056
n-C ₆ H ₁₄	0.009	0.156
n-C ₇ H ₁₆	0.013	0.569
n-C ₈ H ₁₈	0.015	1.808
n-C ₉ H ₂₀	0.006	1.681
n-C ₁₀ H ₂₂	0.003	2.059

Comentarios

Perfiles iniciales

Temperatura: $T_j = 25.$, $j = 1, 8$

Vapor: $V_j = 99.548$, $j = 1, 8$

Líquido: $L_j = 6.3092$, $j = 1, 7$; $L_8 = 6.761$

Métodos de cálculo de propiedades.

Entalpia

Ecuación de Soave

Constantes de equilibrio

Grayson-Streed

19. Columna absorbadora.

Número total de etapas: 8
 Condensador: No.
 Rehervidor: No
 Intercambio térmico: No
 Relación de reflujo: -
 Presión de la columna: 254.7 psia con una caída de 0.2 psi por etapa.

Alimentaciones:	1	2
Presión, psia	254.7	254.7
Temperatura, °F	$H = -8882.5 \frac{\text{BTU}}{\text{lb-mol}}$	$H = 4434.15 \frac{\text{BTU}}{\text{lb-mol}}$
Flujo, lb-mol/h	3141.497	76000.02
Etapas	1	8
Composición	(fracción mol)	(fracción mol)
H ₂	-	0.69728
CH ₄	-	0.09720
C ₂ H ₄	-	0.09482
C ₃ H ₈	-	0.05739
n-C ₄ H ₁₀	0.00004	0.03381
i-C ₅ H ₁₂	0.00275	0.00680
n-C ₅ H ₁₂	0.00504	0.00339
Benceno	0.17712	0.00266
Metilciclopentano	0.01666	0.00026
i-C ₆ H ₁₄	0.09527	0.00291
n-C ₆ H ₁₄	0.04731	0.00091
Tolueno	0.33830	0.00175
n-C ₇ H ₁₆	0.00591	0.00004
Etilbenceno	0.04805	0.00010
para-Xileno	0.04492	0.00009
meta-Xileno	0.10425	0.00020
orto-Xileno	0.05738	0.00010
TBP 112	0.00131	0.00001
(TBP=112.6, API=54.9, PM=99.668)		
2-metil-Hexano	0.02094	0.00025
Aromáticos	0.03475	0.00003
(TBP=314., API=31.8, PM=120.19)		

Perfiles finales de temperatura y flujos de vapor y líquido.

Etapa	Temperatura (°F)	Vapor (lb-mol/h)	Líquido (lb-mol/h)
1	125.797	7101.734	3408.187
2	131.371	7368.423	3476.970
3	134.327	7437.206	3511.928
4	135.865	7472.164	3534.968
5	136.210	7495.204	3552.407
6	135.189	7512.644	3568.326
7	132.141	7528.563	3590.817
8	125.173	7551.054	3639.783

Productos:

Composición	Producto vapor (fracción-mol)	Producto Líquido (fracción-mol)
H ₂	0.74247	0.00729
CH ₄	0.100702	0.00648
C ₂ H ₆	0.08944	0.02349
C ₃ H ₈	0.04087	0.04009
n-C ₄ H ₁₀	0.00462	0.06162
i-C ₅ H ₁₂	0.00053	0.01554
n-C ₅ H ₁₂	0.00076	0.00996
Benceno	0.00517	0.14833
Metilciclopentano	0.00060	0.01375
i-C ₆ H ₁₄	0.00689	0.07487
n-C ₆ H ₁₄	0.00232	0.03821
Tolueno	0.00369	0.28845
n-C ₇ H ₁₆	0.00011	0.00498
Etilbenceno	0.00022	0.04124
para-xileno	0.00020	0.03857
meta-Xileno	0.00044	0.08954
orto-Xileno	0.00022	0.04931
TBP 112	0.00018	0.00081
2-metil-Hexano	0.00054	0.01755
Aromáticos	0.00006	0.02994

Comentarios:

Perfiles iniciales

Temperatura: $T = 85., 94., 101., 107., 112., 116.,$
 $118., 117.$

Vapor: $V_j = 7596.0121, j = 1,8$

Líquido $L_j = 3141.497, j = 1,8$

Métodos de cálculo de propiedades.

Entalpia Ecuación de Soave

Constantes de equilibrio Gayson-Streed

20. Absorción de propano.

Fuente: Diab y Maddox (1982)

Número total de etapas: 6

Condensador: No

Rehervidor: No

Intercambio térmico: No

Relación de reflujo: -

Presión de la columna: 1000. psia

Alimentaciones:	1	2
Presión, psia	1000.	1000.
Temperatura, °F	0	0
Flujo, lb-mol/h	128	1846.12
Etapas	1	6
Composición	(lb-mol/h)	(lb-mol/h)
N ₂	-	23.020
CH ₄	-	1435.970
CO ₂	-	125.590
C ₂ H ₆	-	183.730
C ₃ H ₈	-	60.490
i-C ₄ H ₁₀	-	5.930
n-C ₄ H ₁₀	-	8.400
i-C ₅ H ₁₂	-	1.480
n-C ₅ H ₁₂	-	1.020
n-C ₆ H ₁₄	-	0.420
n-C ₇ H ₁₆	-	0.070
Corte 0-10%	18.710	-
Corte 10-20%	15.020	-
Corte 20-30%	13.330	-
Corte 30-40%	12.480	-
Corte 40-50%	12.140	-
Corte 50-60%	11.940	-
Corte 60-70%	11.690	-
Corte 70-80%	11.370	-
Corte 80-90%	11.060	-
Corte 90-100%	10.260	-

Caracterización para el aceite absorbedor.

Datos por Fracciones

Rango, %	Rango de Ebull. °F	Punto de Ebull. Prom., °F	API	PM
0-10	163-290	231.5	59.53	99.91
10-20	290-376	338.0	50.62	132.11
20-30	376-420	400.3	46.11	153.13
30-40	420-447	435.8	43.73	166.06
40-50	447-455	450.4	42.79	171.60
50-60	455-465	459.7	42.20	175.19
60-70	465-478	471.1	41.49	179.69
70-80	478-495	486.2	40.56	185.76
80-90	495-517	501.4	39.65	192.01
90-100	517-578	542.7	37.27	209.72

Perfiles finales de temperatura y flujos de vapor y líquido

Etapa	Temperatura (°F)	Vapor (lb-mol/h)	Líquido (lb-mol/h)
1	27.300	1502.045	245.163
2	25.972	1619.207	263.681
3	22.891	1637.725	280.449
4	19.348	1654.494	302.224
5	15.213	1676.269	340.810
6	9.491	1714.854	472.075

Productos

Composición	Producto Vapor (lb-mol/h)	Producto Líquido (lb-mol/h)
N ₂	22.355	0.665
CH ₄	1270.608	165.362
CO ₂	89.398	36.192
C ₂ H ₆	110.544	73.186
C ₃ H ₈	8.734	51.756
i-C ₄ H ₁₀	0.050	5.880
n-C ₄ H ₁₀	0.013	8.387
i-C ₅ H ₁₂	-	1.480
n-C ₅ H ₁₂	-	1.020
n-C ₆ H ₁₄	-	0.420
n-C ₇ H ₁₆	-	0.070
Corte 0-10%	0.293	18.417
Corte 10-20%	0.029	14.991
Corte 20-30%	0.008	13.322
Corte 30-40%	0.004	12.476
Corte 40-50%	0.003	12.137
Corte 50-60%	0.002	11.938
Corte 60-70%	0.002	11.688
Corte 70-80%	0.001	11.369
Corte 80-90%	0.001	11.059
Corte 90-100%	-	10.260

Comentarios

Perfiles iniciales

Temperatura: $T_1 = 12.44$, $T_6 = 38.77$, perfil lineal entre éstas.

Vapor: $V_j = 1812.2775$, $j = 1, 6$

Líquido: $L_j = 128.$, $j = 1, 5$; $L_6 = 161.84241$

Métodos de cálculo de propiedades

Entalpia

Ecuación de Soave

Constantes de equilibrio

Grayson-Streed

21. Absorbedor con intercambio térmico.

Fuente: Gupta y Gallier (1979)

Número total de etapas: 7

Condensador: No

Rehervidor: No

Intercambio térmico: -99803 BTU/h en el plato 4

Relación de reflujo: -

Presión de la columna: 91.37 psia

Alimentaciones:	1	2
Presión, psia	91.37	91.37
Temperatura, °F	56.282	55.796
Flujo, lb-mol/h	107.5	84.5
Etapas	7	1
Composición	(fracción mol)	(fracción mol)
H ₂ S	0.0369	-
CH ₄	0.3587	-
N ₂	0.0707	-
H ₂	0.019	-
C ₂ H ₄	0.0423	-
C ₂ H ₆	0.2112	-
C ₃ H ₆	0.0652	-
C ₃ H ₈	0.1072	-
1-Buteno	0.0292	-
n-C ₄ H ₁₀	0.0349	-
n-C ₅ H ₁₂	0.0247	-
n-C ₁₂ H ₂₆	-	1.0

Perfiles finales de temperatura y flujos de vapor y líquido'

Etapa	Temperatura (°F)	Vapor (lb-mol/h)	Líquido (lb-mol/h)
1	65.277	77.150	96.395
2	67.958	89.045	99.192
3	68.118	91.842	100.772
4	58.222	93.421	104.345
5	60.767	96.995	106.202
6	64.375	98.851	108.384
7	70.218	101.033	114.851

Productos

Composición	Vapor (lb-mol/h)	Líquido (lb-mol/h)
H ₂ S	2.628	1.339
CH ₄	36.928	1.632
N ₂	7.530	0.070
H ₂	2.033	0.010
C ₂ H ₄	3.892	0.655
C ₂ H ₆	18.244	4.460
C ₃ H ₆	2.599	4.410
C ₃ H ₈	3.284	8.240
1-Buteno	0.003	3.136
n-C ₄ H ₁₀	0.002	3.750
n-C ₅ H ₁₂	-	2.655
n-C ₁₂ H ₂₆	0.006	84.494

Comentarios:

Perfiles iniciales

Temperatura: $T_1 = 55.796$, $T_7 = 56.282$, perfil lineal -
entre éstas.

Vapor: $V_j = 99.038$, $j = 1,4$; $V_j = 107.5$, $j = 5,7$

Líquido: $L_j = 84.5$, $j = 1,4$; $L_j = 92.962$, $j = 5,7$

Métodos de cálculo de propiedades.

Entalpia

Ecuación de Soave

Constantes de equilibrio

Grayson-Streed

22. Columna de absorción con presaturador.

Fuente: Burningham y Otto (1967)

Número total de etapas: 6

Condensador: Presaturador, etapa 1, T=20°F

Rehervidor: No

Intercambio térmico: Sí, $-5.8(10)^6$ BTU/h, etapa 6

Relación de reflujo: -

Presión de la columna: 1310.0 psia

Alimentaciones:	1	2
Presión, psia	1310.0	1310.0
Temperatura, °F	-5.	45.
Flujo, lb-mol/h	362.5	11808.7
Etapas	1	6
Composición	(lb-mol/h)	(lb-mol/h)
N ₂	-	206.7
CO ₂	-	152.5
CH ₄	-	8721.5
C ₂ H ₆	-	1767.8
C ₃ H ₈	-	686.8
i-C ₄ H ₁₀	-	72.8
n-C ₄ H ₁₀	-	136.7
i-C ₅ H ₁₂	-	19.7
n-C ₅ H ₁₂	-	19.5
n-C ₆ H ₁₄	-	13.1
TBP 200 (TBP=200, API=63.2, PM=89.6)	0.7	8.4
TBP 265 (TBP=265, API=57.3, PM=103.6)	2.9	2.5
TBP 325 (TBP=325, API=52.8, PM=127.)	129.9	0.5
TBP 380 (TBP=380, API=47.3, PM=145.)	204.3	0.1
TBP 425 (TBP=425, API=44.6, PM=166.)	24.7	0.1

Perfiles finales de temperatura y flujos de vapor y líquido.

Etapa	Temperatura (°F)	Vapor (lb-mol/h)	Líquido (lb-mol/h)
1	20.000	8866.323	1139.133
2	29.926	9642.956	1237.465
3	31.157	9741.286	1346.938
4	30.487	9850.762	1513.491
5	29.050	10,017.314	1859.623
6	26.619	10,363.446	3304.876

Productos:

Composición	Vapor (lb-mol/h)	Líquido (lb-mol/h)
N ₂	195.144	11.556
CO ₂	104.667	47.833
CH ₄	7325.721	1395.798
C ₂ H ₆	1055.156	712.644
C ₃ H ₈	175.911	510.889
i-C ₄ H ₁₀	4.596	68.204
n-C ₄ H ₁₀	2.831	133.860
i-C ₅ H ₁₂	0.034	19.666
n-C ₅ H ₁₂	0.008	19.492
n-C ₆ H ₁₄	0.000	13.100
TBP 200	0.058	9.042
TBP 265	0.087	5.313
TBP 325	1.285	129.115
TBP 380	0.802	203.597
TBP 425	0.043	24.757

Carga térmica del presaturadro: -2,297,515.4 BTU/h

Comentarios:

Perfiles iniciales

Temperatura: T = 20., 29., 25., 25., 25., 20.

Vapor: V = 9398.6, 9500., 9750., 10.000.,
10,500., 11,000.

Líquido: L = 500., 1000., 1500., 2000., 2500.,
3308.7

Métodos de cálculo de propiedades.

Entalpia Ecuación de Soave

Constantes de equilibrio Grayson-Streed

23. Absorbedor con rehervidor.

Fuente: Holland (1981)

Número total de etapas: 11

Condensador: No

Rehervidor: Si, etapa 11

Intercambio térmico: No

Relación de Reflujo: -

Presión de la columna: 300 psia

Alimentaciones:	1	2
Presión, psia	300	300
Temperatura, °F	Vapor Saturado	50.36
Flujo, lb-mol/h	100	100
Etapas	4	1
Composición	(lb-mol/h)	(lb-mol/h)
CH ₄	65.0	-
C ₂ H ₆	13.0	-
C ₃ H ₈	1.0	-
i-C ₄ H ₁₀	1.0	-
n-C ₅ H ₁₂	20.0	-
n-C ₈ H ₁₈	-	100.0

Carga térmica del rehervidor: 3.0 (10)⁶ BTU/h

Perfiles finales de temperatura y flujos de vapor y líquido.

Etapa	Temperatura (°F)	Vapor (lb-mol/h)	Líquido (lb-mol/h)
1	63.993	75.735	123.312
2	69.677	99.047	127.362
3	81.551	103.097	130.455
4	120.726	106.189	148.700
5	129.851	24.435	161.716
6	139.484	37.451	175.964
7	147.982	51.699	184.979
8	168.778	60.714	192.412
9	241.771	68.147	216.290
10	364.920	92.025	292.367
11	453.261	168.101	124.265

Productos

Composición	Producto Vapor (lb-mol/h)	Prod. de Fondos (lb-mol/h)
CH ₄	64.998	0.002
C ₂ H ₆	10.597	2.403
C ₃ H ₈	0.032	0.968
i-C ₄ H ₁₀	0.001	0.999
n-C ₅ H ₁₂	-	20.000
n-C ₈ H ₁₈	0.007	99.893

Comentarios:

Perfiles iniciales

Temperatura: $T_1 = 50.$, $T_9 = 200.$, $T_{11} = 450.$, perfil
lineal entre éstas.

Vapor: $V_1 = 75.$, $V_j = 150.$, $j = 2, 4$; $V_j = 50$,
 $j = 5, 10$, $V_{11} = 77.925$

Líquido: $L_j = 175.$, $j = 1, 9$, $L_{10} = 202.93$,
 $L_{11} = 125.$

Métodos de cálculo de propiedades

Entalpia

Ecuación de Soave

Constantes de equilibrio

Grayson-Streed

24. Columna agotadora.

Número total de etapas: 14
 Condensador: No
 Rehervidor: Si, etapa 14
 Intercambio térmico: No
 Relación de reflujo: -
 Presión de la columna: 314.7 psia, con una caída de 0.2 psi por etapa.

Alimentaciones:	1	2
Presión, psia	314.7	315.3
Temperatura, °F	88.45	124.5
Flujo, lb-mol/h	667.557	2002.671
Etapas	1	4
Composición	(fracción mol)(fracción mol)	
H ₂ O	0.00073	0.00073
CO ₂	0.00034	0.00034
CH ₄	0.11147	0.11147
C ₂ H ₆	0.10473	0.10473
C ₃ H ₈	0.14613	0.14613
i-C ₄ H ₁₀	0.04068	0.04068
n-C ₄ H ₁₀	0.12128	0.12128
i-C ₅ H ₁₂	0.06575	0.06575
n-C ₅ H ₁₂	0.07524	0.07524
n-C ₆ H ₁₄	0.11971	0.11971
n-C ₇ H ₁₆	0.06474	0.06474
n-C ₈ H ₁₈	0.04852	0.04852
n-C ₉ H ₂₀	0.10068	0.10068

Producto de fondos: 2285.0 lb-mol/h

Perfiles finales de temperatura y flujos de vapor y líquido.

Etapa	Temperatura (°F)	Vapor (lb-mol/h)	Líquido (lb-mol/h)
1	91.906	385.228	654.119
2	96.240	371.790	665.267
3	103.020	382.938	675.003
4	119.099	392.674	2499.308
5	119.098	214.308	2499.979
6	119.099	214.979	2500.525
7	119.102	215.525	2501.001
8	119.111	216.001	2501.495
9	119.141	216.495	2502.276
10	119.256	217.276	2504.366
11	119.753	219.366	2512.083
12	122.220	227.083	2544.816
13	136.182	259.816	2677.342
14	202.735	392.342	2285.000

Productos:

Composición	Producto Vapor (fracción mol)	Prod. de Fondos (fracción mol)
H ₂ O	0.00506	-
CO ₂	0.00108	0.00022
CH ₄	0.63469	0.02326
C ₂ H ₆	0.21067	0.08687
C ₃ H ₈	0.09561	0.15465
i-C ₄ H ₁₀	0.01145	0.04561
n-C ₄ H ₁₀	0.02528	0.13747
i-C ₅ H ₁₂	0.00625	0.07578
n-C ₅ H ₁₂	0.00559	0.08698
n-C ₆ H ₁₄	0.00323	0.13935
n-C ₇ H ₁₆	0.00070	0.07554
n-C ₈ H ₁₈	0.00021	0.05667
n-C ₉ H ₂₀	0.00019	0.11762

Carga térmica del rehervidor: 9,313,121.8 BTU/h

Comentarios:

Perfiles iniciales

Temperatura: $T = 98.8, 111.6, 118.7, 126.4, 129.2,$
 $135.2, 138.7, 142.9, 148.2, 155.2,$
 $164.9, 179.2,$

Este perfil fue el que se logró obtener con el error menor, usando la técnica de matriz tridiagonal (arreglo BP).

Vapor: $V_1 = 385.228; V_j = 360.794, j = 2, 4;$
 $V_j = 182.475, j = 5, 14$

Líquido: $L_j = 643.123, j = 1, 3; L_j = 2467.476,$
 $j = 4, 13; L_{14} = 2285.0$

Métodos de cálculo de propiedades.

Entalpia	Ecuación de Soave
Constantes de equilibrio	Grayson-Streed

TABLA 7.2 COMPARACION DE RESULTADOS.

No.	Descripción del Problema Título	Número de Iteraciones	Error $\times 10^5$	CFU seg.
1	Amplio rango de T. de Eb. con un comp. intermedio	16	0.03436	14.277
2	Amplio rango de T. de Eb. con comps. intermedios	11	0.62264	-
3	Columna desmetanizadora I	15	1.02785	228.019
4	Columna desmetanizadora II	11	0.28001	147.586
5	Columna desmetanizadora III	11	0.55860	-
6	Desetanizadora I	5	0.54223	60.386
7	Desetanizadora II	9	0.28985	122.074
8	Separación etano-etileno	18	0.51801	322.87
9	Despropanizadora	7	0.65239	-
10	Desbutanizadora	8	0.02588	103.131
11	Estabilización de gasolinas	5	0.12243	42.170
12	Separación acetona-agua	8	0.76603	13.407
13	Metanol puro	8	0.51053	14.354
14	Destilación altamente no-ideal	14	0.56425	15.434
15	Separación metanol-agua	15	0.94764	32.358
16	Destilación extractiva	14	0.94413	109.283
17	Destilación extractiva con furfural	11	0.17607	212.202
18	Absorbedor I	11	0.76433	56.978
19	Absorbedor II	7	0.49481	136.377
20	Absorción de propano	10	0.47864	175.682
21	Absorción con intercambio térmico	3	0.24801	-
22	Absorbedor con presaturador	6	0.74510	57.710
23	Absorbedor con rehervidor	7	0.14072	-
24	Columna agotadora	5	0.85536	97.397

TABLA 7.3 INFORMACION SOBRE EL MANEJO DE LAS MATRICES.

No.	Descripción del Problema Título	NEC	NA	Densidad (%)	Llenado (veces NA)	NJAC	JCTE	ITPI
1	Amplio rango de T. de Eb con un comp. intermedio	142	933	4.63	1.6849	2	-	3
2	Amplio rango de T. de Eb. con comps. intermedios	222	1940	3.94	1.9144	1	2	3
3	Columna desmetanizadora I.	256	3020	4.61	2.0245	1	4	3
4	Columna desmetanizadora II.	254	3750	5.81	2.1229	1	4	3
5	Columna desmetanizadora III	484	7190	3.07	2.3658	1	-	4
6	Desetanizadora I	376	4450	3.15	1.9238	1	-	4
7	Desetanizadora II	380	5234	3.62	2.0210	1	-	4
8	Separación etano-etileno	552	4880	1.60	1.9174	1	-	4
9	Despropanizadora	277	2146	2.80	1.7805	1	-	3
10	Desbutanizadora	521	6118	2.25	2.1436	1	1	3
11	Estabilización de gasolinas	301	4474	4.94	2.159	1	1	3
12	Separación acetona-agua	191	1091	2.99	1.5655	1	-	2
13	Metanol puro	107	708	6.18	1.7429	2	-	2
14	Destilación altamente no-ideal	92	694	8.20	1.8012	1	3	2
15	Separación metanol-agua	247	1413	2.32	1.5725	3	-	3
16	Destilación extractiva	452	3534	1.73	1.8090	1	5	3
17	Destilación extractiva con furfural	256	3020	4.61	2.4646	2	-	3
18	Absorbedor I	232	4110	7.64	2.1377	1	4	2
19	Absorbedor II	328	7782	7.23	2.2345	1	2	2
20	Absorción de propano.	258	6358	9.55	2.1876	2	1	3
21	Absorción con intercambio térmico	175	2743	8.96	2.0678	1	-	2
22	Absorbedor con presaturador	187	3468	9.92	2.1860	1	1	2
23	Absorbedor con rehervidor	144	1400	6.75	1.9786	1	-	3
24	Columna agotadora	379	6372	4.44	2.5038	1	1	2

NEC = No. de Ecuaciones.

NA = No. de elementos diferentes de cero.

NJAC = No. de evaluaciones del jacobiano

JCTE = No. de iteraciones que se mantuvo constante el jacobiano.

ITPI = No. de iteraciones requeridas en el procedimiento iterativo.

CAPÍTULO VIII CONCLUSIONES

Se ha demostrado satisfactoriamente la aplicación del planteamiento de un algoritmo "Almost-Band", con la aplicación del Método de Broyden-Schubert, propuesto originalmente por Gallun (1979). De su aplicación a 24 problemas típicos de separación multicomponente en columnas de etapas de equilibrio, se concluye lo siguiente:

1. Este método es capaz de resolver una gama amplia de sistemas y tipos de problemas, entre los que se incluyen: destilación, absorción, absorción con rehervidor, destilación extractiva, varias alimentaciones y extracciones, condensadores parciales y totales, soluciones que tienen un comportamiento altamente no-ideal, y sin importar el rango de volatilidades de los componentes.
2. Cuando se manejan muchos componentes (>20), combinado con muchas etapas (>20), el tiempo de cómputo es excesivo.
3. Requiere un área de almacenamiento muy grande.

4. Es muy sensible a la suposición inicial del perfil de T , observándose que en aquellos casos en que el perfil inicial está demasiado lejos de la solución, se requiere un gran número de iteraciones, o en muchos casos se obtiene divergencia. Sin embargo, en la mayoría de los casos es relativamente fácil seleccionar suposiciones iniciales, para las que se obtenga convergencia.
5. Las técnicas aplicadas para manejar las matrices demuestran una eficiencia alta en cuanto a precisión y estabilidad, como se observa en el número de iteraciones requeridas en el procedimiento iterativo. Pero, en cuanto al llenado de las matrices en el proceso de descomposición triangular, el número de elementos diferentes de cero que aparecen es excesivo.

VIII.7. Recomendaciones.

Sobre la aplicabilidad de este procedimiento se recomienda lo siguiente:

1. Cuando se manejan soluciones altamente no-ideales este método es superior a otros planteamientos, dada la característica de estos pro-

blemas de poseer pocos componentes, sin importar el número de etapas, por lo que debe usarse en estos casos.

2. Para aquellos problemas en que se tengan muchos componentes, usarlo sólo en los casos que no se obtenga convergencia con otros métodos, y en esta situación, utilizar el mejor perfil de T obtenido con éstos, con lo que se minimiza el número de iteraciones y el tiempo de cómputo.
3. Se recomienda aplicar este método para el número de ecuaciones (NEC) menor o igual que 700 ($NEC = (2NC+1) NP+2$), o que el número de elementos diferentes de cero en la matriz original (NA) sea menor o igual que 10,000 ($NA = 2 \cdot NP \cdot NC^2 + (9 \cdot NP - 2) \cdot NC + 3NP$), con lo que el requerimiento de memoria es aproximadamente de 75 K palabras. El tiempo de cómputo es del orden reportado en el Capítulo VII.
4. Dado que el consumo de tiempo por iteración es alto, es conveniente saber si con una suposición inicial va a converger un problema o no. Esto se hace fácilmente de la observación del error en cada iteración y del tamaño de $\alpha^{(K)}$.

Si el problema va a converger, el error disminuye entre iteraciones y el tamaño de $\alpha^{(K)}$ va aumentando hasta que cerca de la solución su valor siempre es 1. Si el error y/o $\alpha^{(K)}$ oscilan, no se obtendrá convergencia. En problemas fáciles $\alpha^{(K)}$ siempre es 1, y se obtiene convergencia en cinco iteraciones o menos. En problemas difíciles $\alpha^{(K)}$ puede llegar a valer hasta $0.78125 (10)^{-2}$ y requerir hasta 20 iteraciones.

REFERENCIAS

- Amundson, N.R., and A.J. Pontinen, Multicomponent Distillation Calculations on a Large Digital Computer, Industrial and Engineering Chemistry, 50 (5), 730 (1958).
- Ball, W.E., en Billingsley, D.S., AIChE J., 12 (6), 1134 (1966).
- Bennett, J.M., Triangular Factors of Modified Matrices, Numerische Mathematik, 7, 217 (1965).
- Billingsley, D.S., On the Numerical Solution of Problems in Multicomponent Distillation at the Steady State, AIChE Journal, 12 (6), 1134 (1966).
- Billingsley, D.S., On the Equations of Holland in the Solution of Problems in Multicomponent Distillation, IBM J. Res. Develop., 14 (1), 33 (1970b).
- Billingsley, D.S., On the Numerical Solution of Problems in Multicomponent Distillation at the Steady State II, AIChE Journal, 16 (3), 441 (1970a).
- Billingsley, D.S., and G.W. Boynton, Iterative Methods for Solving Problems in Multicomponent Distillation at the Steady State, AIChE Journal, 17 (1), 65 (1971)
- Boston, J.F., A New Class of Quasi-Newton Solution Methods for Multicomponent, Multistage Separation Processes, Ph. D. Dissertation, Tulane University, New Orleans (1970).

- Boston, J.F., and S.L. Sullivan, Jr., An Improved Algorithm for Solving the Mass Balance Equations in Multistage Separation Processes, the Canadian Journal of Chem. Eng., 50, 663 (1972).
- Boston, J.F., and S.L. Sullivan, Jr., A New Class of Solution Methods for Multicomponent, Multistage Separation Processes, the Canadian Journal of Chem. Eng., 52, 52 (1974).
- Boynton, G.W., Iteration Solves Distillation, Hydrocarbon Processing, 49 (1), 153 (1970).
- Broyden, C.G., A Class of Methods for Solving Nonlinear Simultaneous Equations, Mathematics of Computation, 19, 577 (1965).
- Bruno, J.A., J.L. Yanosik, and J.W. Tierney, Distillation Calculations with Nonideal Mixtures, Extractive and Azeotropic Calculations, Advances in Chemistry Series 115, ACS, Washington D.C. (1972).
- Burningham, D.W., and F.D. Otto, Which Computer Design for Absorbers, Hydrocarbon Processing, 46 (10), 163 (1967).
- Christiansen, L.J., M.L. Michelsen, and Aage Fredenslund, Naphtali-Sandholm Distillation Calculations for NGL Mixtures Near the Critical Region, Computers and Chem. Eng., 3, 535 (1979).
- Curtis, A.R., M.J.D. Powell, and J.K. Reid, On the Estimation of Sparse Jacobian Matrices, J. Inst. Maths. Applics., 13, 117 (1974).

- Diab, S., and R.N. Maddox, Absorption, Chem. Eng., 89 (26), 38 (1982).
- Forsythe, G.E., and C.B. Moler, Computer Solution of Linear Algebraic Systems, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey (1967).
- Friday, J.R., and B.D. Smith, An Analysis of the Equilibrium Stage Separations Problem-Formulation and Convergence, AIChE Journal, 10 (5), 698 (1964).
- Gallun, S.E., Solution Procedures for Nonideal Equilibrium Stage Processes at Steady and Unsteady State Described by Algebraic or Differential-Algebraic Systems, Ph.D. Dissertation, Texas A & M University (1979)
- Gallun, S.E., and C.D. Holland, A Modification of Broyden's Method for the Solution of Sparse Systems with Application to distillation Problems Described by Nonideal Thermodynamic Functions, Computers and Chem. Eng., 4, 93 (1980).
- Gallun, S.E., and C.D. Holland, Solve More Distillation Problems. 5-For Highly Nonideal Mixtures, Hydrocarbon Processing, 55 (1), 137 (1976).
- Goldstein, R.P., and R.B. Stanfield, Flexible Method for the Solution of Distillation Design Problems Using the Newton-Raphson Technique, Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop., 9 (1), 78 (1970).
- Gupta, P.W., and P.K., Gallier, Distillation Programs in the ASPEN Simulator, Paper 28a, Presented at the Sym-

posium on Stage Mass/Energy Balances in Multicomponent Distillation, 86th Natl. Meet. of the AIChE, Houston, Texas, April 3 (1979).

Gustavson, F.G., Sparse Matrix Methods, IBM Research Report RC-8330 (1980).

Henley, E.J., and J.D. Seader, Equilibrium-Stage Separation Operations in Chemical Engineering, John Wiley & Sons, Inc., New York (1981).

Hess, F.E., C.D. Holland, R. McDaniel, and N.J. Tetlow, Solve More Distillation Problems. 7-Absorber-Type Piestills, Hydrocarbon Processing, 56 (5), 241 (1977).

Hess, F.E., S.E. Gallun, G.W. Bentzen, C.D. Holland, R. McDaniel, and N.J. Tetlow, Solve More Distillation Problems. 8- Which Method to Use, Hydrocarbon Processing, 56 (6), 181 (1977).

Holland, C.D., Multicomponent Distillation, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey (1963).

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

Holland, C.D., and G.P. Pendon, Solve More Distillation Problems. 1-Improvement Give Exact Answers, Hydrocarbon Processing, 53 (7), 148 (1974).

Holland, C.D., G.P. Pendon, and S.E. Gallun, Solve More Distillation Problems. 3-Application to Absorbers, Hydrocarbon Processing, 54 (1), 101 (1975).

- Ishi, Y., and F.D. Otto, A General Algorithm for Multistage Multicomponent Separation Calculations, The Canadian Journal of Chem. Eng., 51, 601 (1973)
- King, J.C., Separation Processes, McGraw-Hill Book Co., New York (1981).
- Lewis, W.K., and G.L. Matheson., Studies in Distillation-Design of Rectifying Columns for Natural and Refinery Gasoline, Industrial and Engineering Chemistry, 25 (5), 494 (1932).
- Naphtali, L.M., and D.P. Sandholm, Multicomponent Separation Calculations by Linearization, AIChE Journal, 17 (1), 148 (1971).
- Newman, J.S., Temperature Computed for Distillation, Hydrocarbon Processing and Petroleum Refiner, 42 (4), 141 (1963).
- Orbach, O., A Study of the Promotion of Convergence in the Calculation of Complex Chemical Plants, Ph.D. Dissertation, McMaster University (1969).
- Orbach, O., C.M. Crowe, and A.I. Johnson, Multicomponent Separation Calculations by the Modified Form of Newton's Method, Chemical Engineering Journal, 3, 176 (1972).
- Schubert, L.K., Modification of a Quasi-Newton Method for Nonlinear Equations with a Sparse Jacobian, Mathematics of Computation, 25, 27 (1970).

- Shah, M.K., and P.R. Bishnoi, Multistage Multicomponent Separation Calculations Using Thermodynamic Properties Evaluated by the SRK/PR Equation of State, The Canadian Journal of Chem. Eng., 56, 478 (1978).
- Stewart, G.W., Introduction to Matrix Computations, Academic Press: New York (1973).
- Sujata, A.D., Absorber-Stripper Calculations Made Easier, Hydrocarbon Processing and Petroleum Refiner, 40 (12), 137 (1961).
- Tewarson, R.P., Sparse Matrices, Academic Press, New York (1973).
- Thiele, E.W., and R.L. Geddes, Computation of Distillation Apparatus for Hydrocarbon Mixtures, Industrial and Engineering Chemistry, 25 (3), 289 (1933).
- Tierney, J.W., and J.A. Bruno, Equilibrium Stage Calculations, AIChE Journal, 13 (3), 556 (1967).
- Tierney, J.W., and J.L. Yanosik, Simultaneous Flow and Temperature Correction in the Equilibrium Stage Problem, AIChE Journal, 15 (6), 897 (1969).
- Tomich, J.F., A New Simulation Method for Equilibrium Stage Processes, AIChE Journal, 16 (2), 229 (1970).
- Wang, J.C., and G.E. Henke, Tridiagonal Matrix for Distillation, Hydrocarbon Processing, 45 (8), 155 (1966).
- Wilkinson, J.H., The Algebraic Eigenvalue Problem, Oxford: Clarendon Press (1965).

APÉNDICE A

Inicialización de las variables de iteración \underline{f} , \underline{y} y \underline{T} , como una modificación del método propuesto por Boston y Sullivan (1974).

1. Se suponen las temperaturas del domo y del fondo. - Si no se tiene un estimado de éstas, se aplica la siguiente técnica:

Se obtiene una alimentación compuesta, adicionando todas las corrientes de alimentación. Se determinan sus temperaturas de burbuja y de rocío a la presión del plato medio. Estos valores se asignan al domo y el fondo, respectivamente.

El perfil inicial de temperaturas se obtiene interpolando linealmente entre ambas.

2. Se calculan las condiciones de equilibrio de la alimentación compuesta a T_1 y T_{NP} y a las presiones correspondientes, con objeto de obtener valores de las constantes de equilibrio a dos temperaturas. Si se usó la opción de estimar \underline{T} por puntos de burbuja y de rocío, se ahorra este paso y directamente se toman las constantes obtenidas en estos cálculos.

3. Se obtienen las constantes de equilibrio para toda la columna y todos los componentes interpolándolas directamente con los valores obtenidos a las dos -- temperaturas conocidas, y aplicando el perfil de T supuesto. Para esto se supone una funcionalidad de la forma

$$\ln K = a + \frac{b}{T}$$

4. Se suponen flujos molares constantes para obtener L y V.
5. Se aplica el algoritmo modificado de Thomas para -- calcular f.
6. Se utilizan las ecuaciones de equilibrio para obtener v.
7. Se calculan las constantes de equilibrio como

$$K_{ij} = K_{ij}(T_j, P_j, X_{ij}, Y_{ij}) \quad \begin{matrix} i=1, NC \\ j=1, NP \end{matrix}$$

utilizando las composiciones calculadas en (5) y (6).

Si el cambio entre dos iteraciones sucesivas es menor que una tolerancia, se obtuvieron las composiciones deseadas; de no ser así, se utiliza sustitución directa y se va a (5).

APÉNDICE B

Inicialización de las variables de iteración ℓ , \underline{y} y T , para el caso que se tenga un condensador total, propuesta por -- Gallun (1979).

1. Se suponen flujos molares constantes.
2. Se suponen las temperaturas del domo y del fondo.

$$3. T_j = T_1 + \frac{(T_{NP} - T_1)(J - 1)}{(NP - 1)} \quad j=2,3,\dots, NP-1$$

$$4. \text{desl}_i = FT_{i1} - \ell_{iNP} \quad i=1,2,\dots, NC$$

$$FT = \sum_{n=1}^{NP} FA_n$$

$$5. v_{i2} = \left(1 + \frac{L_1}{WL_1}\right) \cdot \text{desl}_i \quad i=1,2,\dots, NC$$

$$6. Y_{i1} = \frac{\text{desl}_i}{\sum_{k=1}^{NC} \text{desl}_k} \quad i=1,2,\dots, NC$$

$$7. \text{DEL}_i = \frac{\left[\frac{\ell_{iNP}}{NC} - Y_{i1} \right]}{\sum_{k=1}^{NC} \ell_{iNP}} \quad i=1,2,\dots, NC$$

$$8. \quad \ell_{i,j-1} = L_j \cdot \{y_{i1} + DEL_i \cdot (j-1)\} \quad \begin{array}{l} i=1,2,\dots,NC \\ j=2,3,\dots,NP-1 \end{array}$$

$$9. \quad v_{ij} = V_j \cdot \{y_{i1} + DEL_i \cdot (j-1)\} \quad \begin{array}{l} i=1,2,\dots,NC \\ j=3,4,\dots,NP \end{array}$$

APÉNDICE C

Algoritmo modificado de Thomas (Boston y Sullivan, 1972).

Para un componente particular, los BMC, en forma general, para el modelo de columna presentado en la figura 3.1, son:

$$b_1 l_1 - C_1 l_2 = fa_1$$

$$-l_{j-1} + b_j l_j - C_j l_{j+1} = fa_j \quad (j=2,3,\dots, NP-1)$$

$$-l_{NP-1} + b_{NP} l_{NP} = fa_{NP}$$

donde

$$b_1 = R_{L1} + S_1$$

$$b_j = R_{Lj} + R_{Vj} S_j \quad (j=2,3,\dots, NP-1)$$

$$b_{NP} = 1 + R_{VNP} S_{NP}$$

$$C_j = S_{j+1} \quad (j=1,2,\dots, NP-1)$$

Las cantidades R_{Lj} y R_{Vj} se definen en función de las extracciones laterales.

$$R_{Lj} = 1 + Q_{Lj} \quad (j=1,2,\dots, NP-1)$$

$$R_{Vj} = 1 + Q_{Vj} \quad (j=2,3,\dots, NP)$$

$$Q_{Lj} = WL_j/L_j$$

$$Q_{Vj} = WV_j/V_j$$

S_j se define como

$$S_j = K_j V_j / L_j$$

Eliminación hacia adelante.

$$b_1'' = S_1 + Q_{L1}$$

$$b_1' = 1 + b_1''$$

$$f_1' = fa_1 / b_1'$$

$$C_{j-1}' = C_{j-1} / b_{n-1}'$$

$$b_j'' = S_j (R_{Vj} b_{j-1}'' + Q_{Vj}) / b_{j-1}' + Q_{Lj} \quad \left. \begin{array}{l} \\ \\ \\ \end{array} \right\} j = 1, 3, \dots, NP$$

$$b_j' = 1 + b_j''$$

$$f_j' = (fa_j + f_{j-1}') / b_j'$$

Sustitución hacia atrás.

$$l_{NP} = f_{NP}'$$

$$l_j = f_j' + C_j' l_{j+1} \quad (j=NP-1, NP-2, \dots, 1)$$

Nota:

Sólo es necesario almacenar los vectores C' y f'.