

300618

# UNIVERSIDAD LA SALLE



ESCUELA DE QUIMICA  
INCORPORADA A LA U.N.A.M.

3

OPTIMIZACION DE UN SIMULADOR DE TORRES  
DE ABSORCION Y DESORCION  
DE MULTICOMPONENTES

## TESIS PROFESIONAL

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:  
INGENIERO QUIMICO

P R E S E N T A:

LUIS HUMBERTO SONI SAMPERIO

2002

MEXICO. D. F.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



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

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

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

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

**PAGINACION**

**DISCONTINUA**

A mis padres:

Carlota Samperio de Soni

Jaime Soni Cassani

con profundo agradecimiento, algo muy pequeño  
para quienes me han dado tanto y a quienes  
debo lo que soy.

1

**TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN**

A mi esposa:

Aurora Gutiérrez de Soni

A mis hijos:

Aurora Amalio

y

Luis Humberto

por los grandes momentos que hemos compartido,  
así como por el cariño, apoyo y paciencia que  
me han brindado siempre.

Son innumerables las personas e instituciones a quienes debo mi formación, y la realización del presente trabajo; sin embargo, quisiera agradecer en forma especial la ayuda e interés brindados durante la dirección de la presente tesis por el M. en C. José Luis González Díaz.

## INDICE

\* INTRODUCCION 1

\* CAPITULO -I-

### DESCRIPCION E IMPLEMENTACION DEL SIMULADOR ORIGINAL.

1.1.- Antecedentes. 4

1.2.- Descripción del modelo matemático. 5

1.3.- Descripción del programa.

1.3.1.- Descripción general y limitaciones. 19

1.3.2.- Organización del programa. 20

1.3.3.- Operación del programa. 45

#### Apéndices.

I-1.- Formas de datos para la alimentación de  
datos al STAB. 50

I-2.- Formas de datos y reportes generados para el  
ejemplo propuesto por J. D. Seader. 60

I-3.- Listado del STAB y de sus variables  
principales. 79

\* CAPITULO -II-

MODIFICACIONES PROPUESTAS.

2.1.- Elección de las modificaciones.	103
2.2.- Descripción de las modificaciones.	
2.2.1.- Modificaciones al uso de memoria y la programación.	105
2.2.2.- Modificaciones a la convergencia del bucle V	108
2.2.3.- Modificaciones a la convergencia del bucle T	111
2.3.- Simulador propuesto.	120
Apéndices.	
II-1.- Modificaciones al uso de memoria y la programación. Subrutinas DELTAT, SETUPA, SETUPB y TRIDI.	121
II-2.1.- Modificación del bucle V de acuerdo al algoritmo de Wegstein.	126
II-2.2.- Modificación del bucle V de acuerdo al algoritmo 4SS/ISSM.	127
II-2.3.- Modificación del bucle V de acuerdo al algoritmo de Steffensen.	128
II-2.4.- Modificación del bucle V de acuerdo al algoritmo de Wegstein en un esquema de convergencia secuencial.	129
II-3.1.- Modificación del bucle T de acuerdo al algoritmo de Powell.	138
II-3.2.- Modificación del bucle T de acuerdo al algoritmo modificado de Bennett-Broyden.	152

\* CAPITULO -III-

COMPARACION DE AMBOS SIMULADORES.

3.1.- Problema # 1	
3.1.1.- Descripción.	164
3.1.2.- Datos alimentados.	165
3.1.3.- Resultados obtenidos.	165
3.2.- Problema # 2	
3.2.1.- Descripción.	175
3.2.2.- Datos alimentados.	176
3.2.3.- Resultados obtenidos.	177
3.3.- Problema # 3	
3.3.1.- Descripción.	189
3.3.2.- Datos alimentados.	189
3.3.3.- Resultados obtenidos.	189
3.4.- Discusión de resultados.	202

\* CAPITULO -IV-

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.	203
---------------------------------	-----

* NOMENCLATURA.	207
*REFERENCIAS.	212
*BIBLIOGRAFIA.	215

## INTRODUCCION

La comprensión y el diseño de los procesos de separación es de gran importancia debido a que los fenómenos que ocurren en forma natural son procesos de mezclado y frecuentemente la necesidad de procesos de separación determina gran parte del costo de fabricación de una sustancia.

Dos procesos de separación que son ampliamente utilizados, sobre todo en la industria del petróleo, son la absorción y desorción de multicomponentes. La primera, se refiere al proceso mediante el cual se pone en contacto una mezcla gaseosa con un líquido, para disolver de manera selectiva varios componentes del gas y obtener una solución de éstos en el líquido. Por otra parte, cuando la transferencia de masa sucede en la dirección opuesta, es

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

decir, del líquido al gas, la operación se conoce como desorción.

Hasta antes del advenimiento de las computadoras el diseño de torres de absorción y desorción de multicomponentes estaba seriamente limitado, ya que los métodos cortos presentan algunas limitaciones por los efectos de la transferencia de masa casi unidireccional que provoca que los flujos de las fases no sean constantes y se tengan efectos térmicos importantes; y por otro lado, los métodos rigurosos involucran una fuerte cantidad de cálculos que es prácticamente imposible realizar a mano.

En 1968, J.D. Seader<sup>(1)</sup> propuso un simulador de torres de absorción y desorción de multicomponentes, que puede utilizarse para resolver una gran variedad de problemas por medio de balances rigurosos de materia y energía en cada etapa teórica; ya que se pueden especificar alimentaciones, salidas laterales de líquido y/o vapor y transferencias de calor hacia o desde la etapa.

En el presente estudio se busca proponer una serie de modificaciones al uso de memoria y los ciclos de convergencia que hagan dicho simulador más eficiente y abran el camino para que en futuros estudios se ataquen otras modificaciones, como por ejemplo las referentes al cálculo de propiedades termodinámicas, alimentaciones a dos fases y sistemas con reacción química.

La exposición del trabajo se divide en cuatro capítulos de acuerdo al siguiente esquema:

- \* En el primer capítulo se presenta la descripción del modelo matemático en que está basado el simulador, su implementación y la descripción general y limitaciones del programa.
- \* En el segundo capítulo se muestran las modificaciones propuestas, dividiendo la exposición en tres partes:

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

- Modificaciones al uso de memoria y la programación.
  - Modificaciones a la convergencia del bucle U.
  - Modificaciones a la convergencia del bucle T.
- \* En el tercer capítulo se presentan 3 ejemplos comparando los resultados obtenidos con el simulador original y el propuesto.
- \* En el cuarto capítulo se exponen las conclusiones y recomendaciones del trabajo.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

CAPITULO I  
DESCRIPCION E IMPLEMENTACION DEL SIMULADOR ORIGINAL.

1.1.- Antecedentes.

El simulador objeto de este estudio, llamado STAB, forma parte de la colección 'Computer Programs for Chemical Engineering Education' <sup>(1)</sup> la cual es el resultado de la inquietud del Comité CACHE (Computer Aids for Chemical Engineering Education), de acelerar y coordinar la introducción de la computación digital en la educación de la ingeniería química.

El STAB fue realizado por T. Shinohara, P.J. Johansen y J.D. Seader en 1968, y está diseñado de tal forma que pueda emplearse en cualquier curso que cubra los fundamentos de la absorción y desorción de multicomponentes. Es un programa que puede utilizarse para resolver una gran variedad de problemas, ya que en cada etapa se pueden especificar una alimentación, salidas laterales de líquido y/o vapor, así como transferencias de calor hacia o desde la etapa.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

## 1.2.- Descripción del modelo matemático.

El STAB considera un modelo como el mostrado en la siguiente figura:

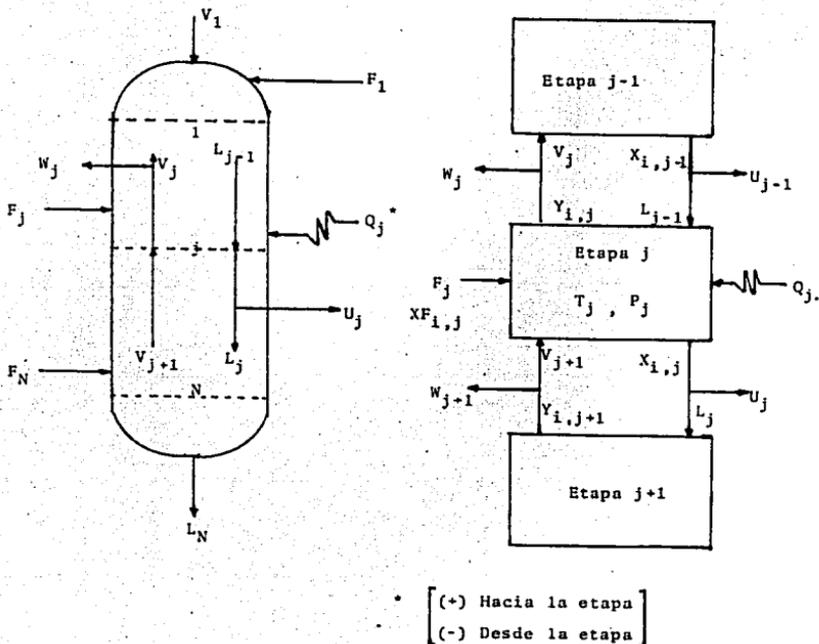


Figura 1.1.- Modelo de etapa teórica considerado por el STAB.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

De acuerdo a este modelo, las ecuaciones que gobernarían el comportamiento de cada etapa serían:

1.- Balance de materia del componente i en la etapa J.

$$L_{i,J} X_{i,J-1} + V_{i,J+1} Y_{i,J+1} + F_{i,J} X_{i,J} - (V_{i,J} + W_{i,J}) Y_{i,J} - (L_{i,J} + U_{i,J}) X_{i,J} = 0 \quad (1.1)$$

2.- Relación de equilibrio del componente i en la etapa J.

$$Y_{i,J} = K_{i,J} X_{i,J} \quad (1.2)$$

3.- Balance de energía en la etapa J.

$$E_{i,J} = Q_{i,J} + F_{i,J} H_{i,J} + L_{i,J-1} h_{i,J-1} - (L_{i,J} + U_{i,J}) h_{i,J} - (V_{i,J} + W_{i,J}) H_{i,J} + V_{i,J+1} H_{i,J+1} = 0 \quad (1.3)$$

4.- Sumatoria de fracciones mol en la etapa J.

$$\sum_{i,J} X_{i,J} = 1.0 \quad (1.4)$$

$$\sum_{i,J} Y_{i,J} = 1.0 \quad (1.5)$$

Además, debe recordarse que  $K_{i,J}$ ,  $h_{i,J}$  y  $H_{i,J}$  en general son funciones de la temperatura y composición de cada fase. Por lo tanto, si tenemos especificadas para cada etapa la alimentación, la transferencia de calor y los flujos de las salidas laterales de líquido y/o vapor, en los casos en que apliquen, los cuatro tipos de ecuaciones anteriores comprenderán  $N(2NC+3)$  ecuaciones simultáneas no lineales con las siguientes  $N(2NC+3)$  incógnitas:

- $X_{i,J}$  = Fracciones mol del líquido en el equilibrio.
- $Y_{i,J}$  = Fracciones mol del vapor en el equilibrio.
- $L_{i,J}$  = Flujo de líquido entre las etapas J y J+1.
- $V_{i,J}$  = Flujo de vapor entre las etapas J y J-1.
- $T_{i,J}$  = Temperatura de equilibrio.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

Los métodos rigurosos para la resolución de estas ecuaciones pueden dividirse en tres grupos:

- a) Métodos etapa por etapa.
- b) Métodos de aproximaciones sucesivas.
- c) Métodos de relajación.

Los métodos etapa por etapa consisten en fijar las condiciones de una cierta etapa del proceso, normalmente la final, y a partir de ella calcular el resto de las etapas secuenciales mediante un adecuado procedimiento repetitivo. Estos métodos están limitados a aquellos problemas en que puede predecirse con buena seguridad las cantidades y composiciones de uno de los productos, por lo cual son los más empleados para los casos en que se conocen las variables de separación y se desea determinar el número de etapas bajo condiciones de caudales conocidos. Estas características limitan notablemente su aplicación en muchos problemas de absorción y desorción de multicomponentes.

Por otra parte, los métodos de aproximaciones sucesivas consisten en suponer los flujos, temperaturas y, en algunos casos, las composiciones de todas las etapas, para tener los valores de las variables desconocidas. Posteriormente, las ecuaciones restantes se emplean como funciones de prueba en un esquema de convergencia para obtener nuevos valores para las variables supuestas y así repetir el procedimiento hasta lograr la precisión deseada. Este tipo de métodos se aplica a aquellos problemas en que el número de etapas está fijo y se desea calcular el grado de separación que se obtendrá. Son los más aconsejables para la solución de problemas que impliquen sistemas complejos. (2)

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

Por último, los métodos de relajación consisten en suponer las composiciones, flujos y temperaturas de todas las etapas. Posteriormente, considerando cada etapa por separado, se calculan los errores en el balance de materia y energía de la etapa y se estiman los nuevos caudales y condiciones para la etapa, intentando relajar los errores a cero. Cuando se ha realizado esto para una etapa, se realiza para la siguiente y así sucesivamente, hasta que todas las etapas se hayan calculado el suficiente número de veces para que los errores sean despreciables. Estos métodos son altamente estables, pero convergen muy lentamente, especialmente cuando se acercan al resultado final. Por ello, generalmente se reservan para problemas particularmente difíciles que no pueden ser resueltos eficazmente por otros métodos.

Ya que el STAB utiliza un método del tipo aproximaciones sucesivas, de aquí en adelante nos centraremos exclusivamente en ellos.

El primer método, que puede parecer obvio, para la resolución de las ecuaciones (1.1) a (1.5) por aproximaciones sucesivas es el de utilizar un método de convergencia simultánea multivariable, por ejemplo el de Newton; sin embargo, esto implicaría una prohibitiva cantidad de cálculos. Por ello, es recomendable hacer algunas manipulaciones algebraicas que ayuden a simplificar el sistema de ecuaciones. La simplificación más evidente es combinar la ecuación (1.2) con las demás ecuaciones para eliminar las  $X_{i,j}$  o las  $Y_{i,j}$ . Con esto logramos suprimir  $N \times N \times C$  ecuaciones y  $N \times N \times C$  incógnitas. Arbitrariamente eliminaremos las  $Y_{i,j}$  y conservaremos las  $X_{i,j}$ . Por otra parte, la suma de las ecuaciones (1.1) para

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

todos los componentes y todas las etapas desde J hasta extremo superior de la torre da el balance de materia:

$$-L + V + \sum_{i=1}^J (F_i - W_i - U_i) - V = 0 \quad (1.6)$$

La ecuación (1.6) puede utilizarse para eliminar V o L de las ecuaciones restantes; de nuevo, arbitrariamente eliminamos L y mantenemos V. De esta forma las ecuaciones (1.1) se convierten en NxNC ecuaciones de la forma:

$$(V + \text{SUM} - U) X_{i, J-1} + [- (V + W) K_{i, J} - U - U_{i, J} - \text{SUMB} + U] X_{i, J} + \frac{U}{J+1} K_{i, J+1} X_{i, J+1} = -F X_{i, J} \quad (1.7)$$

donde  $\text{SUM} = \sum_{i=1}^J [F_i - W_i - U_i] \quad (1.8)$

$$\text{SUMB} = \sum_{i=1}^J [F_i - W_i - U_i] \quad (1.9)$$

Con lo cual se ha reducido el sistema a N(NC+2) ecuaciones con N(NC+2) incógnitas.

Para la solución de las ecuaciones (1.3), (1.4) y (1.7) por aproximaciones sucesivas pueden seguirse dos caminos en función de la idealidad de las soluciones manejadas:

- a) Método de convergencia simultanea (SC).
- b) Método 2N de Newton.

Cuando las soluciones son únicamente no ideales, la ecuación (1.7) se vuelve altamente no lineal debido a la dependencia de K<sub>i,J</sub> de las composiciones. Algunos autores<sup>(3,4)</sup> han presentado formas eficientes de aplicar el método de convergencia simultanea multivariable de Newton a estas situaciones, lo cual implica utilizar todas las X<sub>i,J</sub>, U<sub>J</sub> y T<sub>J</sub> como variables de convergencia y requiere gran cantidad de memoria de computadora y mucho tiempo de cálculo en cada iteración.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN



Existen varios métodos para resolver sistemas de ecuaciones como el (1.10); sin embargo, en algunos de ellos la propagación del error puede provocar que no se converja. Un método, que se ha sugerido como posiblemente el más adecuado, es una modificación del método de eliminación de Gauss. (5) En dicho algoritmo se calculan dos cantidades auxiliares,  $p_j$  y  $q_j$ , utilizando las siguientes fórmulas:

$$p_{j-1} = C_j / B_{j-1}; \quad q_{j-1} = D_j / B_{j-1} \quad (1.15)$$

$$p_j = C_j / (B_j - A_{j,j} p_{j-1}) \quad 2 \leq j < N-1 \quad (1.16)$$

$$q_j = (D_j - A_{j,j} q_{j-1}) / (B_j - A_{j,j} p_{j-1}) \quad 2 \leq j < N \quad (1.17)$$

Después, los valores de  $X_{i,j}$  se calculan evaluando primeramente  $X_{i,N}$  y posteriormente se retrocede decreciendo  $j$  hasta calcular  $X_{i,1}$  de acuerdo a las siguientes fórmulas:

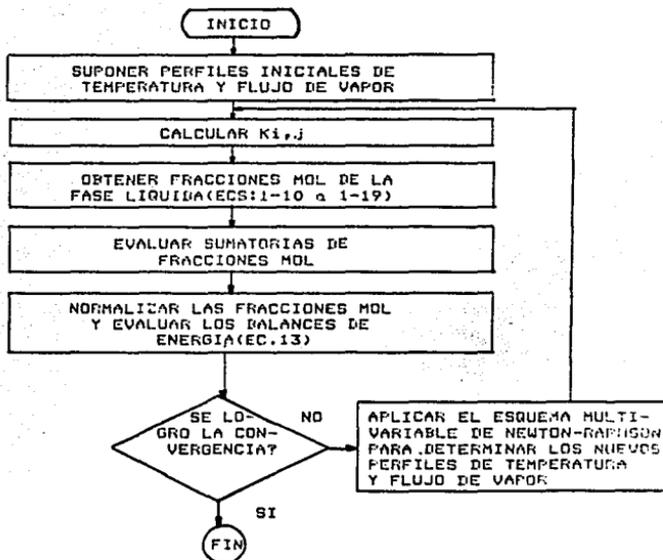
$$X_{i,N} = q_{i,N} \quad (1.18)$$

$$X_{i,j} = q_{i,j} - p_{i,j} X_{i,j+1} \quad 1 \leq j < N-1 \quad (1.19)$$

Este método tiene las ventajas de que es rápido, fácil de programar, no requiere mucha memoria y salvo en circunstancias verdaderamente poco usuales no da lugar a problemas por errores de truncamiento en la computadora.

Una vez que se han obtenido las  $X_{i,j}$ , pueden utilizarse las ecuaciones (1.3) y (1.4) como  $2N$  ecuaciones de prueba para los  $U_j$  y  $T_j$  supuestos. (6)

Tomich propone un método basado en el esquema multivariable de Newton para la convergencia de las temperaturas y los flujos (Figura 1.2-a). En dicho método el número de variables



g).-ARREGLO DE CONVERGENCIA SIMULTANEA

FIGURA 1.2.- METODOS 2N PARA LA RESOLUCION DE TORRES DE -  
ETAPAS CON SOLUCIONES IDEALES O PARCIALMENTE  
IDEALES.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

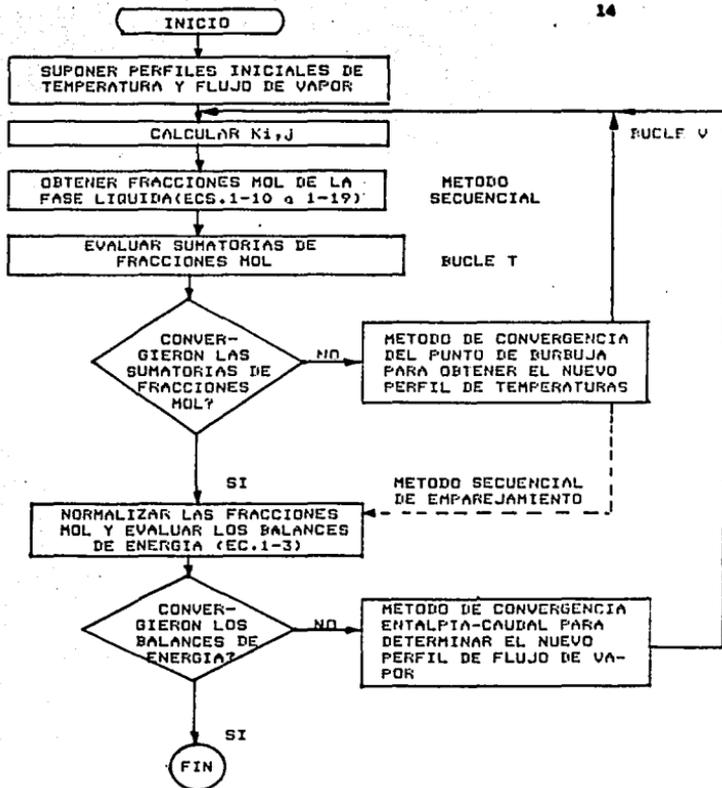
de convergencia es mucho menor (2N) que en el caso del método de convergencia simultánea (SC), y consecuentemente se realizan menos cálculos por iteración y el tiempo total de cálculo puede ser notablemente menor. Sin embargo, dicho método ha sido sugerido como deseable sólo para situaciones complejas donde ninguno de los métodos rápidos por bucles separados dan una convergencia eficaz.

En muchos casos algunas variables de convergencia pueden aparearse con ciertas funciones de prueba y despreciar su influencia en las funciones de prueba con las cuales no están apareadas. Esto es importante, ya que por lo general las temperaturas tienen un efecto más fuerte que los caudales de vapor en uno de dos conjuntos de ecuaciones de prueba, mientras que los caudales de vapor lo tienen en el otro conjunto.

Existen dos arreglos posibles para aparear las temperaturas y los flujos de vapor con los balances de entalpía y las sumatorias de fracciones mol en diferentes combinaciones. Estos se conocen como el arreglo BP (punto de burbuja) y el arreglo SR (suma de caudales).

En el arreglo BP (Figura 1.2-b), los balances de energía se aparean con los flujos totales y las sumatorias de fracciones mol con las temperaturas, ignorando los efectos cruzados. Este apareamiento es aplicable a las situaciones en que las temperaturas de las etapas se determinan más por las composiciones ( $\sum_{i,j} x_{i,j} = 1$ ) que por los balances de entalpía y los flujos totales se determinan más por los balances de entalpía que por las composiciones.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN



b).- ARREGLO 8P

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

FIGURA 1.2.- METODOS 2N PARA LA RESOLUCION DE TORRES DE ETAPAS CON SOLUCIONES IDEALES O PARCIALMENTE IDEALES.

En el arreglo SR (Figura 1.2-c) los balances de entalpía se aparean con las temperaturas y las sumatorias de fracciones mol con los flujos, ignorando los efectos cruzados. Este apareamiento es aplicable a aquellas situaciones en que los flujos totales se determinan más por la composición que por los balances de entalpía, y las temperaturas se determinan más por los balances de entalpía que por las composiciones, y donde los efectos del calor sensible dominan los balances de entalpía. Las torres de absorción y desorción se caracterizan por éstos criterios, y se ha encontrado que el arreglo SR funciona bien, mientras que el esquema BP no.

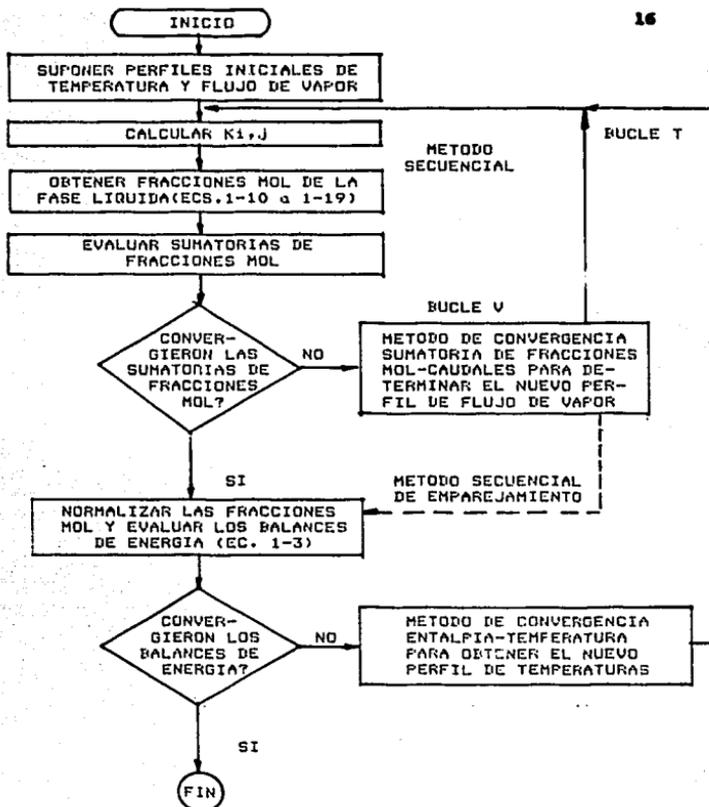
Como sería de esperarse, el STAB utilizó un arreglo del tipo SR. En el bucle del caudal de fase total los nuevos valores de  $V_J$  se obtienen utilizando las sumatorias de fracciones mol como funciones de prueba en un método de sustitución directa. De acuerdo a este, una vez que se conocen las  $X_{i,J}$ , se pueden determinar los nuevos  $L_J$  y  $V_J$  utilizando las siguientes ecuaciones:

$$(L)_J \text{ nuevo} = (L)_J \text{ viejo} \sum_{i,J} X_{i,J} \quad (1.20)$$

$$(V)_J \text{ nuevo} = (L)_{J-1} \text{ nuevo} - (L)_J \text{ nuevo} + (V)_{J+1} \text{ nuevo} + F - U - W \quad (1.21)$$

Por otra parte, en el bucle de temperatura, las nuevas temperaturas se obtienen utilizando los balances de energía como funciones de prueba. La aplicación de la ecuación (1.3) a todos los platos genera un sistema de  $N$  ecuaciones no lineales que se resuelven empleando el esquema de convergencia multivariable de Newton, según el cual las correcciones a las  $T_J$  en la iteración  $k$  están dadas por:

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN



c).- ARREGLO SR

FIGURA 1.2.- METODOS 2N PARA LA RESOLUCION DE TORRES DE ETAPAS CON SOLUCIONES IDEALES O PARCIALMENTE IDEALES.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

$$\phi_k(T) \Delta_k^T = -E_k(T) \quad (1.22)$$

donde

$$T_k = [T_1, T_2, \dots, T_N]^k \quad (1.23)$$

$$\phi_k(T) = \begin{bmatrix} \frac{\partial E_1}{\partial T_1} & \dots & \frac{\partial E_1}{\partial T_N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial E_N}{\partial T_1} & \dots & \frac{\partial E_N}{\partial T_N} \end{bmatrix} \quad (1.24)$$

$$\Delta_k^T = [\Delta_1^T, \Delta_2^T, \dots, \Delta_N^T]^k \quad (1.25)$$

$$E_k(T) = [E_{1k}(T), E_{2k}(T), \dots, E_{Nk}(T)] \quad (1.26)$$

Al aplicar la ecuación (1.22) a los balances de energía se obtiene que:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial E_1}{\partial T_1} & \frac{\partial E_1}{\partial T_2} \\ \frac{\partial E_2}{\partial T_1} & \frac{\partial E_2}{\partial T_2} & \frac{\partial E_2}{\partial T_3} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial E_{N-1}}{\partial T_{N-2}} & \frac{\partial E_{N-1}}{\partial T_{N-1}} & \frac{\partial E_{N-1}}{\partial T_N} \\ \frac{\partial E_N}{\partial T_{N-1}} & \frac{\partial E_N}{\partial T_N} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta_1^T \\ \Delta_2^T \\ \vdots \\ \Delta_{N-1}^T \\ \Delta_N^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_1 \\ E_2 \\ \vdots \\ E_{N-1} \\ E_N \end{bmatrix} \quad (1.27)$$

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

lo cual es un sistema tridiagonal en donde:

$$A_J = \left( \frac{\partial E_J}{\partial T_{J-1}} \right) = L_{J-1} \left( \frac{\partial h_{J-1}}{\partial T_{J-1}} \right) \quad (1.28)$$

$$B_J = \left( \frac{\partial E_J}{\partial T_J} \right) = -(V+W)_J \left( \frac{\partial H_J}{\partial T_J} \right) - (L+U)_J \left( \frac{\partial h_J}{\partial T_J} \right) \quad (1.29)$$

$$C_J = \left( \frac{\partial E_J}{\partial T_{J+1}} \right) = V_{J+1} \left( \frac{\partial H_{J+1}}{\partial T_{J+1}} \right) \quad (1.30)$$

$$D_J = -E_J \quad (1.31)$$

Dicho sistema se resuelve empleando el algoritmo anteriormente descrito (Esc. 1.15 a 1.17) y obteniendo los  $\Delta T_J$  de acuerdo a las siguientes fórmulas:

$$\Delta T_N = q_N \quad (1.32)$$

$$\Delta T_J = q_J - p_J \Delta T_{J+1}, \quad 1 \leq J < N-1 \quad (1.33)$$

Posteriormente las correcciones de temperatura se utilizan para obtener un nuevo perfil e iniciar una nueva iteración.

El procedimiento de cálculo de la columna se repite hasta que los vectores de temperaturas de dos iteraciones sucesivas satisfagan el criterio de convergencia definido como:

$$\sum_{J=1}^N (\Delta T_J)^2 < 0.01N \quad (1.34)$$

Para iniciar la primera iteración de la columna se supone un perfil lineal de temperaturas entre las temperaturas estimadas del domo y del fondo; y los flujos de vapor se calculan suponiendo un flujo molar ascendente constante.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

### 1.3.- Descripción del Programa.

#### 1.3.1.- Descripción general y limitaciones.

Como ya se mencionó anteriormente, el STAB es un programa realizado con fines didácticos que sirve para resolver problemas de absorción y desorción de multicomponentes por medio de balances rigurosos de materia y energía en cada etapa teórica. Fue escrito en FORTRAN IV para ser empleado en una computadora UNIVAC-1180 y está diseñado para manejar una gran variedad de casos, ya que en cada etapa se pueden especificar una alimentación, salidas laterales de líquido y/o vapor, así como transferencias de calor hacia o desde la etapa.

En general, el programa siempre converge a una solución satisfactoria a menos que las especificaciones provoquen un flujo de líquido y/o vapor igual a cero o negativo, o las temperaturas de las etapas queden fuera del rango de validez de las correlaciones de propiedades físicas utilizadas. Sin embargo, es importante destacar que no es un programa que sea ejemplo de eficiencia en el uso de capacidad de almacenamiento y tiempos de ejecución, ya que solamente pretende ser un punto de partida para que los estudiantes realicen posteriores mejoras a sus propios programas.

Además de las limitaciones inherentes al modelo matemático, pueden destacarse las siguientes limitaciones del programa:

- 1.- Acepta un máximo de 20 componentes y 100 etapas de equilibrio.
- 2.- Realiza un máximo de 15 iteraciones para la convergencia del cálculo del nuevo perfil de temperatura (este límite,

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

NHBI, se establece en un DATA en el programa maestro y puede cambiarse si se desea); y un máximo de NCI iteraciones de la columna (si NCI no se especifica en los datos de entrada, se utiliza un límite de 15).

3.- Solamente acepta alimentaciones en una fase.

4.- No puede emplearse en la resolución de absorbedores por intercambio de calor-reflujo, ni absorbedores con reacción química.

5.- El sistema de unidades empleado comprende °F, btu/hr, lbmol/hr, btu/lbmol y psia.

#### 1.3.2.- Organización del Programa.

El STAB está formado por un programa principal, siete subrutinas y cuatro funciones cuyas descripciones y diagramas de bloques se presentan a continuación.

## PROGRAMA PRINCIPAL

Este es el programa maestro del STAB, el cual tiene los siguientes propósitos:

- 1.- Encargarse de todas las tareas de lectura, verificación e impresión de información.
- 2.- Coordinar el seguimiento del algoritmo de cálculo llamando las subrutinas y funciones que se requieran para el mismo.
- 3.- Controlar las iteraciones de la columna y comprobar la convergencia.

En la figura 1.3 se presenta el diagrama de bloques de la estructura general del STAB.

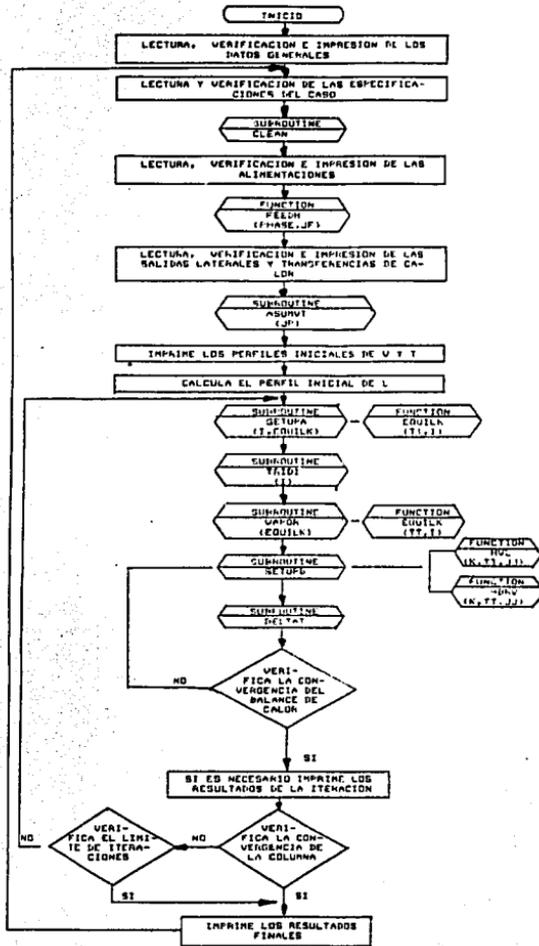
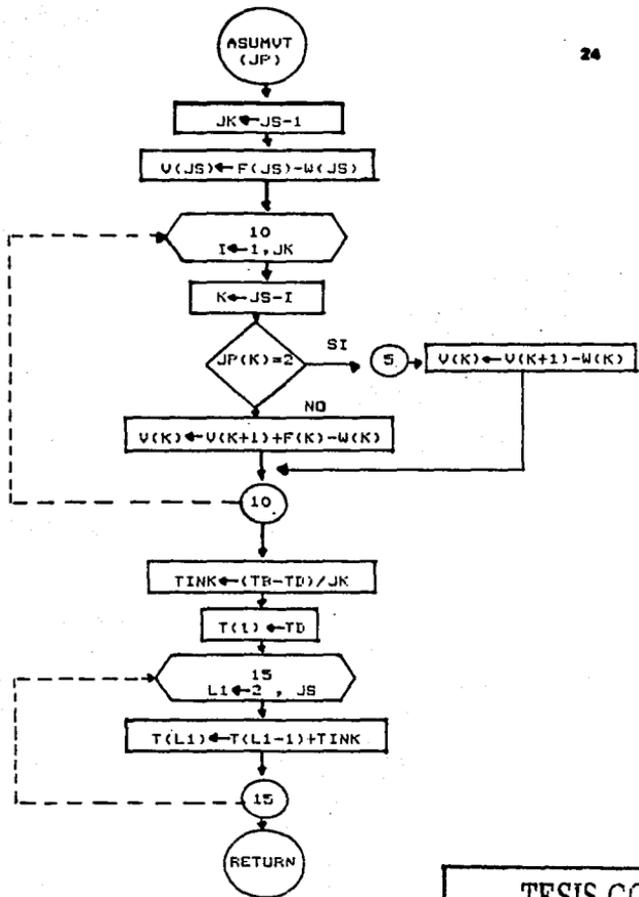


FIGURA 1.3.-ESTRUCTURA GENERAL DEL STAB

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

## SUBROUTINA ASUMVT

Esta subrutina calcula los perfiles iniciales de temperatura y flujo de vapor. El primero, mediante una interpolación lineal entre las temperaturas estimadas del fondo y el domo; y el segundo, suponiendo un flujo molar ascendente constante.



TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

FIGURA 1.4.- DIAGRAMA DE FLUJO SUBRUTINA ASUMVT

## SUBROUTINA CLEAN

Esta subrutina se encarga de inicializar en ceros todos los elementos de los siguientes arreglos:

- F = Alimentaciones.
- TF = Temperaturas de las alimentaciones.
- HF = Entalpias molares de las alimentaciones.
- W = Salidas laterales de vapor.
- U = Salidas laterales de líquido.
- Q = Transferencias de calor hacia ó desde las etapas.
- XF = Fracciones mol de las alimentaciones.

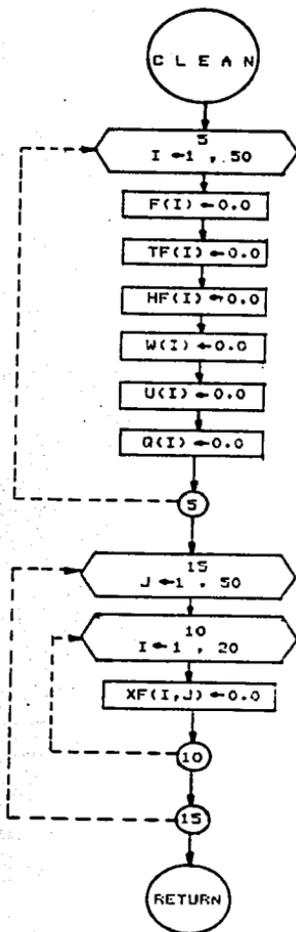


FIGURA 1.3.- DIAGRAMA DE FLUJO SUBROUTINA CLEAN

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

## SUBROUTINA DELTAT

Esta subrutina resuelve la matriz tridiagonal, resultante de la aplicación del método de Newton-Raphson a las ecuaciones de balance de energía, para la determinación de las correcciones en el perfil de temperaturas utilizando la modificación del método de eliminación de Gauss descrito por las ecuaciones 1.15 a 1.17 y 1.32 a 1.33.

Una vez obtenidas dichas correcciones la misma subrutina se encarga del cálculo del nuevo perfil de temperaturas.

**TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN**

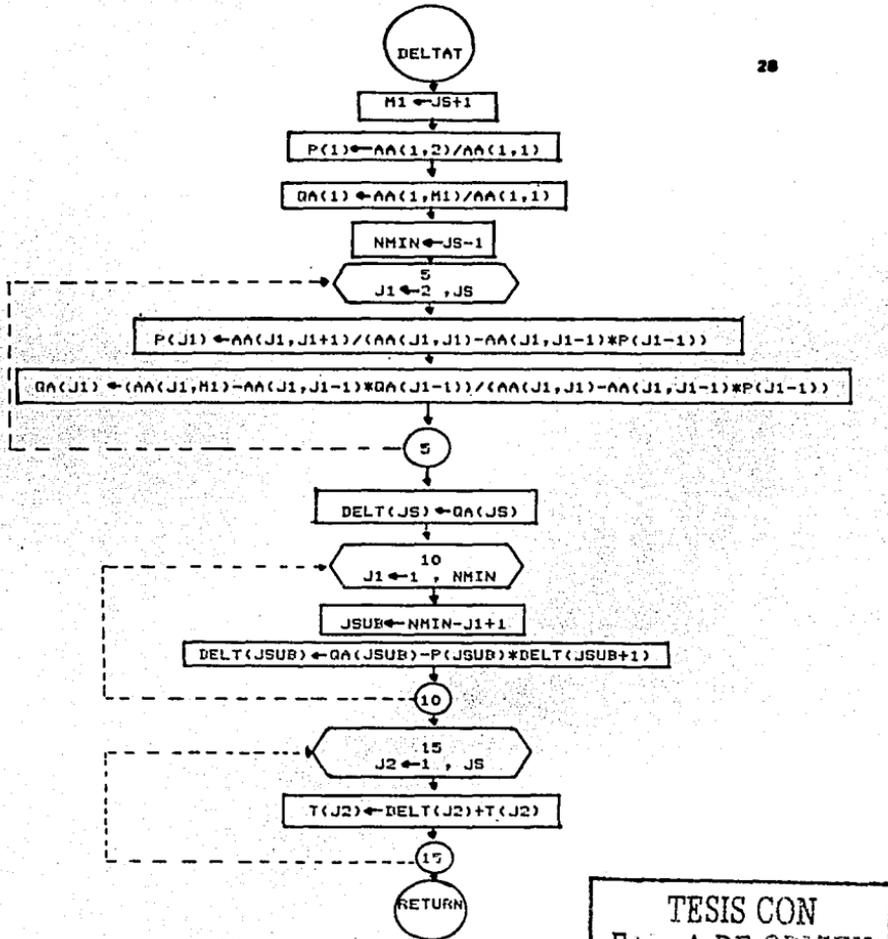


FIGURA 1.6.-- DIAGRAMA DE FLUJO SUBROUTINA DELTAT

## SUBROUTINA SETUPA

Esta subrutina calcula los coeficientes de las matrices tridiagonales que representan las ecuaciones de balance de componente por etapa linealizadas en términos de las fracciones mol de la fase líquida (Ecs. 1.10 a 1.14).

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

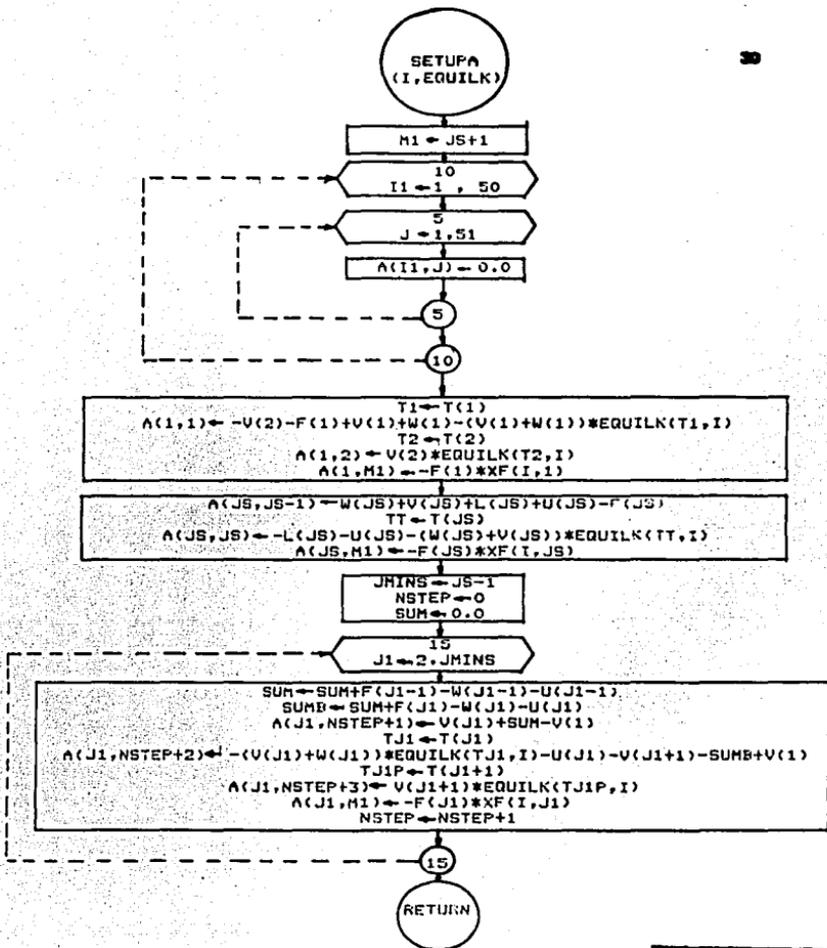


FIGURA 1.7.- DIAGRAMA DE FLUJO SUBROUTINA SETUPA

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

## SUBROUTINA SETUPB

Esta subrutina se encarga de calcular los coeficientes de la matriz tridiagonal, resultante de la aplicación del método de Newton-Raphson a las ecuaciones de balance de energía, para la determinación de las correcciones en el perfil de temperaturas (Ecs. 1.27 a 1.31).

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

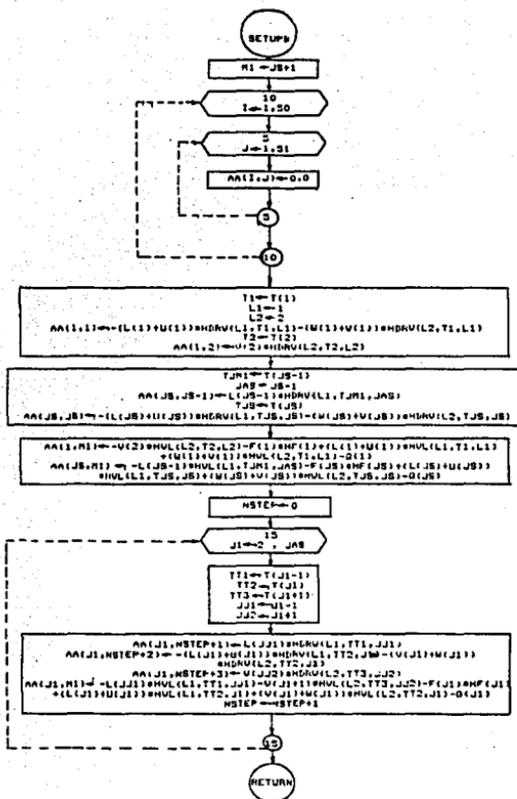


FIGURA 1.8.- DIAGRAMA DE FLUJO SUBROUTINA SETUPB

## SUBROUTINA TRIDI

Esta subrutina resuelve las matrices tridiagonales que representan las ecuaciones de balance de componente por etapa linealizadas en términos de las fracciones mol de la fase líquida utilizando el método modificado de eliminación de Gauss descrito por las ecuaciones 1.15 a 1.19.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

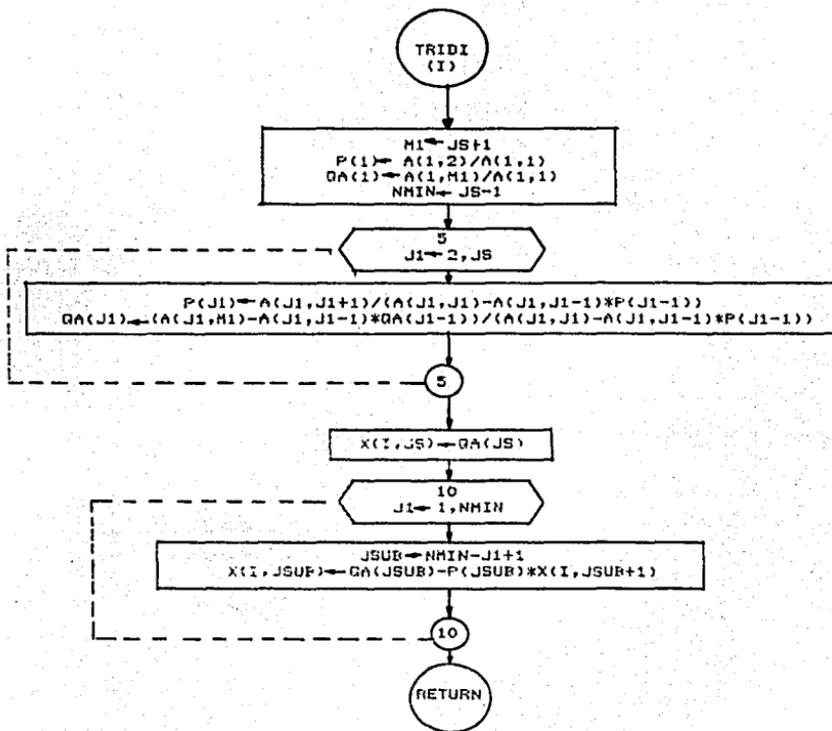


FIGURA 1.9.- DIAGRAMA DE FLUJO SUBROUTINA TRIDI

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

## SUBROUTINA VAPOR

Esta subrutina se encarga de las siguientes tareas:

- 1.- Calcular las fracciones mol de la fase vapor por medio de las relaciones de equilibrio.
- 2.- Determinar los nuevos perfiles de flujo de líquido y vapor utilizando el método de suma de flujos (SR) con sustitución directa descrito por las ecuaciones 1.20 y 1.21
- 3.- Normalizar las fracciones mol del líquido y el vapor.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

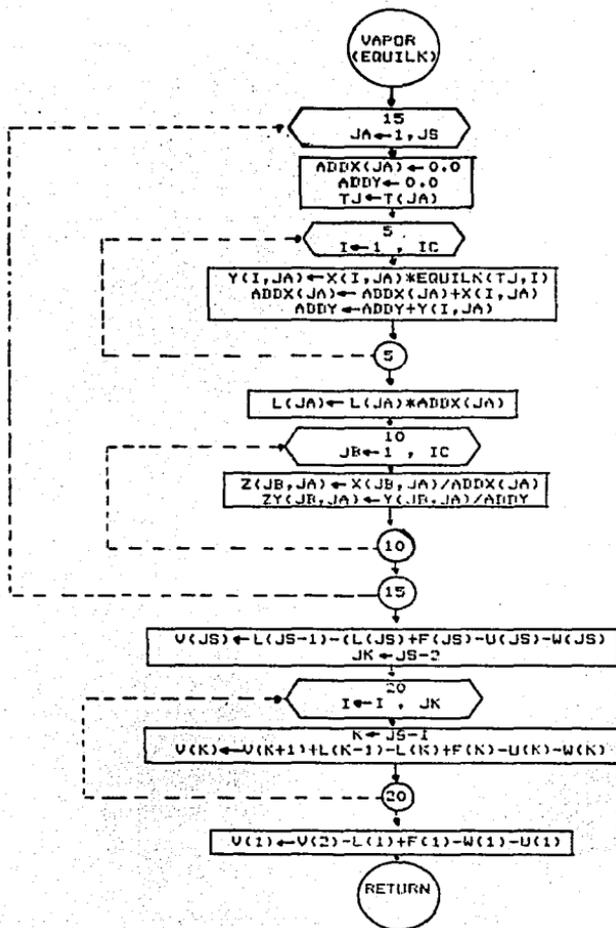


FIGURA 1.10.- DIAGRAMA DE FLUJO SUBROUTINA VAPOR

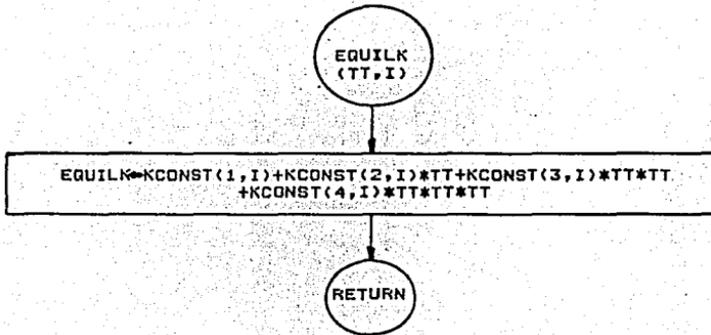
TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

## FUNCION EQUILK

Esta función se encarga de calcular las constantes de equilibrio por medio de polinomios obtenidos por ajustes de mínimos cuadrados:

$$K_i = \alpha_i + \beta_i T + \gamma_i T^2 + \delta_i T^3 \quad (1.35)$$

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN



TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

FIGURA 1.11.- DIAGRAMA DE FLUJO FUNCION EQUILK

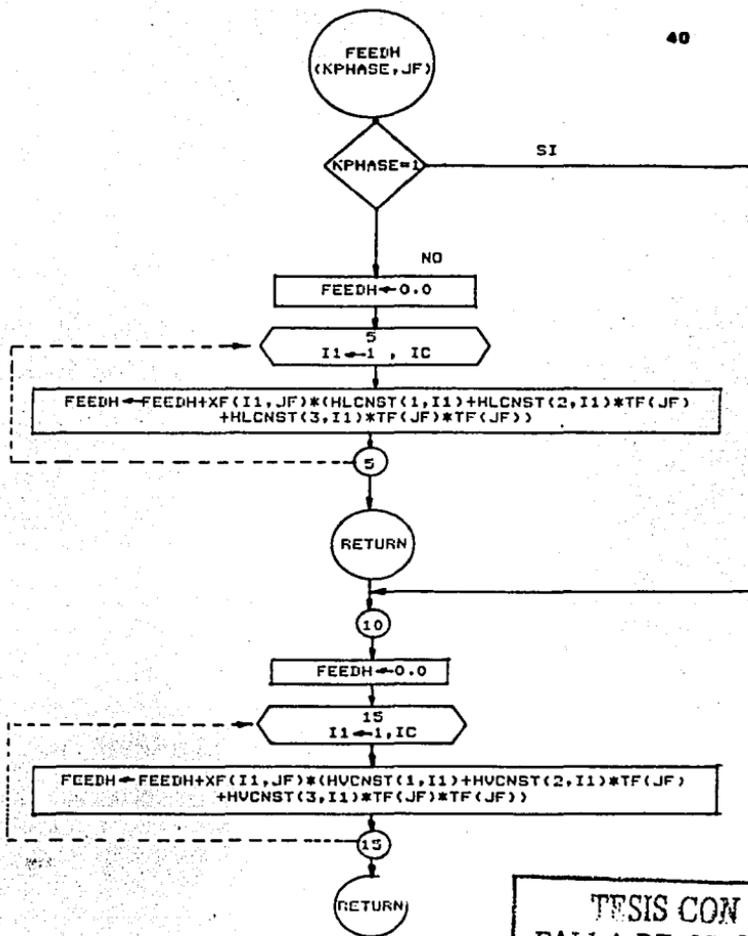
### FUNCION FEEDH

Esta función calcula las entalpías molares de las alimentaciones por medio de polinomios obtenidos por ajustes de mínimos cuadrados.

$$h = \sum_{i=1}^{N} X_i (a_i + b_i T_i + c_i T_i^2) \quad (1.36)$$

$$H = \sum_{i=1}^{N} Y_i (A_i + B_i T_i + C_i T_i^2) \quad (1.37)$$

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN



**TESIS CON FALLA DE ORIGEN**

FIGURA 1.12.- DIAGRAMA DE FLUJO FUNCION FEEDH

### FUNCION HBRV

Esta función calcula las derivadas de las entalpías con respecto a la temperatura a partir de las entalpías expresadas como polinomios obtenidos por ajustes de mínimos cuadrados.

$$\frac{dh_L}{dT} = \sum_i X_i (b_i + c_i T) \quad (1.38)$$

$$\frac{dH_v}{dT} = \sum_i Y_i (B_i + C_i T) \quad (1.39)$$

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

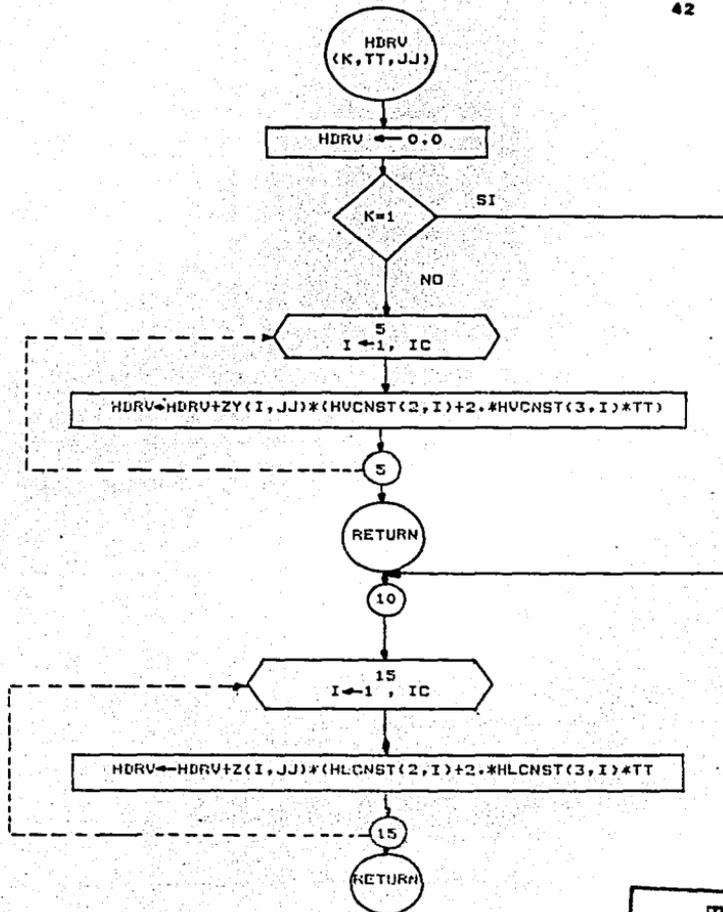


FIGURA 1.13.- DIAGRAMA DE FLUJO FUNCION HDRV

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

## FUNCION HVL

Calcula las entalpias molares de las corrientes internas de la torre por medio de polinomios obtenidos por ajustes de mínimos cuadrados.

$$h_L = \sum_{i=1}^n X_i (a_i + b_i T_i + c_i T_i^2) \quad (1.40)$$

$$H_V = \sum_{i=1}^n Y_i (A_i + B_i T_i + C_i T_i^2) \quad (1.41)$$

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

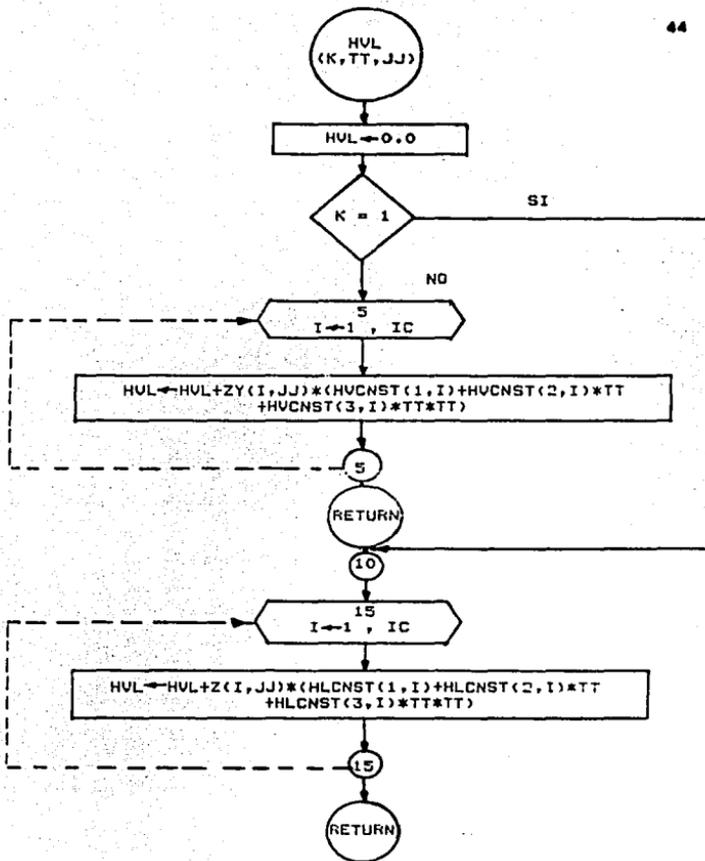


FIGURA 1.14.- DIAGRAMA DE FLUJO FUNCION HVL

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

### 1.3.3. Operación del programa.

Datos de entrada.- En el apéndice I-1 se encuentran las formas de datos necesarias para alimentar las especificaciones del problema que se desee resolver. Algunos detalles que deben tenerse presentes al llenar dichas formas son :

- Las etapas están numeradas del domo hacia el fondo.
- El orden de los componentes deberá ser siempre el mismo en todas las hojas de datos y normalmente se utiliza el orden de volatilidad decreciente.
- Todos los problemas deberán tener por lo menos dos alimentaciones; una de vapor en la última etapa y una de líquido en la primera.
- Se pueden resolver múltiples casos usando los mismos componentes y las mismas constantes de propiedades físicas repitiendo las formas 5 a 9 tantas veces como se desee.
- En la especificación de los formatos se utilizó el código FORTRAN, según el cual:

<u>CODIGO</u>	<u>SIGNIFICADO</u>
IW	Variable entera con un ancho de campo de W caracteres.
FW,d	Variable real sin exponente con ancho de campo de W caracteres y d dígitos a la derecha del punto decimal.
EW,d	Variable real con exponente y un ancho de campo de W caracteres distribuido de la siguiente forma:

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

SIGNO DE LA BASE |-----| W |-----|  
 - X ... X E + ee  
 1 d d -  
 PUNTO DECIMAL |-- d --| SIGNO DEL EXPONENTE

donde:

$X \dots X$  = dígitos más significativos del valor.  
 1 d

ee = dígitos del exponente.

NOTA: Al llenar las formas de datos deberá tenerse cuidado de no dejar posiciones en blanco en la parte derecha del ancho de campo, ya que dichos espacios son considerados como ceros por la computadora y pueden producirse errores.

Reportes generados. - Al ejecutar el programa se imprimen los siguientes reportes:

- Datos de entrada y perfiles iniciales de temperatura y flujo de vapor.
- Comparación entre el factor de convergencia y el factor de tolerancia para cada iteración.
- Las temperaturas, flujos y composiciones de las fases líquida y vapor de todos los platos cuando se realiza la última iteración de la columna o se alcanza el máximo número de iteraciones. NCI.
- Resultados de las iteraciones intermedias comprendiendo las siguientes datos por plato: temperatura, flujos y composiciones de ambas fases y suma de fracciones mol de la

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

fase líquida; siempre y cuando se especifique KP en un valor mayor que cero y menor que NCI.

En el apéndice I-2 se presentan las formas de datos y los reportes generados para el siguiente ejemplo propuesto por J.D.Seader (1):

Una torre de absorción de 6 platos teóricos, operando a 75 psia, se utilizará para tratar 18,000,000 SCFD (60 F y 1 atm) de un gas que contiene:

COMPUESTO:	% MOL
metano	83.0
etano	8.4
propano	4.8
n - butano	2.6
n - pentano	1.2
	100.0

con 300,000 galones/día de un aceite absorbente de 40 API y peso molecular promedio de 161. Las temperaturas de las alimentaciones de gas y de líquido son 60 F y 90 F, respectivamente.

Calcule los productos, los perfiles de temperatura, flujo de líquido y de vapor a través de la torre, y las composiciones del líquido y el vapor en cada etapa teórica.

Mensajes de error y verificación de datos. - El programa maestro tiene ciertas banderas y mensajes de error para guiar al usuario en caso de que se detecte alguna falla. En general, dichos mensajes de error son suficientemente explicativos.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

Los errores detectados pueden afectar la ejecución del programa en tres formas:

- Permitiendo que el caso prosiga.
- Terminando el caso en ejecución y pasando al siguiente.
- Terminando el programa.

Un detalle importante es el hecho de que el programa no verifica los posibles errores en los valores de los coeficientes de las correlaciones de las propiedades físicas; en lugar de ello, calcula los valores de las propiedades a la temperatura media del rango de validez y los imprime junto con los coeficientes para que el usuario pueda revisarlos.

#### 1.4.- Implementación del programa.

El programa fué implementado en una computadora Hewlett-Packard/3000, utilizando el lenguaje FORTRAN-3000. En el apéndice I-3 se presenta el listado de dicho programa, el cual es semejante al presentado por Seader <sup>(1)</sup> salvo en los siguientes conceptos:

- 1.- Se adicionaron las siguientes dos líneas al programa:

```
00001000      $ CONTROL USLINIT
00002000      $ CONTROL FILE = 05, FILE = 06
```

que son comandos requeridos por el sistema para la compilación.

- 2.- Se tradujeron todos los comentarios y formatos de impresión.

- 3.- Debido a limitaciones de capacidad de la máquina utilizada fué necesario reducir el número máximo de etapas teóricas a 50.

- 4.- En las instrucciones 105 y 195, se cambió el índice (J) por (J-1), ya que el primero estaba equivocado.

- 5.- Se eliminó el formato 390 que no era necesario.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

6.- Se adicionó la declaración REAL KCONST, que hacía falta en la subrutina ASUMVT.

7.- Se agregaron las declaraciones REAL L que hacían falta en las funciones FEEDH, HDRV y HVL.

8.- Se eliminó la instrucción COMMON/AA5/, que no era necesario en la subrutina SETUPB.

9.- Para ser consistentes con el modelo matemático, planteado en la sección 1.2, se consideró la siguiente convención de signos para las transferencias de calor:

(+) Hacia la etapa.

(-) Hacia los alrededores.

Esto hizo necesario modificar la subrutina SETUPB cambiando todos los signos de las Q(J).

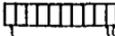
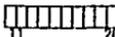
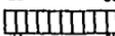
TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

## A P E N D I C E I - 1

FORMAS DE DATOS PARA LA ALIMENTACION DE  
ESPECIFICACIONES AL STAR

FORMA DE DATOS # 1

DATOS GENERALES

<u>CONCEPTO</u>	<u>SÍMBOLO</u>	<u>UNIDADES</u>	<u>FORMATO</u>	
No. Total de componentes (1)	IC	-	I 10	
Temperatura mínima (2)	TLOW	°F	F 10.2	
Temperatura máxima (2)	THI	°F	F 10.2	
Presión de operación	P	PSIA	F 10.2	
No. máximo de iteraciones de la columna (3)	NCI	-	I 10	

NOTAS:

- (1) Máximo 20
- (2) Del rango de validez de los coeficientes de los polinomios para el cálculo de las propiedades termodinámicas.
- (3) Si no se especifica este dato el programa le asigna 15.

**TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN**

FORMA DE DATOS # 2

COEFICIENTES DE LOS POLINOMIOS PARA EL CALCULO DE LAS CONSTANTES DE EQUILIBRIO.

$$K(I) = KCONST (1,1) + KCONST (2,1)*T + KCONST (3,1)* T**2 + KCONST (4,1)* T**3; T [=] °F$$

COMPONENTE	KCONST (1,1)	KCONST (2,1)	KCONST (3,1)	KCONST (4,1)
1				
2				
3				
4				
5				
6				
7				
8				
9				
10				
11				
12				
13				
14				
15				
16				
17				
18				
19				
20				
	1 15	16 30	31 45	46 60

NOTAS:  
Formato E 15.5

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

FORMA DE USAR # 3

COEFICIENTES DE LOS POLINOMIOS PARA EL CALCULO DE LAS  
ENTALPIAS DEL VAPOR.

$$h_v (1) = \text{INVCST} (1,1) + \text{INVCST} (2,1) * T + \text{INVCST} (3,1) * T **2$$

h<sub>v</sub> [=] Btu/lbmol; T [=] °F

COMPONENTE

- 1
- 2
- 3
- 4
- 5
- 6
- 7
- 8
- 9
- 10
- 11
- 12
- 13
- 14
- 15
- 16
- 17
- 18
- 19
- 20

INVCST (1,1)

1	1	15
2	1	15
3	1	15
4	1	15
5	1	15
6	1	15
7	1	15
8	1	15
9	1	15
10	1	15
11	1	15
12	1	15
13	1	15
14	1	15
15	1	15
16	1	15
17	1	15
18	1	15
19	1	15
20	1	15

INVCST (2,1)

1	16	30
2	16	30
3	16	30
4	16	30
5	16	30
6	16	30
7	16	30
8	16	30
9	16	30
10	16	30
11	16	30
12	16	30
13	16	30
14	16	30
15	16	30
16	16	30
17	16	30
18	16	30
19	16	30
20	16	30

INVCST (3,1)

1	31	45
2	31	45
3	31	45
4	31	45
5	31	45
6	31	45
7	31	45
8	31	45
9	31	45
10	31	45
11	31	45
12	31	45
13	31	45
14	31	45
15	31	45
16	31	45
17	31	45
18	31	45
19	31	45
20	31	45

NOTAS:

Formato E. 15.5

TESIS CON  
 FALTA DE ORIGEN

FORMA DE DATOS # 4

COEFICIENTES DE POLINOMIOS PARA EL CALCULO DE  
LAS ENTALPIAS DEL LIQUIDO.

$$h_l (T) = HLCNST (1,1) + HLCNST (2,1) * T + HLCNST (3,1) * T **2$$

$$h_l [=] \text{Btu} / \text{lbmol} ; T [=] ^\circ \text{F}$$

COMPONENTE

- 1
- 2
- 3
- 4
- 5
- 6
- 7
- 8
- 9
- 10
- 11
- 12
- 13
- 14
- 15
- 16
- 17
- 18
- 19
- 20

HLCNST (1,1)

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15

HLCNST (2,1)

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20

HLCNST (3,1)

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20

NOTAS:

Formato E 15.5

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

FORMA DE DATOS # 5

DATOS DEL CASO

<u>CONCEPTO</u>	<u>SÍMBOLO</u>	<u>UNIDADES</u>	<u>FORMATO</u>
Número de caso	NC	-	I 10 1 10
Número de etapas teóricas (1)	JS	-	I 10 11 20
Número de alimentaciones	NOF	-	I 10 21 30
Número de salidas laterales de vapor	NOVS	-	I 10 31 40
Número de salidas laterales de líquido	NOLS	-	I 10 41 50
Número de etapas con transferencia de calor	NOQS	-	I 10 51 60
Frecuencia de impresión de resultados intermedios (2)	KP	-	I 10 61 70
Temperatura estimada del fondo	TB	°F	F 10.2 1 10
Temperatura estimada del domo	TD	°F	F 10.2 11 20

NOTAS:

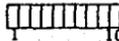
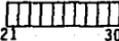
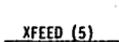
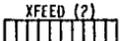
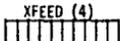
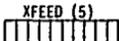
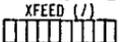
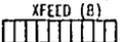
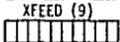
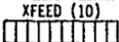
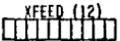
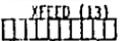
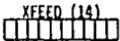
(1) Máximo 50

(2) Si no se especifica este dato, el programa le asigna 10.

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

FORMA DE DATOS # 6

ESPECIFICACIONES DE LAS ALIMENTACIONES

CONCEPTO	SÍMBOLO	UNIDADES	FORMATO	
Número de la etapa que recibe la alimentación	JF	-	I 10	
Fase de la alimentación (1=vapor, 2= líquido)	PHASE	-	I 10	
Temperatura de la alimentación	TEMP	°F	F 10.2	
Flujo de la alimentación	XFLOW	lbmol/hr	F 10.2	
Composición	XFEED(1)	-	F 10.5	
	XFEED (2)			
	XFEED (3)			
	XFEED (4)			
	XFEED (5)			
	XFEED (6)			
	XFEED (7)			
	XFEED (8)			
	XFEED (9)			
	XFEED (10)			
	XFEED (11)			
	XFEED (12)			
	XFEED (13)			
	XFEED (14)			
	XFEED (15)			
	XFEED (16)			
	XFEED (17)			
	XFEED (18)			
	XFEED (19)			
	XFEED (20)			

NOTAS:

Deberá llenarse una de estas formas por cada alimentación.

TESIS CON FALLA DE ORIGEN





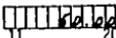
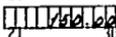
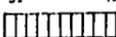


A P E N D I C E I - 2

FORMAS DE DATOS Y REPORTES GENERADOS  
PARA EL EJEMPLO PROPUESTO POR  
J. D. SEADER

FORMA DE DATOS # 1

DATOS GENERALES

<u>CONCEPTO</u>	<u>SIMBOLO</u>	<u>UNIDADES</u>	<u>FORMATO</u>
No. Total de componentes (1)	IC	-	I 10 
Temperatura mínima (2)	TLOW	°F	F 10.2 
Temperatura máxima (2)	THI	°F	F 10.2 
Presión de operación	P	PSIA	F 10.2 
No. máximo de iteraciones de la columna (3)	NCI	-	I 10 

NOTAS:

- (1) Máximo 20
- (2) Del rango de validez de los coeficientes de los polinomios para el cálculo de las propiedades termodinámicas.
- (3) Si no se especifica este dato el programa le asigna 15.

**TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN**

FORMA DE DATOS # 2

COEFICIENTES DE LOS POLINOMIOS PARA EL CALCULO DE LAS CONSTANTES  
DE EQUILIBRIO.

$$K(T) = KCONST (1,1) + KCONST (2,1)*T + KCONST (3,1)* T**2 + KCONST (4,1)* T**3; T. [=] °F$$

COMPONENTE	KCONST (1,1)	KCONST (2,1)	KCONST (3,1)	KCONST (4,1)
1	1.7200E+00	-1.2500E+00	-1.6200E-01	-1.0000E+00
2	-1.7500E+01	-1.8700E-01	1.0000E-01	-8.5500E-02
3	2.8500E+01	-1.7100E-01	-1.7800E-01	-8.7700E-02
4	-1.8700E+00	1.8100E-01	-1.0200E+00	-8.7100E-02
5	2.0700E+00	4.4600E-02	7.7100E-01	3.0000E-02
6	-7.0000E-01	8.0000E-02	0.0000E+00	1.0000E+00
7				
8				
9				
10				
11				
12				
13				
14				
15				
16				
17				
18				
19				
20				

NOTAS:  
Formato E 15.5

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

FORMA DE TALLA # 3

COEFICIENTES DE LOS POLINOMIOS PARA EL CALCULO DE LAS  
ENTALPIAS DEL VAPORES.

$$h_v (1) = h_{vcsT} (1,1) + h_{vcsT} (2,1) * T + h_{vcsT} (3,1) * T **2$$

$$h_v [=] \text{Btu/lbmol}; T [=] ^\circ\text{F}$$

COMPONENTE

- 1
- 2
- 3
- 4
- 5
- 6
- 7
- 8
- 9
- 10
- 11
- 12
- 13
- 14
- 15
- 16
- 17
- 18
- 19
- 20

h<sub>vcsT</sub> (1,1)

1	10.000E+00
2	0.17000E+01
3	1.1000E+00
4	1.6500E+00
5	1.9200E+00
6	2.2000E+00
7	
8	
9	
10	
11	
12	
13	
14	
15	
16	
17	
18	
19	
20	

h<sub>vcsT</sub> (2,1)

1	3.2000E+01
2	1.3000E+00
3	1.3500E+00
4	7.0100E+01
5	2.9000E+00
6	4.4000E+00
7	
8	
9	
10	
11	
12	
13	
14	
15	
16	
17	
18	
19	
20	

h<sub>vcsT</sub> (3,1)

1	0.0000E+00
2	0.0000E-02
3	2.0000E-01
4	3.7000E-01
5	7.0000E-02
6	0.0000E+00
7	
8	
9	
10	
11	
12	
13	
14	
15	
16	
17	
18	
19	
20	

NOTAS:  
Formato E 15.5

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

FORMA DE DATOS # 4

COEFICIENTES DE POLINOMIOS PARA EL CALCULO DE  
LAS ENTALPIAS DEL LIQUIDO.

$$h_1 (1) = HLCNST (1,1) + HLCNST (2,1) * T + HLCNST (3,1) * T **2$$

$$h_1 [ = ] \text{ Btu / lbmol ; } T [ = ] \text{ } ^\circ \text{ F}$$

COMPONENTE

	HLCNST (1,1)			
1				73000E+04
2				36000E+04
3				68000E+04
4				60400E+04
5				75000E+04
6				12000E+04
7				
8				
9				
10				
11				
12				
13				
14				
15				
16				
17				
18				
19				
20				

	HLCNST (2,1)			
1				11000E+02
2				10500E+02
3				25000E+02
4				38500E+02
5				43500E+02
6				71000E+02
7				
8				
9				
10				
11				
12				
13				
14				
15				
16				
17				
18				
19				
20				

	HLCNST (3,1)			
1				00000E-00
2				-10000E-01
3				46500E-01
4				25000E-01
5				30000E-01
6				00000E+02
7				
8				
9				
10				
11				
12				
13				
14				
15				
16				
17				
18				
19				
20				

UNIDADES:  
Temperatura E 15.5

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

FORMA DE DATOS # 5

DATOS DEL CASO

CONCEPTO	SIMBOLO	UNIDADES	FORMATO	
Número de caso	NC	-	1 10	1 10
Número de etapas teóricas (1)	JS	-	1 10	11 20
Número de alimentaciones	NOF	-	1 10	21 30
Número de salidas laterales de vapor	NOVS	-	1 10	31 40
Número de salidas laterales de líquido	NOLS	-	1 10	41 50
Número de etapas con transferencia de calor	NOQS	-	1 10	51 60
Frecuencia de impresión de resultados intermedios (2)	KP	-	1 10	61 70
Temperatura estimada del fondo	TB	°F	F 10.2	71 80
Temperatura estimada del dono	TD	°F	F 10.2	81 90

NOTAS:

(1) Máximo 50

(2) Si no se especifica este dato, el programa le asigna 10.

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

FORMA DE DATOS # 6

ESPECIFICACIONES DE LAS ALIMENTACIONES

CONCEPTO	SIMBOLO	UNIDADES	FORMATO	
Número de la etapa que recibe la alimentación	JF	-	I 10	
Fase de la alimentación (1=vapor, 2= líquido)	PHASE	-	I 10	
Temperatura de la alimentación	TEMP	°F	F 10,2	
Flujo de la alimentación	XFLOW	lbmol/hr	F 10,2	
Composición	XFEED(1)	-	F 10,5	

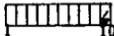
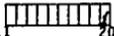
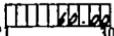
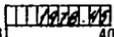
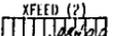
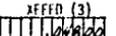
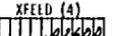
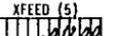
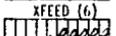
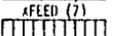
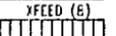
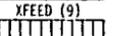
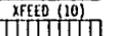
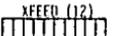
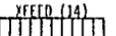
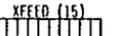
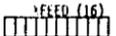
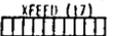
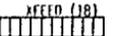
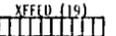
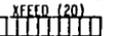

NOTAS:

Deberá llenarse una de estas formas por cada alimentación.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

FORMA DE DATOS # 6

ESPECIFICACIONES DE LAS ALIMENTACIONES

CONCEPTO	SÍMBOLO	UNIDADES	FORMATO	
Número de la etapa que recibe la alimentación	JF	-	I 10	
Fase de la alimentación (1=vapor, 2= líquido)	PHASE	-	I 10	
Temperatura de la alimentación	TEMP	°F	F 10,2	
Flujo de la alimentación	XFLOW	lbmol/hr	F 10,2	
Composición	XFEED(1)	-	F 10,5	
	XFEED (1)			
	XFEED (2)			
	XFEED (3)			
	XFEED (4)			
	XFEED (5)			
	XFEED (6)			
	XFEED (7)			
	XFEED (8)			
	XFEED (9)			
	XFEED (10)			
	XFEED (11)			
	XFEED (12)			
	XFEED (13)			
	XFEED (14)			
	XFEED (15)			
	XFEED (16)			
	XFEED (17)			
	XFEED (18)			
	XFEED (19)			
	XFEED (20)			

NOTAS:

Deberá llenarse una de estas formas por cada alimentación.

TESIS CON  
 FALTA DE ORIGEN

S T A B

ABSORCION Y DESORCION DE MULTICOMPONENTES.

NUMERO MAXIMO DE ITERACIONES PARA EL CALCULO DE LAS TEMPERATURAS = 15

NUMERO MAXIMO DE ITERACIONES PARA LA RESOLUCION DE LA COLUMNA = 15

CONSTANTE PARA EL CRITERIO DE CONVERGENCIA DE LAS ITERACIONES DE LA COLUMNA = .01000

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

COEFICIENTES DE LAS ECUACIONES POLINOMIALES DE LAS PROPIEDADES FISICAS

PROPIEDAD =  $A + B \cdot T + C \cdot T^2 + D \cdot T^3$ ,  
 DONDE T ESTA EN GRAD. F

PRESION = 75.000 PSIA

INTERVALO APROPIADO DE TEMPERATURAS = 50.00 A 150.00 GRAD. F

COMPONENTE	A	B	C	D	VALOR DE LA PROPIEDAD A 100.00 GRAD. F
<b>CONSTANTES DE EQUILIBRIO</b>					
1	.12250E+02	-.25000E+00	-.62500E-03	.00000E+00	31.00000
2	.47500E+01	-.42700E-03	.20000E-03	-.05500E-07	6.70100
3	.23500E+01	-.13100E-01	.13000E-03	-.04700E-07	2.33520
4	-.43400E+00	.12100E-01	-.10200E-04	.54400E-07	.72840
5	-.20700E+00	.41600E-02	.47700E-06	.30000E-07	.24457
6	-.98000E-04	.28000E-05	.00000E+00	.00000E+00	.00011
<b>ENTALPIAS DEL VAPOR (BTU/LB.MOL)</b>					
1	.40000E+04	.90000E+01	.60000E+00		5700.00000
2	.03100E+04	.13200E+02	.60200E-02		9690.19522
3	.11950E+05	.12350E+02	.22100E-01		13406.00000
4	.16550E+05	.90100E+01	.37000E-01		17629.00000
5	.19200E+05	.29500E+02	.72000E-02		22222.00000
6	.37400E+05	.44000E+02	.00500E+00		41000.00000
<b>ENTALPIAS DEL LIQUIDO (BTU/LB.MOL)</b>					
1	.33000E+04	.11000E+02	.00000E+00		4400.00000
2	.36200E+04	.40500E+02	-.13200E-01		7530.00000
3	.62000E+04	.25000E+02	.46500E-01		9245.00000
4	.60400E+04	.20500E+02	.25200E-01		10942.00000
5	.79200E+04	.42500E+02	.30200E-01		12572.00000
6	.12000E+05	.73000E+02	.00000E+00		20100.00000

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

CASO NUMERO 1

NO. DE COMPONENTES	6
NO. DE ETAPAS TEORICAS	6
NO. DE ALIMENTACIONES	2
NO. DE SALIDAS LATERALES DE VAPORES	0
NO. DE SALIDAS LATERALES DE LIQUIDO	0
NO. DE ETAPAS CON TRANSFERENCIA DE CALOR	0

LAS TEMPERATURAS ESTIMADAS SON: -DADO 60.00 GRAD. F  
-FOHDO 150.00 GRAD. F

LAS ETAPAS ESTAN NUMERADAS DEL DADO AL FOHDO

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

ESPECIFICACIONES DE LAS ALIMENTACIONES, SALIDAS LATERALES Y TRANSFERENCIAS DE CALOR.

ALIMENTACIONES	ETAPA	FLUJO (LB/MOL/HR)	FASE	TEMP. (GRAD. F)	TRANSFERENCIA DE CALOR (BTU/HR)	FRACCIONES MOL DE LOS COMPONENTES 1 AL 6				
						1	2	3	4	5
	1	533.00000	LIQ	90.00	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000
	6	1978.44395	VAP	60.00	1.05000	.00400	.04000	.02400	.01200	.00000

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

TEMPERATURA Y FLUJO DE CADA ETAPA UTILIZADOS  
PARA INICIAR LAS ITERACIONES

ETAPA	TEMPERATURA (GRAD. F)	FLUJO DE VAPOR (LB/OL/HR)
1	89.00	1978.44995
2	94.00	1978.44995
3	100.00	1978.44995
4	122.00	1978.44995
5	136.00	1978.44995
6	158.00	1978.44995

LOS RESULTADOS INTERMEDIOS SE IMPRIMIRAN CADA 1 ITERACIONES DE LA COLUMNA.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

RESULTADOS INTERMEDIOS DE LA ITERACION 1

ETAPA	TEMP. (GRAD. F)	FLUJO DE VAPOR (LBRDL/HR)	FLUJO DE LIQUIDO (LBRGL/HR)	FRACCIONES MOL DEL LIQUIDO (SUPERIORES) Y DEL VAPOR (INFERIORES) DE LOS COMPONENTES 1 AL 6					SUMA DE FRACCIONES MOL DEL LIQUIDO
1	101.94	1926.41664	603.38948	.02916 1.00010	.01358	.02851	.04128	.02743	
				.02373 .00007 .02751 1.00021	.00150	.04393	.02050	.00397	1.13286
2	103.74	1996.00005	620.31177	.03159 .00010 .02601 1.00031	.00316	.04945	.03162	.01136	1.16381
3	101.56	2013.72241	620.02498	.03114 .00013 .02484 1.00041	.00584	.04980	.03344	.01020	1.16327
4	96.60	2013.43555	610.25647	.03074 .00015 .02394 1.00052	.00476	.04943	.03146	.02114	1.14495
5	88.20	2003.66699	597.29163	.03042 .00018 .02326 1.00074	.00449	.04895	.02907	.01964	1.12062
6	77.19	1990.70215	585.03955	.03010 .00021	.00423	.04846	.02725	.01585	1.09764

DESPUES DE 1 ITERACIONES NO HAN CONVERGIDO LOS CALCULOS.

EL FACTOR DE CONVERGENCIA DE LA COLUMNA ES 0037.67100, EL CUAL ES MAYOR QUE LA TOLERANCIA DE .00000.

TESIS CON  
FALTA DE ORIGEN

RESULTADOS INTERMEDIOS DE LA ITERACION 2

ETAPA	TEMP. (GRAD. F)	FLUJO DE VAPOR (LBOL/HR)	FLUJO DE LIQUIDO (LBOL/HR)	FRACCIONES MOL DEL LIQUIDO (SUPERIORES) Y DEL VAPOR (INFERIORES) DE LOS COMPONENTES 1 AL 6					SUMA DE FRACCIONES MOL DEL LIQUIDO
1	94.01	1089.02759	578.45972	.02789 .00336	.01216	.01010	.01649	.00147	
				.04342 .00010 .02613 .05925	.00199	.04250	.01222	.00037	.95868
2	96.02	1934.40730	584.16150	.02188 .00010 .02612 .05962	.00270	.04647	.01677	.00000	.94172
3	96.54	1940.10096	587.42371	.01490 .00010 .02672 .07334	.00216	.04666	.01037	.00129	.94742
4	96.30	1943.45117	591.02507	.01501 .00009 .02702 .09224	.00219	.04676	.01927	.00192	.96900
5	94.02	1947.03254	600.25201	.01904 .00000 .02963 .01072	.06265	.04700	.02034	.00296	1.00496
6	85.95	1956.20027	622.42249	.02453 .00006	.00330	.04752	.02214	.00516	1.06390

DESPUES DE 2 ITERACIONES NO HAN CONVERGIDO LOS CALCULOS.

EL FACTOR DE CONVERGENCIA DE LA COLUMNA ES 234.35492, EL CUAL ES MAYOR QUE LA TOLERANCIA DE .06000.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

RESULTADOS INTERMEDIOS DE LA ITERACION 3

ETAPA	TEMP. (GRAD. F)	FLUJO DE VAPOR (LBMOL/HR)	FLUJO DE LIQUIDO (LBMOL/HR)	FRACCIONES MOL DEL LIQUIDO (SUPERIORES) Y DEL VAPOR (INFERIORES) DE LOS COMPONENTES 1 AL 6					SUMA DE FRACCIONES MOL DEL LIQUIDO
1	95.35	1889.52519	568.53455	.02834 .92142	.01283	.01891	.02011	.00197	
				.05388 .00089	.00348	.04384	.01343	.00443	1.00359
2	96.94	1937.85981	568.44224	.02781 .91243	.01383	.02883	.02884	.00451	
				.04887 .00089	.00535	.04768	.01912	.00191	1.00664
3	97.51	1944.56738	592.17529	.02767 .98736	.01297	.02899	.03127	.00783	
				.04558 .00089	.00528	.04817	.02151	.00178	1.00889
4	96.98	1948.78644	596.21655	.02765 .98868	.01296	.02181	.03284	.01235	
				.04488 .00089	.00586	.04818	.02284	.00279	1.00742
5	94.14	1952.74178	602.94153	.02786 .08798	.01318	.02122	.03491	.01949	
				.04233 .00089	.00489	.04812	.02388	.00417	1.00448
6	85.46	1959.46655	621.92493	.02888 .05685	.01366	.02195	.04189	.03684	
				.03879 .00887	.00463	.04887	.02388	.00448	.99928

DESPUES DE 3 ITERACIONES NO HAN CONVERGIDO LOS CALCULOS.

EL FACTOR DE CONVERGENCIA DE LA COLUMNA ES 2.79815, EL CUAL ES MAYOR QUE LA TOLERANCIA DE .96888.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

RESULTADOS INTERMEDIOS DE LA ITERACION 4

ETAPA	TEMP. (GRAD. F)	FLUJO DE VAPOR (LBHOL/HR)	FLUJO DE LIQUIDO (LBHOL/HR)	FRACCIONES MOL DEL LIQUIDO (SUPERIORES) Y DEL VAPOR (INFERIORES) DE LOS COMPONENTES 1 AL 6					SUMA DE FRACCIONES MOL DEL LIQUIDO
1	95.32	1889.48622	568.47241	.02027 .91813	.01279	.01805	.01986	.00199	
				.05957 .00089	.00345	.04303	.01339	.00044	.99969
2	96.07	1936.95244	587.07850	.02767 .90641	.01294	.02071	.02745	.00440	
				.04699 .00009	.06524	.04762	.01901	.00102	.99965
3	97.42	1944.31860	591.04106	.02749 .90000	.01287	.02004	.03047	.00760	
				.04361 .00049	.02500	.04807	.02131	.00178	.99944
4	96.90	1940.32104	595.03740	.02750 .09396	.01288	.02009	.03209	.01205	
				.04103 .00009	.00493	.04006	.02224	.00276	.99936
5	94.10	1952.31730	602.66823	.02770 .00393	.01306	.02116	.03447	.01913	
				.04014 .00009	.00460	.04002	.02275	.00410	.99954
6	85.40	1959.14209	621.97009	.02003 .05674	.01367	.02197	.04203	.03604	
				.03744 .00007	.00449	.04000	.02352	.00631	1.00007

DESPUES DE 4 ITERACIONES LOS CALCULOS CONVERGIERON.

EL FACTOR DE CONVERGENCIA DE LA COLUMNA ES .02352, EL CUAL ES MENOR QUE LA TOLERANCIA DE .06000.

A CONTINUACION SE IMPRINTARAN LOS RESULTADOS FINALES DETALLADOS.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

RESULTADOS FINALES  
CORRIENTES DE PRODUCTOS.

CORRIENTE	DE LA ETAPA	FASE	TEMP. (GRAD. F)	FLUJO (LONOL/HR)	FRACCIONES MOL DE LOS COMPONENTES 1 AL 6				
SALIDA DE GAS	1	VAP	95.32	1689.40	.05957 .00089	.00345	.04393	.01339	.00044
SALIDA DE LIQUIDO	6	LIG	85.48	621.97	.02093 .05674	.01267	.02197	.04293	.03684

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

RESULTADOS FINALES  
CONDICIONES INTERNAS

ETAPA	TEMP. (GRAD. F)	FLUJO DE VAPOR (LBHOL/HR)	FLUJO DE LIQUIDO (LBHOL/HR)	FRACCIONES MOL DEL LIQUIDO DE LOS COMPONENTES 1 AL 6				FRACCIONES MOL DEL VAPOR DE LOS COMPONENTES 1 AL 6					
1	95.32		588.47	.82827	.01279	.01885	.01986	.0199					
2	96.87	1936.95		.91813					.04695	.08524	.04762	.01981	.00182
2	96.87		587.84	.02767	.01294	.02071	.02745	.00448	.00889				
3	97.42	1944.32		.90641					.04361	.08598	.04897	.02131	.00178
3	97.42		591.84	.02749	.01287	.02084	.03047	.00768	.00889				
4	96.98	1948.32		.91808					.04183	.08483	.04886	.02224	.00276
4	96.98		595.84	.02758	.01288	.02089	.03209	.01285	.00889				
5	94.10	1952.32		.89396					.04814	.08468	.04882	.02275	.00418
5	94.10		602.66	.02778	.01306	.02116	.03447	.01913	.00889				
6	85.48	1959.14		.88293					.03744	.08449	.04888	.02352	.00631
									.00887				

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

## A P E N D I C E I - 3

LISTADO DEL STAR Y DE SUS  
VARIABLES PRINCIPALES

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

ESTA TESIS NO SALE  
DE LA BIBLIOTECA

```

00001000 SCNTROL MULTITII
00002000 SCNTROL FIFIFOSFIFIF=00
00003000 C-----PROGRAMA PRINCIPAL 'ATS'ACION/DESCOPION MULTICOMPONENTES'
00004000 C-----AUTORRES T. KIHUOHANA P.J. JOHANSEN Y J.D. BEADER
00005000 C-----AUTORRES DE UJAM. TITIMA REVISIONS JUNIO, 1972
00006000 C-----ADAPTADO POR LUIS HUMBERTO SORLI SAMPERIO
00007000 C-----UNIVERSIDAD LA SALLE 1942
00008000 REAL ACOST,L
00009000 INTEGER PHASE
00010000 EXTERNAL EQUOLY
00011000 DIMENSION IS(50),ITS(40),XFEED(20),JP(20),PH(2),AK(20),IV(20),
00012000 ML(20)
00013000 COMMON/BLCK1/JJS,T(50),F(50),W(50),U(50),V(50),XF(20,50)
00014000 COMMON/A1/TF(50),M(50),O(50)
00015000 COMMON/A2/WHCSTES(20),MLCSTES(20);IC,L(50)
00016000 COMMON/A3/ID,IB,KCCHT(4,20)
00017000 COMMON/A4/A(20,50)
00018000 COMMON/A5/Z(20,50),Y(20,40),ADD(50),Y(20,50)
00019000 C-----ESTACIONES DE MPOSITIVOS DE ENTRADA/SALIDA.LIMITE DE ITERACION-
00020000 C-----RES Y TOLERANCIA.
00021000 DATA LUEN,LUNU,NUB,IAL(5,6,15,01)
00022000 DATA PH(1),PH(2),JMVAP,3MLIG/
00023000 READ (LUIN,250) IC,TLF4,THS,P,NCI
00024000 IF (NCI .EQ. 0) MCTA15
00025000 WRITE (LHOUT,251) MIB,NCI,TLF
00026000 II = (THS+LUNU)*JP
00027000 WRITE (LHOUT,255) P,THS,TH,TT
00028000 IF (IC .GT. 1 .AND. II .LE. 20) GO TO 5
00029000 WRITE (LHOUT,410)
00030000 GO TO 150
00031000 C-----LECTURA E IMPRESION DE DATOS DE PROPIEDADES FISICAS
00032000 5 READ (LUIN,253) (MCHST(I,J),I=1,4),JKA(1,IC)
00033000 READ (LUIN,261) (MCHST(I,J),I=1,3),JKA(1,IC)
00034000 READ (LUIN,261) (MCHST(I,J),I=1,3),JKA(1,IC)
00035000 DO 10 JK=1,3
00036000 MLCJ = MCHST(I,JK)
00037000 MVCJ = MCHST(1,JK) + MCHST(2,JK)*TT + MCHST(3,JK)*TT*TT
00038000 MLCJ = MLCST(1,JK) + MLCST(2,JK)*TT + MLCST(3,JK)*TT*TT
00039000 10 CONTINUE
00040000 WRITE (LHOUT,240) (X,XPONST(I,J),I=1,4),AK(JK),JKA(1,IC)
00041000 WRITE (LHOUT,245) (X,(MCHST(I,J),I=1,3),MVCJ),JKA(1,IC)
00042000 WRITE (LHOUT,250) (X,(MCHST(I,J),I=1,3),MLCJ),JKA(1,IC)
00043000 C-----LECTURA E IMPRESION DE LOS DATOS DEL CASO
00044000 15 READ (LUIN,255) NC, JF, NDF, NDVS, NDLS, NDOS, KP
00045000 IF (KP .EQ. 0) KP=10
00046000 IF (IS .GT. 2 .AND. II .LE. 50) GO TO 20
00047000 WRITE (LHOUT,420)
00048000 GO TO 190
00049000 C-----INICIAR LA LOS ARREGLOS A CLEROS ANTES DE COMENZAR EL CASO
00050000 20 CALL CLEAR
00051000 TOL = TAL*JS
00052000 READ (LUIN,240) TD,TD
00053000 WRITE (LHOUT,245) IC,TF,JS,NDF,NDVS,NDLS,NDOS,TD,TD
00054000 WRITE (LHOUT,270) IC
00055000 SUMPR = 0.0
00056000 DO 35 I1 = 1, NDF
00057000 READ (LUIN,275) JF,PHASE,TFMP,XFLON

```

**TESTES CON  
FALLA DE ORIGEN**

```

00050000 READ (LUHT,240) (XFCEP(1-2), L2 = 1, IC)
00054000 WPHASE = PH(1)
00060000 IF (PHASE .EQ. 2) WPHASE = PH(2)
00061000 WRITE (LUOUT,245) JF, XFLOM, WPHASE, TEPH, (XFCEP(L2), L2=1,IC)
00062000 SUMPH = 0.0
00063000 DO 24 M = 1, IC
00064000 SUMPH = SUMPH + XFCEP(M)
00065000 25 CONTINUE
00066000 IF (SUMPH .LT. 0.999 .AND. SUMPH .GT. 1.001) WRITE (LUOUT,425) JF
00067000 IF (SUMPH .LT. 0.999 .AND. SUMPH .GT. 1.001) WRITE (LUOUT,430)
00068000 TF(JF) = TEPH
00069000 F(JF) = XFLOM
00070000 JF(JF) = WPHASE
00071000 SUMPH = SUMPH + F(JF)
00072000 DO 30 I2 = 1, IC
00073000 WF(L2,JF) = XFCEP(L2)
00074000 30 CONTINUE
00075000 C-----CALCULO DE ENTALPIA DE LA ALIMENTACION
00076000 HF(JF) = FENH (PHASE, JF)
00077000 35 CONTINUE
00078000 KKK = 0
00079000 IF (MOS .EQ. 0) GO TO 45
00080000 WPHASE = PH(1)
00081000 WRITE (LUOUT,240)
00082000 KKK=1
00083000 DO 40 I3 = 1, MOS
00084000 READ (LUHT,290) J3V, VPATE
00085000 WRITE (LUOUT,295) J3V, VPATE, WPHASE
00086000 IF (J3V .LT. 2 .OR. J3V .GT. (J3-1)) GO TO 190
00087000 W(J3V) = VPATE
00088000 40 CONTINUE
00089000 45 IF (MOS .EQ. 0) GO TO 55
00090000 WPHASE = PH(1)
00091000 IF (KKK .EQ. 0) WRITE (LUOUT,240)
00092000 DO 50 I4 = 1, MOS
00093000 READ (LUHT,290) J3L, PATE
00094000 WRITE (LUOUT,295) J3L, PATE, WPHASE
00095000 IF (J3L .LT. 2 .OR. J3L .GT. (J3-1)) GO TO 190
00096000 H(J3L) = PATE
00097000 50 CONTINUE
00098000 55 IF (MOS .EQ. 0) GO TO 65
00099000 WRITE (LUOUT, 100)
00100000 DO 60 I5 = 1, MOS
00101000 READ (LUHT,305) JO, OPATE
00102000 WRITE (LUOUT,310) JO, OPATE
00103000 IF (JO .LT. 2 .OR. JO .GT. (J3-1)) GO TO 190
00104000 H(JO) = OPATE
00105000 60 CONTINUE
00106000 C-----CALCULO DE PERFILES INICIALES DE TEMPERATURA Y FLUJO DE VAPOR
00107000 65 CALL ASUMT(JP)
00108000 WRITE (LUOUT,315)
00109000 WRITE (LUOUT,320) (J, TEPH, W(J), I = 1, J3)
00110000 WRITE (LUOUT,325) W
00111000 C-----CALCULO DEL PERFIL INICIAL DE FLUJO DE LIQUIDO
00112000 JLI = J3 - 1
00113000 SUM = 0.0
00114000 DO 70 Y = 1, JLI

```

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

```

00115000      SUM = SUM + F(J) - W(J) = H(I)
00116000      L(I) = V(I)+1) SUM = V(I)
00117000      T(I) = T(I)
00118000      TIS(I) = T(I)
00119000      70 CONTINUE
00120000      L(JS) = SUM + F(JS) + W(JS) - U(JS) = V(I)
00121000      T(J) = T(J)
00122000      TIS(JS) = T(JS)
00123000      K2 = 0
00124000      K1 = 0
00125000      75 K1 = K1 + 1
00126000      K2 = K2 + 1
00127000      C-----CALCULO DE LOS COEFICIENTES DE LA MATRIZ PARA LAS FRACCIONES
00128000      C-----MOL DEL LIQUIDO.
00129000      DO 80 I = 1, IC
00130000      CALL SETHPA (I, EQUILK)
00131000      C-----RESUELVE LA MATRIZ PARA LAS FRACCIONES MOL DEL LIQUIDO.
00132000      CALL TPO(I)
00133000      80 CONTINUE
00134000      C-----CALCULO DE FRACCIONES MOL DEL VAPOR, Y PERFILES DE FLUJO
00135000      C-----DE LIQUIDO Y VAPOR.
00136000      CALL VAPOR(EQUILK)
00137000      DO 100 I = 1, NOUT
00138000      C-----CALCULO DE LOS COEFICIENTES DE LA MATRIZ PARA LOS CAMBIOS
00139000      C-----DE TEMPERATURA.
00140000      CALL SETHPB
00141000      C-----CALCULO DE LAS NUEVAS TEMPERATURAS DE PLATO
00142000      CALL DELTAT
00143000      IF (I .EQ. 1) GO TO 90
00144000      DO 85 J = 1, JS
00145000      IF (ABS(T(J)-TIS(J)) .GT. .1) GO TO 90
00146000      85 CONTINUE
00147000      GO TO 105
00148000      90 DO 85 J = 1, JS
00149000      TIS(J) = T(J)
00150000      95 CONTINUE
00151000      100 CONTINUE
00152000      105 IF (I(2)-1) .LT. TLOW .OP. V(I)-1) .GT. THIG) GO TO 195
00153000      DO 110 J = 1, JS
00154000      IF (V(J) .LT. 0.0) GO TO 200
00155000      IF (I(3) .LT. 0.0) GO TO 210
00156000      110 CONTINUE
00157000      IF (K2 .NE. NP .AND. V1 .NE. NC11) GO TO 130
00158000      WRITE (LIOUT,350)
00159000      WRITE (LIOUT,350) K1, IC
00160000      K2 = 0
00161000      C-----CALCULO DE LA SUMA DE FRACCIONES MOL DEL LIQUIDO
00162000      DO 125 I = 1, JS
00163000      115 ADD W 0.0, 0
00164000      DO 120 K = 1, IC
00165000      ADD = ADD + V(K,I)
00166000      120 CONTINUE
00167000      WRITE (LIOUT,350) I, T(I), V(I), L(I), F(I,K,1), K = 1, IC)
00168000      WRITE (LIOUT,360) ADD
00169000      WRITE (LIOUT,360) (T(I), I), K=1, IC)
00170000      125 CONTINUE
00171000      C-----PRUEBA DE LA CONVERGENCIA

```

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

```

0017000 130 STO = 0, B
0017000 DD 145 J = 1, JS
0017000 DIFF = T(1) - T(2)
0017000 T(1) = T(2)
0017000 STD = STD + DIFF * DIFF
0017000 135 CONTINUE
0017000 IF (410 - CT - TOL * AND, P1, LT, NC1) WRITE (LCOU7,355) K1,STD,TOL
0017000 IF (410 - CT - TOL * AND, P1, LT, NC1) GO TO 15
0018000 IF (410 - LC - TOL) GO TO 140
00181000 IF (K1, EU, NC1) WRITE (LCOU7,365) AC1
00182000 GO TO 145
00183000 140 WRITE (LCOU7,340) K1, STD, TOL
00184000 145 WRITE (LCOU7,370) T(1), T(2), T(1), T(2), (X(K,1)), (X(K,2)), K = 1, IC)
00185000 WRITE (LCOU7,375) P1(2), P1(2), T(1), T(2), (X(K,1)), K = 1, IC)
00186000 JS5 = JS - 1
00187000 IF (NDVS, EQ, 0) GO TO 155
00188000 DU 140 I = 2, JS5
00189000 IF (M(1), LT, .00001) GO TO 150
00190000 WRITE (LCOU7,380) T, P1(2), T(1), T(2), (X(K,1)), K = 1, IC)
00191000 150 CONTINUE
00192000 155 IF (MDS, EQ, 0) GO TO 165
00193000 DU 140 I = 2, JS5
00194000 IF (M(1), LT, .00001) GO TO 160
00195000 WRITE (LCOU7,340) T, P1(2), T(1), T(2), (X(K,1)), K = 1, IC)
00196000 160 CONTINUE
00197000 165 WRITE (LCOU7,385) JS, P1(2), T(1), T(2), L(J), (X(K,1)), K = 1, IC)
00198000 170 WRITE (LCOU7,350)
00199000 175 WRITE (LCOU7,395) IC, IC
00200000 DD 145 I = 1, JS
00201000 IF (I, EQ, 1) GO TO 180
00202000 WRITE (LCOU7,400) T, T(1), T(2), (X(K,1)), K = 1, IC)
00203000 IF (I, EQ, JS) GO TO 165
00204000 180 WRITE (LCOU7,405) T, T(1), T(2), L(I), (X(K,1)), K = 1, IC)
00205000 185 CONTINUE
00206000 GO TO 15
00207000 190 WRITE (LCOU7,415)
00208000 STOP
00209000 195 WRITE (LCOU7,435) T(1), T(2), K1
00210000 WRITE (LCOU7,440)
00211000 STOP
00212000 200 WRITE (LCOU7,445) V(1), V(2), K1
00213000 WRITE (LCOU7,450)
00214000 205 WRITE (LCOU7,440)
00215000 GO TO 15
00216000 210 WRITE (LCOU7,455) L(J), J, K1
00217000 WRITE (LCOU7,450)
00218000 GO TO 205
00219000 215 FORMAT (1H17/61X,10H) B A 89/45X,42HARMONICACION Y DESORCION DE HU
00220000 111CHROMONES,42119,47HNUMERO MAXIMO DE ITERACIONES PARA EL CALC
00221000 210 DE LAS TEMPERATURAS = 13,4/31X,40HNUMERO MAXIMO DE ITERACIONES
00222000 3 PARA LA RESOLUCION DE LA COLUMNA = 16,4/31X,39HCONSTANTE PARA EL
00223000 A CRITERIO DE CONVERGENCIA DE LAS ITERACIONES DE LA COLUMNA = 17,
00224000 55/1H)
00225000 220 FORMAT (10, 3F10,2, 110)
00226000 225 FORMAT (4E15,5)
00227000 230 FORMAT (1E15,5)
00228000 235 FORMAT (/31X,30HCOEFICIENTES DE LAS ECUACIONES POLINOMIALES DE LA

```

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN





PAGE 0007

00343000 'SIAPA. IN. IAW OF LA 11<sup>TA</sup> RACION. 13.2TH DE LA COLUMA ES NEGATIVO.'  
00344000 460 FORMAT (102, 56) DEBERA REVISAR LAS ESPECIFICACIONES Y REPFTR LA CO  
00345000 (ORTO4/3)  
00346000 END

PROGRAM UNIT MAIN' COMPILED

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

```

00347000 SUBROUTINE ASUMVT(JP)
00348000 DIMENSION JP(20)
00349000 REAL KCONST
00350000 COMMON/DLUCK1/J3,F(50),F(50),W(50),U(50),V(50),R(20,50)
00351000 J3 = J3-1
00352000 JK = J3-1
00353000 V(J3)=F(J3)-W(J3)
00354000 DO IN I = 1, JK
00355000 K = IS-1
00356000 IF (V(K),EQ,2) GO TO 5
00357000 V(K) = V(K+1) + F(K) - W(K)
00358000 GO TO 10
00359000 5 V(K) = V(K+1) - W(K)
00360000 10 CONTINUE
00361000 T(1) = (I3+I0)/JK
00362000 T(1) = I0
00363000 DO IN I = 2, J3
00364000 T(I) = T(I-1) + TINV
00365000 15 CONTINUE
00366000 RETURN
00367000 END
    
```

PROGRAM UNIT ASUMVT COMPILED

FESIS CON  
 FALTA DE ORIGEN

```

00368000 SURROUTINE CLEAN
00369000 COMMMIBLOCK1/JS,I(50),F(50),U(50),V(50),XF(20,50)
00370000 COMMMIBALL1/F(50),MF(10),D(50)
00371000 DO 5 I = 1, 50
00372000 F(I) = 0.0
00373000 XF(I) = 0.0
00374000 MF(I) = 0.0
00375000 U(I) = 0.0
00376000 V(I) = 0.0
00377000 O(I) = 0.0
00378000 5 CONTINUE
00379000 DO 15 J = 1, 50
00380000 O( J ) = 1.20
00381000 XF( I, J ) = 0.0
00382000 10 CONTINUE
00383000 15 CONTINUE
00384000 RETURN
00385000 END
    
```

PROGRAM UNIT CLEAN COMPILED

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

```

00366000 SURRUTIC DELTAT
00367000 DIMENSION F(50),QA(50)
00368000 DIMENSION DELT(50)
00369000 COMMON/BLCK1/J5,T(50),F(50),M(50),U(50),V(50),XF(20,50)
00370000 COMMON/BLK2/AA(50,51)
00371000 NI = J5 + 1
00372000 P(I) = AA(I,7)/AA(I,1)
00373000 GA(I) = AA(I,MI)/AA(I,I)
00374000 NMIN = J5 - 1
00375000 DO 5 J1 = 2, J5
00376000 P(J1) = AA(J1,J1+1)/AA(J1,J1) - AA(J1,J1-1)*P(J1-1)
00377000 GA(J1) = (AA(J1,MI) - AA(J1,J1-1)*GA(J1-1))/AA(J1,J1) - AA(J1,J1-1)
00378000 I = P(J1-1)
00379000 5 CONTINUE
00400000 DELT(J5) = GA(J5)
00401000 DO 10 J1 = 1, NMIN
00402000 JSUB = NI*M + J1+1
00403000 DELT(JSUB) = GA(JSUB)*P(JSUB) + DELT(JSUB+1)
00404000 10 CONTINUE
00405000 DO 15 J2 = 1, J5
00406000 T(J2) = DELT(J2)*T(J2)
00407000 15 CONTINUE
00408000 RETURN
00409000 END

```

PROGRAM UNIT DELTAT COMPILED

TESIS CON  
PALA DE ORIGEN

```
00410600      FUNCION EQUIL*(TT,II)
00411600      REAL *CONST
00412000      COMMON/AA3/TO,TB,KCONSF(4,20)
00413000      EQUIL=KCONST(1,1)*KCONSF(1,20)
00414000      I=KCONST(6,II)+TTATFATT
00415000      RETURN
00416000      END
```

PROGRAM UNIT EQUIL\* COMPILED

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

```

00417000      FUJCTJRU FEEDH(A,PHASE,JF1)
00417600      REAL L
00417600      COMMON/3/GK1(75,150),F(50),U(50),V(50),AF(20,50)
00420000      COMMON/AA1/FF(*0),HF(*0),Q(50)
00421000      COMMON/AA2/HVCHS1(3,3),MLCHS1(3,20),IC1(50)
00422000      IF (NPHASE.EQ.1) GO TO 10
00423000      FEEDH=0
00424000      DO 5 II = 1, IC
00425000      FEEDH=FEEDH+FF(II,JF1)+(HVNST(1,II)+MLCHS1(2,II)+TF(JF1)
00426000      +MLCHS1(1,II)+TF(JF1)+TF(JF1))
00427000      5 CONTINUE
00428000      HETURN
00429000      10 FEEDH=0
00430000      DO 14 II = 1, IC
00431000      FEEDH=FEEDH+HF(II,JF1)+(HVNST(1,II)+HVCHS1(2,II)+TF(JF1)
00432000      +HVCHS1(1,II)+TF(JF1)+TF(JF1))
00433000      14 CONTINUE
00434000      RETURN
00435000      END
    
```

PROGRAM UNIT FEEDH COMPILED

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

```

00436000      FUNCT(M, HORV(K, TT, JJ))
00437000      MEAL L
00438000      COMINI/AA2/HVCHST(3;2^);HLCHST(3;20);IC,L(50)
00439000      COMINI/AA5/Z(20,50);ZY(20,40);ADDR(50);F(20,50)
00440000      HORV(0)
00441000      IF (* EQ, 1) GO TO 10
00442000      DO 5 I = 1, IC
00443000      HORV(HRV+ZY(I, JJ)+HVCHST(2, I)*2, HVCHST(1, I)+TT)
00444000      5 CONTINUE
00445000      RE TURN
00446000      10 CONTINUE
00447000      DO 15 I = 1, IC
00448000      HORV(HRV+Z(I, JJ)+HLCHST(3; I)*2, HVCHST(3; I)+TT)
00449000      15 CONTINUE
00450000      PCTUHF
00451000      END

```

PROGRAM UNIT HORV COMPILED

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

```

00452000      FUNCTION HVLEN(I,J)
00453000      REAL L
00454000      COMMON/AA2/HVCNST(3,2),MLFNST(3,20),IC,L(50)
00455000      COMMON/AA5/Z(20,50),TY(20,40),AGDA(50),Y(20,50)
00456000      MVL = 0.0
00457000      IF (M .EQ. 1) GO TO 10
00458000      DO 5 I = 1, IC
00459000      MVL = MVL + TY(I,J) * (MVCFS(I,1) + HVCNST(2,1) * TY + HVCNST(3,1) * TT + TT)
00460000      5 CONTINUE
00461000      RETURN
00462000      10 CONTINUE
00463000      DO 15 I = 1, IC
00464000      MVL = MVL + TY(I,J) * (MLFNST(I,1) + HVCNST(2,1) * TY + HVCNST(3,1) * TT + TT)
00465000      15 CONTINUE
00466000      RETURN
00467000      END

```

PROGRAM UNIT HVL COMPILED

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

```

00460000 SURRUTINE SFTUPL (I,FD*ILK)
00460006 REAL L
00470000 COMMON/BLOCK1/JS,T(50),F(50),W(50),U(50),V(50),X(20,50)
00471000 COMMON/AA2/MVNST(3,20),M,FNST(3,20),IC,L(50)
00472000 COMMON/BA1/X(50,51)
00473000 M=J4+1
00474000 DO 16 J1=1,50
00475000 DO 5 J2,51
00476000 A(J1,J2)=0
00477000 5 CONTINUE
00478000 10 CONTINUE
00479000 C.....ELEMENTOS DEL PRIMER PENGLIN
00480000 T1=T(1)
00481000 A(1,1)=V(2)-F(1)+V(1)+W(1)-(V(1)+W(1))+FOULK(T1,1)
00482000 T2=T(2)
00483000 A(1,2)=V(2)+FOULK(T2,1)
00484000 A(1,M13)=F(1)+V(F1,1)
00485000 C.....ELEMENTOS DEL MULTIMO PENGLIN
00486000 A(J5,J3)=U(FJ5)+V(FJ5)+L(J4)+U(J5)-F(J5)
00487000 T1=T(J5)
00488000 A(J5,J4)=L(J5)+U(J5)*(F(J4)+V(FJ5))+FOULK(T1,J)
00489000 A(J5,M13)=F(J5)+V(F1,J5)
00490000 C.....ELEMENTOS DE LOS NEGLIGNES INTERMEDIOS
00491000 JM=M*J5+1
00492000 NSTEP=0
00493000 SUM=0
00494000 DO 14 J1=2,JMNS
00495000 SUM=SUM+F(J1-1)+W(J1-1)-U(J1-1)
00496000 SUM=SUM+F(J1)-W(J1)-F(J1)
00497000 A(J1,NSTEP+1)=V(J1)+SUM*V(1)
00498000 T1=T(J1)
00499000 A(J1,NSTEP+2)=V(J1)*W(J1)+FOULK(T1,J1)-U(J1)+V(J1+1)+SUM*V(1)
00500000 T2=T(J1+1)
00501000 A(J1,NSTEP+3)=V(J1+1)+FOULK(T2,J1)
00502000 A(J1,M13)=F(J1)+V(F1,J1)
00503000 NSTEP=NSTEP+1
00504000 15 CONTINUE
00505000 GOTO 11
00506000 END
    
```

PROGRAM UNIT SETUPL COMPILED

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

```

00507000  SUBROUTINE SETHPR
00508000  REAL L
00509000  COMMON/IBJLGC/ JJS, TFS01, FFS01, HES01, UFS01, VFS01, XFE20, S0
00510000  COMMON/IAJ1/ J1, F01, MF01, GFS01
00511000  COMMON/IAJ2/ J2, F02, MF02, GFS02, J1, J2, J3, MF03, TFS, TFS, L (50)
00512000  COMMON/IOBAZ/AA(50,51)
00513000  M1 = J5 + 1
00514000  D0 16 J1 = 1, 50
00515000  M0 8 J1 = 1, 51
00516000  AA(L, J1) = 0.0
00517000  5 CONTINUE
00518000  10 CONTINUE
00519000  C-----ELEMENTOS DEL PRIMER *ENGLIN EXCEPTO ULTIMA COLUMNA
00520000  T1 = T(1)
00521000  L1 = 1
00522000  L2 = 2
00523000  AA(L1, L2) = -(L1)*U(L1)*HNRV(L1, T1, L1) - (L1)*V(L1)*HORV(L2, T1, L1)
00524000  T2 = T(2)
00525000  AA(L1, L2) = V(L2)*HORV(L2, T2, L2)
00526000  C-----ELEMENTOS DEL ULTIMO *ENGLIN EXCEPTO ULTIMA COLUMNA
00527000  TJM1 = T(J5-1)
00528000  JAS = J5 - 1
00529000  AA(LJ5, J5-1) = L(J5-1)*MPS(L1, TJM1, JAS)
00530000  TJS = T(J5)
00531000  AA(LJ5, J5) = (L(J5)*D(J5))*HORV(C1, TJS, J5) - (M(J5)*V(J5))*HORV(L2, J5
00532000  , J5)
00533000  C-----PRIMER Y ULTIMO ENGLIN DE LA ULTIMA COLUMNA
00534000  AA(L1, M1) = -V(L2)*HVL(L2, T2, L2) + (L1)*M(L1)*L(L1)*HVL(L1, T1, L1)
00535000  1/(M(L1)*V(L1)*HVL(L2, T1, L1) - D(L1))
00536000  AA(LJ5, M1) = L(J5-1)*M(L1, TJM1, JAS) - F(J5)*M(LJ5) + (L(J5)*U(J5))*HVL
00537000  1(L1, TJS, J5) - (M(LJ5)*V(J5))*HVL(L2, TJS, J5) + D(J5)
00538000  C-----ELEMENTOS INTERFOTCS
00539000  NSTEP = 0
00540000  M0 16 J1 = 2, JAS
00541000  T11 = T(L1+1)
00542000  T12 = T(L1)
00543000  T13 = T(L1+1)
00544000  J21 = J1 - 1
00545000  J22 = J1 + 1
00546000  AA(L21, NSTEP+1) = L(LJ21)*HORV(L1, T11, J21)
00547000  AA(L21, NSTEP+2) = -(L(LJ21)*H(L21))*HORV(L1, T12, J1) - (V(LJ1)*U(LJ1))*HORV(L
00548000  1, T13, J1)
00549000  AA(L21, NSTEP+3) = V(LJ21)*HORV(L2, T13, J22)
00550000  AA(L21, M1) = L(LJ21)*HVL(L1, T11, J21) - V(LJ1)*HVL(L2, T13, J22) - F(J1)*M(L
00551000  1(L21)*L(L1)*H(L21))*HVL(L1, T12, J21) + (V(LJ1)*U(LJ1))*HVL(L2, T13, J1) - D(J
00552000  21)
00553000  NSTEP = NSTEP + 1
00554000  15 CONTINUE
00555000  RETURN
00556000  END

```

PROGRAM UNIT SETUP PDMFILE

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

```

00557000      NUMRUTIME 10101(1)
00558000      DIMENSION P(6), Q(6,50)
00559000      COMMON/BLUEN/JS, T(50), F(50), M(50), U(50), V(50), X(20,50)
00560000      COMMON/6417A/120,501
00561000      COMMON/AA47X/120,501
00562000      M17J=1
00563000      P(1)=A(1,2)7A(1,1)
00564000      Q(1,1)=A(1,M1)/2(1,1)
00565000      M17H=JS-1
00566000      DO 5 J1 = 2, JS
00567000      P(J1)=A(1,J1+1)/(A(J1,J1)-A(21,J1+1)*P(J1-1))
00568000      Q(J1)=A(21,M1)-A(21,J1-1)+Q(21-1)/(A(21,J1)-A(21,J1-1)*
00569000      P(J1-1))
00570000      5 CONTINUE
00571000      V(1,1)=NA(25)
00572000      DO 1A J1 = 1, NMIN
00573000      JSUB=JMIN-J1+1
00574000      V(1,JSUB)=Q(1,JSUB)+P(JSUB)*X(1,JSUB+1)
00575000      10 CONTINUE
00576000      RETURN
00577000      END
    
```

PROGRAM UNIT TRIDI COMPILED

TESIS CONT  
FALTA DE ORIGEN

```

00570000 SURROUTME VAPOR(LOUJK1)
00574000 PLAL L
00580000 COMING=MLCKI/J5,VES0),F50),W50),U50),V50),X(20,50)
00581000 COMMM;AA2/ML65F(3,25),MLPUS(1,20),IC,L(50)
0 3200 COMMM;AA4/V(20,50)
00583000 COMMM;AA5/Z(20,50),ZY(20,50),AGDX(50),FF(20,50)
00584000 00 15 JA = 1, 15
00585000 ADDR(JA)=L.L
00586000 ADDR=0,0
00587000 I(J,I)I
00588000 DO 5 I = 1, IC
00589000 Y(I, I)=Y(I, JA)+EQUILY(I, J, I)
00590000 ADDR(JA)=ADDR(JA)+X(I, JA)
00591000 ADDR=ADDR+Y(I, JA)
00592000 5 CONTINUE
00593000 L(JA)=L(IA)+ADDR(JA)
00594000 00 10 JB = 1, IC
00595000 Z(I0, JA)=X(IJ, IA)+ADDR(JA)
00596000 ZY(IJ, JA)=Y(IJ, JA)+ADY
00597000 10 CONTINUE
00598000 15 CONTINUE
00599000 W(J5)=L(I5)-L(J5)+F(J5)-H(J5)+W(J5)
00600000 JK=JK+7
00601000 00 20 I = 1, JK
00602000 K(I)=I
00603000 W(I)=W(K)+L(I)-(K-1)-L(I)+F(K)-H(K)+W(K)
00604000 20 CONTINUE
00605000 V(I)=V(I2)-L(I)+I(1)-W(I)-U(I)
00606000 WETURN
00607000 END

```

PROGRAM UNIT VAPOR COMPILED

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

## LISTADO DE VARIABLES PRINCIPALES DEL STAB.

## COMMON/BLOCK1/

Símbolo	Tipo	Descripción y notación usual
F	real	Flujo de alimentación, F
JS	entera	Número total de etapas teóricas, N
T	real	Temperatura de equilibrio de la etapa, T
U	real	Flujo de salida lateral de líquido, U
V	real	Flujo de vapor entre etapas, V
W	real	Flujo de la salida lateral de vapor, W
XF	real	Fraciones mol de la alimentación, XF

## COMMON/AA1/

Símbolo	Tipo	Descripción y notación usual
HF	real	Entalpía molar de la alimentación, HF
Q	real	Transferencia de calor hacia o desde la etapa, Q
TF	real	Temperatura de la alimentación, TF

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

## COMMON/AA2/

Símbolo	Tipo	Descripción y notación usual
HLCNST	real	Coefficientes de la función polinomial para el cálculo de las entalpías molares del líquido (*)
HVCNST	real	Idem del vapor (*)
IC	entera	Número total de componentes, NC
L	real	Flujo de líquido entre etapas, L

(\*) Las variables FORTRAN de estos coeficientes se relacionan con los símbolos usuales de la siguiente forma:

$$\begin{array}{ll}
 \text{HLCNST}(1,JK) = a_i & \text{HVCNST}(1,JK) = A_i \\
 \text{HLCNST}(2,JK) = b_i & \text{HVCNST}(2,JK) = B_i \\
 \text{HLCNST}(3,JK) = c_i & \text{HVCNST}(3,JK) = C_i
 \end{array}$$

## COMMON/AA3/

Símbolo	Tipo	Descripción y notación usual
KCONST	real	Coefficientes de las funciones polinomiales para el cálculo de las constantes de equilibrio (**)
TD	real	Estimado inicial de la temperatura del domo
TB	real	Estimado inicial de la temperatura del fondo

(\*\*) Las variables FORTRAN de estos coeficientes se relacionan con los símbolos usuales de la siguiente forma:

$$\begin{array}{ll}
 \text{KCONST}(1,JK) = \alpha_i & \text{KCONST}(3,JK) = \gamma_i \\
 \text{KCONST}(2,JK) = \beta_i & \text{KCONST}(4,JK) = \delta_i
 \end{array}$$

## COMMON/AA4/

Símbolo	Tipo	Descripción y notación usual
X	real	Fraciones mol del líquido, X

**TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN**

## COMMON/AA5/

Símbolo	Tipo	Descripción y notación usual
Z	real	Fraciones mol normalizadas del líquido
ZY	real	Fraciones mol normalizadas del vapor
ADDX	real	Sumatoria de fracciones mol del líquido
Y	real	Fraciones mol del vapor, y

## COMMON/BA1/

SÍMBOLO	Tipo	Descripción
A	real	Coefficientes de la matriz tridiagonal de las ecuaciones del balance de materia por componente

## COMMON/BA2/

Símbolo	Tipo	Descripción
AA	real	Coefficientes de la matriz tridiagonal de las ecuaciones del balance de calor

## Programa maestro

Símbolo	Tipo	Descripción y notación usual
JF	entera	Número de la etapa que recibe la alimentación
JP	entera	Estado de la alimentación (1=vapor, 2=líquido)
JQ	entera	Número de la etapa que recibe la transferencia de calor
JSL	entera	Número de la etapa con salida lateral del líquido

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

Símbolo	Tipo	Descripción y notación usual
JSV	entera	Número de la etapa con salida lateral del vapor
KI	entera	Número de iteración en la columna
KP	entera	Frecuencia de impresión para los resultados de la iteración de la columna
LUIIN	entera	Número de unidad lógica del dispositivo de entrada; prefijado en 5 en una declaración DATA
LUOUT	entera	Número de unidad lógica del dispositivo de salida; prefijado en 6 en una declaración DATA
NC	entera	Número de caso
NCI	entera	Número máximo de iteraciones en la columna; 15 si no se especifica
NHBI	entera	Número máximo de iteraciones del balance de calor; prefijado en 15 en una declaración DATA
NOF	entera	Número de alimentaciones
NOLS	entera	Número de salidas laterales del líquido
NOOS	entera	Número de etapas con calentamiento o enfriamiento
NOVS	entera	Número de salidas laterales de vapor
PHASE	entera	Estado de la alimentación (1=vapor, 2=líquido)
GRATE	real	Flujo de transferencia de calor a una etapa [(-) si es enfriamiento, (+) si es calentamiento], Q

Símbolo	Tipo	Descripción y notación usual
RATE	real	Flujo de salida lateral del líquido, U
STD	real	Sumatoria del cuadrado de las diferencias entre perfiles sucesivos de temperaturas
SUM	real	Flujo neto hacia una sección superior de la torre
SUMFD	real	Sumatoria de los flujos de alimentación
TEMP	real	Temperatura de alimentación
TAL	real	Constante del criterio de convergencia de las iteraciones de la columna, prefijado en 0.01 en una declaración DATA
TOL	real	Criterio de convergencia de las iteraciones de la columna
TS	real	Temperaturas por etapa para iniciar una iteración en la columna
VRATE	real	Flujo de la salida lateral de vapor, W
XFEED	real	Fraciones mol de la alimentación, XF
XFLOW	real	Flujo de alimentación, F

## CAPITULO II

### MODIFICACIONES PROPUESTAS

#### 2.1.- Elección de las modificaciones.

Como ya se mencionó en el capítulo anterior, el STAB no pretende ser un ejemplo de eficiencia en el uso de memoria y tiempos de ejecución, sino simplemente un punto de partida para que los estudiantes desarrollen posteriores mejoras o sus propios programas. Entre los principales puntos susceptibles de mejora se pueden mencionar los siguientes:

- 1.- El uso de capacidad de memoria es muy ineficiente.
- 2.- La convergencia del bucle V se realiza por el método de sustitución directa que puede ser muy lento y además no siempre es convergente.

3.- La convergencia del bucle T se realiza por el método de Newton-Raphson el cual presenta las siguientes desventajas:

- Si la aproximación inicial no es suficientemente cercana a la solución el método no converge.
- Cada iteración requiere el cálculo de  $3N$  derivadas parciales y  $N$  evaluaciones de las funciones de balance de energía; lo cual, por el momento, se realiza más o menos fácilmente ya que las propiedades termodinámicas están expresadas por polinomios, lo que permite manejar expresiones analíticas para el cálculo de las derivadas. Sin embargo, al sofisticar el cálculo de propiedades muy posiblemente no se disponga de las expresiones analíticas para el cálculo del Jacobiano y sería necesario su evaluación numérica, con lo que se consumiría gran cantidad de memoria y tiempo de cálculo.

4.- El cálculo de las propiedades termodinámicas se realiza mediante polinomios obtenidos por ajustes de mínimos cuadrados, lo cual puede llegar a ser muy inexacto debido a las condiciones de operación manejadas en una torre de absorción.

5.- No permite alimentaciones a dos fases, por lo cual no puede ser utilizado cuando se presentan estas alimentaciones, ni en las torres de absorción por intercambio de calor-reflujo.

6.- No pueden manejarse sistemas con reacción química.

Dado que el trabajo necesario para atacar todas las modificaciones anteriormente mencionadas es demasiado extenso, se decidió centrar el presente estudio en las modificaciones relativas al uso de memoria y los ciclos de convergencia, por

considerarse éstas básicas para poder tratar en futuros estudios las mejoras restantes.

## 2.2.- Descripción de las modificaciones.

### 2.2.1.- Modificaciones al uso de memoria y la programación.

La modificación principal al uso de memoria consistió en sustituir las matrices tridiagonales resultantes de la linealización de los balances de materia en términos de las fracciones mol del líquido (Ecs. 1.10 a 1.13) y de la aplicación del método de Newton-Raphson a las ecuaciones de balance de energía para la determinación de las correcciones del perfil de temperaturas (Ecs. 1.27 a 1.30), por arreglos rectangulares de la forma:

$$\left[ \begin{array}{ccc|c} 0 & B & C & D \\ & 1 & 1 & 1 \\ A & B & C & D \\ 2 & 2 & 2 & 2 \\ A & B & 0 & D \\ N & N & & N \end{array} \right] \quad (2.1)$$

con la cual se ahorran 75.8K-bytes de espacio de memoria  $[2 \times 4 \text{ bytes/variable} \times (100 \times 101 - 100 \times 4 \text{ variables})] / (1024 \text{ bytes/K-byte})$ , ya que no se reserva espacio para todos los ceros de las matrices tridiagonales. Esta modificación hizo posible restablecer el número máximo de etapas teóricas en 100, el cual había tenido que reducirse a 50 debido a la capacidad de memoria requerida por el planteamiento original.

En el apéndice II-1 se presentan los listados de las subrutinas DELTAT, SETUPA, SETUPB y TRIDI de acuerdo al nuevo planteamiento.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

Conjuntamente con la modificación anterior se realizaron algunos cambios a la programación tendientes a simplificar y eficientar el programa. Algunos de dichos cambios son:

- Las líneas 00044000 y 00346000, que originalmente tenían la siguiente forma:

```
00044000 15 READ (LUTR,255) NC, JS, NOF, NOV5, NOL5, NOO5, KP
00346000 END
```

se modificaron de la siguiente manera:

```
00044000 15 READ (LUTR,255,END=500) NC, JS, NOF, NOV5, NOL5, NOO5, KP
00345000 500 END
```

con lo cual se eliminó el fin por error.

- Las líneas:

```
00066000 IF (SUMMF.LT. 0.999 .OP. SUMMF .GT. 1.001) WRITE (LUOUT,425) JF
00067000 IF (SUMMF .LT. 0.999 .OP. SUMMF .GT. 1.001) WRITE (LUOUT,430)

00326000 425 FORMAT (12X,40HLAS-FRACCIONES-MOL-DE-LA-ALIMENTACION-A-LA-ETAPA,14-
00327000 1,14H NO SUMAN 1.000.)
00328000 430 FINMAT (21X,40HLAS CALCULO PODRIAN PROSEGUIR, PERO POSIBLEMENTE-N-
00329000 10 CONVERJAN O DEN RESULTADOS INEXACTOS.)
```

se cambiaron por los siguientes:

```
00066000 IF (SUMMF.LT. 0.999 .OP. SUMMF .GT. 1.001) WRITE (LUOUT,425) JF
00326000 425 FORMAT (12X,40HLAS-FRACCIONES-MOL-DE-LA-ALIMENTACION-A-LA-ETAPA,14-
00327000 1,14H NO SUMAN 1.000.)
00328000 203POSIBLEMENTE-NO CONVERJAN-O DEN RESULTADOS INEXACTOS.:)
```

que cumplen con el mismo propósito en una forma más sencilla.

- Las líneas 00153000 a 00156000, que comprueban que no se produzcan flujos de líquido o vapor negativos, se transfirieron quedando insertadas entre las líneas 00136000 y 00137000 con lo cual la prueba se realiza antes de calcular el nuevo perfil de temperaturas.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

-Las líneas:

```

00178000 ----- IF (NTR .GT. TOL .AND. K1 .LT. NCI) WRITE (CUOUT,355) K1,STD,TOL
00179000 ----- IF (NTR .GT. TOL .AND. K1 .LT. NCI) GO TO 75
00180000 ----- IF (NTR .LT. TOL) GO TO 140
00181000 ----- IF (K1 .FU. NCI) WRITE (LUNUT,365) NCI

```

se substituyeron por las siguientes:

```

00177000 ----- IF (STD .LT. TOL) GO TO 140
00178000 ----- IF (K1 .EQ. NCI) GO TO 137
00179000 ----- WRITE (LUNUT,355) K1,STD,TOL
00180000 ----- GO TO 75
00181000 ----- 137 WRITE (LUNUT,365) NCI

```

que cumplen con el mismo objetivo en una forma más eficiente.

- Aprovechando que el compilador utilizado permite el empleo de variables índice con límite inferior y decremento en la definición de ciclos se hicieron los siguientes cambios:

\*Subrutina ASUMUT.

```

00354000 ----- DO 10 I = 1, JK
00355000 ----- K = JS-I

```

```

00353000 ----- DO 10 K = JK, 1, -1

```

\*Subrutina DELTAT.

```

00401000 ----- DO 10 J1 = 1, NMIN
00402000 ----- JSUB = NMIN - J1

```

```

00391000 ----- DO 10 J1 = NMIN, 1, -1

```

\*Subrutina TRIDI.

```

00572000 ----- DO 10 J1 = 1, NMIN
00573000 ----- JSUB = NMIN - J1

```

```

00553000 ----- DO 10 JSUB = NMIN, 1, -1

```

\*Subrutina VAPOR.

```

00601000 ----- DO 20 I = 1, JK
00602000 ----- K = JS-I

```

```

00501000 ----- DO 20 I = JS-1, 1, -1

```

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

- La subrutina CLEAN se modificó, quedando de la siguiente forma:

```

00366000-----SURROUT(NE CLEAN)
00367000-----COMMON/BLCK17/JS,A(25*0)
00368000-----COMMON/AA17/B(300)
00369000-----DD 5 I = 1, P500
00370000-----S A(I)=0.0
00371000-----DO 10 J = 1, 300
00372000-----D R(I)=0.0
00373000-----RETURN
00374000-----END

```

### 2.2.2.- Modificaciones a la convergencia del bucle U.

Debido a que el método de sustitución directa ha mostrado ser eficaz en la solución del bucle U para el procedimiento SR, presentando como desventajas que:

- es muy lento, sobre todo cuando se aproxima a la solución;
- si el valor absoluto de la derivada de la función es mayor que 1 puede no converger.

Se decidió buscar un método de sustituciones sucesivas que no tuviera estos inconvenientes.

Una primera aproximación resultó ser el método de Wegstein, según el cual las dos primeras iteraciones se realizan igual que en el método de sustitución directa:

$$X_i^{(1)} = f(X_i^{(0)}) \quad (2.2)$$

$$X_i^{(2)} = f(X_i^{(1)}) \quad (2.3)$$

y a partir de la tercera iteración se utiliza la siguiente fórmula de aproximación:

$$X_i^{(k+1)} = X_i^{(k)} + \alpha \Delta X_i^{(k)} \quad (2.4)$$

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

donde:

$$\Delta X_i^{(K)} = f(X_i^{(K)}) - X_i^{(K-1)} \quad (2.5)$$

$$\alpha_i = \frac{1}{1 - \frac{f(X_i^{(K)}) - X_i^{(K-1)}}{X_i^{(K)} - X_i^{(K-1)}}} = \text{Factor de aceleramiento y/o verificación de la dirección de búsqueda (derivada direccional)}. \quad (2.6)$$

En el apéndice II-2.1 se presenta el listado de la subrutina VAPOR de acuerdo al algoritmo de Wegstein. Un detalle que es importante mencionar es que se impuso límite a los valores de  $\alpha_i^{(8)}$ , de tal forma que siempre estén en el rango de  $-10 < \alpha_i^{(8)} < 10$ , ya que el empleo de valores muy grandes puede provocar inestabilidad.

Para estudiar los efectos de esta modificación se decidió resolver varios problemas con el simulador original y el modificado, con lo cual se encontró que, mientras el simulador original convergía en todos los casos, el simulador modificado no convergía debido a que se producían perfiles de flujo de vapor y temperatura muy inestables. Para tratar de controlar la inestabilidad se probaron límites más restringidos de  $\alpha_i$  (-8 a 8, -5 a 5 y -2 a 2); sin embargo, el cálculo de estas pruebas también fue no convergente. Con base en esto, se decidió estudiar dos caminos alternativos que se han propuesto para atacar los problemas de inestabilidad:

- Utilizar alternadamente varias iteraciones del método de sustituciones sucesivas modificado (4SS/1SSM).<sup>(9)</sup>
- Utilizar el algoritmo de Steffensen, según el cual inicialmente se utiliza la fórmula de sustituciones sucesivas

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

para generar los iterados  $X_i^{(1)}$ ,  $X_i^{(2)}$ , ... y las razones  $r_i^{-1(1)}$ ,  $r_i^{-1(2)}$ , ...

$$\text{siendo } r_i^{-1(k)} = \frac{X_i^{(k)} - X_i^{(k-1)}}{f(X_i^{(k)}) - X_i^{(k)}} \quad (2.7)$$

y cuando estas razones se vuelven suficientemente estables, cambiamos a la fórmula de iteración de Steffensen:

$$X_i^{(k)} = f(X_i^{(k)}) + \frac{\Delta X_i^{(k)}}{r_i^{-1(k)} - 1} \quad (2.8)$$

con la cual se obtiene el valor corregido de  $X_i^{(k)}$  que posteriormente es utilizado para iniciar nuevamente el proceso.

En los apéndices II-2.2 y II-2.3 se presentan los listados de la subrutina VAPOR correspondientes a estos métodos.

La evaluación de estas modificaciones mostró que:

\* El método 4SS/ISSH era convergente para ejemplos sencillos pero al irse incrementando la complejidad se presentaban problemas de inestabilidad.

\* Las relaciones  $r_i^{-1(k)}$  del método de Steffensen nunca se estabilizaban, por lo cual el método funcionaba como una sustitución directa ya que jamás se empleaba la fórmula de corrección (2.8).

Los hechos anteriores condujeron a pensar que en realidad los problemas de inestabilidad no se debían a la aplicación sucesiva de la fórmula de Wegstein, sino al empleo del esquema de

convergencia simultánea de emparejamiento, en el cual se calcula una corrección al perfil de flujos e inmediatamente se pasa al cálculo del perfil de temperaturas, sin haber checado la convergencia de los perfiles de flujo.

Para investigar esta posibilidad se modificaron el programa principal y la subrutina VAPOR (Apendice II.2.4) de tal forma que la convergencia del bucle V se realizara por el método de Wegstein dentro de un esquema de convergencia secuencial.

La evaluación de esta modificación condujo a resultados satisfactorios, ya que en todos los ejemplos se logró la convergencia con un menor tiempo de cálculo, y en algunos casos complejos el número de iteraciones de la columna también se redujo.

### 2.2.3. Modificaciones a la convergencia del bucle T.

La solución de sistemas de ecuaciones no lineales generalmente es un problema muy difícil y no se conocen métodos de iteración funcional muy satisfactorios para el mismo; sin embargo, se ha propuesto replantear el problema:

$$f_i(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \quad \forall i \quad (2.9)$$

como encontrar el mínimo no restringido de la función escalar:

$$\phi(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^n [f_i(x_1, x_2, \dots, x_n)]^2 \quad (2.10)$$

donde la función  $\phi$  toma su mínimo absoluto en la solución del sistema. (10)

De acuerdo a este planteamiento el problema se transforma en una optimización multivariable, para cuya solución pueden distinguirse dos tipos de métodos numéricos: los de búsqueda

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

directa, en los que únicamente es necesaria la evaluación de la función objetivo; y los de gradiente, en los que además se requiere el cálculo del gradiente. En general, los métodos con gradiente son más eficientes; sin embargo, cuando no se dispone de la expresión analítica del gradiente se ha recomendado utilizar los métodos de búsqueda directa, <sup>(11,12)</sup> ya que la aproximación numérica de las derivadas reduce en gran forma la eficiencia de los métodos con gradiente y además pueden esperarse problemas en la vecindad del óptimo. Con base en esto se decidió utilizar un método de búsqueda directa.

Dentro de los principales métodos de búsqueda directa se encuentran los siguientes:

- Búsqueda univariable.
- Simplex.
- Hooke - Jeeves.
- Rosenbrock.
- Powell.

de los cuales, los tres primeros han resultado no ser muy recomendables y el de Rosenbrock, aunque es mejor que los anteriores y ampliamente utilizado, presenta el problema de que algunas veces es muy lento de iniciar <sup>(12)</sup>. Debido a esto se decidió utilizar el método de Powell cuyo algoritmo es: <sup>(13)</sup>

1.- Seleccionar un punto inicial,  $X^{(0)}$ . Las direcciones iniciales de búsqueda  $M_i^{(0)}$ ,  $i=1, \dots, N$ , serán paralelas a los ejes coordenados.

2.- Realizar una secuencia de búsquedas univariadas en las  $N$  direcciones originales utilizando aproximación cuadrática.

## 3.- Localizar los siguientes puntos:

$\tilde{x}_N^{(k)}$  = Ultimo punto de la secuencia de búsquedas univariadas.

$\tilde{x}_H^{(k)}$  = Punto de mayor mejoría en la función objetivo entre búsquedas univariadas sucesivas.

$\tilde{x}_t^{(k)} = 2\tilde{x}_N^{(k)} - \tilde{x}_0^{(k)}$  = Punto extendido (2.11)

$\tilde{x}_0^{(k)}$  = Punto inicial de la iteración

4.- Verificar si el valor de la función objetivo en el punto extendido,  $\tilde{x}_t^{(k)}$ , es mejor que en el punto inicial  $\tilde{x}_0^{(k)}$ . Si no existe mejoría tomar el último punto,  $\tilde{x}_N^{(k)}$ , como nuevo punto inicial y realizar una nueva secuencia de búsquedas univariadas en las mismas direcciones que la anterior.

$$\tilde{x}_0^{(k+1)} = \tilde{x}_N^{(k)} \quad (2.12)$$

$$\tilde{m}_i^{(k+1)} = \tilde{m}_i^{(k)}, \quad i=1, \dots, N \quad (2.13)$$

si la función objetivo en el punto extendido,  $F_t^{(k)}$ , es mejor que la del punto inicial,  $F_0^{(k)}$ , realizar la siguiente prueba:

$$\left[ F_0^{(k)} - 2F_t^{(k)} + F_t^{(k)} \quad F_0^{(k)} - F_t^{(k)} - \Delta \right]^2 > (F_0^{(k)} - F_t^{(k)})^2 \quad (2.14)$$

$$\text{donde: } \Delta = \left| F_H^{(k)} - F_{H-1}^{(k)} \right| \quad (2.15)$$

si se satisface la prueba, realizar una nueva secuencia de búsquedas univariadas conservando las mismas direcciones de la anterior. En caso contrario, realizar una búsqueda univariable en la dirección  $\underline{\mu}^{(k)}$

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

$$\mu^{(k)} = \sum_N^{(k)} - x_0^{(k)} \quad (2.16)$$

hasta encontrar el mejor valor,  $x_0^{(k+1)}$ . Después, seleccionar las direcciones de búsqueda de la siguiente forma:

$$\mu_i^{(k+1)} = \mu_i^{(k)} \quad \text{para } i=1, \dots, M-1 \quad (2.17)$$

$$\mu_i^{(k+1)} = \mu_{i+1}^{(k)} \quad \text{para } i=1, \dots, N-1 \quad (2.18)$$

$$\mu_N^{(k+1)} = \mu_N^{(k)} \quad (2.19)$$

e iniciar una nueva secuencia de búsquedas univariadas.

5.- Se considera que se logra la convergencia cuando las variaciones de los valores de las variables independientes entre dos iteraciones sucesivas son menores que un límite preestablecido.

$$\left| x_i^{(k)} - x_i^{(k-1)} \right| < \epsilon \quad i=1, \dots, N \quad (2.20)$$

En el apéndice II-3.1 se presentan los listados del programa principal y las subrutinas FOB y POWELL que serían necesarias para realizar la convergencia del bucle T por minimización de la sumatoria de los imbalances cuadrados de energía. Un detalle que es importante mencionar es que la subrutina POWELL fue tomada de la subrutina BOTM propuesta por (13) Kuester y únicamente se le hicieron algunos cambios para adaptarla al STAB.

La evaluación de esta modificación se hizo en forma semejante a las anteriores encontrándose que, aunque el método era convergente para todos los ejemplos, se presentaba el problema de que el tiempo de cálculo se incrementaba considerablemente con

respecto al del simulador original. Debido a esto, se decidió probar otro tipo de procedimientos que se han propuesto para la solución de sistemas de ecuaciones no lineales a los que se les denomina cuasi-Newton.

Uno de los métodos cuasi-Newton más utilizados en la ingeniería química es el de Broyden. (14) Hess (15) reporta que este método se ha empleado en la resolución de torres de absorción y destilación utilizando el siguiente algoritmo:

- 1.- Suponer un conjunto inicial de las variables independientes,  $X_0$ , y calcular:

$$f_0 = f(X_0) \quad (2.21)$$

- 2.- Calcular los elementos de H, definido como el menos inverso del Jacobiano, J :

$$H_0 = -J_0^{-1} \quad (2.22)$$

obteniendo la primera aproximación de los elementos de J utilizando la fórmula:

$$\frac{\partial f_i}{\partial X_j} = \frac{f(X_i + h_j) - f(X_i)}{h_j} \quad (2.23)$$

donde  $h_j$  se toma aproximadamente igual a  $0.001 X_j$ .

- 3.- Con base en los valores más recientes de H y  $f_K$  calcular

$$P_K = H_K f_K \quad (2.24)$$

- 4.- Encontrar la  $S_K$ , tal que la norma Euclídeana de  $f(X_K + S_K P_K)$  sea menor que la de  $f(X_K)$ . Primero pruebe  $S_K = 1$  y si se cumple la siguiente desigualdad:

$$\left[ \sum_{i=1}^n f_i^2 \left( \frac{X_i + S_{K,2}}{K} \right) \right]^{1/2} < \left[ \sum_{i=1}^n f_i^2 \left( \frac{X_i}{K} \right) \right]^{1/2} \quad (2.25)$$

vaya al paso 5. De lo contrario, calcúle  $S_{K,2}$  de acuerdo a la siguiente fórmula:

$$S_{K,2} = \left[ (1+6\eta)^{1/2} - 11/3\eta \right] \quad (2.26)$$

donde:

$$\eta = \frac{\sum_{i=1}^n f_i^2 (X_i + S_{K,2})}{\sum_{i=1}^n f_i^2 (X_i)} \quad (2.27)$$

si la norma Euclideana no se reduce utilizando  $S_{K,2}$ , regrese al paso 2 y reevalúe  $J_K$  utilizando como base  $X_{K,2}$ .

5.- Al realizar los cálculos del paso 4 se obtienen los siguientes vectores:

$$\tilde{X}_{K+1} = \frac{X_K + S_{K,2} P_K}{K} \quad (2.28)$$

$$\tilde{f}_{K+1} = f \left( \frac{X_K}{K} \right) \quad (2.29)$$

se prueba la convergencia de  $\tilde{f}_{K+1}$  y, si no se ha logrado se calcula:

$$Y_K = f \left( \frac{X_K}{K} \right) - \tilde{f}_{K+1} \quad (2.30)$$

6.- Calcular:

$$H_{K+1} = H_K - \frac{H_K Y_K + S_{K,2} P_K}{K} P_K^T \quad (2.31)$$

y regresar al paso 3.

Este método tiene en general buenas propiedades de convergencia; sin embargo, utiliza gran cantidad de memoria y

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

tiempo de cálculo, por lo cual Hess <sup>(16)</sup>, también presenta una modificación de dicho algoritmo propuesta por Bennett, según la cual el procedimiento a seguir sería:

- 1.- Igual al paso 1 del algoritmo de Broyden.
- 2.- Calcular el Jacobiano,  $J$ , en forma semejante al paso 2 del algoritmo de Broyden. Encontrar los factores  $L$  y  $U$  de la factorización triangular de  $J$  tales que

$$J = \begin{matrix} L & U \\ \circ & \circ & \circ \end{matrix} \quad (2.32)$$

- 3.- Con base en los valores más recientes de  $L$ ,  $U$  y  $f$ , calcular  $\tilde{P}_K$  de acuerdo a la siguiente fórmula:

$$L \begin{matrix} U \\ K \end{matrix} \tilde{P}_K = - \begin{matrix} f \\ K \end{matrix} \quad (2.33)$$

- 4.- Igual al paso 4 del algoritmo de Broyden
- 5.- Probar la convergencia de  $f_{K+1}$ . Si no se logró calcular:

$$C = \frac{1}{S \begin{matrix} P \\ K \end{matrix} \tilde{P}_K} \quad (2.34)$$

$$x_{K+1} = \begin{matrix} f \\ K \end{matrix} - (1-S) \begin{matrix} f \\ K \end{matrix} \quad (2.35)$$

$$y_{K+1} = \begin{matrix} P \\ K \end{matrix} \tilde{P}_K \quad (2.36)$$

- 6.- Obtener las matrices actualizadas  $L_{K+1}$  y  $U_{K+1}$  de acuerdo a la siguiente fórmula:

$$L_{K+1} U_{K+1} = L \begin{matrix} U \\ K \end{matrix} + x \begin{matrix} C \\ K \end{matrix} y^T \quad (2.37)$$

utilizando el algoritmo propuesto por Bennett mostrado en la

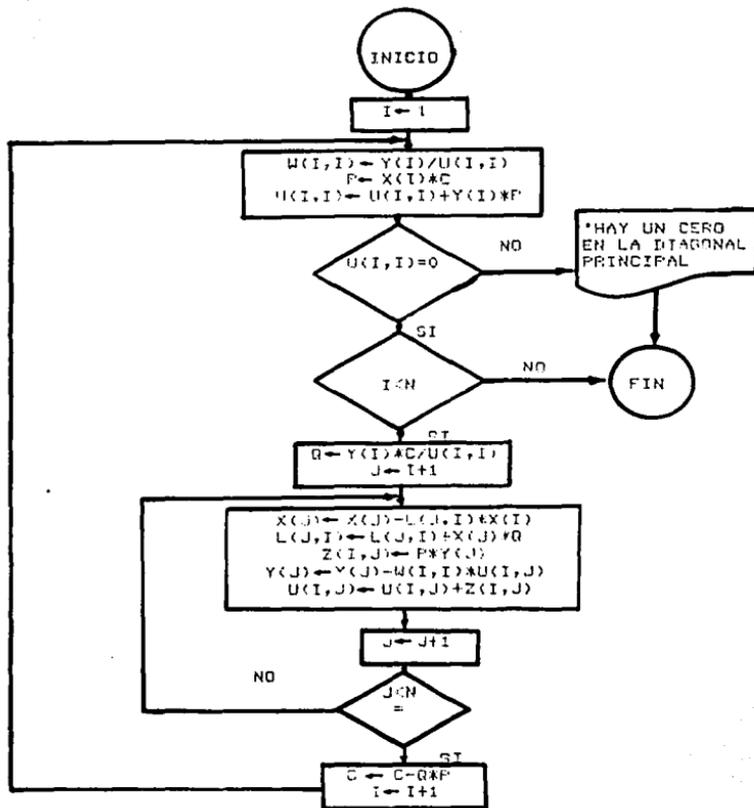


Figura 2.1.- Algoritmo de Bennett para la actualización de la factorización triangular del Jacobiano.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

Esta modificación tiene como ventajas el que requiere menor número de operaciones, tanto en el cálculo de los factores L y U del Jacobiano, respecto al cálculo de la inversa del mismo ( $n^3/3$  vs  $n^2$ ), como en la actualización del L y U respecto a la de H ( $2n^2$  vs  $3n^2$ ); sin embargo, se sigue utilizando gran cantidad de memoria.

En la aplicación del algoritmo modificado de Broyden al STAB, se aprovechó el hecho de que el Jacobiano de los balances de energía es una matriz tridiagonal, lo que permitió modificar dicho algoritmo de tal forma que se utilizara el siguiente arreglo:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \frac{\partial f_N}{\partial x_{N-1}} & \frac{\partial f_N}{\partial x_N} \end{bmatrix} \quad (2.38)$$

lo cual redujo considerablemente la memoria utilizada.

En el apéndice II-3.2 se presentan los listados del programa principal, la subrutina BROYDEN y la función FER de acuerdo al algoritmo modificado de Broyden replanteando en el presente trabajo en términos del arreglo (2.38).

La evaluación de esta modificación condujo a resultados satisfactorios, ya que en todos los ejemplos se logró la convergencia utilizando menor tiempo de cálculo que el simulador original.

### 2.3.- SIMULADOR PROPUESTO.

Con base en lo expuesto en este capítulo, el simulador propuesto, STAB1, tendría las siguientes modificaciones respecto

al STAB:

- Modificaciones al uso de memoria y la programación descritas en el punto 2.2.1.
- Convergencia del bucle V por el método de Wegstein, utilizando un arreglo secuencial en el cálculo de la torre.
- Convergencia del bucle T mediante la modificación propuesta en el presente trabajo al algoritmo de BENNETT-BROYDEN.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

A P E N D I C E   I I - 1

MODIFICACIONES AL USO DE MEMORIA Y LA PROGRAMACION  
SUBROUTINAS DELTAT, SETUPA, SETUPB Y TRIDI.

```

00375600 SUBROUTINE DELTAT
00376400 DIMENSION P(100),DA(1*0)
00377600 DIMENSION DELT(100)
00378000 COMMON/BLGCR1/JS,T(10),F(100),W(100),V(100),XF(20,100)
00379400 COMMON/D2/AA(100,4)
00380600 P(1) = 4*(1.7)/AA(1,2)
00381000 DA(1) = AA(1,4)/AA(1,2)
00382000 NMIN = JS - 1
00383000 DO 5 J1 = 2, NMIN
00384000 D = AA(J1,2) - 41*(J1-1)*P(J1-1)
00385000 *R(J1) = AA(J1,3)/D
00386000 DA(J1) = (AA(J1,4) - AA(J1,1) + DA(J1-1))/D
00387000 5 CONTINUE
00388000 DELT(J2) = (AA(J2,4) - AA(J2,1) + DA(J2-1))/AA(J2,2) - AA(J2,1) + P(NMIN)
00389000 1)
00390000 DO 10 J1 = NMIN, 1, -1
00391000 DELT(J1) = DA(J1) - P(J1) + DELT(J1+1)
00392000 10 CONTINUE
00393000 DO 15 J2 = 1, JS
00394000 T(J2) = DELT(J2) + T(J2)
00395000 15 CONTINUE
00396000 RETURN
00397000 END

```

PROGRAM UNIT DELTAT COMPILED

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

```

00454000 SURCUTINE SFTUPA (I,FN'IX)
00457000 REAL L
00458000 COMMON/BLCK/JS,T(10),F(100),W(100),U(100),V(100),XF(20,100)
00459000 COMMON/AA2/HVENS(3,20),HLCHST(3,20),IC,L(100)
00460000 COMMON/BI1/A(100,4)
00461000 DO 10 I=1,100
00462000 DO 5 J=1,4
00463000 A(I,J)=0
00464000 5 CONTINUE
00465000 10 CONTINUE
00466000 C.....ELEMENTOS DEL PRIMER PIVELON
00467000 I1=I(1)
00468000 A(I1,2)=V(2)-F(1)+V(1)+F(1)+V(11)-W(11)*EQUILR(I1,1)
00469000 I2=I(2)
00470000 A(I1,3)=V(2)+EQUILR(I2,1)
00471000 00471000 C.....ELEMENTOS DEL ULTIMO PIVELON
00472000 A(J5,1)=V(J5)+V(J5)+L*(J5)+H(J5)-F(J5)
00473000 I1=I(25)
00474000 A(J5,2)=L*(J5)-U(J5)-W(J5)+V(J5)+EQUILR(I1,1)
00475000 A(J5,3)=L*(J5)+F(I1)+F(I1)
00476000 C.....ELEMENTOS DE LOS PIVELONES INTERMEDIOS
00477000 J1=J5-1
00478000 SUM=0
00479000 DO 15 J=2,J1MS
00480000 SUM=SUM+F(J1)-U(J1)-W(J1)+V(J1)+L*(J1)
00481000 SUM=SUM+F(J1)-A(J1)+F(J1)
00482000 A(J1,1)=V(J1)+SUM-V(1)
00483000 J2=I(1)
00484000 A(J1,2)=V(J1)+EQUILR(J2,1)+U(J1)+V(J1)+SUM+V(1)
00485000 I1=I(J1)
00486000 A(J1,3)=V(J1)+EQUILR(I1,1)
00487000 A(J1,4)=F(J1)+F(I1,1)
00488000 15 CONTINUE
00489000 ELTUM
00490000 END

```

PROGRAM UNIT SETUPA COMPILED

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

```

00492000 SURROGATE SFTIHR
00493000 DEAL L
00494000 COMMON/BLOCK//JS,T(10),F(100),W(100),U(100),V(100),X(20),Y(0)
00495000 COMMON/A1/F(100),H(100),G(100)
00496000 COMMON/A2/PCMT(12),T,W,PMT(12),Z(10),IC,L(10)
00497000 COMMON/A3/A(100,4)
00498000 DD IN I = 7, 100
00499000 DD S J = 1, 8
00500000 AA(T,J) = W
00501000 S CONTINUE
00502000 10 CONTINUE
00503000 C-----ELEMENTOS DEL PRIMER PENLON
00504000 T1 = T(1)
00505000 L1 = 1
00506000 L2 = 2
00507000 AA(L,2) = (L(1)+U(1))*HDPW(L,1,T1,L1) - (W(1)+V(1))*HDPV(L2,T1,L1)
00508000 T2 = T(2)
00509000 AA(L,3) = W(2)+HDPV(L2,T2,L2)
00510000 AA(L,4) = V(2)+HVL(L2,T2,L2)+F(2)+H(F(1)+L(1)+U(1))*HVL(L1,T1,L1)+
00511000 1*G(1)+V(1))*HVL(L2,T1,L1)+G(1)
00512000 C-----ELEMENTOS DEL ULTIMO PENLON
00513000 TJM1 = T(JM-1)
00514000 JAS = JS - 1
00515000 AA(JA,1) = L(JM-1)+HDPV(L1,TJM1,JAS)
00516000 TJM = T(JM)
00517000 AA(JA,2) = (L(JM)+U(JM))*HDPV(L1,TJM,JM) - (W(JM)+V(JM))*HDPV(L2,TJM
00518000 1,JM)
00519000 AA(JA,4) = L(JM+1)+HVL(L1,TJM1,JAS) - F(JM)+H(F(JM)+L(JM)+U(JM))*HVL
00520000 (L1,TJM,JM) + (H(JM)+F(JM))*HVL(L2,TJM,JM)+G(JM)
00521000 C-----ELEMENTOS DE LA ULTIMA COLUMNA
00522000 C-----ELEMENTOS DE LOS RECTANGULOS INTERMEDIOS
00523000 DD IN JI = 2, JAS
00524000 TTI = T(JI-1)
00525000 TTI = T(JI)
00526000 TTI = T(JI+1)
00527000 JJI = JI - 1
00528000 JJI = JI + 1
00529000 AA(JI,1) = L(JJI)+HDPV(L1,TTI,JJI)
00530000 AA(JI,2) = (L(JTI)+U(JTI))*HDPV(L1,TTI,JTI) - (W(JTI)+V(JTI))*HDPV(L
00531000 1,TTI,JJI)
00532000 AA(JI,3) = V(JJI)+HDPV(L2,TTI,JJI)
00533000 AA(JI,4) = L(JJI)+HVL(L1,TTI,JJI) - (V(JI+1)+HVL(L2,TTI,JJI) - F(JI)+H(F
00534000 1(JI)+L(JI)+U(JI))*HVL(TTI,TTI,JJI) + (W(JI)+V(JI))*HVL(L2,TTI,JI)+G(J
00535000 1)
00536000 19 CONTINUE
00537000 RETURN
00538000 END

```

PROGRAM UNIT SETUP COMPILED

00

\*

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

```

00530000 SUBROUTINE TRIDI(I)
00540000 DIMENSION P(100),QA(1*0)
00541000 COMMON/ALOCK/7JS,Y(10)*P(100),W(100),U(100),V(100),X(20,100)
00542000 COMMON/AB1/A(100,4)
00543000 COMMON/AB6/X(20,100)
00544000 P(1)=A(1,3)/A(1,2)
00545000 QA(1)=A(1,4)/A(1,2)
00546000 NMIN=7S-1
00547000 DO 5 J1 = 2, NMIN
00548000 D = A(J1,2)-A(J1,1)*P(J1-1)
00549000 P(J1) = A(J1,3)/D
00550000 QA(J1) = (A(J1,4)-A(J1,1)*QA(J1-1))/D
00551000 5 CONTINUE
00552000 X(1,10) = (A(JN,4)-A(JN,1)*QA(NMIN))/ (A(JN,2)-A(JN,1)*P(NMIN))
00553000 DO 10 JSUB = NMIN, 1, -1
00554000 X(1,JSUB) = QA(JSUB) - P(JSUB)*X(1,JSUB+1)
00555000 10 CONTINUE
00556000 RETURN
00557000 END

```

PROGRAM UNIT TRIDI COMPILED

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

```

00550000      SUMRATIVE VAPNREQUILK,K11)
00560000      REL L,LA,LA
00561000      COMMON/BLOCK1/J3,T(100);F(100),W(100),U(100);V(100),XF(20,100)
00562000      COMMON/AA2/HVCHST(3,20),MLPRST(3,20),IC,L(100)
00563000      COMMON/JAA/X(20,100)
00564000      COMMON/JAS/Z(20,100),ZF(20,100),ADDX(100),Y(20,100)
00565000      COMMON/W/P/L(100);L*(100)
00566000      DO 14 JA = 1, 25
00567000      ADDX(JA)=0
00568000      ADDY=0
00569000      TJRY(JA)
00570000      DO 5 I = 1, IC
00571000      Y(I, JAA*(Z(JA)+EQUILF(I,J)))
00572000      ADDX(JA)=ADDX(JA)+I(JA)
00573000      ADDY=ADY+Y(I,JA)
00574000      5 CONTINUE
00575000      IF (X1.GT.2) GO TO 25
00576000      W(I,JE,1) LA*(JA)+A(JA)
00577000      LA(JA)=L(JA)
00578000      L(JA)=A(JA)+ADDX(JA)
00579000      GO TO 10
00580000      25 LA*(JA)=A(JA)
00581000      L(JA)=L(JA)
00582000      SJAM A(JA) (ADDX(JA)-1)/(LA(JA)-LA*(JA))
00583000      TJAM/(1-SJA)
00584000      IF (TJA.GT.10) TJA=10
00585000      IF (TJA.LT.-10) TJA=-10
00586000      L(JA)=L(JA)+(1+TJA*(DDH(JA)+1))
00587000      30 DO 10 JB = 1, IC
00588000      Z(JB,JA)=Z(JB,JA)+ADY*(JA)
00589000      ZF(JB,JA)=ZF(JB,JA)+ADY
00590000      10 CONTINUE
00591000      15 CONTINUE
00592000      W(JA,10)=1-L(JB)+F(JB)-(H(JB)+W(JB))
00593000      JARJA=2
00594000      DO 20 I = JB-1, 1, -1
00595000      W(I)=W(I)+L(I)-L(I)+F(I)-F(I)-W(I)-W(I)
00596000      20 CONTINUE
00597000      W(1)=W(2)-L(1)+F(1)-W(1)-W(1)
00598000      RETURN
00599000      END
    
```

PROGRAM UNIT VAPN: COMPILED

APENDICE II - 2.1

MODIFICACION DEL BUCLE V  
DE ACUERDO AL ALGORITMO DE WEGSTEIN

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

121

```

00540000 SUPRRTIME VAPOR(EDUIT,K,1)
00540000 REAL L,LA,LLA
00541000 COMMON/MLDCE1/JS,T(10**),F(100),W(100),U(100),VF(20,100)
00542000 COMMON/AA2/MCNST(3,2),MLCNST(3,20),IC,L(100)
00543000 COMMON/AA4/X(20,100)
00544000 COMMON/AA5/Z(20,100),Y(20,100),ADDX(100),V(20,100)
00545000 COMMON/VAP/LA(100),LA*(100)
00546000 CRRK=5
00547000 KCRK=5*(INT(CR))
00548000 IF (KC,EG,0) KCS=5
00549000 DD 1=JA = 1, JB
00570000 ADDX(JA)=0,0
00571000 ADDY=0
00572000 T(JT(JA))
00573000 DO 5 I = 1, IC
00574000 V(I,JA)=V(I,JA)*REU(LP(T,J,T))
00575000 ADDX(JA)=ADDX(JA)+W(I,JA)
00576000 ADDY=ADDY+V(I,JA)
00577000 5 CONTINUE
00578000 IF (KC,GT,4) GO TO 25
00579000 IF (KC,GE,1) LA*(JA)=LA*(JA)
00580000 LA*(JA)=L*(JA)
00581000 L*(JA)=L*(JA)+ADDX(JA)
00582000 GO TO 10
00583000 25 LA*(JA)=LA*(JA)
00584000 LA*(JA)=L*(JA)
00585000 SJAJ=L*(JA)+(ADDX(JA)-1)/TL*(JA)-LA*(JA)
00586000 TJAJ=(1-SJAJ)
00587000 IF (TJA,GT,100) TJAJ=10
00588000 IF (TJA,LT,-10) TJAJ=-10
00589000 L*(JA)=L*(JA)+(1+TJAJ*(ADDX(JA)-1))
00590000 30 DO 10 JB = 1, IC
00591000 Z(JB,JA)=X(JB,JA)/ADDX(JA)
00592000 Y(JB,JA)=Y(JB,JA)/ADDX(JA)
00593000 10 CONTINUE
00594000 15 CONTINUE
00595000 V(JB)=L*(JB-1)-L*(JB)+F(JB)+V(JB)-W(JB)
00596000 JAJ=2
00597000 DO 20 I = JB-1, 1, -1
00598000 V(I)=V(I+1)+L*(I-1)+F(I)+V(I)-W(I)
00599000 20 CONTINUE
00600000 V(1)=V(2)+L*(1)+F(1)-W(1)-W(1)
00601000 RETURN
00602000 END

```

PROGRAM UNIT VAPOR COMPILED

APENDICE II - 2.2.

MODIFICACION DEL BUCLE V  
DE ACUERDO AL ALGORITMO 4SS / 1SSM

127

TESIS CON  
FALTA DE ORIGEN

```

00559000 SUBROUTINE VAPDR(EQUITH,N1,CA)
00560000 REAL L,L1,LA4
00561000 COMMON/BLOCK1/J3,T(100),F(100),N(100),U(100),V(100),NF(20,100)
00562000 COMMON/AR2/MVCHST(3,20),MLPHST(3,20),IC,L(100)
00563000 COMMON/AR4/X(20,100)
00564000 COMMON/AA5/Z(20,100),ZY(20,100),ADDF(100),Y(20,100)
00565000 COMMON/VAP/L(100),G(100),P1MV(100),D1(100),PREVRI(100)
00566000 DO 14 JA = 1, JS
00567000 ADDX(JA)=0.0
00568000 ADDY(JA)=0
00569000 T(JT(JA))
00570000 DO 5 I = 1, TC
00571000 Y(I,JA)=Y(I,JA)+EQUILY(I,JA)
00572000 ADDX(JA)=ADDX(JA)+X(I,JA)
00573000 ADDY(JA)=ADDY(JA)+Y(I,JA)
00574000 5 CONTINUE
00575000 IF (CA.EQ.1) GO TO 40
00576000 IF (K1.GT.1) GO TO 25
00577000 40 LA(JA)=L(JA)
00578000 L(JA)=L(JA)+ADDF(JA)
00579000 D(JA)=L(JA)-LA(JA)
00580000 IF (K1.EQ.1) P1MV(JA)=0.
00581000 LA(JA)=L(JA)
00582000 CARD
00583000 GO TO 30
00584000 25 L(JA)=LA(JA)+ADDF(JA)
00585000 D1(JA)=L(JA)-LA(JA)
00586000 PREVRI(JA)=P1MV(JA)
00587000 P1MV(JA)=D1(JA)/D1(JA)
00588000 IF (ABS(P1MV(JA)).LE.1.E.) GO TO 35
00589000 IF (CA.GT.0V(JA)-PREVRI(JA))/P1MV(JA)).GE.0.1) GO TO 35
00590000 L(JA)=L(JA)+D1(JA)/P1MV(JA)-L1.
00591000 CA=1
00592000 GO TO 30
00593000 35 LA(JA)=L(JA)
00594000 D(JA)=D1(JA)
00595000 CARD
00596000 DO 10 JB = 1, TC
00597000 Z(JB,JA)=X(JB,JA)+ADDF(JA)
00598000 ZY(JB,JA)=Y(JB,JA)+ADFY
00599000 10 CONTINUE
00600000 15 CONTINUE
00601000 V(J3)=L(J3)-L(J2)+F(J3)-H(JB)-W(JB)
00602000 JK=J4-2
00603000 DO 20 T = JS-1, 1
00604000 V(1)=V(1)+L(1)-L(T)+F(T)-U(1)-W(1)
00605000 20 CONTINUE
00606000 V(1)=V(2)-L(1)+F(1)-W(1)-U(1)
00607000 RETURN
00608000 END
    
```

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

PROGRAM UNIT VAPDR COMPILED

APENDICE II - 2.3.  
 MODIFICACION DEL BUCLE V  
 DE ACUERDO AL ALGORITMO DE STEFFENSEN

## A P E N D I C E   I I - 2 . 4

MODIFICACION DEL BUCLE V DE ACUERDO AL ALGORITMO  
WEGSTEIN EN UN ESQUEMA DE CONVERGENCIA SECUENCIAL.

```

00001000 SCRNTPRL USLINT
00020000 SCRNTPRL FILF05/FILF06
00030000 C-----PROGRAMA PRINCIPAL "AFS"PCJOW/DESCOPCION MULTICOMPONENTES"
00040000 C-----AUTORES: I. SHIGOHARA, P.J. JOMANSEN Y J.D. SEADER
00050000 C-----UNIVERSIDAD DE UTAM, "ULTIMA REVISION" JUNIO, 1972
00060000 C-----VERSION MODIFICADA POR LUIS HUMBERTO SONT SAMPERO
00070000 C-----UNIVERSIDAD LA SALLE 1982
00080000 REAL MCONST(1)
00090000 INTEGER PHASZ
00100000 EXTERNAL EQUILA
00110000 DIMENSION TS(100),TTS(100),XFEE(20),JP(20),PK(2),AK(20),MV(20),
00120000 IM(20)
00130000 COMMON/BLCK1/JS,T(10),F(100),M(100),VE(100),V(100),VFE(20),100)
00140000 COMMON/AK1/TF(100),HF(10),O(100)
00150000 COMMON/AK2/HVCONST(3,2),MLFNST(3,20),ICG(100)
00160000 COMMON/AK3/TO,KCONTT(4,20)
00170000 COMMON/AK4/R(20,100)
00180000 COMMON/AK5/T(20,100),P(20,100),BDD(100),V(20,100)
00190000 C-----ASIGNACION DE DISPOSITIVOS DE ENTRADA/SALIDA/LIMITE DE ITERACION
00200000 C-----NES Y TOLERANCIA.
00210000 DATA LUIN,LUOUT,MHRI,TAI/5,0,15,0/
00220000 DATA PH(1),PH(2)/3MVAF,3MLTD/
00230000 READ (LUIN,201) IC,ILPM,THI,P,MCI
00240000 IF (IC1.EQ. 0) NCIS1=
00250000 WRITE (LUOUT,215) MHRI,MCI,TAL
00260000 TT = (THI+LOW)/2
00270000 WRITE (LUOUT,215) P,TI,THI,TT
00280000 IF (IC1.GT. 1 .AND. I(LE, 20) GO TO 5
00290000 WRITE (LUOUT,410)
00300000 GO TO 190
00310000 C-----LECTURA E IMPRESION DE DATOS DE PROPIEDADES FISICAS
00320000 5 READ (LUIN,225) (KCONP(I,J), I=1,4), JKR1,IC)
00330000 READ (LUIN,230) (MCONP(I,J), I=1,3), JKR1,IC)
00340000 READ (LUIN,235) (MCONP(I,K), I=1,3), JKR1,IC)
00350000 DO IN JKR1,IC
00360000 AK(JK) = EQUIL*(TT,JK)
00370000 MV(JK) = HVCONST(1,JK) + MVFNST(2,JK)*TT + HVCONST(3,JK)*TT*TT
00380000 ML(JK) = MCONST(1,JK) + MLFNST(2,JK)*TT + MCONST(3,JK)*TT*TT
00390000 10 CONTINUE
00400000 WRITE (LUOUT,240) (JK,(FCONST(I,K), I=1,4), AK(JK), JKR1,IC)
00410000 WRITE (LUOUT,245) (JK,(MCONST(I,K), I=1,3), MV(JK), JKR1,IC)
00420000 WRITE (LUOUT,250) (JK,(MCONST(K,J), I=1,3), ML(JK), JKR1,IC)
00430000 C-----LECTURA E IMPRESION DE LOS DATOS DEL CASO
00440000 15 READ (LUIN,255,END=500) IC, JS, MOF, MOVS, MOLA, MOBS, RP
00450000 IF (RP.FD. 0) KPR10
00460000 IF (IS1.GT. 2 .AND. J(LE, 100) GO TO 20
00470000 WRITE (LUOUT,420)
00480000 GO TO 190
00490000 C-----INICIALIZA LOS ARREGLOS A PEROS ANTES DE COMENZAR EL CASO
00500000 20 CALL CLEAN
00510000 TOL = TAL*JS
00520000 READ (LUIN,260) TO,TD
00530000 WRITE (LUOUT,265) MCI,IC,JS,MOF,MOVS,MOLA,MOBS,TO,TD
00540000 WRITE (LUOUT,270) IC
00550000 SUMPH = 0.0
00560000 DO 34 LI = 1, MOF
00570000 READ (LUIN,275) JF,PHASZ,TMPP,3FL00

```

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

```

00050000 READ (LU04,240) (XFEED(L2), L2 = 1, 10)
00050000 MPMASE = PM(1)
00060000 IF (PHASE .EQ. 2) MPMASE = PH(2)
00061000 WRITE (LQU07,245) JF, YFLOW, MPMASE, TEMP, (XFEED(L2), L2=1,10)
00062000 SUMMP = 0.0
00063000 DO 24 M = 1, 10
00064000 SUMMP = SUMMP + XFEED(M)
00065000 25 CONTINUE
00066000 IF (SUMMP .LT. 0.999 .OR. SUMMP .GT. 1.001) WRITE (LQU07,245) JF
00067000 TF(JF) = TEMP
00068000 F(JF) = YFLOW
00069000 JP(JF) = PHASE
00070000 SUMMO = SUMMO + TF(JF)
00071000 DO 30 L2 = 1, 10
00072000 XF(L2, JF) = XFEED(L2)
00073000 30 CONTINUE
00074000 C-----CALCULO DE ENTALPIA DE ALIMENTACION
00075000 MFC(JF) = FEEDH (PHASE, JF)
00076000 35 CONTINUE
00077000 NAK = 0
00078000 IF (NOVS .EQ. 0) GO TO 45
00079000 MPMASE = PM(1)
00080000 WRITE (LQU07,240)
00081000 KKK=1
00082000 DO 40 L3 = 1, NOVS
00083000 READ (LU04,226) JSV, VRATE
00084000 WRITE (LQU07,245) JSV, VRATE, MPMASE
00085000 IF (JSV .LT. 2 .OR. JSV .GT. (JS-1)) GO TO 190
00086000 W(JSV) = VRATE
00087000 40 CONTINUE
00088000 45 IF (MOLS .EQ. 0) GO TO 55
00089000 MPMASE = PM(2)
00090000 IF (EKK .EQ. 0) WRITE (LQU07,240)
00091000 DO 50 L4 = 1, MOLS
00092000 READ (LU04,226) JSL, PATF
00093000 WRITE (LQU07,245) JSL, PATF, MPMASE
00094000 IF (JSL .LT. 2 .OR. JSL .GT. (JS-1)) GO TO 190
00095000 U(JSL) = PATF
00096000 50 CONTINUE
00097000 55 IF (MOOS .EQ. 0) GO TO 65
00098000 WRITE (LQU07, 300)
00099000 DO 60 L5 = 1, MOOS
00100000 READ (LU04,305) JO, OPATF
00101000 WRITE (LQU07, 310) JO, OPATF
00102000 IF (JO .LT. 2 .OR. JO .GT. (JO-1)) GO TO 190
00103000 Q(JO) = OPAIF
00104000 60 CONTINUE
00105000 C-----CALCULO DE PERFILES INICIALES DE TEMPERATURA Y FLUJO DE VAPOR
00106000 65 CALL SUBMT(FP)
00107000 WRITE (LQU07,315)
00108000 WRITE (LQU07,320) (I, T(I), Y(I), J= 1, JS)
00109000 WRITE (LQU07,325) KP
00110000 C-----CALCULO DEL PERFIL INICIAL DE FLUJO DE LIQUIDO
00111000 I=1; JS=1
00112000 SUMSO = 0
00113000 DO 70 J = 1, JL1
00114000 SUM = SUM + F(I) * W(I) * U(I)

```

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

PAGE 0003

```

00115600 L(I) = V(I-1)+SUM-V(I)
00116600 T5(I) = T(I)
00117600 T15(I) = T(I)
00118000 70 CONTINUE
00119600 L(J5) = SUM*(J5)+WE(J5)-UE(J5)-VE(I)
00202000 T5(J5) = T(J5)
00210000 T15(J5) = T(J5)
00226000 WJ = J5*(J5+1)
00236000 K2 = 0
00240000 K1 = 0
00250000 WJ = 0
00266000 75 K1 = K1 + 1
00276000 K2 = K2 + 1
00286000 C-----CALCULO DE LOS COEFICIENTES DE LA MATRIZ PARA LAS FRACCIONES
00296000 C-----MOL DEL LIQUIDO.
00310000 77 DO B= 1 TO 1C
00310000 CALL SFTUPA (I,EQUILK)
00326000 C-----RESUELVE LA MATRIZ PARA LAS FRACCIONES MOL DEL LIQUIDO.
00336000 CALL PRODIAT
00340000 80 CONTINUE
00350000 C-----CALCULO DE FRACCIONES MOL DEL VAPOR, Y PERFILES DE FLUJO
00366000 C-----DE LIQUIDO Y VAPOR.
00376000 CALL VAPOR(EQUILK,RR)
00386000 IF (RW,NE,0) GO TO 77
00396000 DO 11C 1=1, J5
00406000 IF (V(J) .LT. 0.0) GO TO 200
00416000 IF (I(J) .LT. 0.0) GO TO 210
00420000 110 CONTINUE
00436000 DO 12C I=1, RW02
00446000 C-----CALCULO DE LOS COEFICIENTES DE LA MATRIZ PARA LOS CAMBIOS
00456000 C-----DE TEMPERATURA.
00466000 CALL SFTUPB
00470000 C-----CALCULO DE LAS NUEVAS TEMPERATURAS DE PLATO
00486000 CALL OPLTAT
00496000 IF (I .GT. 1) GO TO 90
00506000 DO 85 J= 1, J5
00516000 IF (ABS(T(J)-T15(J))-GT. .1) GO TO 90
00526000 85 CONTINUE
00530000 GO TO 105
00540000 90 DO 95 J= 1, J5
00550000 T15(I) = T(I)
00560000 95 CONTINUE
00570000 100 CONTINUE
00580000 105 IF (T(J5) .LT. FLOW (R, T(J5) ,GT, TH)) GO TO 195
00590000 IF (R2 .NE. NP .AND. T1 .NP. NC1) GO TO 130
00600000 WRITF (LUOUT,350)
00610000 WRITF (LUOUT,330) K1, 1C
00620000 K2 = 0
00636000 C-----CALCULO DE LA SUMA DE FRACCIONES MOL DEL LIQUIDO
00640000 DO 120 I = 1, J5
00650000 115 ADD = 0.0
00660000 DO 120 K = 1, 1C
00670000 ADD = ADD + Y(K,I)
00680000 120 CONTINUE
00690000 WRITF (LUOUT,335) T, T(I), V(I), L(I), (X(K,I), K = 1, 1C)
00700000 WRITF (LUOUT,340) ADD
00710000 WRITF (LUOUT,345) (F(K,I), K = 1, 1C)

```

88  
89  
90

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

```

00172000 125 CONTINUE
00173000 C-----PUNERA DE LA CONVERGE CIA
00174000 130 STD = 0,0
00175000 DD 145 J = 1, JS
00176000 DIFF = T(J) - T(EJ)
00177000 T(J) = T(EJ)
00178000 STD = STD + DIFF * DIFF
00179000 135 CONTINUE
00180000 IF (ATD .LT. TOL) GO TO 140
00181000 IF (PI .EQ. NC) GO TO 137
00182000 WRITE (LROUT,355) KI, TP, TOL
00183000 GO TO 75
00184000 137 WRITE (LROUT,345) NCT
00185000 GO TO 145
00186000 140 WRITE (LROUT,340) KI, STD, TOL
00187000 145 WRITE (LROUT,370) IC
00188000 WRITE (LROUT,375) PH(2), V(1), V(2), V(K), K = 1, IC)
00189000 JS = JS + 1 GO TO 155
00190000 IF (NONS .EQ. 0) GO TO 155
00191000 DO 146 I = 2, JS
00192000 IF (W(I) .LT. .00001) GO TO 150
00193000 WRITE (LROUT,340) I, PH(1), T(1), M(1), V(K), K = 1, IC)
00194000 150 CONTINUE
00195000 155 IF (NOLS .EQ. 0) GO TO 165
00196000 DO 146 I = 2, JS
00197000 IF (H(I) .LT. .00001) GO TO 160
00198000 WRITE (LROUT,345) I, PH(2), T(1), U(1), V(K), K = 1, IC)
00199000 160 CONTINUE
00200000 165 WRITE (LROUT,345) JS, PH(2), T(2), U(2), V(K), K = 1, IC)
00201000 170 WRITE (LROUT,350)
00202000 175 WRITE (LROUT,355) IC, IC
00203000 DD 145 I = 1, JS
00204000 IF (I .EQ. 1) GO TO 140
00205000 WRITE (LROUT,400) I, T(1), V(1), V(K), K = 1, IC)
00206000 IF (I .EQ. JS) GO TO 145
00207000 180 WRITE (LROUT,405) I, T(1), L(1), V(K), K = 1, IC)
00208000 185 CONTINUE
00209000 GO TO 15
00210000 190 WRITE (LROUT,415)
00211000 STOP
00212000 195 WRITE (LROUT,435) T(1), JS, J = 1, KI
00213000 WRITE (LROUT,440)
00214000 STOP
00215000 200 WRITE (LROUT,445) V(1), J, KI
00216000 WRITE (LROUT,450)
00217000 205 WRITE (LROUT,460)
00218000 GO TO 15
00219000 210 WRITE (LROUT,455) L(1), J, KI
00220000 WRITE (LROUT,450)
00221000 GO TO 205
00222000 215 FORMAT (1H17/6X,10H5 T = 09/5P,42HARROSCION Y DESARROSCION DE MU
00223000 ILICHOZDMENTS,9/3X,42HNUMERO MAXIMO DE ITERACIONES PARA EL CALCU
00224000 2LD UP LAS TEMPFRATURAS E ,13,4/315,42HNUMERO MAXIMO DE ITERACIONES
00225000 Y PARA LA RESOLUCION DE LA COLUMNA = 10, 8/314,72HCONSTANTE PARA EL
00226000 A CRITERIO DE CONVERGENCIA RE LAS ITERACIONES DE LA COLUMNA = ,F3,
00227000 55/1M)
00228000 220 FORMAT (110, -3F10,2, -110)

```

TESIS CON  
 FOLIA DE ORIGEN





PAGE 0007

00343000 316CASO TERMINADO)  
00344000 455 FORMAT (117,32)EL FLUJO CALCULADO DE LIQUIDO DE,F15,5,14\* PARA LA  
00345000 (ETAPA,10;10H DE CALIFICACION;13;27M DE LA COLUMNA ES NEGATIVO;)  
00346000 460 FORMAT (107,5)MDEBERA REVISAR LAS ESPECIFICACIONES Y REPETIR LA CO  
00347000 (00104/)  
01.00000 500 END

PROGRAM UNIT HAINI COMPILED

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

100

```

00561000 SUPROUTINE VAPDR(EQUIL,KM)
00562000 REAL L,L4,LA4
00563000 COMMON/BLDCK1/J5,F(100),F(100),M(100),U(100),V(20,100)
00564000 COMMON/AA2/HVCNST(3,2),MLCNST(3,20),IC,L(100)
00565000 COMMON/AA4/Z(20,100)
00566000 COMMON/AA5/Z(20,100),Z(20,100),Z(20,100)
00567000 COMMON/AA6/PL(100),EA*(100)
00568000 N4=N4+1
00569000 DO 14 JA = 1, JS
00570000 ADDX(JA)=0
00571000 ADDY=0
00572000 T=1/(JA)
00573000 DO 5 I = 1, IC
00574000 Y(I,JA)=X(I,JA)*EQUILV(I,J,1)
00575000 ADDX(JA)=ADDX(JA)+X(I,JA)
00576000 ADDY=ADDY+Y(I,JA)
00577000 5 CONTINUE
00578000 IF (KM,GT,2) GO TO 25
00579000 IF (KM,NE,1) LA4(JA)=R(JAY)
00580000 LA(JA)=L(JA)
00581000 L(JA)=L4(JA)+ADDX(JA)
00582000 GO TO 30
00583000 25 LA4(JA)=L4(JA)
00584000 L4(JA)=L(JA)
00585000 SJAA=R(JA)+ADDX(JA)-1/(LX(JA)-CA(JA))
00586000 TJAA=Y(I-SJA)
00587000 IF (TJA,GT,10) TJAA=10
00588000 IF (TJA,LT,-10) TJAA=-10
00589000 L(JA)=L4(JA)+I*(TJAA*(JDX(JA)-1))
00590000 30 DO 10 JB = 1, TC
00591000 Z(J0,JA)=X(JM,JA)+ADDX(JA)
00592000 Z(JM,JA)=Y(J0,JA)+ADDY
00593000 10 CONTINUE
00594000 15 CONTINUE
00595000 V(J3)=L(J0-1)-L(J5)+F*Z5)-(L(J3)-W(J3))
00596000 J4=J4-P
00597000 DO 20 I = JS+1, 100
00598000 V(I)=V(I)+L(I-1)-L(I)+F*(I-U(I))-W(I)
00599000 20 CONTINUE
00600000 V(1)=V(2)-L(1)+F*(1)-W(1)-U(1)
00601000 DO 50 I = 1, JS
00602000 IF (ABS(L(I)-LA(I))/A(I),GT,0.01) GO TO 60
00603000 50 CONTINUE
00604000 W=0
00605000 GO TO 70
00606000 60 IF (KM,EQ,15) N4=0
00607000 70 RETURN
00608000 END

```

PROGRAM UNIT VAPDR COMPILED

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

## A P E N D I C E   I I - 3 . 1

MODIFICACION DEL BUCLE T UTILIZANDO  
EL ALGORITMO DE POWELL.

```

00001000 SCINTERNAL UAL32IT
00002000 SCINTERNAL FILEFAS,FILEF00
00003000 C-----PROGrama PRINCIPAL "APERTURACION/DESCOCCION MULTICOMPONENTES"
00004000 C-----AUTORES: T. SHUKHARA, P.J. JOHANSEN Y J.O. SEADEN
00005000 C-----UNIVERSIDAD DE UTAH, ULTIMA REVISION JUNIO, 1972
00006000 C-----VERSION MODIFICADA POR LUIG HUMBERTO SONT SAMPERIO
00007000 C-----UNIVERSIDAD LA SALLE 1982
00008000 REAL CONST/L
00009000 IITERER PHASE
00010000 EXTERNAL EQU/LK
00011000 DIMENSION T5(100),T15(100),XFECO(20),JP(20),PHF2;AK(20),HV(20),
00012000 IML(2)
00013000 COMMON/BLCKK/JS,YS(100),F(100),T(100),U(100),VE(100),VF(20,100)
00014000 COMMON/AA1/TF(100),JF(100),Q(100)
00015000 COMMON/AA2/HVNST(3,2),MLPHST(3,20);IC,L(100)
00016000 COMMON/AA3/IN,IB,ACCNT(4,30)
00017000 COMMON/AA4/Z(20,100)
00018000 COMMON/AA5/Z(20,100),Y(20,100),ADDX(100),Y(20,100)
00019000 C-----ASIGNACION DE DISPOSITIVOS DE ENTRADA/SALIDA, LIMITE DE ITERACION=
00020000 C-----NES Y TOLERANCIA.
00021000 DATA LMTG,LUOUT,PHB2;AL,5,6,15,0,1/
00022000 DATA ET,FCI,70,0,1,2/
00023000 DATA IML(1),PHF2;SHVAF,SHLTOP/
00024000 READ (LUIN,250) IC,TLN,THT,P,NCI
00025000 IF (NCI.EQ.0) MC=15
00026000 WRITE (LUOUT,210) IML,FCI,TAL
00027000 TT = (THT+LPH)/P
00028000 WRITE (LUOUT,230) P,TIOM,THT,TT
00029000 IF (IC.GT.1.AND.(FCI.EC.20) GO TO 5
00030000 WRITE (LUOUT,410)
00031000 GO TO 190
00032000 C-----LECTURA E IMPRESION DE DATOS DE PROPIEDADES FISICAS
00033000 5 READ (LUIN,250) (COMPST(I,J), I=1,4), J=1,IC)
00034000 READ (LUIN,250) (COMPST(I,J), I=1,3), J=1,IC)
00035000 READ (LUIN,250) (MLCST(I,J), I=1,3), J=1,IC)
00036000 GO TO J=1,IC
00037000 4(J) = EQU(L(1),J)
00038000 HV(J) = HVNST(1,J) + HVNST(2,J)*TT + HVNST(3,J)*L*TT
00039000 ML(J) = MLCNST(1,J) + MLCNST(2,J)*TT + MLCNST(3,J)*L*TT
00040000 10 CONTINUE
00041000 WRITE (LUOUT,240) (J, (COMPST(I,J), I=1,4), 4(J), J=1,IC)
00042000 WRITE (LUOUT,250) (J, (MVCNST(I,J), I=1,3), MV(J), J=1,IC)
00043000 WRITE (LUOUT,250) (J, (MLCNST(I,J), I=1,3), ML(J), J=1,IC)
00044000 C-----LECTURA E IMPRESION DE LOS DATOS DEL CASO
00045000 15 READ (LUIN,255,END=500) MC,JS,NOF,NOVS,NOLB,NOOS,TP
00046000 IF (TP.EQ.0) K=210
00047000 IF (LX.GT.2.AND.JS.EC.100) GO TO 20
00048000 WRITE (LUOUT,420)
00049000 GO TO 190
00050000 C-----INICIALIZA LOS ARREGLOS A CEROS ANTES DE COMENZAR EL CASO
00051000 20 CALL CLEAR
00052000 TOL = TOL*JS
00053000 READ (LUIN,260) TB,TD
00054000 WRITE (LUOUT,265) MC,IC,JS,NOF,NOVS,NOLB,NOOS,TD,TB
00055000 WRITE (LUOUT,270) IC
00056000 SUMNO = 0.0
00057000 DO 35 L=1,1,NOF

```

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

```

00050000 READ (LUH,275) JF,PHASE,TEMP,XFLDW
00051000 READ (LUI,280) XFEED(L2), L2 = 1, IC
00060000 WPHASE = PH(I)
00061000 IF (PHASE .EQ. 2) WPHASE = PH(2)
00062000 WRITE (LUOUT,285) JF, XFLDW, WPHASE, TEMP, XFEED(L2), L2=1,IC
00063000 SUMMF = 0.0
00064000 DO 25 M = 1, IC
00065000 SUMMF = SUMMF + XFEED(M)
00066000 25 CONTINUE
00067000 IF (SUMMF .LT. 0.999 .OR. SUMMF .GT. 1.001) WRITE (LUOUT,425) JF
00068000 IF (JF) = TEMP
00069000 JF(JF) = XFLDW
00070000 JF(JF) = PHASE
00071000 SUMFA = SUMFA + F(JF)
00072000 DO 30 L2 = 1, IC
00073000 XF(L2,JF) = XFEED(L2)
00074000 30 CONTINUE
00075000 C----CALCULO DE ENTALPIA DE LA ALIMENTACION
00076000 HF(JF) = FFECH(PHASE, JF)
00077000 35 CONTINUE
00078000 HRF = 0
00079000 IF (NDVX .EQ. 0) GO TO 45
00080000 WPHASE = PH(I)
00081000 WRITE (LUOUT,290)
00082000 HXK=1
00083000 DO 40 I3 = 1, NDVX
00084000 READ (LUH,295) J3V, RATE
00085000 WRITE (LUOUT,295) J3V, RATE
00086000 IF (ISW .LT. 2 .OR. J3V .GT. (J3+1)) GO TO 190
00087000 W(J3V) = RATE
00088000 40 CONTINUE
00089000 45 IF (NDLS .EQ. 0) GO TO 55
00090000 WPHASE = PH(2)
00091000 IF (HXX .EQ. 0) WRITE (LUOUT,290)
00092000 DO 50 I4 = 1, NDLS
00093000 READ (LUH,290) J4L, RATE
00094000 WRITE (LUOUT,295) J4L, RATE
00095000 IF (ISL .LT. 2 .OR. J4L .GT. (J4+1)) GO TO 190
00096000 W(J4L) = RATE
00097000 50 CONTINUE
00098000 55 IF (NDVS .EQ. 0) GO TO 65
00099000 WRITE (LUOUT, 300)
00100000 DO 60 I5 = 1, NDVS
00101000 READ (LUH,305) J5, OPATF
00102000 WRITE (LUOUT,310) J5, OPATF
00103000 IF (ID .LT. P .OR. J5 .GT. (J8+1)) GO TO 190
00104000 O(J5) = RATE
00105000 60 CONTINUE
00106000 C----CALCULO DE PERFILES TERICIALES DE TEMPERATURA Y FLUJO DE VAPOR
00107000 65 CALL ASUMVT(JP)
00108000 WRITE (LUOUT,315)
00109000 WRITE (LUOUT,320) T1, Y(1), V(1), I= 1, J5)
00110000 WRITE (LUOUT,325) SP
00111000 C----CALCULO DEL PERFIL INICIAL DE FLUJO DE LIQUIDO
00112000 JLI=J5-1
00113000 SUMAN,0
00114000 DO TO T = 1, JLI

```

TESIS CON  
 FALTA DE ORIGEN

PAGE 0003

```

00115000 SUM = SUMF(I)-M(I)-U(I)
00116000 L(I) = V(I)-1+SUM-V(I)
00117000 TS(I) = T(I)
00118000 TO CONTINUE
00119000 L(I) = SUMF(J)+M(J)-U(I)+V(I)
00120000 TS(J) = T(J)
00121000 M = J*(J+1)
00122000 K2 = 0
00123000 K1 = 0
00124000 75 K1 = K1 + 1
00125000 72 K2 = K2 + 1
00126000 C-----CALCULO DE LOS COEFICIENTES DE LA MATRIZ PARA LAS FRACCIONES
00127000 C-----MOL DEL LIQUIDO
00128000 77 DO 80 I = 1, IC
00129000 CALL SFTUPA (I,EQUIB)
00130000 C-----CALCULO DE LA MATRIZ PARA LAS FRACCIONES MOL DEL LIQUIDO.
00131000 CALL TSDIT(I)
00132000 80 CONTINUE
00133000 C-----CALCULO DE FRACCIONES MOL DEL VAPOR, Y PERFILES DE FLUJO
00134000 C-----DE LIQUIDO Y VAPOR.
00135000 CALL VAPRPROCAL(K,K1)
00136000 IF (VH,VF,0) GO TO 77
00137000 DO 110 J=1, JS
00138000 IF (V(I),LT,0.0) GO TO 280
00139000 IF (I(J),LT,0.0) GO TO 210
00140000 110 CONTINUE
00141000 CALL PGMFL (T,ET,JS,M,FST,MIBI,EF,IBC)
00142000 GO TO (105,84),IRC
00143000 65 WRITF (LQUOT,6A5)
00144000 STOP
00145000 105 IF (I(JS),LT,TCM-PP,TSJS)-GT,THI)GO TO 195
00146000 IF (K2,NE,MP,AND,K1,NE,UCI) GO TO 130
00147000 WRITF (LQUOT,350)
00148000 WRITF (LQUOT,350) K1, IC
00149000 K2 = 0
00150000 C-----CALCULO DE LA SUMA DE FRACCIONES MOL DEL LIQUIDO
00151000 DO 125 I = 1, J0
00152000 115 ADD = 0.0
00153000 DO 120 K = -1, IC
00154000 ADD = ADD + X(P,I)
00155000 120 CONTINUE
00156000 WRITF (LQUOT,355) I, T(I), V(I), L(I), (K(K,I), K * S, IC)
00157000 WRITF (LQUOT,360) ADD
00158000 WRITF (LQUOT,365) (T(P,I), K = 1, IC)
00159000 125 CONTINUE
00160000 C-----NUMERO DE LA CONVERGENCIA
00161000 130 STD = 0.0
00162000 DO 145 J = 1, JS
00163000 NIFF = T(J) - TS(J)
00164000 TS(J) = T(J)
00165000 STD = STD + NIFF - DIFF
00166000 135 CONTINUE
00167000 IF (NTO,LT,10L) GO TO 140
00168000 IF (N1,EQ,NCI) GO TO 137
00169000 WRITF (LQUOT,355) K1,FST,10L
00170000 GO TO 75
00171000 137 WRITF (LQUOT,365) NCI

```

144

**TESIS CON  
 FALTA DE ORIGEN**







PAGE 0007

00343000 500 END

PROGRAM UNIT MAIN COMPILED

TESIS CON  
FALTA DE ORIGEN

```

00340000      SUBROUTINE FOB (NV,FF)
00400000      REAL L
00401000      COMMON/BLDCK1/25:1110*F,F(100),W(100),U(100),V(100),WF(20;100)
00402000      COMMON/AA11/F(100),HF(100),G(100)
00403000      COMMON/AA2/HVCHST(3,20),MLPNST(3;20),IC,L(100)
00404000      T1=TF1
00405000      T2=TF2
00406000      T3=1
00407000      T32=2
00408000      FF = (-V(2)+HVL(T2,T2,T2)-F(1)+HF(1)+L(1)+U(1))+HVL(T1,T1,T1)+
00409000      (4*(1+V(1))+HVL(T2,T1,T1)-G(1))**2
00410000      4*V = NV-1
00411000      T1V = T(1V)
00412000      T1VV = T(1VV)
00413000      FF = FF+(-L(NV)+HVL(T1,T1VV,T1VV)-F(NV)+HF(NV)+(L(NV)+G(NV))+
00414000      HVL(T1,T1V,NV)+H(NV)+V(NV))+HVL(T2,T1V,NV)-G(NV))**2
00415000      DO 10 I = 2, NV
00416000      T11=1(11-1)
00417000      T12=1(12)
00418000      T13=1(13)
00419000      T3=1-1
00420000      I=I+1
00421000      FF = FF+(-L(T11)+HVL(T1,T11;T3)-V(T1))+HVL(T2,T11,T3)-F(T1))+H
00422000      (F(T1)+L(T1)+U(T1))+HVL(T1,T2;T3)+V(T1)+G(T1))+HVL(T2,T2;T3)-G(T1))**2
00423000      10 CONTINUE
00424000      RETURN
00425000      END

```

PROGRAM UNIT FOB COMPILED

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

```

00447000 5LPROJTNL POWFL (VV,EP,NV,NW,ESCALE,MAXIT,EF,(BC)
00447000 A)MESTUV VV(DD), MT(NW)
00447000 7BC21
00447000 00MAGC0,1=ESCALE
00447000 SCF06,05=ESCALE
00447000 J3204(NV+1)
00447000 J33=120NV
00447000 K3=+1
00447000 F3CC1
00447000 I3J1
00447000 I3N1
00447000 00 4 I=1,NV
00447000 M3I1 = ESCALE
00447000 00 4 J=1,NV
00447000 M3K1 = 0
00447000 IF (I-J) 4,3,4
00447000 1 M3K1 = ABS TER)
00447000 4 K3K+1
00447000 1 I3EP 21
00447000 13CR4D 22
00447000 CALL F06 (NV,FF)
00447000 F3EEP W 2,4ARS(FF)
00447000 5 I3O(FF)
00447000 F3PFF
00447000 S3M0R
00447000 I3P12
00447000 00 6 I=1,NV
00447000 6 I3P23P+1
00447000 6 M3I(FF)=VV(I)
00447000 T3I(M3N+1)
00447000 I3I3F1
00447000 7 0M3R3NT(I3I3F)
00447000 0ACC=0M3R+SCFR
00447000 0M3C3M3V1 (0M3C,0,1*0M3R1)
00447000 0M3C3M3R1 (0M3C,0,+PACC)
00447000 0M3R3D=0M3C
00447000 00 I3 (70,70,71)I3ChF
00447000 70 0L3C
00447000 00D3L
00447000 F3P3V3FF
00447000 I3S3
00447000 F3R3P3EV
00447000 0ARD1
00447000 4 0D3D-DL
00447000 0L3
00447000 50 M3I3D3N
00447000 00 9 I=1,NV
00447000 VV(I)=VV(I)-00M3T(K)
00447000 9 K3K+1
00447000 CALL F06 (NV,FF)
00447000 M3CC3F3CC+1
00447000 00 I3 (10,11,12,13,14,05), 10
00447000 14 IF (FF-FA) 15,10,20
00447000 16 IF (AS(0)-0M3R) 17,1,10
00447000 17 0M3Ch
00447000 00 I3 8
00447000 18 I3C W 2
    
```

TESIS CON  
 FALTA DE ORIGEN

```

00499000 00 IN 20
00500000 15 FCFF
00501000 DBPU
00502000 00 IN 21
00503000 24 FBFF
00504000 DBDA
00505000 FARFF
00506000 DARD
00507000 21 00 IN (85,23);ISGRAD
00508000 23 DARD;DB-DA
00509000 13=1
00510000 00 IN A
00511000 63 0=0,(DA+DB)-(FA+FB)/(DF+DN))
00512000 13=4
00513000 1F (DA+D)+(DB+D)25,F,FA
00514000 25 13=1
00515000 1F (ARS(D+DB)-DNAX)8,6,26
00516000 26 0=0B;SIGV(DDMAX,DB-DA)
00517000 13=1
00518000 DMAX;DDMAX;DNMAX
00519000 DNMAX;DNMAX;DNMAX
00520000 1F (DNMAX,GE,1,GF+60) DDMAX=1,DE+60
00521000 1F (DNMAX-DMAX) 8,8,27
00522000 27 DD'AY = DMAX
00523000 00 IN A
00524000 13 1F (FF-FA) 28,23,23
00525000 28 FCFF
00526000 DCDP
00527000 29 FBFF
00528000 DBD
00529000 00 IN 30
00530000 12 1F (FF-FA) 2A,28,31
00531000 31 FARFF
00532000 DARD
00533000 00 IN 30
00534000 13 1F (FF-FA) 32,10,10
00535000 32 FARFA
00536000 DARD
00537000 00 IN 29
00538000 71 NLR,
00539000 DDMAX,5,
00540000 FARFF
00541000 DAP=1,
00542000 FBFFHOLD
00543000 DBD,
00544000 DAI
00545000 10 FCFF
00546000 DCD
00547000 30 A=(DA-DC)+(FA-FC)
00548000 B=(DF-DB)+(FB-FC)
00549000 1F (A+B)=(DA-DC)33,33,34
00550000 33 FARFA
00551000 DARD
00552000 FBFF
00553000 DCDP
00554000 00 IN 26
00555000 34 0=0,(A+(DB+DC)+B+(DA+DC))/(A+B)

```

TESIS CON  
 FALLA EN ORIGEN

```

00550000 D1=DR
00557000 F1=FR
00558000 IF (F=FC) 44,44,43
00559000 43 D1=DR
00560000 F1=FR
00561000 44 GO TO (86,86,85).ITDMF
00562000 85 ITDMF=2
00563000 GO TO 85
00564000 86 IF (85*(7-D1)-DACC) 41,41,43
00565000 93 IF (46*(0-D1)-0,03*48*(D1)) 41,41,45
00566000 45 IF (D1-DC)+(DC-0)*-47,46,46
00567000 46 FA=FR
00568000 DA=DR
00569000 DB=DR
00570000 DB=DR
00571000 CU TO 25
00572000 47 IS=2
00573000 IF ((UR-0)*(D-DC)) 48,0,0
00574000 48 IS=3
00575000 GO TO X
00576000 41 FF=FT
00577000 D=DI-DL
00578000 DU=5*NT[(DC-DB)+(DC-0)*+(D1-DB)/(1+0)]
00579000 DU 40 T1,UV
00580000 UV[(T1+V1)*+DB*NT(IDIRN)]
00581000 +T1*(N1)*-DB*NT(IDIRN)
00582000 49 TDIRN=IDIRN+1
00583000 W[(I*JL)=NT(I*JL)]/DF
00584000 J1=J+1,LINE 1
00585000 51 GO TO (55,38),ITONE
00586000 55 IF (FPELV-FF-SUM)*-94,95,95
00587000 95 SUM=FPELV-FF
00588000 J1=J+1,LINE
00589000 94 IF (IDIRN-J) 7,7,84
00590000 84 GO TO (92,53).IND
00591000 92 F*JL= X FF
00592000 IS=6
00593000 I=I+J
00594000 DO 59 T1,UV
00595000 I=I+X+1
00596000 59 W[(I*J)=UV(I)-W(I*J)]
00597000 DO 1,
00598000 GO TO 58
00599000 96 CU TO (112,81).IND
00600000 112 IF (F=FF) 37,37,91
00601000 91 DO 2,+(FP-FF)*2,+FHOLD)/(FP-FF)*2
00602000 IF (W*(P-F*JL-C-SUM)*2*8U)-87,37,37
00603000 87 J=J1+W*1
00604000 IF (I-J) 59,60,61
00605000 60 DO 60 T1,JJ
00606000 K=I+W
00607000 62 W(K)=W(I)
00608000 DO 97 I=J1,UV
00609000 97 W(I)=I*W(I)
00610000 61 IDIRN=IDIRN+W
00611000 ITDMF=3
00612000 K=IDIRN

```

TESIS CON  
FALTA DE ORIGEN

```

00613000 1AP21J
00614000 AAAZ0,
00615000 DD 67 J21,NV
00616000 1AP21P1
00617000 W1(K12VT(I)P)
00618000 IF [AAA+ADS(WT(K)/ER)] 66,67,67
00619000 66 AAA+ADS(WT(K)/ER)
00620000 67 K=K+1
00621000 CDMAC1,
00622000 W1(CV)ESCALE,AAA
00623000 1LTHFNV
00624000 GO IN 7
00625000 37 1AP21J
00626000 AAAZ0,
00627000 PFP=HOLD
00628000 DD 99 J21,NV
00629000 1AP21P1
00630000 VV(I1+VV(I)-WT(I)P)
00631000 IF [AAA+ADS(PA)-BS(IN(I)P)] 98,99,99
00632000 98 AAA+BS(WT(I)P)/ER)
00633000 99 CUMTHUE
00634000 GO IN 55
00635000 38 AAA+AAA*(E+.71)
00636000 GO IN (55,104),END
00637000 53 GO IN (109,88),END
00638000 109 IF [AAA-D.1] 20,20,76
00639000 76 IF [PFP] 35,20,20
00640000 88 INDI
00641000 35 DMMAC0,=8001(ABS[PFP])
00642000 IF [DMMAC,CE,1,0E+00] DMMAC1,0E+60
00643000 15GRAD1
00644000 100 ITRR=TIERC+
00645000 IF (ITRAC=MAX(I)5,5)81
00646000 81 IF [PFP-120,20,110]
00647000 110 PFP=PEEP
00648000 DD 111 IN1,NV
00649000 JJJ=JJJ+1
00650000 111 VV(I)WT(JJJ)
00651000 GO IN 20
00652000 161 JIL1
00653000 PFP=PEEP
00654000 IF [PFP-PEEP] 105,20,104
00655000 104 JILP
00656000 PFP=PEEP
00657000 PFP=PEEP
00658000 105 I=I+1
00659000 DD 113 IN1,NV
00660000 1AP21P1
00661000 K=K+NV
00662000 GO IN (110,115),JIL
00663000 110 1LTHFNV(I)K)
00664000 GO IN 118
00665000 115 WT(I)P)+VV(I)
00666000 VV(I)WT(K)
00667000 113 CUMTHUE
00668000 JILP
00669000 GO IN 92

```

TESIS CON  
 PALA DE ORIGEN

PAGE 0018 POWELL

00670000 106 IF (AAA-0,1) 20,20,107  
00671000 20 EF=FF  
00672000 RETURN  
00673000 107 IN=1  
00674000 GO TO 35  
00675000 END

PROGRAM UNIT POWELL COMPILED

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

## A P E N D I C E   I I - 3 . 2

MODIFICACION DEL BUCLE T UTILIZANDO  
EL ALGORITMO MODIFICADO DE  
BENNET-BROYDEN.

```

00001000 SCNTROL UNLTHET
00002000 SCNTROL FIL#05,FIL#06
00003000 C-----PROGRAMA PRINCIPAL "APROCCION/DEORDONCION MULTICOMPONENTES"
00004000 C-----AUTORES: I. SUTZHUKER, P. J. JOHANSEN Y J.D. READER
00005000 C-----UNIVERSIDAD DE UTAH, ULTIMA REVISION JUNIO, 1972
00006000 C-----VERSION MODIFICADA POR LUIGI HUMBERTO SONTI SAMPERIO
00007000 C-----UNIVERSIDAD LA SALLE 1982
00008000 REAL CONST 1
00009000 TOLERAN PHAS
00010000 EXTERNAL EQUIL
00011000 DIMENSION TSI(100),TYS(100),XFEEED(20),JPE(20),PHI2),AK(20),HVE(20),
00012000 IML(20)
00013000 COMMON/BLDCK1/JS,TE(10),F(100),R(100),UT(100),VE(100),XF(20),100)
00014000 COMMON/AS1/TI(10),LMT(10),J(10),JL(10)
00015000 COMMON/AA2/HVCONST(3,2),MLCONST(3,20),ICL(100)
00016000 COMMON/AA3/TD,TD,KCONST(1,20)
00017000 COMMON/AA4/TI(20,100)
00018000 COMMON/AA5/TI(20,100),ZT(20,100),ADDA(100),Y(20,100)
00019000 C-----ASIGNACION DE DISPOSICIONES DE ENTRADA/SALIDA/LIMITE DE ITERACION
00020000 C-----AES Y TOLERANCIA
00021000 DATA LUIGI,LUNDT,MHBI,AL/5,6,15,017
00022000 DATA PH(1),PH(2)/SHVAP,3MLTD/
00023000 READ (LUIGI,2P0) IC,ILFW,INT,P,NCI
00024000 IF (NCI.EQ.0) NCI=15
00025000 WRITE (LUNDT,2T5) NMT,MC,TAL
00026000 TT = (TMI+TLN)/2
00027000 WRITE (LUNDT,2T5) P,TLDT,MC,TT
00028000 IF (IC.GT.1.AND.ZT.IC.P0) GO TO 5
00029000 WRITE (LUNDT,4T0)
00030000 GO TO 100
00031000 C-----LECTURA E IMPRESION DE DATOS DE PROPIEDADES FISICAS
00032000 5 READ (LUIGI,2P5) (KCONSI(IW,JK), IW=1,4), JK=1,IC)
00033000 READ (LUIGI,2T0) (MVCSI(IW,JK), IW=1,3), JK=1,IC)
00034000 READ (LUIGI,2T0) (MLCSI(IW,JK), IW=1,3), JK=1,IC)
00035000 DO 10 JK=1,IC
00036000 AK(IK) = LOULI(TT,JK)
00037000 MV(JK) = MVCONST(1,JK) + MVHNSI(2,JK)*TT + MVHCSI(3,JK)*TT*TT
00038000 ML(JK) = MLCONST(1,JK) + MLHNSI(2,JK)*TT + MLHCSI(3,JK)*TT*TT
00039000 10 CONTINUE
00040000 WRITE (LUNDT,2T0) (JK,(PCONST(IK,JK),IW=1,4), AK(IK), JK=1,IC)
00041000 WRITE (LUNDT,2T5) (JK,(MVCONST(IK,JK),IW=1,3), MV(IK), JK=1,IC)
00042000 WRITE (LUNDT,2T0) (JK,(MLCONST(IK,JK),IW=1,3), ML(JK), JK=1,IC)
00043000 C-----LECTURA E IMPRESION DE LOS DATOS DEL CASO
00044000 15 READ (LUIGI,2T5,END=500) NC, JS, NDF, NDVB, NULS, NODS, NP
00045000 IF (NP.EQ.0) NP=0
00046000 IF (IS.GT.1.AND.JK.IC.100) GO TO 20
00047000 WRITE (LUNDT,4P0)
00048000 GO TO 100
00049000 C-----EJECUTIVA LNS ARREGLOS A PEROS MILES DE CONFINAR EL CASO
00050000 20 CALL CLEAR
00051000 TOL = TOL+JS
00052000 READ (LUIGI,2T0) TD,TD
00053000 WRITE (LUNDT,2T5) AC,IC,JS,NDF,MHVB,NOL5,NOQ5,TD,TD
00054000 WRITE (LUNDT,2T0) IC
00055000 SUMPH = 0.0
00056000 DO 34 LI = 1, NDF
00057000 READ (LUIGI,2T5) JF,PHAS0,TFMP,FLDU

```

PALM SPRING  
 CALIFORNIA  
 CON  
 GEN

```

00050000 READ (LUIG,2AG) (XFEED(4-2), L2 = 1, IC)
00055000 WPHASE = PH(1)
00060000 IF (PHASE .EQ. 2) WPHASE = PH(2)
00061000 WRITE (LUOUT,295) JF, YFLOW, WPHASE, TEMP, (XFEED(L2), L2=1,IC)
00062000 SUMM = 0.0
00063000 DO 24 M = 1, IC
00064000 SUMM = SUMM + XFEED(M)
00065000 25 CONTINUE
00066000 IF (SUMM .LT. 0.999) GO TO 26
00067000 IF (JF) = 1END
00068000 F(JF) = YFLOW
00069000 JF(JF) = WPHASE
00070000 SUMM = SUMM + F(JF)
00071000 DO 30 L2 = 1, IC
00072000 XF(L2, JF) = XFEED(L2)
00073000 30 CONTINUE
00074000 C-----CALCULO DE ENTALPIA DE ALIMENTACION
00075000 MF(JF) = FLESH (PHASE, JF)
00076000 35 CONTINUE
00077000 KKR = 0
00078000 IF (NDVS .EQ. 0) GO TO 45
00079000 WPHASE = PH(1)
00080000 WRITE (LUOUT,290)
00081000 KKR = 1
00082000 DO 30 L2 = 1, NDVS
00083000 READ (LUIG,290) J5V, VRATE
00084000 WRITE (LUOUT,295) J5V, VRATE, WPHASE
00085000 IF (L2V .LT. 2) OR (J5V .GT. (J5-1)) GO TO 190
00086000 N(J5V) = WRITE
00087000 40 CONTINUE
00088000 45 IF (NDLS .EQ. 0) GO TO 55
00089000 WPHASE = PH(2)
00090000 IF (KKR .EQ. 0) WRITE (LUOUT,290)
00091000 DO 50 L2 = 1, NDLS
00092000 READ (LUIG,290) J5L, PAIF
00093000 WRITE (LUOUT,295) J5L, PAIF, WPHASE
00094000 IF (J5L .LT. 2) OR (J5L .GT. (J5-1)) GO TO 190
00095000 U(J5L) = RATE
00096000 50 CONTINUE
00097000 55 IF (L2VS .EQ. 0) GO TO 65
00098000 WRITE (LUOUT, 300)
00099000 DO 60 I5 = 1, NDVS
00100000 READ (LUIG,305) JO, OPATF
00101000 WRITE (LUOUT,310) JO, OPATF
00102000 IF (JO .LT. 2) OR (JO .GT. (J5-1)) GO TO 190
00103000 O(I5) = ORATF
00104000 60 CONTINUE
00105000 C-----CALCULO DE PERFILES INICIALES DE TEMPERATURA Y FLUJO DE VAPOR
00106000 65 CALL ASUMPT(JP)
00107000 WRITE (LUOUT,315)
00108000 WRITE (LUOUT,320) (I = 1), V(I), (I = 1), J5)
00109000 WRITE (LUOUT,325) KP
00110000 C-----CALCULO DEL PERFIL INICIAL DE FLUJO DE LIQUIDO
00111000 JLI = 1
00112000 SUMM = 0
00113000 DO TO I = 1, JLI
00114000 SUM = SUM + F(I) - (I) - U(I)

```

**TESTIS CON**  
**PALLA DE ORIGEM**

```

00115000      L(I) = V(I+1)+SUM-V(I)
00116000      TS(I) = T(I)
00117000      TSE(I) = T(I)
00118000      70 CONTINUE
00119000      L(J5) = SUM*(J5)-W(J5)-U(J5)-V(I)
00120000      TS(J5) = T(J5)
00121000      TSE(J5) = T(J5)
00122000      M = J5*(J5+3)
00123000      K2 = 0
00124000      K1 = 0
00125000      KM = 0
00126000      75 R1 = K1 + 1
00127000      K2 = K2 + 1
00128000      C-----CALCULO DE LOS COEFICIENTES DE LA MATRIZ PARA LAS FRACCIONES
00129000      C-----MOL DEL LIQUIDO.
00130000      77 DO 80 I = 1, 17
00131000          CALL SPTMA (I,COULK)
00132000      C-----RESUELVE LA MATRIZ PARA LAS FRACCIONES MOL DEL LIQUIDO.
00133000          CALL TRIDI(I)
00134000      80 CONTINUE
00135000      C-----CALCULO DE LAS FRACCIONES MOL DEL VAPOR Y PERFILES DE PRESION
00136000      C-----DE LIQUIDO Y VAPOR.
00137000          CALL VAPOR(ERULK,PI)
00138000          IF (N.NE.0) GO TO 77
00139000          DO 110 J = 1, J5
00140000          IF (V(J) .LT. 0.0) GO TO 200
00141000          IF (L(J) .LT. 0.0) GO TO 210
00142000          110 CONTINUE
00143000          CALL ORDVEN (MUD,TIS,N*01)
00144000          IF (MUD .GE. 1) GO TO 105
00145000          WRITE (LQUOT,485)
00146000          STOP
00147000          105 IF (T(J5) .LT. TGM .OR. T(J5) .GT. TH) GO TO 105
00148000          IF (E2 .NE. 0 .AND. P1 .GT. PC) GO TO 110
00149000          WRITE (LQUOT,350)
00150000          WRITE (LQUOT,310) R1, IF
00151000          K2 = 0
00152000      C-----CALCULO DE LA SUMA DE FRACCIONES MOL DEL LIQUIDO
00153000          DO 125 I = 1, J5
00154000          125 SUM = 0.0
00155000          DO 130 N = 1, IC
00156000          SUM = SUM + V(N,I)
00157000          130 CONTINUE
00158000          WRITE (LQUOT,315) T, T(I), V(I), L(I), (R(K,I), K = 1, IC)
00159000          WRITE (LQUOT,300) SUM
00160000          WRITE (LQUOT,305) (T(I), I)
00161000          125 CONTINUE
00162000      C-----PRUEBA DE LA CONVERGENCIA
00163000          130 S10 = 0.0
00164000          DO 145 J = 1, J5
00165000          DIFF = T(J) - TS(J)
00166000          TSE(J) = T(J)
00167000          S10 = S10 + DIFF * DIFF
00168000          135 CONTINUE
00169000          IF (S10 .LT. TH) GO TO 100
00170000          IF (N1 .GT. N2) GO TO 137
00171000          WRITE (LQUOT,305) N1,S10,TOL

```

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN







```

00356000 SURRUTINE DROYCEH (M,N,T14,NH8)
00360000 REAL L,FAC,HEC,HEA,HEF,THI
00361000 COMMON/BLDCK1/JS,T(10),F(100),WT(100),DEL(100),F(100),XF(20,100)
00362000 DIMENSION FE(100),WT(100,3),XC(100),DEL(100),FA(100),TN(100),K(10)
00363000 I0,T(100),TIS(100)
00364000 H=0.0
00365000 TIME
00366000 10 FE(1)=FER(0.,T(1),T(2),1)
00367000 FE2=FER(0.,T(1)+.001,T(2),1)
00368000 FE3=FER(0.,T(1),T(2)+.001,1)
00369000 WT(1,1)=(FE2-FE(1))/T(1)*.001*T(2)
00370000 WT(1,2)=(FE3-FE(1))/T(1)*.001*T(2)
00371000 WT(1,3)=(FE3-FE(1))/T(1)*.001*T(2)
00372000 JSP=IS-1
00373000 DO 20 K2 = 2, JSP
00374000 K1K2=1
00375000 T1=T(K1)
00376000 T2=T(K2)
00377000 T3=T(K3)
00378000 FE(K2)=FER(T1,T2,T3,K2)
00379000 FE1=FER(T1,001,T2,T3,K2)
00380000 FE2=FER(T1,T2,001,T3,K2)
00381000 FE3=FER(T1,T2,T3,001,K2)
00382000 WT(K2,1)=(FE1-FE(K2))/T(0.001*T(K1))
00383000 WT(K2,2)=(FE2-FE(K2))/T(0.001*T(K2))
00384000 WT(K2,3)=(FE3-FE(K2))/T(0.001*T(K3))
00385000 20 CONTINUE
00386000 T1=T(JSP)
00387000 T2=T(JS)
00388000 FL(J2)=FER(T1,T2,0.,JS)
00389000 FE1=FER(T1,001,T2,0.,JS)
00390000 FE2=FER(T1,T2,001,0.,JS)
00391000 WT(J2,1)=(FE1-FE(J2))/T(0.001*T(JS))
00392000 WT(J2,2)=(FE2-FE(J2))/T(0.001*T(JS))
00393000 DO 30 I = 2, JS
00394000 I=I-1
00395000 WT(I,1)=WT(I,2)/WT(I,0)
00396000 WT(I,2)=WT(I,2)-WT(I,1)*WT(I,1,3)
00397000 30 CONTINUE
00398000 XC(1)=FF(1)
00399000 DO 40 I = 2, JS
00400000 XC(1)=FE(1)+WT(I,1)*XC(I-1)
00401000 40 CONTINUE
00402000 DELT(JS)=XC(JS)/WT(JS,2)
00403000 DO 50 I = JSP, 1, -1
00404000 DELT(I)=XC(I)-WT(I,3)+DELT(I+1)/WT(I,2)
00405000 50 CONTINUE
00406000 COMET
00407000 NEAC=0
00408000 DO 60 I = 1, JS
00409000 FA(1)=FE(I)
00410000 NEAC=HEA*FA(I)+2
00411000 60 CONTINUE
00412000 SK=1
00413000 DO 70 DN I = 1, JS
00414000 TN(I)=WT(I)+SK*DELT(I)
00415000 70 CONTINUE

```

**TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN**

```

00416000      HEMC=6
00417000      DO 40 I = 2, JSP
00418000      K1=I-1
00419000      K3=I+1
00420000      T1=TN(I)
00421000      T2=I(I)
00422000      T3=I(2)
00423000      FE(1)=FER(T1,T2,T3)
00424000      HEMC=HEMC+FE(1)*2
00425000      90 CONTINUE
00426000      FE(1)=FER(0.,TN(1),TN(2),I)
00427000      T1=I(JSP)
00428000      T2=TN(J5)
00429000      FE(J4)=FER(T1,T2,0.,J)
00430000      HEMC=HEMC+FE(1)*2+FE(J5)*2
00431000      NEUR=NR(T1,EC)
00432000      NEUR=NR(T1,EC)
00433000      IF (NEW .LT. NEA) GO TO 100
00434000      IF (PONT .NE. 1) GO TO 10
00435000      CONTINUE
00436000      NUR=NR(T1,NEA)
00437000      SK=(NORT(1+NHU)-1)/(3*U)
00438000      GO TO 70
00439000      100 DO 116 I = 1, J8
00440000      T(1)=I(I)
00441000      116 CONTINUE
00442000      IF (IT.EQ.1) GO TO 130
00443000      DO 120 I = 1, J5
00444000      IF (ABS(I(1)-T5(I)) .GT. 0.1) GO TO 125
00445000      120 CONTINUE
00446000      GO TO 170
00447000      125 IF (IT.EQ. NHAI) GO TO 170
00448000      130 IT=I+1
00449000      DO 135 I = 1, J5
00450000      T5(I)=I(I)
00451000      135 CONTINUE
00452000      FSK=1-84
00453000      SKPTAG
00454000      DO 146 I = 1, J5
00455000      SKPTAG=PT+DEL(T(1)*2
00456000      V(I)=FR(I)-FSK*FR(I)
00457000      V(I)=DEL(I)
00458000      140 CONTINUE
00459000      C=1/FSKPTAG
00460000      IM
00461000      150 V=V(I)/V(I,2)
00462000      P=V(I)*C
00463000      W(I,2)=W(I,2)+V(I)*P
00464000      IF (W(I,2) .EQ. 0) GO TO 160
00465000      IF (I .EQ. J8) GO TO 70
00466000      DO I(1)=C/W(I,2)
00467000      J=I+1
00468000      W(J)=W(J)-W(I,2)*W(I)
00469000      W(J,1)=W(I,1)+W(I,2)*C
00470000      Z=I+1
00471000      V(J)=V(I)-V(W(I,2))
00472000      W(I,3)=W(I,3)+V

```

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

PAGE 0010 BROYDEN

00073000 C=C-DIP  
00074000 I=I+I  
00075000 GO TO 150  
00076000 160 R/DH1  
00077000 170 RETURN  
00078000 END

PROGRAM UNIT BROYDEN COMPILED

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

```

00514000      FUNCTION FER( T1, T2, T3, T3 )
00515000      REAL L
00516000      CUMMUL/DLGR( 1/32, T1(0) ) * F(100) * U(100), U(100), V(100) * F(20, 100)
00517000      CUMMUL/AA1 / F(100) * H(100), U(100)
00518000      CUMMUL/AA2 / HCNST(3, 2) * MLPHST(3, 26), IC, L(100)
00519000      IF ( J2, NF, 1) GO TO 10
00520000      FER = V(2) * HVL( 2, T3, 2 ) * F(1) * H(1) * ( C(1) * U(1) ) * HVL(1, T2, 1) * W(1) * V(1)
00521000      1) * HVL( 2, T2, 1) * O(1)
00522000      GO TO 36
00523000      10 IF (1, L, E, JS) GO TO 20
00524000      FER = L(1, 1) * HVL(1, T1, 1) * F(1) * H(1) * ( L(1, 1) * U(1, 1) ) * HVL(1, T2, 1)
00525000      1) * W(1, 1) * V(1, 1) * HVL( 2, T2, 1) * O(1, 1)
00526000      GO TO 36
00527000      20 IARR = 1
00528000      IPR1 = 1
00529000      FER = L(1, 1) * HVL(1, T1, 1) * V(1) * HVL( 2, T3, 1) * F(1) * H(1, 1) * ( L(1, 1) * U(1, 1)
00530000      1) ) * HVL( 1, T2, 1) * V(1, 1) * W(1, 1) * HVL( 2, T2, 1) * O(1, 1)
00531000      30 RETURN
00532000      END

```

PROGRAM UNIT FER COMPILED

TESIS CON  
 FOLIA DE ORIGEN

## CAPITULO III

## COMPARACION DE AMBOS SIMULADORES

En el capítulo anterior se describieron las modificaciones propuestas para hacer más eficiente el uso de memoria y los ciclos de convergencia del STAB, mencionándose que la evaluación de dichas modificaciones se realizó mediante la resolución de varios problemas con el simulador original (STAB) y el modificado (STAB1). Dado que sería impráctico presentar todos los casos utilizados en dicha evaluación, se decidió seleccionar tres de ellos y exponerlos en el presente capítulo con sus respectivos resultados y perfiles de convergencia obtenidos con el STAB y el STAB1.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

## 3.1.- PROBLEMA # 1

## 3.1.1.- Descripción.

Este problema, el más sencillo de los utilizados, es el propuesto por J. D. Seader <sup>(1)</sup> y consiste básicamente en el siguiente proceso.

Una torre de absorción de 6 platos teóricos, operando a 75 psia, se utilizará para tratar 18,000,00 SCFD (60 °F y 1 atm) de un gas que contiene:

COMPUESTO	Z MOL
CH <sub>4</sub>	83.0
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	8.4
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	4.8
n-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	2.6
n-C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	1.2
	100.0

Como líquido absorbente se utilizarán 300,000 galones/día de un aceite de 40 °API y peso molecular promedio de 161. Las temperaturas de las alimentaciones de gas y de líquido son 60 °F y 90 °F, respectivamente.

Calcule los productos, los perfiles de temperatura, flujo de líquido y de vapor a través de la torre, y las composiciones del líquido y el vapor en cada etapa teórica.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

### 3.1.2.- Datos alimentados.

En el apéndice I-2 del Capítulo # 1 se presentaron las formas de datos alimentadas al programa, en las que cabe mencionar que se utilizaron los datos propuestos por J. D. Swader <sup>(1)</sup>,

Algunos detalles importantes de dichos datos son los siguientes:

- Se supuso que el aceite absorbente tiene las propiedades del n-dodecano.
- Los flujos de líquido y vapor alimentados se convirtieron a las unidades consistentes con el simulador.

18,000,000 SCFD (60 °F y 1 atm) = 1978.45 lb mol/hr.

300,000 galones/día = 533.00 lb mol/hr.

### 3.1.3.- Resultados obtenidos.

Al resolver el problema el STAB convergió en 4 iteraciones, mientras que el STAB1 utilizó 5 iteraciones; sin embargo, como puede verse en la siguiente tabla el tiempo de ejecución del STAB1 fue menor:

Simulador	Tiempo ejecución (miliseg)
STAB	5423
STAB1	4823

Las especificaciones de los productos y condiciones internas, perfiles de flujo de vapor y temperatura por etapa en cada iteración y los perfiles de convergencia obtenidos con ambos simuladores se muestran en las siguientes figuras y tablas:

**TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN**

Descripción	Modelo	Ubicación
*Especificaciones de productos y condiciones internas.	STAB	Tabla # 3.1
		Tabla # 3.2
	STAB1	Tabla # 3.3
		Tabla # 3.4
*Perfiles de temperatura por etapa en cada iteración.	STAB	Tabla # 3.5
	STAB1	Tabla # 3.6
*Perfiles de convergencia de las temperaturas.	STAB vs STAB1	Figura # 3.1
*Perfiles de flujo de vapor por etapa en cada iteración.	STAB	Tabla # 3.7
	STAB1	Tabla # 3.8
*Perfiles de convergencia de los flujos de vapor.	STAB vs STAB1	Figura # 3.2

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

RESULTADOS FINALES  
CORRIENTES DE PRODUCTOS.

CORRIENTE	DE LA	TEMP.	FLUJO	FRACCIONES MOL. DE LOS COMPONENTES 1-5					
	ETAPA	FASE	(GRAD. F)	(LB/MOL/HO)					
SALIDA DE									
GAS	1	VAP	95.32	1889.48	.85951	.03345	.04393	.01339	.00000
					.00009				
SALIDA DE									
LIQUIDO	6	LIC	85.48	621.970	.02863	.01367	.02197	.04203	.03680
					.85674				

TABLA # 3.1.  
ESPECIFICACIONES DE PRODUCTOS  
EJEMPLO # 1. MODELO STAB

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

RESULTADOS FINALES

CONDICIONES INTERNAS

ETAPA	TEMP.	FLUJO DE VAPOR (L/MIN) (HR)	FLUJO DE LIQUIDO (L/MIN) (HR)	FRACCIONES MOL DEL LIQUIDO DE LOS COMPONENTES 1 AL 6				FRACCIONES MOL DEL VAPOR DE LOS COMPONENTES 1 AL 6					
	(CEN. F)			P.P.	P.P.	P.P.	P.P.	P.P.	P.P.	P.P.			
1	95.32		540.07241	.02021 .01813	.01279	.01885	.01988	.00199					
2	96.87	1936.95	547.03850	.02767 .00081	.01294	.02071	.02745	.00440	.00695 .00009	.00526	.00762	.01901	.00182
3	97.42	1940.32							.00361 .00009	.00500	.00807	.02131	.00170
3	97.42		541.00106	.02789 .00008	.01207	.02006	.03007	.00760					
4	96.90	1940.32							.00183 .00009	.00483	.00806	.02228	.00276
4	96.90		545.03740	.02750 .00396	.01288	.02089	.03209	.01205					
5	98.10	1952.92							.00016 .00009	.00460	.00802	.02275	.00410
5	98.10		602.06283	.02770 .00393	.01306	.02116	.03447	.01913					
6	85.48	1959.14							.03740 .00007	.00440	.00800	.02352	.00651

TABLA # 3. 2

ESPECIFICACIONES DE CONDICIONES  
INTERNAS EJEMPLO #1. MODELO STAB

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

RESULTADOS FINALES  
CORRIENTES DE PRODUCTOS.

CORRIENTE	DE LA ETAPA	FASE	TEMP. (GRAD. F)	FLUJO (LB/MOL/HO)	FRACCIONES MOL DE LOS COMPONENTES-1 AL-6				
SALIDA DE GAS	1	VAP	95.32	1009.47	.05950	.00365	.04393	.01339	.00000
					.00009				
SALIDA DE LIQUIDO	6	LIQ	85.48	621.983	.02883	.01367	.02197	.04204	.03604
					.05671				

TABLA # 3.3.

ESPECIFICACIONES DE PRODUCTOS

EJEMPLO #1- MODELO STAB1

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

RESULTADOS FINALES

CONDICIONES INTERNAS

ETAPA	TEMP. (GRAD. F)	FLUJO DE VAPOR (LB/MOL/HR)	FLUJO DE LIQUIDO (LB/MOL/HR)	FRACCIONES MOL DEL LIQUIDO DE LOS COMPONENTES 1 AL 6				FRACCIONES MOL DEL VAPOR DE LOS COMPONENTES 1 AL 6					
1	95.32		540.47375	.02627	.01279	.01886	.01967	.00190					
				.01822									
2	96.88	1736.94						.00699	.00526	.00763	.01981	.00192	
								.00009					
3	98.88		547.84778	.02760	.01295	.02072	.02748	.00447					
				.00673									
4	97.43	1948.32						.00371	.00591	.00400	.02132	.00178	
								.00009					
5	97.43		541.88295	.02751	.01287	.02086	.03053	.00768					
				.00061									
6	98.90	1948.33						.00198	.00486	.00489	.02226	.00276	
								.00009					
7	98.90		545.88795	.02751	.01289	.02091	.03216	.01208					
				.00457									
8	98.10	1952.73						.00632	.00470	.00802	.02279	.00410	
								.00009					
9	98.10		602.64100	.02779	.01367	.02117	.03653	.01918					
				.00038									
10	95.00	1959.18						.02758	.00491	.00400	.02393	.00431	
								.00007					

TABLA # 3. 4.

ESPECIFICACIONES DE CONDICIONES  
INTERNAS EJEMPLO # 1. MODELO STAB1

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

Iteración (j) Etapa (i)	T (°F) i,j				
	0	1	2	3	4
1	80.00	101.04	94.81	95.35	95.32
2	94.00	103.74	96.03	96.94	96.87
3	108.00	101.56	96.54	97.51	97.42
4	122.00	96.08	96.30	96.98	96.90
5	136.00	88.20	94.03	94.14	94.10
6	150.00	77.19	85.95	85.46	85.48
* ET J	160.29	31.74	3.37	0.33	0

Tabla # 3.5.- Perfiles de temperatura por etapa en cada iteración del problema # 1. Simulador STAB

Iteración(j) Etapa (i)	T (°F) i,j					
	0	1	2	3	4	5
1	80.00	101.69	94.57	95.41	95.32	95.32
2	94.00	105.08	95.66	97.05	96.87	96.88
3	108.00	103.46	96.17	97.64	97.41	97.43
4	122.00	98.01	96.07	97.09	96.89	96.90
5	136.00	89.63	94.08	94.18	94.09	94.10
6	150.00	77.90	86.34	85.42	85.48	85.48
* ET J	160.29	33.76	4.94	0.80	0.05	0

Tabla # 3.6.- Perfiles de temperatura por etapa en cada iteración del problema # 1. Simulador STAB1

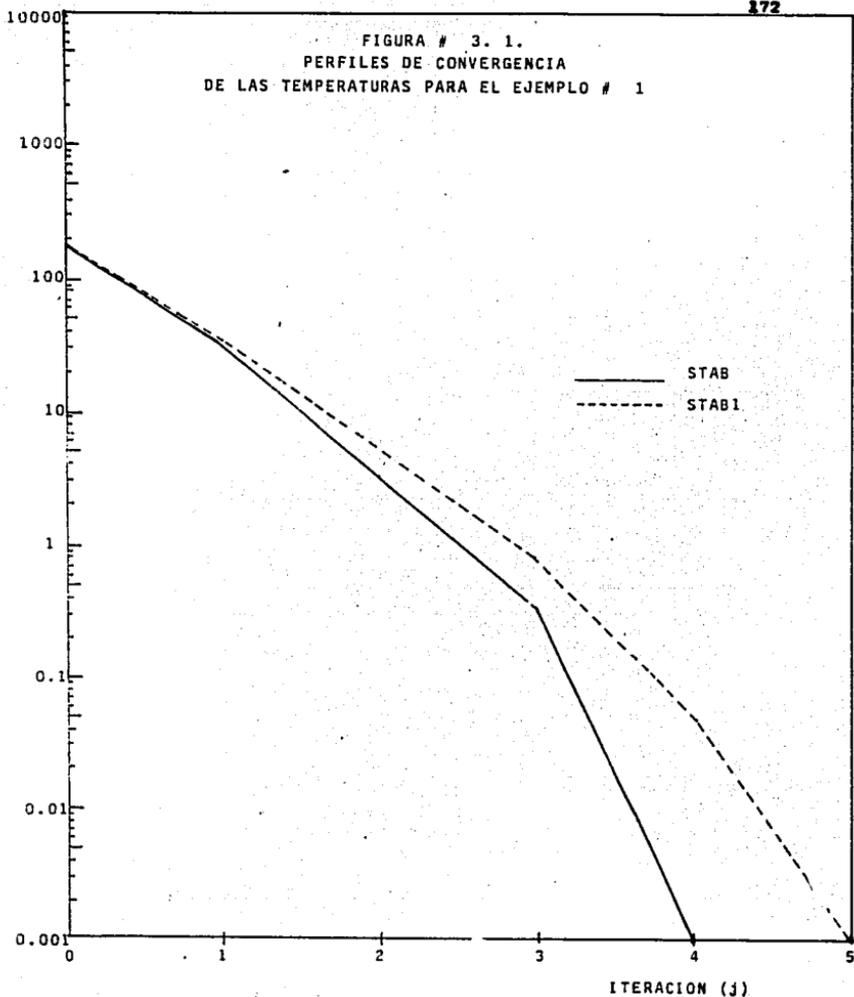
$$ET = \sum_{j=1}^n (T_{i,F} - T_{i,j})^2$$

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

ETJ

172

FIGURA # 3. 1.  
PERFILES DE CONVERGENCIA  
DE LAS TEMPERATURAS PARA EL EJEMPLO # 1



TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

Iteración(J) etapa(i)	V (lb mol/hr) i,j				
	0	1	2	3	4
1	1978.45	1926.41	1889.03	1889.53	1889.48
2	1978.45	1996.80	1934.49	1937.06	1936.95
3	1978.45	2013.72	1940.19	1944.57	1944.32
4	1978.45	2013.44	1943.45	1948.70	1948.32
5	1978.45	2003.67	1947.85	1952.74	1952.32
6	1978.45	1990.70	1956.28	1959.47	1959.14
* EV J	240.17	314.21	19.24	1.54	0

Tabla # 3.7.- Perfiles de flujo de vapor por etapa en cada iteración del problema # 1. Simulador STAB

Iteración(J) etapa(i)	V (lb mol/hr) i,j					
	0	1	2	3	4	5
1	1978.45	1920.22	1885.48	1889.73	1889.51	1889.47
2	1978.45	1997.24	1929.36	1937.54	1936.98	1936.94
3	1978.45	2016.58	1934.06	1945.34	1944.34	1944.32
4	1978.45	2018.30	1937.17	1949.66	1948.35	1948.33
5	1978.45	2008.54	1942.15	1953.71	1952.32	1952.33
6	1978.45	1993.53	1951.99	1960.20	1959.14	1945.16
* EV J	240.15	323.86	50.34	5.63	0.13	0

Tabla # 3.8.- Perfiles de flujo de vapor por etapa en cada iteración del problema # 1. Simulador STAB1

$$* EV = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^2 (V_{i,F} - V_{i,J})^2$$

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN



## 3.2.- PROBLEMA # 2.

## 3.2.1.- Descripción.

En un cierto proceso se requiere tratar una corriente de gas cuya composición es:

Componente	V N+1,i (lb mol/hr)
CO	14.08154
N <sub>2</sub>	5.45767
CH <sub>4</sub>	2655.82450
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	199.85249
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	83.19560
i-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	19.08945
n-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	10.94352
i-C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	3.46664
n-C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	1.51297
C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>	0.43565
C <sub>7</sub> H <sub>16</sub>	0.24159
C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	0.05973
C <sub>9</sub> H <sub>20</sub>	0.00086
C <sub>10</sub> H <sub>22</sub>	0.00042
	2994.16259

utilizando como medio absorbente un liquido con la siguiente composición:

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

Componente	$i$ (lb mol/hr) $o, i$
C H	0.04345
3 B	
i-C H	0.01889
4 10	
n-C H	0.03778
4 10	
i-C H	0.20024
5 12	
n-C H	0.18324
5 12	
C H	4.47708
6 14	
C H	17.17535
7 16	
C H	54.53534
8 18	
C H	50.49841
9 20	
C H	61.73645
10 22	
	188.90630

Las temperaturas de entrada del gas y del líquido son  $0^{\circ}\text{F}$  y  $2.9^{\circ}\text{F}$  respectivamente.

Cúales serán las especificaciones de los productos, así como los perfiles de flujo, temperatura y composición en el interior de la torre, si se utiliza en una torre de 8 etapas teóricas operando a 800 psia?

### 3.2.2.- Datos alimentados.

En la Tabla # 3.9 se muestra el listado de los datos alimentados al programa, en los que cabe mencionar que los coeficientes de los polinomios para el cálculo de las propiedades termodinámicas fueron obtenidos a partir de los datos presentados por Holland (17).

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

## 3.2.3.- Resultados obtenidos.

Ambos simuladores convergieron en 7 iteraciones de la columna; sin embargo, como puede notarse en la siguiente tabla, el STAB1 consumió menor tiempo.

Simulador	Tiempo ejecución (miliseg)
STAB	19251
STAB1	17769

Las especificaciones de los productos y condiciones internas, perfiles de flujo de vapor y temperatura por etapa en cada iteración y los perfiles de convergencia obtenidos con ambos simuladores se muestran en las siguientes figuras y tablas:

Descripción	Modelo	Ubicación
*Especificaciones de productos y condiciones internas.	STAB	Tabla # 3.10
		Tabla # 3.11
	STAB1	Tabla # 3.12
		Tabla # 3.13
*Perfiles de temperatura por etapa en cada iteración.	STAB	Tabla # 3.14
	STAB1	Tabla # 3.15
*Perfiles de convergencia de las temperaturas.	STAB vs STAB1	Figura # 3.3
*Perfiles de flujo de vapor por etapa en cada iteración.	STAB	Tabla # 3.16
	STAB1	Tabla # 3.17
*Perfiles de convergencia de los flujos de vapor.	STAB vs STAB1	Figura # 3.4

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

1	14	-25.00	40.00	800.00	15
2	.5575E+00	.6034E-02		.1793E+04	-.1927E-07
3	.1565E+02	.8805E-01		.6595E+03	.2140E+05
4	.2473E+01	.1379E-01		.3893E+04	.6562E-07
5	.4888E+02	.4521E-02		.2367E+04	.8479E-07
6	.1543E+00	.1674E-02		.8719E+05	-.3015E-07
7	.7102E+01	.0294E-03		.8805E-05	-.1855E-07
8	.4868E+01	.6165E-03		.3751E+05	-.1504E-07
9	.2381E+01	.2964E-03		.1792E+05	.0488E-08
10	.1683E+01	.2301E-03		.1512E-04	.6705E-08
11	.6432E-02	.9138E-03		.6081E+06	.2399E-08
12	.2574E-02	.3703E-04		.2611E+06	.1202E-08
13	.1128E-02	.1594E-04		.1122E+06	.6033E-09
14	.5302E+01	.7404E-03		.5473E+07	.1064E-09
15	.7613E-03	.3484E-03		.2401E-07	.1382E-09
16	.1502E+05	.0462E+01		.5420E-03	
17	.6497E+04	.0815E+01		.1626E+02	
18	.0250E+04	.0221E+01		.3620E+02	
19	.1328E+05	.1160E+02		.6317E+02	
20	.1742E+05	.1597E+02		.1044E+01	
21	.2071E+05	.2084E+02		.1648E+01	
22	.2275E+05	.2123E+02		.1630E+01	
23	.2604E+05	.2507E+02		.2265E+01	
24	.2877E+05	.2570E+02		.2100E+01	
25	.4730E+05	.0852E+02		.1016E+00	
26	.3274E+05	.3577E+02		.3235E+01	
27	.6164E+05	.4053E+02		.5181E+01	
28	.4222E+05	.4651E+02		.6020E+01	
29	.0560E+05	.5163E+02		.7008E+01	
30	.8037E+04	.1420E+02		.1540E+02	
31	.5809E+04	.1061E+02		.2095E+02	
32	.6558E+04	.1584E+02		.3524E+02	
33	.7882E+04	.1849E+02		.7346E+02	
34	.9746E+04	.2583E+02		.1409E+01	
35	.1152E+05	.3138E+02		.1702E+01	
36	.1286E+05	.3150E+02		.1396E+01	
37	.1624E+05	.3895E+02		.1848E+01	
38	.1654E+05	.3833E+02		.1614E+01	
39	.1993E+05	.4656E+02		.1702E+01	
40	.1607E+05	.5054E+02		.3215E+01	
41	.1727E+05	.5573E+02		.3914E+01	
42	.2107E+05	.6168E+02		.3822E+01	
43	.2227E+05	.6016E+02		.4644E+01	
44	1	0	2	0	0
45	15.00	35.00			
46	1	2	2.00	100.00	
47	.0000	.0000	.0000	.0000	.00023
48	.0001	.0020	.0010	.0007	.02370
49	.0002	.2064	.2637	.3241	
50			1.00	2044.16	
51	.0040	.0012	.0000	.00675	.00770
52	.0043	.00365	.0016	.05091	.00819
53	.0088	.0081	.0008	.03082	

TABLA # 3.9.

LISTADO DE DATOS ALIMENTADOS AL EJEMPLO # 2

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

RESULTADOS FINALES

CORRIENTES DE PRODUCTOS.

CORRIENTE	DE LA ETAPA	FASE	TEMP. (GRAD. F)	FLUJO (L/MOL/HR)	FRACCIONES MOL DE LOS COMPONENTES 1 AL 14									
SALIDA DE GAS	1	VAP	41.89	2690.03	.00403	.00201	.92001	.05465	.00005					
					.00025	.00003	.00002	.00003	.00016					
					.00024	.00034	.00010	.00009						
SALIDA DE LIQUIDO	8	LID	21.62	493.025	.00650	.00010	.32207	.10725	.11510					
					.03768	.02210	.00730	.00351	.00916					
					.03402	.10093	.10172	.12065						

TABLA # 3. 10.

ESPECIFICACIONES DE PRODUCTOS

EJEMPLO #2. MODELO STAR

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

RESULTADOS FINALES

CONDICIONES INTERNAS

ETAPA (GRAD. F)	FLUJO DE VAPOR (LBMOL/HR)	FLUJO DE LIQUIDO (LBMOL/HR)	FRACCIONES MOL DEL LIQUIDO DE LOS COMPONENTES 1 AL 14				FRACCIONES MOL DEL VAPOR DE LOS COMPONENTES 1 AL 14				
1	41.09	377.13114	.00489	.00010	.24039	.07589	.04106				
			.00220	.00036	.00062	.00058	.01378				
			.05270	.14709	.15664	.18900					
2	43.97	2828.27				.00439	.00192	.91726	.00075	.01610	
						.00049	.00006	.00002	.00003	.00016	
						.00025	.00034	.00015	.00009		
2	43.97	336.44045	.00513	.00009	.24023	.08206	.05700				
			.00411	.00067	.00060	.00054	.01336				
			.05120	.16246	.15039	.18383					
3	43.21	2837.40				.00443	.00191	.91830	.00153	.01607	
						.00024	.00033	.00014	.00008		
3	43.21	343.96124	.00521	.00009	.24046	.08370	.06548				
			.00613	.00112	.00054	.00050	.01301				
			.05000	.15885	.14711	.17486					
4	41.26	2845.10				.00448	.00191	.91232	.00178	.01120	
						.00027	.00015	.00002	.00002	.00014	
						.00023	.00031	.00013	.00008		
4	41.26	342.39269	.00531	.00009	.24308	.08560	.07152				
			.00886	.00183	.00057	.00048	.01262				
			.04870	.15491	.14355	.17555					
5	38.61	2853.52				.00445	.00190	.91122	.00208	.01609	
						.00127	.00024	.00002	.00002	.00013	
						.00021	.00029	.00013	.00008		
5	38.61	343.31018	.00545	.00009	.24086	.08617	.07730				
			.01183	.00303	.00062	.00047	.01218				
			.04788	.14499	.13009	.17615					
6	35.15	2866.45				.00448	.00190	.90931	.00250	.01403	
						.00168	.00040	.00003	.00002	.00012	
						.00019	.00027	.00011	.00007		
6	35.15	379.78862	.00545	.00010	.24194	.09172	.08432				
			.01566	.00526	.00087	.00054	.01147				
			.04478	.14308	.13202	.16255					
7	30.20	2888.84				.00451	.00189	.90641	.00311	.02029	
						.00229	.00071	.00007	.00006	.00010	
						.00016	.00023	.00010	.00006		
7	30.20	410.88300	.00546	.00010	.24084	.09711	.09483				
			.02267	.00492	.00145	.00043	.01044				
			.04104	.13183	.12259	.15014					
8	21.62	2911.22				.00456	.00187	.90102	.00418	.02245	
						.00342	.00141	.00023	.00010	.00008	
						.00012	.00017	.00007	.00006		

TABLA 3.11  
ESPECIFICACIONES DE CONDICIONES INTERNAS  
EJEMPLO # 2. MODELO STAB

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

RESULTADOS FINALES

CONCENTRACIONES DE PRODUCTOS.

CORRIENTE	DE LA ETAPA	FASE	TEMP. (GRAD. F)	FLUJO (LARG./HR)	FRACCIONES MOL DE LOS COMPONENTES 1 AL 14.					
SALIDA DE GAS	I	VAP	41.13	2649.65	.00003	.00201	.92820	.05464	.00984	
					.00025	.00003	.00002	.00003	.00016	
					.00024	.00034	.00014	.00009		
SALIDA DE LIGUINO	A	LIC	21.65	493.218	.00655	.00010	.32267	.10719	.11508	
					.03759	.02206	.00731	.00330	.00913	
					.03397	.10874	.10155	.12464		

TABLA # 3. 12

ESPECIFICACIONES DE PRODUCTOS

EJEMPLO # 2. MODELO STAB I

TESIS CON  
 TALLA DE ORIGEN

RESULTADOS FINALES  
CONDICIONES INTERNAS

ETAPA	TEMP. (GRAD. F)	FLUJO DE VAPOR (LBM/L.HR)	FLUJO DE LIQUIDO (LBM/L.HR)	FRACCIONES MOL. DEL LIQUIDO DE LOS COMPONENTES 1 AL 14				FRACCIONES MOL. DEL VAPOR DE LOS COMPONENTES 1 AL 14								
1	41.13		397.23697	.00483	.00010	.29835	.07583	.04098								
				.00218	.00036	.00042	.00058	.01376								
				.05263	.16689	.15444	.18677									
2	44.02	2827.28							.00439	.00192	.91735	.06078	.01408			
									.00048	.00006	.00002	.00003	.00016			
									.00025	.00034	.00015	.00004				
2	44.02		316.54132	.00513	.00009	.29015	.08200	.05688								
				.00409	.00066	.00060	.00056	.01334								
				.05113	.16228	.15018	.18358									
3	43.27	2837.28							.00443	.00191	.91637	.06152	.01406			
									.00071	.00009	.00002	.00003	.00015			
									.00024	.00033	.00014	.00002				
3	43.27		344.14893	.00521	.00009	.29040	.08364	.06537								
				.00609	.00111	.00058	.00050	.01248								
				.04991	.15854	.14643	.17952									
4	41.31	2848.89							.00444	.00191	.91274	.06178	.01319			
									.00097	.00015	.00002	.00002	.00014			
									.00025	.00031	.00013	.00008				
4	41.31		342.64475	.00531	.00009	.29304	.08556	.07144								
				.00841	.00181	.00057	.00047	.01259								
				.04858	.15454	.14321	.17513									
5	38.44	2833.43							.00445	.00190	.91121	.06268	.01404			
									.00127	.00024	.00002	.00002	.00013			
									.00021	.00029	.00013	.00007				
5	38.44		343.76654	.00545	.00009	.29689	.08819	.07729								
				.01134	.00302	.00062	.00047	.01211								
				.04695	.14964	.13877	.16975									
6	35.16	2844.43							.00446	.00190	.90991	.06250	.01403			
									.00167	.00040	.00003	.00002	.00012			
									.00019	.00027	.00011	.00007				
6	35.16		340.05566	.00566	.00010	.30206	.09179	.08441								
				.01589	.00529	.00046	.00053	.01145								
				.04473	.14240	.13265	.16234									
7	30.18	2880.40							.00451	.00189	.90650	.06312	.02030			
									.00229	.00071	.00007	.00004	.00016			
									.00016	.00023	.00010	.00006				
7	30.18		449.92493	.00597	.00010	.30460	.09721	.09497								
				.02244	.00092	.00145	.00043	.01046								
				.04116	.13203	.12276	.15037									
8	21.03	2910.87							.00456	.00187	.90134	.06416	.02245			
									.00342	.00141	.00023	.00016	.00008			
									.00012	.00017	.00007	.00004				

TABLA # 3. 13  
ESPECIFICACIONES DE CONDICIONES INTERNAS  
LJEMPILO # 2. MODELO STABI

TESIS CON  
FALTA DE ORIGEN

188

Iteración(J) Etapas(i)	T (°F) i,j							
	0	1	2	3	4	5	6	7
1	35.00	25.60	40.31	41.60	41.18	41.02	41.04	41.09
2	32.14	23.36	43.20	45.44	44.50	44.01	43.93	43.97
3	29.29	19.33	41.22	45.02	44.08	43.38	43.19	43.21
4	26.43	15.67	37.58	42.94	42.34	41.57	41.28	41.26
5	23.57	12.47	33.12	39.73	39.73	39.03	38.69	38.61
6	20.71	9.49	27.96	35.30	36.04	35.59	35.26	35.15
7	17.86	6.43	21.72	29.05	30.53	30.49	30.29	30.20
8	15.00	2.93	13.24	19.16	21.06	21.52	21.60	21.62
* ET J	95.11	179.83	36.76	10.25	5.47	1.84	0.43	0

Tabla # 3.14.- Perfiles de temperatura por etapa en cada iteración del problema # 2.

Simulador STAB.

$$ET = \sum_{j=1}^n (T_{i,F} - T_{i,j})^2$$

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

Iteración(j)	T (°F)							
	i,j							
Etapas(i)	1	2	3	4	5	6	7	
1	35.00	45.60	38.89	41.89	41.27	41.11	41.11	41.13
2	32.14	51.87	40.42	44.99	44.39	44.04	44.00	44.02
3	29.29	52.29	39.68	43.91	43.83	43.35	43.26	43.27
4	26.43	50.22	38.36	41.48	41.96	41.45	41.31	41.31
5	23.57	46.67	36.51	38.43	39.25	38.83	38.67	38.64
6	20.71	41.75	33.80	34.75	35.63	35.34	35.19	35.16
7	17.86	34.84	29.47	29.77	30.47	30.32	30.21	30.18
8	15.00	23.81	21.43	21.39	21.77	21.73	21.67	21.65
*								
ET <sub>j</sub>	95.36	51.69	16.80	3.83	3.21	0.85	0.16	0

Tabla # 3.15 .- Perfiles de temperatura por etapa en cada iteración del problema # 2.

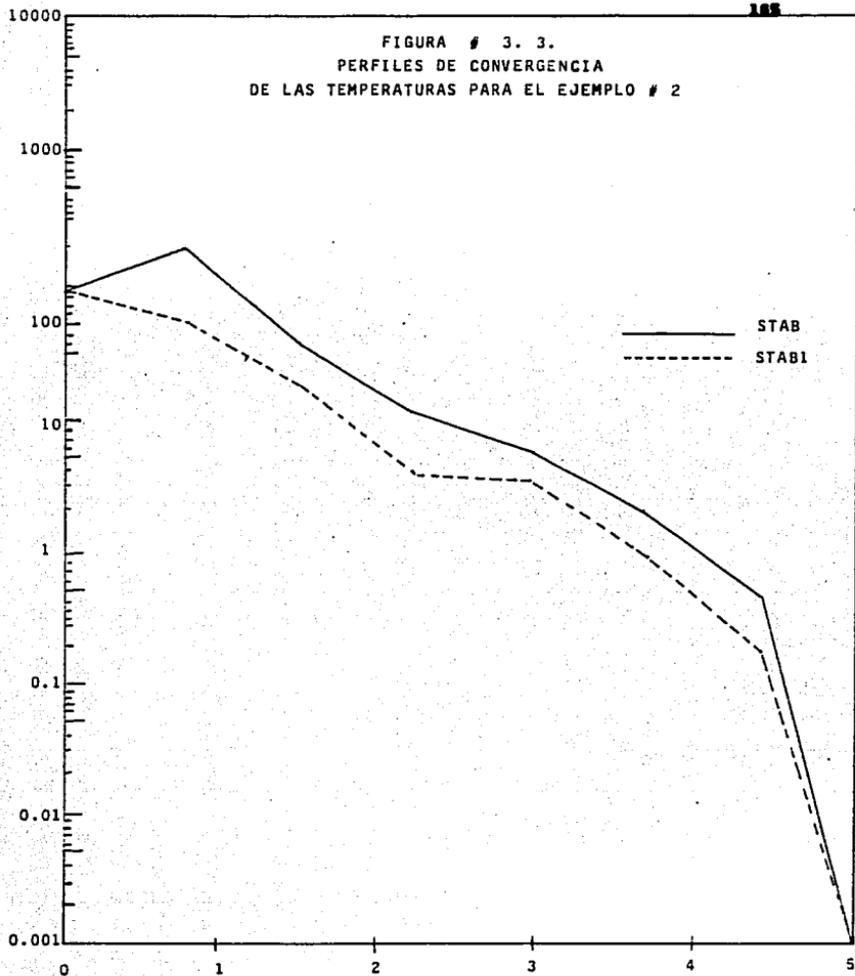
Simulador STAB1.

$$*ET = \sum_j (T_{i,F} - T_{i,j})^2$$

ETJ

185

FIGURA # 3. 3.  
PERFILES DE CONVERGENCIA  
DE LAS TEMPERATURAS PARA EL EJEMPLO # 2



ITERACION 111

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

Iteración(j)	V (lb mol/hr)								
	0	1	2	3	4	5	6	7	
Etapa(i)									
1	2994.16	2855.93	2747.82	2705.11	2693.81	2691.21	2690.44	2690.05	
2	2994.16	2947.46	2876.77	2837.81	2828.69	2827.99	2828.26	2828.27	
3	2994.16	2959.51	2895.41	2850.67	2838.29	2836.99	2837.41	2837.58	
4	2994.16	2965.68	2908.39	2861.53	2846.44	2844.31	2844.76	2845.10	
5	2994.16	2970.76	2920.24	2873.75	2856.32	2852.96	2853.12	2853.52	
6	2994.16	2975.81	2932.39	2888.52	2869.47	2864.62	2864.17	2864.45	
7	2994.16	2981.31	2946.43	2908.03	2888.68	2882.36	2880.95	2880.84	
8	2994.16	2987.82	2965.30	2937.82	2921.43	2914.50	2912.03	2911.22	
* EV J	1242.25	933.25	481.72	152.21	32.10	8.35	2.51	0	

Tabla # 3.16.--Perfiles de flujo de vap por etapa en cada iteración del problema # 2.

Simulador STAB.

$$EV = \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^N (V_{i,F} - V_{i,J})^2$$

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

Iteración(j)	V <sub>i,j</sub> (lb mol/hr)							
	0	1	2	3	4	5	6	7
1	2994.16	2655.54	2701.83	2687.25	2688.13	2689.19	2689.59	2689.65
2	2994.16	2794.63	2836.06	2828.40	2825.65	2827.11	2827.81	2827.98
3	2994.16	2812.92	2840.07	2840.96	2834.88	2836.16	2837.02	2837.28
4	2994.16	2826.84	2843.95	2849.94	2843.02	2843.73	2844.56	2844.89
5	2994.16	2840.79	2850.44	2858.42	2852.34	2852.42	2853.09	2853.43
6	2994.16	2857.04	2860.50	2868.56	2864.07	2863.72	2864.16	2864.45
7	2994.16	2878.68	2877.14	2883.65	2880.86	2880.37	2880.59	2880.80
8	2994.16	2913.51	2908.00	2912.13	2910.85	2910.49	2910.56	2910.67
* EV <sub>j</sub>	1244.13	134.88	37.06	24.96	9.83	5.96	1.77	0

Tabla # 3.17.- Perfiles de flujo de vapor por etapa en cada iteración del problema # 2.

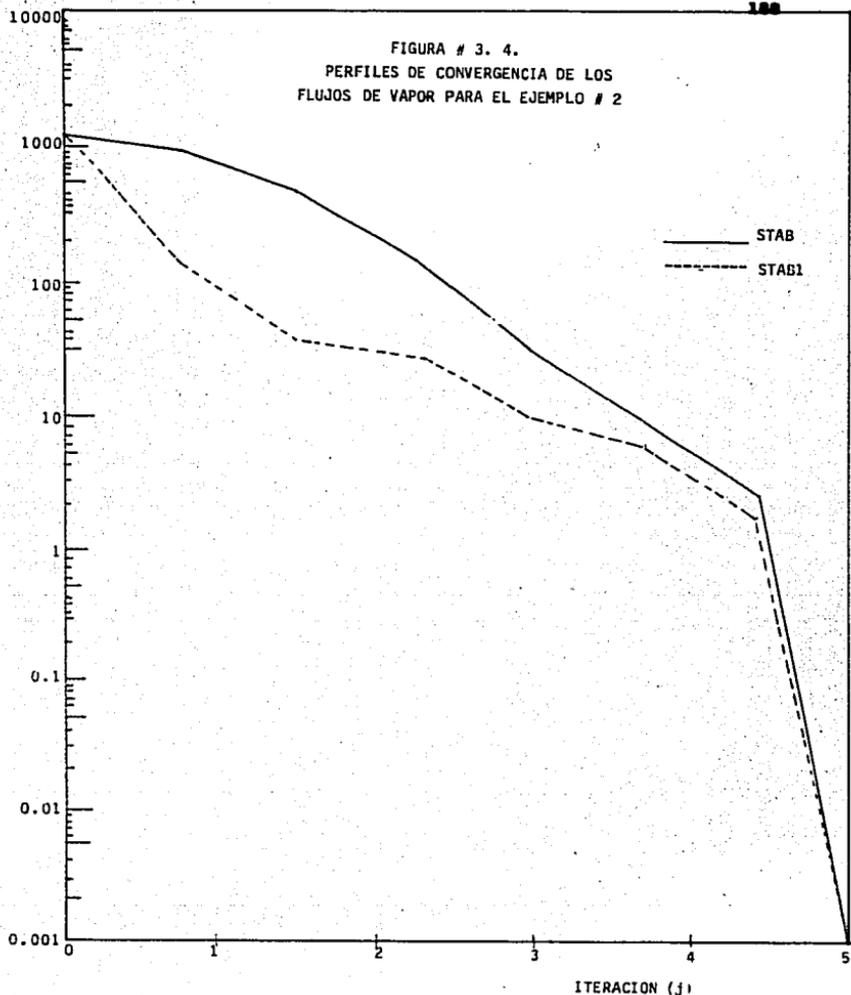
Simulador STAB1.

$$EV_j = \sum_{i=1}^n (V_{i,F} - V_{i,j})^2$$

EVJ

100

FIGURA # 3. 4.  
PERFILES DE CONVERGENCIA DE LOS  
FLUJOS DE VAPOR PARA EL EJEMPLO # 2



TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

## 3.3. - PROBLEMA # 3 .

## 3.3.1.- Descripción

En este caso, se desea saber cual será el efecto de usar un torre de 20 etapas teóricas para el proceso descrito en el problema # 2.

## 3.3.2.- Datos alimentados.

En la tabla # 3.18 se muestra el listado de los datos alimentados al programa, como puede notarse dichos datos son idénticos a los del problema # 2 (tabla # 3.9), a excepción del renglón 44, en el cual se especifica el número de etapas teóricas igual a 20.

## 3.3.3.- Resultados obtenidos.

Ambos simuladores convergieron; sin embargo, como puede notarse en la siguiente tabla, el STAB1 requirió menor número de iteraciones y tiempo de ejecución.

Simulador	Tiempo ejecución (miliseg)	No.Iteraciones
STAB	63819	13
STAB1	47611	11

Las especificaciones de los productos y condiciones internas, perfiles de flujo de vapor y temperatura por etapa en cada iteración y los perfiles de convergencia obtenidos con ambos simuladores se muestran en las siguientes figuras y tablas:

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

Descripción	Modelo	Ubicación
*Especificaciones de productos y condiciones internas.	STAB	Tabla # 3.19
		Tabla # 3.20
	STAB1	Tabla # 3.21
		Tabla # 3.22
*Perfiles de temperatura por etapa en cada iteración.	STAB	Tabla # 3.23
	STAB1	Tabla # 3.24
*Perfiles de convergencia de las temperaturas.	STAB vs STAB1	Figura # 3.5
*Perfiles de flujo de vapor por etapa en cada iteración.		
	STAB	Tabla # 3.25
	STAB1	Tabla # 3.26
*Perfiles de convergencia de los flujos de vapor.	STAB vs STAB1	Figura # 3.6

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN



RESULTADOS FINALES  
CORRIENTES DE PRODUCTOS.

CORRIENTE	DE LA	TEMP.	FLUJO	FRACCIONES-MOL. DE LOS COMPONENTES 1-6-14					
ESTAPA	ESTAPA	(GRAD. P)	(L/MOL/HO)						
42	42		PC						
SALIDA DE GAS	VAC	42.61	2684.55	.00402	.00201	.02014	.05439	.00932	
				.00066	.00001	.00003	.00003	.00010	
				.00025	.00035	.00015	.00004		
SALIDA DE LIQUIDO	20 LIT	21.01	498.317	.00640	.00010	.32378	.10803	.11681	
				.03801	.02194	.00723	.00325	.00901	
				.03350	.10750	.10049	.12336		

TABLA # 3. 19  
ESPECIFICACIONES DE PRODUCTOS  
EJEMPLO # 3. MODELO STAB

TESIS CON  
FALLA DE CUBIEN

RESULTADOS FINALES  
CONDICIONES INTERNAS

ETAPA	TEMP. (GRAD. F)	FLUJO DE VAPOR (LB/MOL/HR)	FLUJO DE LIQUIDO (LB/MOL/HR)	FRACCIONES MOL DEL LIQUIDO DE LOS COMPONENTES 1 AL 14					FRACCIONES MOL DEL VAPOR DE LOS COMPONENTES 1 AL 14									
				1	2	3	4	5	1	2	3	4	5					
1	42.41		322.02305	.00475	.00010	.29612	.07438	.03819										
				.00026	.00013	.00068	.00062	.01400										
				.05341	.16922	.15654	.19131											
2	47.01	2818.47							.00437	.00193	.91890	.06032	.01324					
									.00012	.00001	.00003	.00004	.00017					
									.00026	.00037	.00016	.00009						
2	47.01		327.66510	.00497	.00009	.28576	.07409	.05177										
				.00097	.00012	.00063	.00061	.01360										
				.05263	.16672	.15422	.18846											
3	47.05	2821.31							.00440	.00192	.91663	.06089	.01406					
									.00017	.00001	.00003	.00004	.00017					
									.00027	.00037	.00016	.00009						
3	47.05		310.07910	.00496	.00009	.28371	.07919	.05759										
				.00135	.00012	.00062	.00059	.01368										
				.05222	.16545	.15306	.18705											
4	47.49	2824.72							.00439	.00192	.91583	.06092	.01557					
									.00021	.00001	.00003	.00004	.00017					
									.00026	.00036	.00016	.00009						
4	47.49		332.03418	.00499	.00009	.28372	.07935	.06045										
				.00172	.00012	.00061	.00058	.01358										
				.05187	.16441	.15211	.18590											
5	47.21	2827.68							.00440	.00192	.91539	.06095	.01593					
									.00026	.00001	.00003	.00003	.00017					
									.00026	.00036	.00015	.00009						
5	47.21		333.88049	.00499	.00009	.28436	.07977	.06220										
				.00209	.00013	.00061	.00056	.01348										
				.05155	.16343	.15123	.18683											
6	46.61	2829.52							.00440	.00192	.91503	.06101	.01617					
									.00030	.00001	.00003	.00003	.00016					
									.00026	.00035	.00015	.00009						
6	46.61		315.70837	.00502	.00009	.28521	.08031	.06353										
				.00247	.00013	.00060	.00054	.01339										
				.05123	.16246	.15036	.18376											
7	45.98	2831.35							.00440	.00192	.91472	.06109	.01636					
									.00035	.00001	.00002	.00003	.00016					
									.00025	.00035	.00015	.00009						
7	45.98		337.56104	.00505	.00009	.28614	.08092	.06471										
				.00288	.00014	.00059	.00053	.01329										
				.05091	.16151	.14949	.18274											
8	45.33	2833.21							.00441	.00192	.91440	.06118	.01653					
									.00040	.00001	.00002	.00003	.00016					
									.00025	.00034	.00015	.00009						
8	45.33		339.47125	.00509	.00009	.28712	.08155	.06586										
				.00331	.00016	.00058	.00051	.01319										
				.05058	.16054	.14862	.18188											
9	44.65	2835.12							.00441	.00191	.91409	.06127	.01670					
									.00045	.00002	.00002	.00003	.00016					
									.00024	.00034	.00014	.00009						
9	44.65		341.47632	.00512	.00009	.28813	.08222	.06702										
									.00378	.00018	.00058	.00050	.01309					
									.05025	.15954	.14772	.18059						
10	43.94	2837.12							.00442	.00191	.91378	.06136	.01688					
									.00051	.00002	.00002	.00003	.00015					
									.00024	.00033	.00014	.00009						
10	43.94		343.62201	.00516	.00009	.28918	.08291	.06825										
				.00432	.00022	.00057	.00049	.01299										
				.04990	.15849	.14678	.17945											
11	43.19	2839.27							.00442	.00191	.91342	.06146	.01704					
									.00058	.00002	.00002	.00003	.00015					
									.00024	.00033	.00014	.00009						
11	43.19		345.96678	.00520	.00009	.29030	.08366	.06956										
				.00493	.00028	.00056	.00047	.01288										
				.04953	.15738	.14576	.17822											
12	42.38	2841.61							.00443	.00191	.91304	.06157	.01727					
									.00066	.00003	.00002	.00003	.00015					
									.00023	.00032	.00014	.00008						
12	42.38		348.59540	.00525	.00009	.29152	.08447	.07100										
				.00564	.00037	.00055	.00046	.01275										
				.04912	.15615	.14465	.17688											
13	41.48	2844.24							.00443	.00191	.91262	.06169	.01749					
									.00075	.00004	.00002	.00003	.00014					
									.00023	.00031	.00013	.00008						
13	41.48		351.63568	.00530	.00009	.29286	.08537	.07262										
				.00650	.00051	.00054	.00044	.01261										
				.04865	.15475	.14330	.17535											
14	40.45	2847.28							.00444	.00191	.91213	.06182	.01775					
									.00086	.00006	.00002	.00003	.00014					
									.00022	.00031	.00013	.00008						
14	40.45		345.28891	.00536	.00009	.29439	.08641	.07450										
				.00755	.00073	.00053	.00042	.01245										
				.04811	.15311	.14191	.17355											
15	39.23	2850.93							.00445	.00190	.91153	.06198	.01805					
									.00100	.00009	.00002	.00002	.00014					
									.00021	.00030	.00013	.00008						
15	39.23		349.87329	.00542	.00009	.29619	.08744	.07676										
				.00890	.00111	.00052	.00041	.01225										
				.04744	.15109	.14008	.17134											
16	37.73	2855.52							.00446	.00190	.91078	.06218	.01843					
									.00118	.00014	.00002	.00002	.00013					

RESULTADOS FINALES  
CORRIENTES DE PRODUCTOS.

CORRIENTE	DE LA ETAPA	FASE	TEMP. (GRAD. F)	FLUJO (L/MOL/H)	FRACCIONES MOL DE LOS COMPONENTES 1 AL 14				
SALIDA DE GAS	1	VAP	42.60	2400.50	.00402 .00007	.00201 .00001	.92918 .00003	.05439 .00003	.00932 .00016
					.00025	.00035	.00015	.00069	
SALIDA DE LIQUIDO	20	LIC	21.02	498.572	.00660 .03790	.00010 .02193	.32396 .00723	.10002 .00325	.11677 .00008
					.03350	.10753	.10000	.12331	

TABLA # 3. 21  
ESPECIFICACIONES DE PRODUCTOS.  
EJEMPLO # 3. MODELO STAB 1

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

RESULTADOS FINALES  
CONDICIONES INTERNAS

ETAPA	TEMP. (GRAD. F)	FLUJO DE VAPOR (LBMDL/HR)	FLUJO DE LIQUIDO (LPMGL/HR)	FRACCIONES MOL DEL LIQUIDO DE LOS COMPONENTES 1 AL 14					FRACCIONES MOL DEL VAPOR DE LOS COMPONENTES 1 AL 14										
				1	2	3	4	5	1	2	3	4	5						
1	42.61		372.02385	.00475	.00010	.29612	.07438	.03819											
2	47.01	2818.47		.00056	.00013	.00064	.00042	.01400											
2	47.01		377.66510	.00497	.00009	.28576	.07989	.05177	.00437	.00193	.91890	.00632	.01324						
3	47.85	2825.31		.00009	.00012	.00063	.00061	.01360	.00012	.00001	.00003	.00004	.00017						
3	47.85		370.07910	.00496	.00009	.28371	.07919	.05759	.00026	.00037	.91663	.00609	.01486						
4	47.69	2825.72		.00135	.00012	.00062	.00059	.01368	.00010	.00001	.00003	.00004	.00017						
4	47.69		312.03818	.00497	.00009	.28372	.07935	.06045	.00027	.00037	.91663	.00609	.01486						
5	47.21	2827.68		.00172	.00012	.00061	.00058	.01358	.00010	.00001	.00003	.00003	.00017						
5	47.21		311.30049	.00499	.00009	.28436	.07977	.06220	.00026	.00036	.91583	.00602	.01557						
6	46.61	2829.52		.00209	.00013	.00061	.00056	.01368	.00027	.00036	.91583	.00602	.01557						
6	46.61		315.70637	.00502	.00009	.28521	.08031	.06353	.00026	.00035	.91583	.00601	.01617						
7	45.98	2831.35		.00247	.00013	.00060	.00054	.01339	.00025	.00035	.91583	.00601	.01617						
7	45.98		317.56104	.00505	.00009	.28610	.08092	.06471	.00025	.00035	.91583	.00601	.01617						
8	45.33	2833.21		.00291	.00016	.00058	.00051	.01319	.00024	.00035	.91583	.00601	.01617						
8	45.33		319.47125	.00504	.00009	.28712	.08155	.06586	.00024	.00035	.91583	.00601	.01617						
9	44.65	2835.12		.00336	.00016	.00056	.00047	.01298	.00024	.00036	.91440	.00612	.01670						
9	44.65		321.47632	.00512	.00009	.28813	.08222	.06702	.00024	.00036	.91440	.00612	.01670						
10	43.94	2837.12		.00376	.00018	.00055	.00045	.01309	.00024	.00033	.91376	.00612	.01670						
10	43.94		323.62201	.00516	.00009	.28916	.08291	.06825	.00024	.00033	.91376	.00612	.01670						
11	43.19	2839.27		.00412	.00022	.00057	.00049	.01299	.00024	.00033	.91342	.00616	.01706						
11	43.19		325.96674	.00520	.00009	.29030	.08366	.06956	.00024	.00033	.91342	.00616	.01706						
12	42.38	2841.61		.00453	.00028	.00056	.00047	.01288	.00024	.00033	.91304	.00612	.01727						
12	42.38		328.59540	.00525	.00009	.29152	.08447	.07100	.00023	.00032	.91304	.00612	.01727						
13	41.68	2844.24		.00491	.00037	.00055	.00048	.01275	.00023	.00031	.91262	.00616	.01749						
13	41.68		331.63568	.00530	.00009	.29276	.08537	.07262	.00023	.00031	.91262	.00616	.01749						
14	40.45	2847.28		.00550	.00051	.00054	.00044	.01261	.00022	.00031	.91213	.00612	.01775						
14	40.45		335.28491	.00536	.00009	.29399	.08641	.07450	.00022	.00031	.91213	.00612	.01775						
15	39.21	2850.93		.00575	.00073	.00053	.00042	.01245	.00021	.00030	.91153	.00616	.01805						
15	39.21		339.87329	.00582	.00009	.29619	.08764	.07676	.00021	.00030	.91153	.00616	.01805						
16	37.73	2855.52		.00619	.00111	.00052	.00041	.01225	.00021	.00029	.91078	.00618	.01843						
16	37.73		345.98932	.00551	.00009	.29842	.08918	.07960	.00021	.00029	.91078	.00618	.01843						
17	35.78	2861.63		.00697	.00175	.00052	.00039	.01200	.00019	.00027	.90996	.00623	.01891						
17	35.78		374.81030	.00562	.00010	.30132	.09122	.08341	.00019	.00027	.90996	.00623	.01891						
18	33.06	2870.45		.00737	.00289	.00057	.00040	.01184	.00018	.00025	.90827	.00627	.01940						
18	33.06		349.04805	.00579	.00010	.30541	.09413	.08846	.00018	.00025	.90827	.00627	.01940						
19	28.83	2884.71		.00835	.00507	.00081	.00047	.01111	.00016	.00022	.90584	.00631	.02086						
19	28.83		416.92450	.00604	.00010	.31184	.09882	.09411	.00016	.00022	.90584	.00631	.02086						
20	21.01	2912.57		.00938	.00968	.00064	.00047	.01023	.00015	.00022	.90102	.00627	.02262						

TABLA # 3. 22  
ESPECIFICACIONES DE CONDICIONES INTERNAS  
EJEMPLO # 3. MODELO STAB 1

TESIS CON  
TALLA DE OR EN

**TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN**

Iteración(j)	T (°F)													
	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
Etapa (i)														
1	35.00	27.11	43.32	44.79	43.41	42.47	42.18	42.24	42.39	42.53	42.61	42.64	42.63	42.61
2	33.95	25.85	48.57	51.46	49.03	47.11	46.37	46.34	46.57	46.82	46.98	47.04	47.04	47.01
3	32.89	22.77	48.73	53.64	50.94	48.35	47.16	46.97	47.21	47.54	47.77	47.88	47.89	47.85
4	31.84	20.17	47.26	54.13	51.65	48.67	47.09	46.69	46.88	47.25	47.54	47.70	47.73	47.69
5	30.79	18.20	45.28	53.78	51.80	48.66	46.79	46.17	46.28	46.64	46.98	47.18	47.23	47.21
6	29.74	16.72	43.23	52.96	51.61	48.50	46.44	45.62	45.62	45.95	46.31	46.54	46.53	46.61
7	28.68	15.55	41.31	51.87	51.18	48.22	46.07	45.09	44.97	45.25	45.61	45.87	45.98	45.98
8	27.63	14.57	39.56	50.63	50.56	47.83	45.67	44.58	44.34	44.56	44.90	45.17	45.31	45.33
9	26.58	13.69	37.96	49.31	49.79	47.34	45.22	44.07	43.73	43.87	44.19	44.46	44.61	44.65
10	25.53	12.87	36.48	47.94	48.90	46.73	44.71	43.53	43.11	43.19	43.46	43.73	43.89	43.94
11	24.47	12.06	35.08	46.53	47.89	46.02	44.12	42.95	42.48	42.48	42.71	42.96	43.13	43.19
12	23.42	11.24	33.69	45.08	46.78	45.18	43.42	42.28	41.78	41.73	41.91	42.14	42.31	42.38
13	22.37	10.39	32.32	43.55	45.53	44.20	42.60	41.51	41.00	40.91	41.04	41.24	41.40	41.48
14	21.32	9.50	30.75	41.89	44.12	43.05	41.61	40.60	40.09	39.96	40.05	40.22	40.37	40.45
15	20.28	8.54	29.06	40.03	42.49	41.67	40.40	39.47	38.98	38.83	38.89	39.03	39.15	39.23
16	19.21	7.50	27.11	37.84	40.51	39.96	38.87	38.03	37.58	37.42	37.45	37.55	37.66	37.73
17	18.16	6.35	24.75	35.13	38.00	37.73	36.84	36.12	35.71	35.55	35.56	35.64	35.72	35.78
18	17.11	5.02	21.73	31.54	34.58	34.64	33.99	33.41	33.06	32.91	32.89	32.95	33.01	33.06
19	16.05	3.41	17.56	26.34	29.45	29.88	29.53	29.13	28.87	28.75	28.73	28.75	28.79	28.83
20	15.00	1.32	11.10	17.67	20.46	21.23	21.27	21.14	21.03	20.97	20.96	20.97	20.99	21.01
ET	322.02	559.19	133.52	70.09	67.76	35.70	14.23	9.76	10.46	8.91	5.48	2.56	0.89	0

Tablo # 3.23.- Perfiles de temperatura por etapa en cada iteración del problema # 3.

Simulador STAB.

$$ET = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n (T_{i,j} - T)$$

T (° F)

i,j

Iteración(j)	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Etapo(i)										
1	35.00	49.22	40.46	42.23	42.66	42.71	42.73	42.70	42.65	42.60
2	33.95	58.18	44.11	45.86	47.00	47.15	47.20	47.16	47.08	47.00
3	32.89	61.12	45.44	45.84	47.63	47.96	48.09	48.07	47.97	47.85
4	31.84	61.70	46.21	45.04	47.13	47.69	47.93	47.94	47.84	47.71
5	30.79	61.25	46.68	44.25	46.25	47.03	47.39	47.47	47.39	47.24
6	29.74	60.34	46.88	43.67	45.31	46.23	46.71	46.87	46.82	46.68
7	28.68	59.23	46.84	43.25	44.42	45.38	45.97	46.21	46.20	46.07
8	27.63	58.00	46.61	42.92	43.64	44.55	45.19	45.50	45.54	45.44
9	26.58	56.69	46.23	42.60	42.95	43.74	44.40	44.77	44.86	44.78
10	25.53	55.31	45.72	42.24	42.33	42.96	43.60	44.00	44.13	44.08
11	24.47	53.84	45.09	41.80	41.72	42.20	42.77	43.18	43.35	43.34
12	23.42	52.26	44.34	41.26	41.09	41.42	41.92	42.31	42.51	42.52
13	22.37	50.52	43.46	40.59	40.38	40.60	41.00	41.37	41.57	41.61
14	21.32	48.59	42.41	39.75	39.55	39.67	39.99	40.31	40.51	40.57
15	20.26	46.40	41.12	38.68	38.51	38.57	38.81	39.08	39.27	39.34
16	19.21	43.84	39.51	37.31	37.18	37.20	37.37	37.59	37.75	37.82
17	18.16	40.72	37.40	35.46	35.38	35.37	35.49	35.65	35.79	35.85
18	17.11	36.70	34.46	32.81	32.77	32.76	32.84	32.95	33.05	33.11
19	16.05	31.01	29.96	28.63	28.65	28.64	28.68	28.75	28.82	28.86
20	15.00	21.51	21.76	20.87	20.91	20.93	20.97	21.00	21.00	21.02

ET	323.49	182.94	30.20	28.43	18.15	11.49	6.42	3.30	1.47	0
----	--------	--------	-------	-------	-------	-------	------	------	------	---

Tabla # 3.24.- Perfiles de temperatura por etapo en cada iteración del problema # 3.

Simulador STAB.

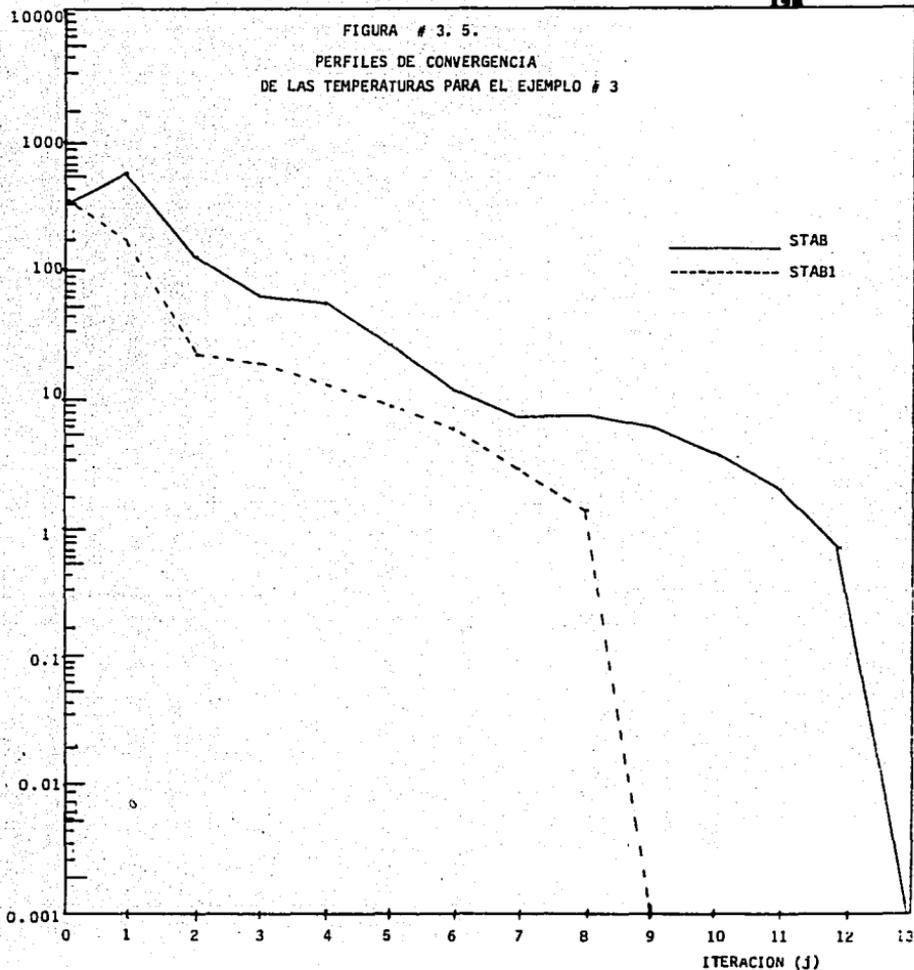
$$ET = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n (T_{i,F} - T_{i,j})^2$$

TESIS CON  
 FALLA DE ORIGEN

ETJ

198

FIGURA # 3. 5.  
PERFILES DE CONVERGENCIA  
DE LAS TEMPERATURAS PARA EL EJEMPLO # 3



TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

V (lb mol/hr)

i,j

Iteración (j) 0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
Etapa (i)													
1	2994.16	2854.35	2741.70	2695.12	2684.18	2684.17	2685.44	2685.91	2685.71	2685.26	2684.86	2684.62	2684.54
2	2994.16	2944.99	2866.78	2821.21	2811.77	2814.79	2818.47	2820.16	2820.27	2819.70	2819.07	2818.64	2818.47
3	2994.16	2954.97	2881.49	2828.30	2814.84	2817.69	2822.44	2825.04	2825.55	2824.99	2824.21	2823.62	2823.34
4	2994.16	2958.68	2889.98	2832.98	2816.17	2818.35	2823.75	2827.16	2828.16	2827.75	2826.91	2826.19	2825.81
5	2994.16	2961.00	2896.31	2837.67	2817.97	2818.06	2824.62	2829.62	2830.12	2829.94	2829.11	2828.31	2827.83
6	2994.16	2962.83	2901.28	2842.31	2820.30	2820.12	2825.50	2829.66	2831.79	2831.68	2831.14	2830.30	2829.74
7	2994.16	2964.47	2905.33	2846.78	2823.01	2821.56	2826.54	2831.05	2833.32	2833.70	2833.08	2832.24	2831.63
8	2994.16	2966.03	2908.80	2851.03	2825.99	2823.35	2827.79	2832.28	2834.79	2835.43	2834.97	2834.17	2833.53
9	2994.16	2967.58	2911.91	2855.07	2829.17	2825.44	2829.28	2833.63	2836.28	2837.14	2836.85	2836.13	2835.48
10	2994.16	2869.13	2914.86	2858.97	2832.49	2827.83	2831.05	2835.15	2837.85	2838.89	2839.76	2838.14	2837.51
11	2994.16	2970.72	2917.77	2862.83	2835.98	2830.51	2833.10	2836.92	2839.59	2840.74	2840.77	2840.25	2839.66
12	2994.16	2972.36	2920.74	2866.75	2839.68	2833.49	2835.50	2838.98	2841.56	2842.78	2842.94	2842.53	2842.00
13	2994.16	2974.06	2923.89	2870.87	2843.59	2836.86	2838.30	2841.43	2843.87	2845.12	2845.39	2845.08	2844.61
14	2994.16	2975.85	2927.31	2875.38	2846.16	2840.75	2841.62	2844.38	2846.65	2847.88	2848.22	2848.01	2847.62
15	2994.16	2977.73	2931.14	2880.49	2853.33	2846.36	2845.67	2848.03	2850.10	2851.28	2851.67	2851.55	2851.23
16	2994.16	2979.75	2935.56	2886.57	2859.59	2851.07	2850.78	2852.72	2854.55	2855.66	2856.07	2856.02	2855.77
17	2994.16	2981.95	2940.86	2894.15	2867.58	2858.53	2857.59	2859.06	2860.61	2861.60	2862.01	2862.02	2861.84
18	2994.16	2984.42	2947.56	2904.27	2878.58	2869.04	2867.37	2868.26	2869.46	2870.29	2870.67	2870.72	2870.60
19	2994.16	2987.34	2956.73	2919.06	2875.34	2865.54	2863.01	2863.17	2863.91	2864.50	2864.80	2864.87	2864.81
20	2994.16	2991.08	2970.81	2943.87	2925.24	2916.31	2913.05	2912.27	2912.31	2912.50	2912.62	2912.65	2912.62
Σ	3126.94	2545.03	1436.55	419.42	120.65	124.58	76.13	35.18	24.03	23.71	19.85	11.80	4.40

Tabla # 3.25.- Perfiles de flujo de vapor por etapa en cada iteración problema # 3.

Simulador SIAB.

$$EV = \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^N (V - V_j) i_j F_{i,j}$$

TESIS CON  
 FALTA DE ORIGEN

Etapa(i)	Iteración(j)	V (lb mol/hr)								
		0	1	2	3	4	5	6	7	8
1	2994.16	2648.10	2690.98	2687.77	2604.99	2684.54	2684.31	2684.27	2684.36	2684.50
2	2994.16	2783.47	2817.40	2825.90	2820.03	2818.79	2818.20	2818.02	2818.12	2818.34
3	2994.16	2795.60	2815.05	2833.19	2826.41	2824.28	2823.21	2822.81	2822.84	2823.09
4	2994.16	2802.16	2813.10	2835.73	2830.35	2827.52	2825.95	2825.26	2825.17	2825.41
5	2994.16	2806.98	2812.71	2836.47	2833.43	2830.33	2828.34	2827.35	2827.09	2827.28
6	2994.16	2811.13	2813.42	2836.62	2835.82	2832.88	2830.65	2829.39	2828.95	2829.04
7	2994.16	2815.00	2814.79	2836.77	2837.63	2835.19	2832.91	2831.45	2830.82	2830.81
8	2994.16	2818.82	2816.57	2837.18	2839.05	2837.26	2835.11	2833.54	2832.76	2832.63
9	2994.16	2822.69	2818.63	2837.93	2840.30	2839.14	2837.26	2835.68	2834.78	2834.54
10	2994.16	2826.71	2820.93	2939.03	2841.54	2840.92	2839.38	2837.86	2836.90	2836.56
11	2994.16	2830.95	2823.49	2840.48	2842.92	2842.71	2841.51	2840.14	2839.16	2838.74
12	2994.16	2835.49	2826.37	2842.30	2844.56	2844.61	2843.74	2842.55	2841.61	2841.14
13	2994.16	2840.42	2829.66	2844.54	2846.56	2846.78	2846.18	2845.19	2844.32	2843.83
14	2994.16	2845.85	2833.49	2847.31	2849.07	2849.36	2848.98	2848.19	2847.42	2846.94
15	2994.16	2851.97	2838.09	2850.78	2852.27	2852.58	2852.36	2851.76	2851.10	2850.65
16	2994.16	2859.07	2843.79	2855.28	2856.50	2856.78	2856.67	2856.23	2855.70	2855.31
17	2994.16	2867.66	2851.23	2861.40	2862.34	2862.56	2862.52	2862.21	2861.80	2861.48
18	2994.16	2878.81	2861.60	2870.29	2870.96	2871.10	2871.09	2870.88	2870.59	2870.34
19	2994.16	2894.98	2877.72	2884.70	2885.07	2885.14	2885.12	2885.00	2884.81	2884.64
20	2994.16	2923.36	2908.04	2912.69	2912.82	2912.81	2912.78	2912.71	2912.62	2912.53

\*  
EV = 3135.40    270.38    233.70    68.88    64.82    47.48    29.13    14.65    5.38    0

Tabla # 3.26.- Perfiles de flujo de vapor por etapa en cada iteración del problema # 3.

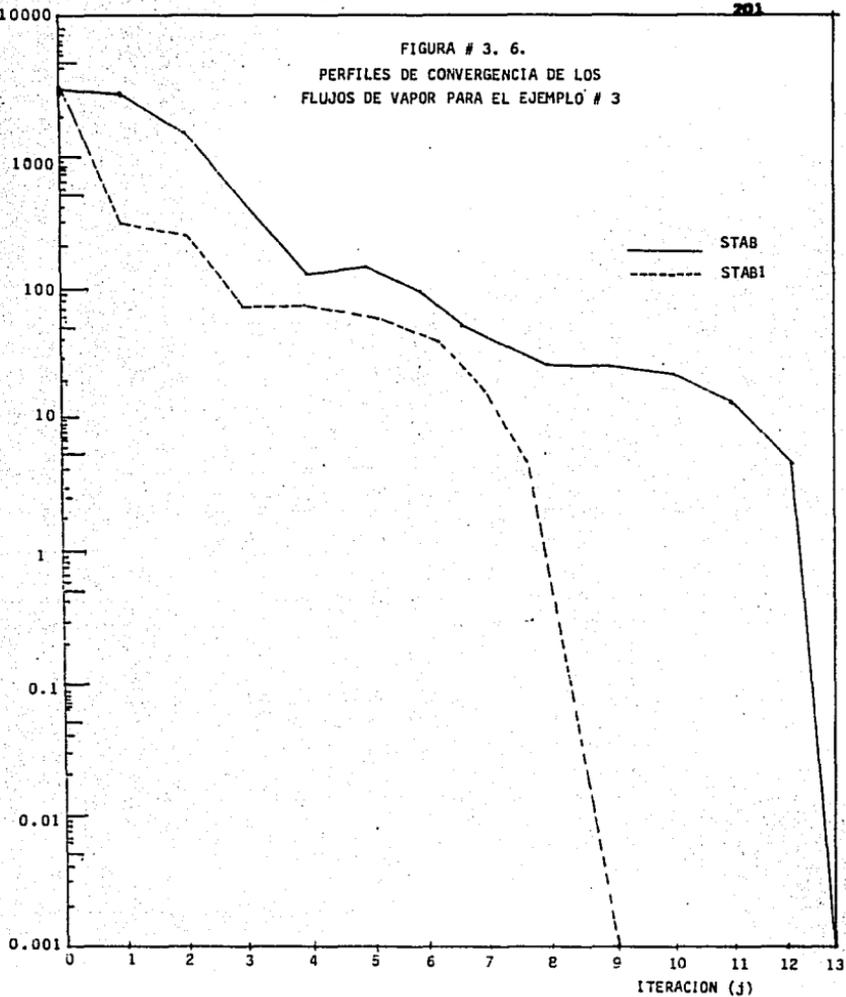
Simulador STAB1.

$$EV = \sum_{j=1}^n \sum_{i,F} (V_{i,j} - V_{i,F})^2$$

EVJ

201

FIGURA # 3. 6.  
PERFILES DE CONVERGENCIA DE LOS  
FLUJOS DE VAPOR PARA EL EJEMPLO # 3



TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

### 3.4.- Discusión de resultados.

Los aspectos más relevantes que pueden mencionarse de la comparación de ambos simuladores son los siguientes:

- \* En todos los casos el tiempo de ejecución del STAB1 fué menor que el del STAB.
- \* Para ejemplos sencillos ambos simuladores convergieron prácticamente en el mismo número de iteraciones; sin embargo, al irse complicando los problemas el STAB1 convergió en menor número de iteraciones.
- \* Los perfiles de convergencia muestran una mayor estabilidad en el caso del STAB1.
- \* El inicio de la convergencia en el STAB1 es mucho más rápido que en el STAB; sin embargo, después disminuye esta velocidad, lo cual sugiere que existen posibilidades no estudiadas para evitar este fenómeno.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

CAPITULO IV  
CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

En el presente estudio se buscaba proponer una serie de modificaciones al uso de memoria y los ciclos de convergencia del simulador propuesto por J.D. Seader<sup>(1)</sup> de tal forma que se incrementara su eficiencia y se abriera el camino para tratar otras mejoras en estudios posteriores.

Para cumplir con dicho objetivo se realizaron los siguientes pasos:

- Análisis del modelo matemático en que se basa el simulador.
- Implementación del modelo original.
- Modificaciones al uso de memoria y la programación.
- Exploración de métodos alternativos para mejorar la convergencia del bucle V.
- Exploración de métodos alternativos para mejorar la convergencia del bucle T.
- Comparación entre el simulador original y el modificado resolviendo varios problemas de diversos grados de complejidad.

**TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN**

Lo anterior llevó a proponer un simulador modificado, STAB1, en el que se tienen las siguientes ventajas:

- \* Se reduce considerablemente el uso de memoria (75.8k-bytes).
- \* El cambio en el bucle U, utilizando el algoritmo de Wegstein y un arreglo secuencial en el cálculo de la torre, dió mayor estabilidad a la convergencia, incrementando su velocidad y reduciendo el número de iteraciones en los casos complejos.
- \* El cambio del bucle T, utilizando la modificación propuesta en el presente trabajo al algoritmo de Bennett-Broyden, aceleró la convergencia, la hizo independiente del método utilizado para el cálculo de las entalpías y eficiente el uso de memoria.

Algunos puntos importantes de destacar son los siguientes:

- \* No se realizó una validación experimental del simulador.
- \* Las modificaciones propuestas tienen mayor impacto conforme aumenta la complejidad del problema a simular.
- \* La mayor estabilidad del modelo propuesto da mayor confiabilidad en su aplicación a sistemas complejos, así como en su posible incorporación a un simulador de procesos.
- \* La utilización del algoritmo de optimización de Powell en la solución del sistema de ecuaciones no lineales del balance de energía dio soluciones siempre convergentes; sin embargo, se incrementaba considerablemente el tiempo de cálculo.

En cuanto a la aplicabilidad del simulador propuesto puede mencionarse lo siguiente:

- \* La gran variedad de casos que puede manejar lo convierte en un instrumento útil para la educación, ya que por medio de él

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

se pueden analizar diversos problemas, y con ello comprender cómo opera el fenómeno, por ejemplo:

-Variaciones contra los métodos cortos de cálculo.

-Efecto de las variaciones en los diferentes parámetros de operación de la torre.

-Efecto de utilizar dos aceites absorbentes entrando en diferentes etapas.

-Efecto de utilizar un interenfriador para mantener una baja temperatura de absorción.

\*Aunque el simulador está concebido con fines didácticos, puede utilizarse en diseño, siempre y cuando se disponga de los coeficientes adecuados para el cálculo de las propiedades termodinámicas.

\*Por estar enfocado hacia el análisis de operación de torres, más que hacia su diseño; cuando se tuviesen este tipo de problemas, con un número de etapas desconocido y las variables de separación fijadas, sería necesario obtener soluciones mediante interpolación entre diferentes casos.

\*En cualquier aplicación es muy importante considerar las limitaciones inherentes al modelo matemático descritas en el capítulo I.

Algunos puntos que podrían atacarse en futuros estudios son:

\*Mejorar los métodos para el cálculo de propiedades termodinámicas, ya que los resultados predichos por el simulador dependen fuertemente de ellas.

\*Realizar la validación experimental del simulador propuesto.

\*Desarrollar un modelo híbrido de convergencia en el que se aproveche el arranque rápido del STABI y posteriormente se

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

cambie a un algoritmo que acelere la fase final.

\*Investigar más a fondo la aplicación de métodos de optimización en la resolución de sistemas de ecuaciones no lineales.

\*Modificar el simulador para incluir sistemas con alimentaciones a dos fases y reacción química.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

## NOMENCLATURA

## Variables:

- A<sub>i</sub>.- Primer coeficiente de la función polinomial para el cálculo de la entalpía molar del componente i en el vapor.
- A<sub>J</sub>.- Elementos de la diagonal inferior en las matrices tridiagonales.
- a<sub>i</sub>.- Primer coeficiente de la función polinomial para el cálculo de entalpía molar del componente i en el líquido.
- B<sub>i</sub>.- Segundo coeficiente de la función polinomial para el cálculo de la entalpía molar del componente i en el vapor.
- B<sub>J</sub>.- Elementos de la diagonal principal en las matrices tridiagonales.
- b<sub>i</sub>.- Segundo coeficiente de la función polinomial para el cálculo de entalpía molar del componente i en el líquido.
- C.- Constante del algoritmo de Bennett.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN



- h<sub>J</sub> .- Entalpía molar del líquido en la etapa J (Capítulo I).
- h<sub>J</sub> .- Incremento en la variable J para la aproximación del cálculo de la derivada en el algoritmo de Broyden (Capítulo II).
- HF<sub>J</sub> .- Entalpía molar de la alimentación a la etapa J.
- J<sub>K</sub> .- Jacobiano en la iteración K del algoritmo de Broyden.
- K<sub>i,J</sub> .- Constante de equilibrio del componente i en la etapa J  
 $(K_{i,J} = Y_{i,J} / X_{i,J})$ .
- L<sub>J</sub> .- Flujo molar del líquido entre las etapas J y J+1.
- L<sub>K</sub> .- Matriz triangular inferior en la iteración K del algoritmo de Bennett.
- $\tilde{m}_i^{(K)}$  .- Dirección de búsqueda de la iteración K en el algoritmo de Powell.
- N .- Número de etapas teóricas.
- NC .- Número de componentes.
- P<sub>J</sub> .- Presión en la etapa J.
- $\tilde{P}_K$  .- Vector utilizado en el algoritmo de Broyden para denotar X<sub>K</sub>.
- p<sub>J</sub> .- Cantidad auxiliar del método modificado de Gauss para resolución de sistemas de ecuaciones lineales.
- Q<sub>J</sub> .- Carga térmica suministrada o extraída de la etapa J.
- q<sub>J</sub> .- Cantidad auxiliar del método modificado de Gauss para resolución de sistemas de ecuaciones lineales.
- r<sup>-1(K)</sup> .- Razón del algoritmo de Steffensen.
- S<sub>i</sub> .- Cantidad auxiliar en el algoritmo de Broyden.
- T<sub>K</sub> .- Temperatura de la etapa J.
- U<sub>J</sub> .- Flujo molar de la salida lateral de líquido de la etapa J.
- U<sub>K</sub> .- Matriz triangular superior en la iteración K del algoritmo de Bennett.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

- $V$  .- Flujo molar de vapor entre las etapas  $J$  y  $J-1$ .
- $W_J$  .- Flujo molar de la salida lateral de vapor de la etapa  $J$ .
- $X_o^{(K)}$  .- Punto inicial de la iteración  $K$  en el algoritmo de Powell.
- $X_K$  .- Conjunto de variables independientes en la iteración  $K$  del algoritmo de Broyden.
- $X_K$  .- Vector columna utilizado en el algoritmo de Bennett.
- $X_i^{(K)}$  .- Valor de la variable  $X_i$  en la iteración  $K$  del método de convergencia.
- $X_M^{(K)}$  .- Punto de mayor mejoría de la función objetivo en la iteración  $K$  del algoritmo de Powell.
- $X_N^{(K)}$  .- Último punto en la secuencia de búsquedas univariadas de la iteración  $K$  del algoritmo de Powell.
- $X_t^{(K)}$  .- Punto extendido de la iteración  $K$  del algoritmo de Powell.
- $X_{i,j}$  .- Fracción mol del componente  $i$  en la corriente líquida que sale de la etapa  $J$ .
- $X_{i,j}^F$  .- Fracción mol del componente  $i$  en la alimentación a la etapa  $J$ .
- $y_K$  .- Vector columna utilizado en el algoritmo de Bennett.
- $Y_{i,j}$  .- Fracción mol del componente  $i$  en la corriente de vapor que sale de la etapa  $J$ .
- $\alpha_i$  .- Primer coeficiente de la función polinomial para el cálculo de la constante de equilibrio del componente  $i$  (Capítulo I).

TESIS  
FALLA DE ORIGEN

- $\alpha_i$ .- Factor de aceleramiento y/o verificación de la dirección de búsqueda del algoritmo de Wegstein (Capítulo II).
- $\beta_i$ .- Segundo coeficiente de la función polinomial para el cálculo de la constante de equilibrio del componente i.
- $\gamma_i$ .- Tercer coeficiente de la función polinomial para el cálculo de la constante de equilibrio del componente i.
- $\delta_i$ .- Cuarto coeficiente de la función polinomial para el cálculo de la constante de equilibrio del componente i.
- $\epsilon$ .- Error.
- $\eta$ .- Cantidad auxiliar en el algoritmo de Broyden.
- $\mu^{(k)}$ .- Dirección de búsqueda en la iteración k del algoritmo de Powell.

Subíndices y superíndices :

- i.- Número de componente.
- J.- Número de etapa.
- k.- Número de iteración.
- T.- Transpuesto.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

## REFERENCIAS

- (1).- CHRISTENSEN, James H. (Ed.)  
1972 "Computer programs for Chemical Engineering  
Education" Vol. VI - Stagewise Operations  
University of Oklahoma, E.U.A.  
Pags: 390-428
- (2).- KING, C. Judson [t.ing. José Costa López et. al.]  
1980 "Procesos de separación"  
Editorial Reverté, S.A.; España  
Pag: 427
- (3).- NAPHTALI, L.M. y D.P. Sandholm  
1971 cit. pos., C. Judson King (1981);  
"Separation processes";  
Mc.Graw-Hill; U.S.A.  
Pag: 480
- (4).- NEWMAN, J.S.  
1968 cit. pos., C. Judson King (1981), Ibidem

TESIS CON  
FALTA DE ORIGEN

- (5).- KING, C.Judson  
1981 op.cit.  
Pags: 468-469
- (6).- TOMICH, J.F.  
1970 cit.pos.,C.Judson King (1981) op.cit.  
Pag: 482
- (7).- KING, C.Judson  
1981 op.cit.  
Pag: 487
- (8).- MYERS, Alan L. y Warren D. Seider  
1976 "Introduction to Chemical Engineering and  
Computer Calculations"  
Prentice-Hall, E.U.A.  
Pags: 463
- (9).- WESTERBERG, A.W.; H.P. Hutchison; R.L. Motard y P. Winter  
1979 "Process flowsheeting"  
Cambridge University Press, U.S.A.  
Pags: 65-77
- (10).- RALSTON, Anthony Ct.ing.Carlos E. Cervantes de Gortari]  
1978 "Introducción al análisis numérico"  
Editorial Limusa; México  
Pags: 388
- (11).- KUESTER, J. y Mize J.  
"Optimization Techniques with FORTRAN"  
Mc.Graw-Hill  
Pags:297

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

- (12).- BEVERIDGE, Gordon S.G. y Robert S. Shechter.  
1970 "Optimization Theory and Practice"  
Mc.Graw-Hill, U.S.A.  
Pag: 406
- (13).- BEVERIDGE, Gordon S.G. y Robert S. Shechter.  
1970 Ibidem
- (14).- KUESTER, J. y Mize J.  
op.cit.  
Pag: 331-343
- (15).- GIRAL, José; Fco. Barnés y Alejandro Ramírez  
1977 "Ingeniería de procesos.  
Manual para el diseño de procesos químicos  
apropiados para países en desarrollo".  
U.N.A.M., México.  
Pag: 47
- (16).- HESS, F.E.; S.E. Gallun; G.W. Bentzen y C.D. Holland  
1977 "Solve more distillation problems"  
Part 8 - Wich method to use.  
Hydrocarbon Processing  
June 1977  
Pags: 181-188
- (17).- HOLLAND, Charles D.  
1975 "Fundamentals and Modeling of Separation  
Processes. Absorption, Distillation, Evaporation  
and Extraction.  
Prentice Hall, U.S.A.  
Pags: 407-414

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

BIBLIOGRAFIA

- (1) AMUNDSON, Neal R. y Arlene J. Pontinen  
1958 "Multicomponent Distillation Calculations on a Large Digital Computer".  
Ind. Eng. Chem.  
Vol. 50, No. 5  
Pags: 730-736
- (2) BEVERIDGE, Gordon S.G. y Robert S. Shechter  
1970 "Optimization: Theory and Practice".  
Mc Graw-Hill, U.S.A.  
Pags: 355-507
- (3) BURNINGHAM, D.W. y F.D. Otto  
1967 "Which Computer Design for Absorbers?".  
Hydrocarbon Processing  
Vol. 46, No. 10  
Pags: 163-170

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

- (4) CARNAHAN, Brice; H.A. Luther y James O. Wilkes  
1969 "Applied Numerical Methods".  
John Wiley & Sons; E.U.A.  
Pags: 141-209  
269-340
- (5) CONTE, S.D. y Carl de Boor [t. ing. Hernando Alfonso Castilla]  
1977<sup>2</sup> "Análisis numérico elemental.  
Un enfoque algorítmico".  
Mc Graw-Hill; México  
Pags: 29-205
- (6) GIRAL, José; Fco. Barnés y Alejandro Ramírez  
1977 "Ingeniería de Procesos  
Manual para el diseño de procesos químicos  
apropiados para países en desarrollo"  
U.N.A.M., México  
Pags: 49-57
- (7) HOLLAND, Charles D.  
1975 "Fundamentals and Modeling of Separation  
Processes: Absorption, Distillation, Evaporation  
and Extraction".  
Prentice Hall, U.S.A.  
Pags: 107-148
- (8) JENSON, V.G. y G.V. Jeffreys [t. ing. E.Costa Novella, et.al.]  
1969 "Métodos matemáticos en Ingeniería Química".  
Editorial Alhambra, S.A.; España  
Pags: 478-535

- (9) KING, C. Judson [t. ing. José Costa López et.al.]  
1980 "Procesos de Separación"  
Editorial Reverte, S.A.; España  
Pags: 391-395, 425-427, 529-610
- (10) KUESTER, J. y Mize J.  
"Optimization Techniques with FORTRAN".  
Mc Graw-Hill.  
Pags: 297-366
- (11) SHERWOOD, Thomas K. y Robert L. Pigford  
1952<sup>2</sup> "Absorption and Extraction"  
Mc Graw-Hill, U.S.A.
- (12) SMITH, Buford D.  
1963 "Design and Equilibrium Stage Processes".  
Mc Graw-Hill, E.U.A.  
Pags: 252-295  
462-473
- (13) SOUDERS, Mott y George Granger Brown  
1932 "Fundamental Design of Absorbing and Stripping  
Columns for Complex Vapors".  
Ind. Eng. Chem.  
Vol. 24, No. 5  
Pags: 519-522

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

- (14) THIELE, E.W. y R.L. Geddes  
1933 'Computation of Distillation Apparatus for  
Hydrocarbon Mixtures'.  
Ind. Eng. Chem.  
Vol. 25, No. 3  
Pags: 289-295
- (15) TREYBAL, Robert E. [t. ing. Amelia García Rodríguez]  
1980<sup>2</sup> 'Operaciones de Transferencia de Masa'.  
Mc.Graw-Hill, México  
Pags: 306-368
- (16) WANG, J.C. y G.E. Henke  
1966 'Tridiagonal Matrix for Distillation'.  
Hydrocarbon Processing  
Vol. 45, No. 8  
Pags: 155-163

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN