

UNIVERSIDAD NACIONAL DE INGENIERIA

FACULTAD DE INGENIERIA QUIMICA
Y MANUFACTURERA



SIMULACION Y OPTIMIZACION DE SEPARACION
MULTICOMPONENTES UTILIZANDO UN
MICROCOMPUTADOR

TESIS

PARA OBTENER EL TITULO PROFESIONAL DE

INGENIERO QUIMICO

LUIS ANTONIO COLLANTES BOHORQUEZ

LIMA - PERU

1992

INDICE

LISTA DE SIMBOLOS

INTRODUCCION

CAPITULO 1 : RESUMEN DEL PROYECTO.

- 1.1 Objetivos.
- 1.2 Planteamientos y Enfoque al Proceso de Destilación.
- 1.3 Modelamiento y Simulación.

CAPITULO 2 : FUNDAMENTOS TEORICOS.

- 2.1 Conceptos Matemáticos.
 - 2.1.1 Ecuaciones y Correlaciones.
 - 2.1.2 Técnicas de Solución de Ecuaciones.
- 2.2 Conceptos Termodinámicos.
 - 2.2.1 Propiedades Termodinámicas.
 - 2.2.1.1 Propiedades Críticas y Reducidas.
 - 2.2.1.2 Densidad Molar. Ecuación de Estado.
 - 2.2.1.3 Constante de Distribución.
 - 2.2.1.4 Entalpía y Entropía.
 - 2.2.1.5 Viscosidad y Tensión Superficial.
 - 2.2.2 Procesos Termodinámicos.
 - 2.2.2.1 Equilibrio Líquido-Vapor.
 - 2.2.2.2 Procesos Isoentrópicos.
 - 2.2.2.3 Procesos Isoentálpicos.
- 2.3 Separación Multicomponente : Destilación.
 - 2.3.1 Modelado del Proceso de Destilación.
 - 2.3.2 Balance de Materia y Energía.
 - 2.3.3 Etapa de equilibrio.
 - 2.3.4 Condensador de Topes y Rehervidor de Fondos.
 - 2.3.5 División y Mezcla de Corrientes.
 - 2.3.6 Integración para la Columna de Destilación.
- 2.4 Diseño de Columnas de Destilación.
 - 2.4.1 Especificaciones y Condiciones de Operación.
 - 2.4.2 Cálculo Abreviado (Shortcut).
 - 2.4.3 Cálculo Riguroso.
 - 2.4.4 Dimensionamiento e Hidrodinámica.
 - 2.4.5 Diseño de Equipos Auxiliares.
 - 2.4.5.1 Intercambiadores de Calor.
 - 2.4.5.2 Compresores.
 - 2.4.5.3 Bombas.
 - 2.4.6 Concepto de Bombas Calorimétricas. Aplicación a Columnas de Destilación.

CAPITULO 3 : DESARROLLO DEL PROGRAMA.

- 3.1 Resumen del Equipo Utilizado. Microcomputadores.
 - 3.1.1 Capacidad del Equipo.
 - 3.1.2 Lenguaje de Programación.
- 3.2 Procedimientos y Funciones para el cálculo de Propiedades Termodinámicas.
 - 3.2.1 Propiedades Críticas y Reducidas.
 - 3.2.2 Densidad Molar. Ecuación de Estado.
 - 3.2.3 Constante de Distribución.
 - 3.2.4 Entalpía y Entropía.
 - 3.2.5 Viscosidad y Tensión Superficial.
- 3.3 Procedimientos y Funciones para el Cálculo de Procesos Termodinámicos.
 - 3.3.1 Cálculo de Propiedades Termodinámicos de un Sistema Multicomponente.
 - 3.3.2 Cálculos de Procesos Termodinámicos.
 - 3.3.2.1 Temperatura de Burbuja y Rocío.
 - 3.3.2.2 Equilibrio Líquido-Vapor. Evaporación Instantánea (Flashing).
- 3.4 Programas Desarrollados para la Simulación.
 - 3.4.1 Programas de Accesos a la Base de Datos.
 - 3.4.2 Programa de Diseño de Columnas de Destilación.
 - 3.4.2.1 Especificaciones. Condiciones de Operación.
 - 3.4.2.2 Determinación de Parámetros Iniciales.
 - 3.4.2.3 Cálculo Riguroso.
 - 3.4.2.4 Dimensionamiento e Hidrodinámica.
 - 3.4.3 Programa de Evaluación de Propiedades Termodinámicas y Procesos Termodinámicos.
- 3.5 Integración de los Programas para la Simulación.

CAPITULO 4 : SIMULACION Y OPTIMIZACION.

- 4.1 Confrontación del Programa con otras fuentes.
 - 4.1.1 Propiedades Termodinámicas vs. Valores Tabulados.
 - 4.1.2 Programa de Destilación vs. Otros Programas.
- 4.2 Simulación y Optimización aplicado a una Unidad de Separación.
 - 4.2.1 Descripción del Sistema.
 - 4.2.2 Planteamientos de Esquemas. Alternativas.
 - 4.2.2.1 Destilación Convencional.
 - 4.2.2.2 Destilación utilizando Bombas Calorimétricas.
 - 4.2.3 Criterio Económico para la Optimización del proceso.
 - 4.2.4 Simulación de los Esquemas Establecidos.
 - 4.2.4.1 Simulación del Esquema 1
 - 4.2.4.2 Simulación del Esquema 2
 - 4.2.4.3 Simulación del Esquema 3
 - 4.2.5 Selección del Esquema Optimo.
 - 4.2.5.1 Optimo del Punto de Vista Económico.
 - 4.2.5.2 Optimo del Punto de Vista del Ahorro de Energía.

CAPITULO 5 : CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

- 5.1 Discusión de Resultados.
- 5.2 Limitaciones.
 - 5.2.1 Por Modelos Matemáticos.
 - 5.2.2 Por el Equipo Utilizado.
- 5.3 Lineamientos para futuros trabajos.
 - 5.3.1 Ampliación de la Base de Datos.
 - 5.3.2 Biblioteca de Procedimientos y Funciones.
- 5.4 Conclusiones.
- 5.5 Recomendaciones.

ANEXOS

- Anexo N°1 Tablas de Constantes de las Bases de Datos.
- Anexo N°2 Diseño de Platos Perforados para Columnas de Destilación.
- Anexo N°3 Resultados del Programa DESMUL vs CACHE.
- Anexo N°4 Resultados del Programa DESMUL vs WHENDI.
- Anexo N°5 Caso problema y resultados de la Simulación y Optimización.
- Anexo N°6 Listados de Programas.
- Anexo N°7 Análisis Energético para el Caso Problema.
- Anexo N°8 Ejemplo de Cálculo para el Primer Esquema.

BIBLIOGRAFIA.

LISTA DE SIMBOLOS

A	fuerza molecular de atracción reducida
A	constante de la ecuación de Passut y Danner
A	área de transferencia
A'	derivada de A con respecto a la composición
ARM	coeficiente de la ecuación cúbica de Richmond
a	fuerza molecular de atracción. Primer parámetro ec. Soave
B	tamaño de esferas sólida reducida
B	constante de la ecuación de Passut y Danner
B	flujo molar de fondos
B	función de Darreius
B _o	función de Darreius referencial
B'	derivada de B con respecto a la composición
B _{j,1}	parametro de la matriz tridiagonal de la fila j para el compuesto i
b	tamaño de esferas sólida. Segundo parámetro ec. Soave
b ₁	flujo molar de fondos del compuesto i
BRM	coeficiente de la ecuación cúbica de Richmond
C	constante de la ecuación de Passut y Danner
C	numero de compuestos
C	parámetro de la matriz tridiagonal de la fila j para el compuesto i
C	costos
C _T	costo total
C _{pvo}	capacidad calorífica del gas ideal
CRM	coeficiente de la ecuación cúbica de Richmond
D	constante de la ecuación de Passut y Danner
D	flujo molar del destilado
d	depreciación
d ₁	flujo molar del destilado del compuesto i
DRM	coeficiente de la ecuación cúbica de Richmond
E	constante de la ecuación de Passut y Danner
e	numero neperiano
e	exergía
e _a	exergía de una fuente de calor
F	constante de la ecuación de Passut y Danner
F	variables intensivas por especificar
F	flujo molar de alimentación
F	energía pérdida por fricción
f	factor de equivalencia costo equipos / costo servicios
f _{j,1}	flujo molar de alimentación del compuesto i en la etapa j
f ₁	flujo molar de alimentación del compuesto i
f(x)	función en general
f'(x)	primera derivada de la función
f''(x)	segunda derivada de la función
f ₁	fugacidad del componente "i"
f _{1,v}	fugacidad del compuesto i en fase vapor para la mezcla multicomponente
f _{1,l}	fugacidad del compuesto i en fase líquida para la mezcla multicomponente
FNF	flujo neto de fondos
G _o	constante dimensional de fuerza

H	entalpía del vapor
H _j	entalpía del vapor en la etapa j
HK	componente clave pesado
H _l	entalpía del líquido
H ^o	entalpía de referencia a la temperatura T ^o
H _p	potencia
H _v	entalpía del gas real
H _{vap}	entalpía de vaporización
H _{vapb}	entalpía de vaporización a la temperatura normal de ebullición
H _{vo}	entalpía del gas ideal
ΔH	diferencia de entalpías
h	entalpía del líquido
h	entalpía del líquido en la etapa j
I _o	inversión inicial
	compuesto i
	año en curso
K _i	constante de distribución para el compuesto i
k	número de iteraciones
L	flujo molar líquido
L _{e, j}	flujo molar líquido de entrada de la etapa j
L _k	componente clave ligero
L _{s, j}	flujo molar líquido de salida de la etapa j
M	peso molecular
m	pendiente de la relación factor acéntrico vs. temperatura reducida
m	etapas por encima de la etapa de alimentación
m	flujo molar
N	número de etapas
N _{min}	número mínimo de etapas
n	número de componentes
P	presión
P _c	presión crítica
P _{c, s}	presión pseudo-crítica
P _R	fuerzas de repulsión
P _A	fuerzas de atracción
P ^o	presión de referencia
P _r	presión reducida
P _{r, s}	presión pseudo-reducida
p	etapas debajo de la etapa de alimentación
Q	calor requerido, calor transferido
Q _b	calor suministrado al rehornador
Q _c	calor removido del condensador
q	flujo de calor requerido
R	constante universal de gases
R	reflujo
R _{min}	reflujo mínimo
S	entropía
S	flujo molar, salida lateral
S _j	parámetro de agotamiento
S ^o	entropía del gas ideal
T	temperatura
T _c	temperatura crítica
T _{c, s}	temperatura pseudo-crítica

T^o	temperatura de referencia
T_r	temperatura reducida
$T_{r,s}$	temperatura pseudo-reducida
T^b	temperatura normal de ebullición
t	tasa de impuesto
ΔT	diferencia de temperaturas
U	coeficiente de transmisión de calor
V	volumen molar
V	flujo molar gaseoso
V	velocidad
V	ventas
VAN	valor actual neto
$V_{e,j}$	flujo molar gaseoso de entrada de la etapa j
$V_{s,j}$	flujo molar gaseoso de salida de la etapa j
W_o	trabajo ideal
W_s	trabajo suministrado
W_u	trabajo útil
X	variable ec. Gilliland
x	variable
x	fracción molar del compuesto i fase líquida
x_1	variable en la ite
acción 1	
$x_{1,j}$	fracción molar del compuesto i en la etapa j fase líquida
x_1	variable en el punto 1
x_0	variable en el punto 0
Y	variable ec. Gilliland
y_1	fracción molar del compuesto i fase gaseosa
$y_{1,j}$	fracción molar del compuesto i en la etapa j fase gaseosa
Z	factor compresibilidad de gases
Z	altura manométrica
z_1	composición de alimentación del compuesto i
ZRM	compresibilidad inicial en la ecuación cúbica de Richmond
1	propiedad evaluada en el punto 1
2	propiedad evaluada en el punto 2
α	factor de Riedel. Tercer parámetro ec. Soave
α_1	volatilidad relativa del compuesto i
δ	factor de interacción binaria
Φ	raíz ec. Underwood
ϵ	tolerancia
ϵ	parámetro de Letson y Steil
σ	tensión superficial
μ_1	viscosidad del líquido
w	factor acéntrico. Tercer parámetro ec. Soave
(i)	argumento i para una función
[i]	elemento i de un arreglo (vector y matriz)
1..n	varia de 1 hasta n

INTRODUCCION

En el desarrollo de este trabajo, se ha podido constatar la gran ayuda que significa el uso de microcomputadores para fines científicos y sus aplicaciones en ingeniería. En los últimos años, los microcomputadores han tenido una gran expansión y diversificación de su uso. Ello es debido a la facilidad y rapidez de resolver diversas tareas en diferentes campos.

En Ingeniería Química, el uso del computador significó un gran adelanto para la obtención de resultados. Su aplicación se realiza en diversos aspectos, como lo son la evaluación de propiedades físico-químicas, diseño de procesos y equipos, simulación, etc.

La microcomputadora favorece al Ingeniero Químico realizando dos importantes tareas :

- Rapidez en cálculos.
- Manejo de una Base de Datos.

Con ello, el Ingeniero dispone de mayor tiempo para realizar un análisis más profundo y extenso en la interpretación de resultados y toma de decisiones.

CAPITULO I RESUMEN DEL PROYECTO

1.1. OBJETIVOS.

Los objetivos de la Tesis pueden resumirse en tres importantes puntos:

Iniciar la creación de Software Nacional, diseñado de acuerdo a la realidad del país y con los recursos disponibles.

- Poner al alcance de la Facultad de Ingeniería Química y de otras facultades un modesto paquete de programas que sirva como base para futuros programas que desarrollen los alumnos y profesores de la Facultad, así como también aplicarla en la educación y en la industria.
- Actualización en el campo de la Informática en la Facultad de Ingeniería Química, como complemento útil a las necesidades de la Carrera.

1.2. PLANTEAMIENTO Y ENFOQUE DEL PROBLEMA DE DESTILACION.

La Destilación es un proceso que se basa en el equilibrio termodinámico para la separación de sustancias

que se encuentran formando una mezcla homogénea, realizando sucesivas evaporaciones y logrando flujos enriquecidos de dichas sustancias. Como todo proceso se requiere de realizar los Balances de Materia y Energía simultáneamente si se desea simular con gran precisión el fenómeno de destilación. Todos estos balances requieren de parámetros iniciales y de datos físicos y químicos que varían conforme se avance en el proceso.

El cálculo de propiedades termodinámicas utiliza un modelo de ecuación de estado para determinación del estado termodinámico de un fluido¹. Para ello se ha diseñado rutinas de cálculos introduciendo :

- Presión-Temperatura.
Presión-Entalpía.
- Presión-Entropía.
- Temperatura-Entalpía.
- Temperatura-Entropía.

El modelo de destilación utilizado contempla los siguientes puntos que aumenta el grado de complejidad del proceso de separación :

- Separación de Mezclas Multicomponentes.
Alimentaciones Múltiples.
- Corrientes Laterales.
- Condensador Parcial o Total.
- Cálculo de Propiedades Plato a Plato.
- Simulación y Optimización.

Los diversos métodos de diseño de destilación fueron revolucionados por la computadora que usa de principio a fin modelos rigurosos de cálculos de etapas, eficiencia de plato y propiedades físico-químicas. La disponibilidad de estas máquinas, permite la adaptación de modelos en diversas circunstancias. También se tiene ahora un mejor entendimiento del equilibrio de fases en un sistemas de multicomponentes, la aproximación a la etapa teórica y el concepto de eficiencia de transferencia de masa.

La disponibilidad de microcomputadores para el manejo de la enorme carga de cálculos repetitivos, como son los cálculos en determinación de propiedades termodinámicas y la destilación de mezclas de multicomponentes por multietapas, ha hecho posible el poder aproximarse a la solución del problema de diseño. Muchos tipos de problemas son mas tratables para una solución económica. La determinación de la aproximación involucra la selección de las condiciones geométricas y de operación, siguiendo la evaluación y capacidad de separación. Esta es la aproximación utilizada frecuentemente por ingenieros en su trabajo. Por otro lado, la aproximación al diseño es una de las más aceptable; aquí la separación requerida puede ser dato, con condiciones de operación y factores geométricos como respuesta, aunque es simple y obvio, la determinación vs. la superioridad del diseño se puede tener en mente

constantemente.

Enfocando el proceso de manera general se plantea la siguiente figura (Figura 1.1) como camino a seguir durante su desarrollo.

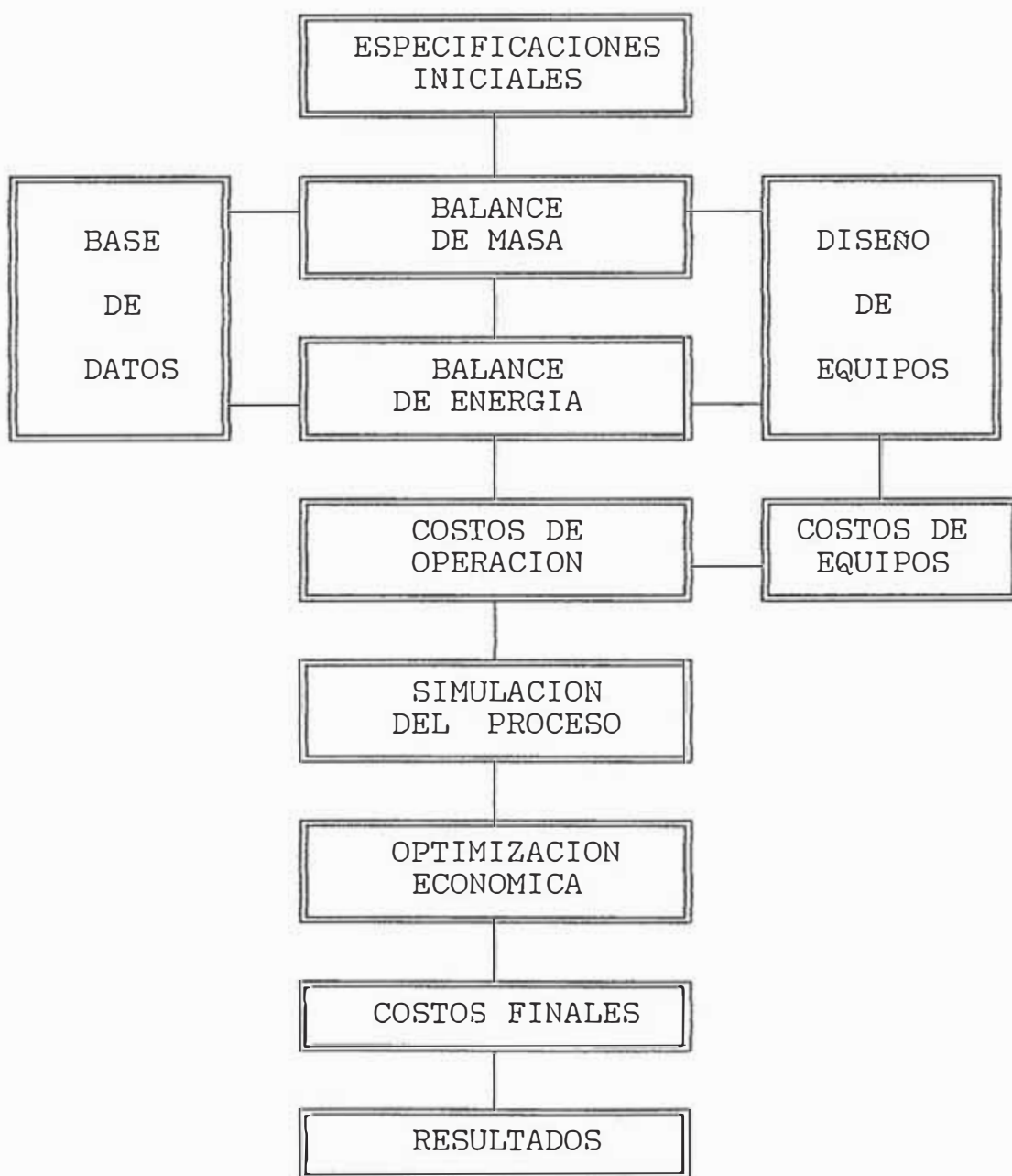


Figura 1.1

El diagrama de flujo puede desglosarse en 4 partes .

- Base de Datos.
- Desarrollo del Proceso.
- Diseño de Equipos.
- Simulación y Optimización.

Cada uno de estos bloques será desarrollado utilizando diferentes medios ofrecidos por el computador.

1.3. MODELAMIENTO Y SIMULACION.

La Simulación viene a ser la aproximación cuantitativa al problema de diseño y operación de procesos, a partir de un modelo matemático desarrollado en forma empírica y/o teórica; en otras palabras se analiza el problema definiendo términos matemáticos. El alcance de la simulación cubre tres áreas importantes de estudios analíticos :

- Investigación y Desarrollo de Nuevos Procesos.
- Optimización de operaciones de proceso.

Cada área de análisis cubre las siguientes categorías :

- Flujo de Fluídos.
- Transferencia de Masa.
- Transferencia de Calor.
- Cinética Química.
- Dinámica y Control del Proceso.
- Termodinámica de la Ingeniería Química.

La Simulación en las áreas mencionadas puede aplicarse en dos formas :

- Simulación en Estado Estacionario y/o No Estacionario, para el dimensionamiento de planta (equipos, producción).

Simulación Dinámica del Proceso para comportamiento y respuesta ante una variación, para el control del proceso (sistema de control).

Estas diferentes aplicaciones de Simulación obedece a las necesidades del Ingeniero en determinar el comportamiento estacionario y/o no estacionario (aplicado al diseño) y dinámico (aplicado al control) de un proceso.

El principio más importante que caracteriza a los simuladores, radica en la modularidad o modelamiento mediante procedimientos que encierran modelos matemáticos. Toda Operación Unitaria (destilación, transferencia de calor) o Proceso Unitario (reacciones de alquilación) está basado en un juego de leyes de la química o física, en las cuales se pueden usar un modelo matemático de la unidad, o puede ser representada por ecuaciones empíricas. El ensamblaje de este juego de ecuaciones matemáticas y técnicas matemáticas para ser resuelto y simular la unidad, da a lugar a la conformación del procedimiento de computación de la unidad. Estos módulos pueden ser conformados para los

diferentes operaciones y procesos unitarios que pueda poseer una planta química. El objetivo de los referidos módulos de computación es de representar los parámetros de las etapas de planta, consistentes en dimensionamiento físico, condiciones de operación, o el estudio del sistema.

La simulación dependerá del grado de sofisticación de los módulos de computación de operaciones y procesos, los que dependerán de cuan cercano se encuentre el modelo matemático propuesto al fenómeno real. Para ello se puede realizar diferentes simulaciones para varios niveles de sofisticación para el mismo tipo de equipo empleado. Usualmente los modelos aproximados se usa para fijar los valores de los parámetros iniciales de la planta en estudio; estos estudios son generalmente usados para establecer las razones de convergencia en investigar el comportamiento de varias técnicas de convergencia. Cabe recordar que mientras más sofisticado sea un módulo de computación, mayor será el costo del tiempo de cálculo, y mayor será el costo de programación.

CAPITULO II FUNDAMENTOS TEORICOS

2.1 CONCEPTOS MATEMATICOS.

Todo fenómeno físico-químico puede ser representado mediante un modelo matemático, conformado por un juego de ecuaciones. Esto hace necesario determinar la forma de encontrar la solución, de manera eficaz y óptima, de modo los resultados sean obtenidos en un mínimo de tiempo y con precisión. Para ello es necesario aplicar las diferentes técnicas de solución para cada una de las formas de ecuaciones existentes.

2.1.1 ECUACIONES Y CORRELACIONES.

Existen diferentes formas de ecuaciones y correlaciones utilizadas durante el desarrollo de este trabajo correspondientes a los diferentes modelos matemáticos que representan los fenómenos físicos-químicos. De acuerdo al grado de complejidad se proponen ecuaciones y correlaciones con la siguiente forma :

- Ecuaciones lineales.

- Polinomios de coeficientes constantes.
- Polinomios con coeficientes variables.
- Sistemas de ecuaciones lineales.
- Ecuaciones no-lineales.
- Sistemas de ecuaciones no lineales.
- Polinomios de multivariantes.

Un modelo matemático aumenta en complejidad conforme las ecuaciones que lo representan contienen muchas variables en forma implícita, obligando a la utilización de técnicas de convergencia para su solución.

2.1.2 SOLUCION DE ECUACIONES.

Generalmente las ecuaciones que describen a los fluidos y su equilibrio entre las fases (vapor y líquido) no pueden ser resueltas explícitamente debido a la complejidad que posee el sistema. Numerosos métodos de cálculo por prueba y error han sido desarrollados. Estos procedimientos tienen como objetivos la determinación de los valores para las variables no conocidas que satisfagan todas las ecuaciones simultáneamente. Raramente es correcto el valor fijado para una primera prueba. Generalmente es necesario realizar varias pruebas para obtener un resultado dentro del criterio seleccionado para la convergencia del modelo matemático y la obtención de la solución. Los procedimientos

mayormente usados para la solución de problemas de destilación se describen a continuación :

- 1) Iteración Directa² . Comúnmente conocida con el nombre de "iteración" o iteraciones sucesivas, es un procedimiento natural, el cual no requiere de matemáticas avanzadas sino de un ordenamiento adecuado de la ecuación para lograr la convergencia deseada. El método se basa en suponer un rearrreglo en la siguiente forma :

$$x = f(x) \qquad 2-1$$

Se requiere de una primera aproximación de la raíz y luego de relacionar de la siguiente forma :

$$x_{i+1} = f(x_i) \quad i=1,2,3,\dots \qquad 2-2$$

Su desventaja es su lenta convergencia con respecto a otros métodos, pero se tiene en cuenta que es muy útil para convergencia del tipo lineal.

- 2) Método de Newton² .- Consiste en un procedimiento sistemático de prueba y error, utilizando el concepto de la primera derivada. Se supone que se desea encontrar el valor de "x" tal que $f(x) = 0$. El

método de Newton consiste en usar los primeros términos de la expansión de Taylor como sigue :

$$f(x) = f(x_i) + f'(x_i) (x - x_i) \quad 2-3$$

Reordenando la ecuación e igualando $x - x_{i+1}$ y $f(x) = 0$, tenemos:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \quad 2-4$$

El Método de Newton converge cuadráticamente, pero la primera iteración debe ser escogida cuidadosamente. Otra dificultad en usar este método es que requiere la evaluación de $f(x)$ y $f'(x)$ para cada iteración. La evaluación de las derivadas de funciones, encontradas en cálculos en Ingeniería Química es frecuentemente un proceso laborioso.

3) Método de la Bisectriz² .- Asume que la ecuación $f(x)$ es continua en un intervalo (x_0, x_1) y que $f(x_0) \cdot f(x_1) < 0$. Con ello se asegura que existe una raíz real en el intervalo definido. Este intervalo puede ser bisechado. Para ello se hace un subintervalo $I_1 (x_1, x_2)$, donde los valores de la función de los extremos sean de diferente signo, y

se fija x_2 con la semisuma de x_0 y x_1 . Este proceso es realizado hasta llegar a la raíz de la ecuación. Aunque este método es muy lento, la técnica es segura y converge cuando es usado con propiedad. Las ventajas de esta están en que se puede predecir el número de iteraciones mediante la fórmula :

$$k > \frac{\log \left[\frac{(x_1 - x_0)}{\epsilon} \right]}{\log 2} \quad 2-5$$

donde k es el número de iteraciones y ϵ es la tolerancia.

- 4) Método de Richmond³ .- Es muy similar al método de convergencia de Newton, con la diferencia de que incluye un término más, en función de la segunda derivada.

$$f(x_0) - (x - x_0) \left[f'(x_0) + (x - x_0) \frac{f''(x_0)}{2} \right] = 0 \quad 2-6$$

El término $(x - x_0)$ entre los corchetes, se reemplaza por la ecuación deducida del método de Newton, obteniendo la siguiente expresión :

$$x = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0) - \frac{f(x_0) f''(x_0)}{2 f'(x_0)}} \quad 2-7$$

Aunque el método de Richmond requiere evaluar la segunda derivada, $f''(x_0)$, esta generalmente toma menos tiempo de computación que la de Newton-Raphson para la misma tolerancia.

2.2 CONCEPTOS TERMODINAMICOS.

El concepto termodinámico más importante es la relación de equilibrio de fases entre el líquido y vapor. Esta relación de equilibrio junto con los conceptos matemáticos determinan los procedimientos a emplearse como por ejemplo la estimación de puntos de burbuja y rocío, así como los procesos de evaporación instantánea (flashing). El factor más importante dentro de las ecuaciones termodinámicas que intervienen es la razón de distribución líquido-vapor, comúnmente llamada constante de equilibrio (K_1).

Otro concepto importante que interviene en la relación de equilibrio termodinámico y en la determinación de propiedades físicas es la "Ecuación de Estado".

La ecuación de estado tendrá entonces dos aplicaciones dentro de la simulación de destilación : la estimación de propiedades físicas como el volumen específico (tanto para la fase vapor como la fase líquida); y su evaluación de propiedades y desviaciones de los modelos ideales con respecto al modelo real. Para el tratamiento de las ecuaciones que plantean estos dos conceptos, es necesario disponer de una base de datos de propiedades físicas intrínsecas a los componentes utilizados en las simulaciones (Peso Molecular, Temperatura Normal de Ebullición de un compuesto puro, Propiedades Críticas, etc.), así como las constantes de las correlaciones y las ecuaciones involucradas en los modelos planteados (Factor Acéntrico, Presiones de Vapor, Factor de Compresibilidad Crítico, etc.).

Por lo tanto, un programa de Simulación para un Sistema de Multicomponentes necesitará una base de datos que solucionará los requerimientos internos del programa.

2.2.1 PROPIEDADES TERMODINAMICAS.

Dentro de las propiedades físicas y termodinámicas se han seleccionado aquellas que intervienen en el equilibrio termodinámico y en la evaluación del estado termodinámico. Estas propiedades conformarán la base de

datos que los módulos de diseños consultarán a lo largo de la ejecución de los programas.

2.2.1.1 PROPIEDADES CRITICAS Y REDUCIDAS.

1) Propiedades Críticas.- La generalización de la ley de estados correspondientes sirve para expresar la dependencia de propiedades físico-químicas de las sustancias, con las fuerzas intermoleculares y relacionar las propiedades críticas en la misma forma para todos los compuestos. Las propiedades críticas de un compuesto se define como el punto máximo donde pueden coexistir la fase líquida y la del vapor. Esto nos daría valores de presión, temperatura y volumen crítico. Los valores críticos para el sistema de compuestos utilizada en las correlaciones se encuentran dentro de las tablas del Anexo 1.

2) Propiedades Reducidas.- La relación de presión y volumen a una temperatura constante difiere para diferentes sustancias, pero si la presión, el volumen y la temperatura están relacionados a las correspondientes propiedades críticas, la función que relaciona las propiedades reducidas conlleva a lo mismo para diferentes sustancias. Las propiedades

reducidas está comúnmente expresada como una fracción de la propiedad crítica :

$$P_r = \frac{P}{P_c} \quad ; \quad T_r = \frac{T}{T_c} \quad ; \quad V_r = \frac{V}{V_c} \quad 2-8$$

La importancia de la ley de estados correspondientes reside en las relaciones de datos de P-V-T usando el factor de compresibilidad :

$$Z = \frac{P V}{R T} \quad 2-9$$

Los valores de estas propiedades han sido halladas experimentalmente, pero es necesario realizar estimaciones para muchas sustancias que todavía no han sido estudiadas. Entre los métodos de estimación podemos citar los métodos de incrementos por contribución estructural de los compuestos como lo es el método de Lyndersen^{3,4}; las correlaciones empíricas, modelos matemáticos basados en datos experimentales (ej. T_b , T_c , y SG utilizados en el método de Spencer y Daubert³) y generalizadas para familias de compuestos.

3) Factor Acéntrico. - El factor acéntrico es una de las constantes más comunes de los compuestos puros y

está definida por ·

$$\omega = -\log(P_r^{sv}) + 1 ; @ T_r = 0.7 \quad 2-10$$

Originalmente se propuso, que el factor acéntrico representa la no esfericidad de las moléculas (acentricidad). Para gases monoatómicos su valor es igual a cero, para hidrocarburos livianos tendrá valores pequeños, incrementándose cuando aumente de tamaño la molécula o aumente su polaridad.

- 4) Regla de Mezcla para Multicomponentes.- La regla de mezcla que de utilizarse para mezcla multicomponentes debe de fijarse del modo como lo indique la correlación utilizada. El método seguido por la regla de mezcla obedece a la comparación entre los datos experimentales contra el modelo utilizado con la regla de mezcla establecida.

La base de datos para la familia de hidrocarburos escogidos, ha sido tomada del libro de Reid, Prausnitz y Sherwood⁴; y no ha sido necesaria la estimación de propiedades críticas por encontrarse estos valores derivados de las ecuaciones antes mencionadas.

La decisión de tomar la ley de estados correspondientes (T_r, P_r, w) para la evaluación de propiedades termodinámicas y otras propiedades basadas en la definición de fuerzas intermoleculares, se fundamenta en realizar el sistema multicomponente lo más general posible, ya que es más simple el tratar con un sólo modelo (ecuación) dentro de un sistema de multicomponentes que con una ecuación particular para cada uno de los compuestos.

2.2.1.2 DENSIDAD MOLAR. ECUACION DE ESTADO.

La determinación del volumen molar a través de una ecuación de estado es uno de los problemas más frecuentes de la termodinámica. La elección de la ecuación de estado obedece a que esta debe utilizar las propiedades críticas y la ley de estados correspondientes (T_r, P_r, w). Dentro de estos tipos de ecuaciones encontramos tres modelos de gran interés :

- La Ecuación Modificada B-W-R.
- La Ecuación de Soave.
- La Ecuación de Peng-Robinson.

1) La Ecuación Modificada de B-W-R⁵ .- El suceso de la ecuación original de Benedict-Webb-Rubin para calcular las propiedades termodinámicas de gases

puros y líquidos llevó a un gran número de estudios en la ecuación o una modificación de esta, a ser generalizada para aplicarlas a muchos tipos de compuestos. Lee-Kesler^{3,5,6} desarrolló una modificación de la ecuación con el contexto de la correlación de tres parámetros de Pitzer (Tr,Pr,w).

- 2) La Ecuación de Soave-Redlich-Kwong⁷ .- La ecuación de estado de Redlich-Kwong es considerada comúnmente la mejor ecuación de estado de dos parámetros que se ha propuesto hasta ahora. Desde entonces numerosas modificaciones han sido realizadas para el mejoramiento de las predicciones en el equilibrio líquido-vapor.

Una de estas modificaciones ha sido realizada por Soave⁷ en 1972, ganando gran aceptación por procesos de la industria de hidrocarburos por la simplicidad que ofrece comparada esta misma con la ecuación de BWR, y por la capacidad de generar con razonable aproximación razones de equilibrio en sistema de líquido-vapor.

- 3) La Ecuación de Peng-Robinson⁸ . Otra de las modificaciones de la ecuación de Redlich-Kwong, considerada tan buena como la de Soave, fue propuesta por Peng-Robinson⁸ en 1976. Esta ecuación

muestra grandes ventajas en la predicción de densidades en la fase líquida con respecto a la ecuación de Soave.

De estas ecuaciones planteadas, se ha escogido la ecuación de estado de Soave, por presentar una forma sencilla, solución sumamente rápida, y el tratamiento termodinámico mas simple :

CUADRO 2.1

Ecuación	Tipo de Ecuación	Solución
BWR modificada	Polinomial de 5to grado con término complejo	Iterativa
RK modificada	Polinomial de 3er grado	Exacta o Iterativa

A) Formulación de la ecuación de Soave: Las ecuaciones semiempíricas de estado generalmente expresan la presión como la suma de dos términos, una presión debido a las fuerzas de repulsión (P_R) y otra presión debido a la fuerza de atracción (P_A) como sigue:

$$P = P_R + P_A$$

2-11

Las fuerzas de repulsión están expresadas por el primer término :

$$P_R = \frac{R T}{V - b} \quad 2-12$$

En el segundo término, las fuerzas de atracción pueden expresarse como :

$$P_A = -\frac{a}{g(V,b)} \quad 2-13$$

donde $g(V,b)$ es una función del volumen molar y la constante "b" (relacionada con el tamaño de una esferas sólidas). El parámetro "a" puede ser relacionado como una medida de las fuerzas moleculares de atracción. Al aplicar el criterio de la primera y segunda derivada en el punto crítico, se puede obtener los valores de "a" y "b" en términos de la temperatura y presión crítica. Mientras que "b" es usualmente tratado como independiente de la temperatura, el parámetro "a" es un factor dependiente de la temperatura por su relación con las fuerzas moleculares de atracción. Escogiendo una función $g(V,b)$ adecuada se puede predecir el factor de compresibilidad mas aproximado al valor real. Este efecto de considerar factores acéntricos y temperaturas reducidas mejora la predicción de presiones de vapor para sustancias puras, y consecuentemente por razones de equilibrio

(K_1) para mezclas.

La Ecuación de Soave presenta la siguiente forma :

$$P = \frac{R T}{V - b} * \frac{a(T)}{V (V + b)} \quad 2-14$$

y puede ser expresada en función del factor de compresibilidad Z :

$$Z^3 - Z^2 + (A - B + B^2) Z - A B = 0 \quad 2-15$$

$$A = \frac{a(T) P}{R^2 T^2} \quad 2-16$$

$$B = \frac{b P}{R T} \quad 2-17$$

$$Z = \frac{P V}{R T} \quad 2-18$$

Esta ecuación brinda tres raíces dependiendo del número de fases en el sistema. En la región de dos fases, la raíz positiva más grande corresponde al factor de compresibilidad del vapor mientras que la raíz más pequeña corresponde a la del líquido, para compuestos puros.

Aplicando la ecuación de estado en el punto

crítico encontramos las siguientes relaciones :

$$a(T_c) = 0.42748 \frac{R^2 T_c^2}{P_c^2} \quad 2-19$$

$$b(T_c) = 0.08664 \frac{R T_c}{P_c} \quad 2-20$$

$$Z = 0.307 \quad 2-21$$

A otras temperaturas de la crítica, encontramos :

$$a = a(T_c) \alpha(T_r, w) \quad 2-22$$

$$b = b(T_c) \quad 2-23$$

La función $\alpha(T_r, w)$ ha sido deducida aplicando el concepto de fugacidad, la condición de equilibrio y la presión de vapor a una temperatura reducida de 0.7 (definición del factor acéntrico). Bajo estos criterios se deduce la siguiente ecuación :

$$\alpha^{1/2} = 1 + m (1 - T_r^{1/2}) \quad 2-24$$

$$m = 0.48 + 1.574 \omega - 0.1.76 \omega^2 \quad 2-25$$

B) Sistemas Multicomponentes : En sistema de mezcla multicomponente se aplica la regla de mezcla establecida para la ecuación de estado. Los

parámetros usados en la ecuación de Soave (a,b) siguen una regla de mezcla como se expone a continuación:

$$a = \sum \sum x_i x_j a_{ij} \quad 2-26$$

$$b = \sum x_i b_i \quad 2-27$$

$$a_{ij} = (1 - \delta_{ij}) a_i^{1/2} a_j^{1/2} \quad 2-28$$

El parámetro δ_{ij} es determinado empíricamente, caracterizando el coeficiente interacción binaria.

Aplicando las ecuaciones termodinámicas para la determinación de la fugacidad se encuentra la siguiente expresión :

$$\ln\left(\frac{f_i}{yP}\right) = -\ln(Z_v - B) + (Z_v - 1)B'_i - \frac{A}{B}[A'_i - B'_i] \ln\left(1 + \frac{B}{Z_v}\right) \quad 2-29$$

$$A'_i = \frac{1}{a} 2a_i^{1/2} \sum x_j a_j^{1/2} (1 - \delta_{ij}) \quad , \quad B'_i = \frac{b_i}{b} \quad 2-30$$

$$A = \frac{aP}{(RT)^2} \quad ; \quad B = \frac{bP}{RT} \quad 2-31$$

2.2.1.3 CONSTANTE DE DISTRIBUCION.

El cálculo del equilibrio líquido-vapor precisa del conocimiento de los coeficientes de equilibrio definidos termodinámicamente como la relación de la fracción molar en la fase vapor y la fracción molar de la fase líquida, para un componente "i" :

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} \quad 2-32$$

Recordemos también que la expresión de este coeficiente K_i se obtiene al igualar las fugacidades de los componentes en el líquido ($f_{i,l}$) y el vapor ($f_{i,v}$) en equilibrio¹

$$f_{i,v} = f_{i,l} \quad 2-33$$

El cálculo de esta constante puede realizarse a través de una ecuación de estado, relacionando los valores de los coeficientes de fugacidad para la fase vapor como para la fase líquida. Esta forma de obtener el valor del K_i para un sistema de mezcla multicomponente es tedioso e iterativo, debido a la dependencia de estos parámetros con el valor de las concentraciones que generalmente en los procesos de equilibrio de fases son

incógnitas del sistema.

Varias asunciones pueden ser realizadas para simplificar el cálculo del valor del K_1 . Por supuesto estas asunciones limitan la aplicabilidad, por lo que ciertas condiciones deben ser exigidas para la confiabilidad de los resultados.

Una expresión simple para el cálculo de la constante de equilibrio está dada por la expresión deducida por Wilson⁹, la que asume que :

$$K_1 = \frac{e^{5.37 (1+v_1) (1-\frac{1}{T_{r1}})}}{P_{r1}} \quad 2-34$$

Esta forma de expresar K_1 , tiene la ventaja de estar sólo en función de las constantes críticas, y es independiente de la composición del sistema. La constante de distribución es restringida sólo para sistema que contenga compuestos homólogos.

Mayor precisión en el cálculo de la constante de distribución para equilibrio líquido-vapor se logra utilizando modelos más rigurosos.

2.2.1.4 ENTALPIA Y ENTROPIA.

1) Entalpía.- El calor específico de gases es dado como un polinomio en temperatura. La integración del calor específico nos da la entalpía¹⁰ del gas ideal a una temperatura T referida a una temperatura T₀.

$$H_v^o = \int_{T_0}^T C_{p_v}^o dT = \sum_{i=1}^n a_i (T-T^o)^i \quad 2-35$$

Passut y Danner³ propusieron la siguiente ecuación para calcular H_{v,0}, para H^o=0 a T=0°R :

$$H_v^o = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4 + FT^5 + H^o \quad 2-36$$

Cuando la ley de gas ideal asumida no es válida, se usa una expresión derivada del modelo de ecuación de estado utilizada para obtener la entalpía a la presión de trabajo. Para una especie pura o mezclas la entalpía del vapor es :

$$H_v = \sum_{i=1}^n (y_i H_{v,i}) + (H_v - H_v^o) \quad 2-37$$

y la entalpía del líquido es :

$$H_1 = \sum_{i=1}^n (y_i H_{1,i}) + (H_1 - H_v^o) \quad 2-38$$

Las ecuaciones muestran en su segundo término la desviación del modelo real con respecto al ideal. Utilizando la ecuación de estado de Soave se deduce la siguiente expresión para la desviación de la entalpía con respecto a la presión :

$$\frac{H - H_v^o}{RT} = (Z-1) + \frac{T \frac{dA}{dT} - A}{B} \ln \left(\frac{Z+B}{Z} \right) \quad 2-39$$

Esta ecuación es aplicable tanto para la fase vapor como para la fase líquida .

2) Entalpía de Vaporización .- Para la deducción de la entalpía de vaporización, simplemente se resta de la entalpía del gas (H_v) menos la entalpía del líquido (H_l) :

$$\Delta H_{vap} = H_v - H_l \quad 2-40$$

Otro método aproximado de la entalpía del vapor y del líquido es la de estimar las entalpías de los compuestos puros aplicando la ecuación de Danner y Passut para la estimación de la entalpía del vapor y

restándole el calor latente de vaporización según la siguiente ecuación para la estimación de la entalpía del líquido :

$$\Delta H_{vap} = \Delta H_{vap}^b \left(\frac{1-T_r}{1-T_r^b} \right)^{0.30} \quad 2-41$$

Otros trabajos para la estimación de la entalpía de mezcla existen en las diferentes experiencias realizadas sobre este tema. Uno de estos trabajos utiliza la correlación de Lee-Kesler a partir de la ecuación de BWR modificada, extendiendo su uso para fracciones de petróleo⁴.

- 3) Entropía.- La entropía se relaciona con la capacidad calorífica y es función de la temperatura referida a una temperatura T_0 :

$$dS = \frac{Cp_v^0}{T} dT \quad 2-42$$

A partir del polinomio de Passut y Danner³, se evalúa el siguiente polinomio para calcular S_0 :

$$S_o = B \ln(T) + 2CT + \frac{3}{2}DT^2 + \frac{4}{3}ET^3 + \frac{5}{4}FT^4 + G \quad 2-43$$

La expresión derivada para gases reales utilizando el modelo de ecuación de estado que evalúa la desviación con respecto a la presión :

$$\frac{S - S_o}{R} = \ln \frac{P}{P^o} + \ln(Z-B) + \frac{A}{B} \frac{T}{a} \frac{da}{dT} \ln \left(\frac{Z+B}{Z} \right) \quad 2-44$$

La entropía sólo es calculado para el estado gaseoso. En la fase líquida no es de mucha aplicación en termodinámica, aunque la forma de cálculo es muy similar a la entalpía.

2.2.1.5 VISCOSIDAD Y TENSION SUPERFICIAL.

- 1) Viscosidad.- Entre la viscosidad del vapor y la viscosidad del líquido, la variable más importante por efecto en el sistema es la ofrecida por el líquido, siendo importante en el diseño del plato.

La correlación de la viscosidad del líquido puro expresada en función de las constantes reducidas viene dada por la ecuación de Letson y Steil¹¹ :

$$\mu_1 \epsilon = (\mu_1 \epsilon)_0 + \omega (\mu_1 \epsilon)_1 \quad 2-45$$

$$\epsilon = \frac{T^{\frac{1}{6}}}{M^{\frac{1}{2}} P^{\frac{2}{3}}} \quad 2-46$$

$$(\mu_1 \epsilon)_0 = 0.015174 - 0.02135 T_r + 0.0075 T_r^2 \quad 2-47$$

$$(\mu_1 \epsilon)_1 = 0.042552 - 0.07674 T_r + 0.0340 T_r^2 \quad 2-48$$

El valor de la viscosidad se encuentra en centipoises y es válido a altas temperaturas ($T_r > 0.75$).

2) Tensión Superficial.- El método desarrollado por Brock y Bird¹¹ es usado para estimar la tensión superficial entre el vapor saturado y el líquido saturado :

$$\sigma P^{\frac{2}{3}} T^{\frac{1}{3}} = (0.491 + 0.656 \omega) (1 - T_r)^{\frac{11}{9}} \quad 2-49$$

El valor de σ se encuentra en dinas/cm.

2.2.2 PROCESOS TERMODINAMICOS.

Las variables, ecuaciones y grados de libertad, así como la determinación de las variables de diseño para un sistema de equilibrio de fases configura una de las etapas seguida para la solución del problema. A partir de este punto se tendrá que escoger la diversidad de métodos y procedimientos de solución propuestos por diferentes investigadores, de los cuales la elegida debe moldearse a los requerimiento del problema y la capacidad disponible del computador.

2.2.2.1 EQUILIBRIO LIQUIDO-VAPOR.

El procedimiento de cálculo del equilibrio entre las fases puede plantearse como un módulo de análisis, estableciendo las variables, ecuaciones y grados de libertad para su sucesiva programación. Las ecuaciones que intervienen en este proceso las determinamos por :

Tabla 2.1

- $z_i F = x_i L + y_i V$	B.M.C. (C ecuaciones).
- $y_i = K_i x_i$	E.L.V. (C ecuaciones).
- $K_i = f(P,T,x_i,y_i)$	P.T. (C ecuaciones).
- $\sum x_i = 1 \quad \sum y_i = 1 \quad \sum z_i = 1$	F.M. (3 ecuaciones).
Las variables utilizadas son	4C + 5 variables.
El número de ecuaciones son	3C + 3 ecuaciones.
Grados de Libertad	C + 2 variables.

Siempre estarán definidas las composiciones de la alimentación z_1 , restando 2 variables por definir según el cálculo que se desea realizar :

- a) Escogiendo la presión y la relación V/F podemos determinar la temperaturas de rocío ($V/F = 1$), la temperatura de burbuja ($V/F = 0$), y la temperatura para una fracción de mezcla vaporizada ($0 < V/F < 1$).
- b) Escogiendo la presión y temperatura podemos determinar si la mezcla se encuentra como líquido, vapor o una mezcla de ambas, determinando la fracción vaporizada V/F .
- c) Escogiendo la temperatura y la relación V/F se puede determinar la presión de saturación (similar al caso a)).

Para los casos tenemos diferentes condiciones cualitativas que determinan el estado termodinámico para un sistema

- 1) Punto de Burbuja.- De las expresiones de equilibrio deducimos una ecuación para la determinación del punto de burbuja :

$$x_1 = z_1 \quad 2-50$$

$$y_1 = K_1 x_1 = K_1 z_1 \quad 2-51$$

Por lo tanto la ecuación (en función de la variable por determinar) a resolver es :

$$\sum K_i(T, P, y_i, z_i) z_i = 1 \quad 2-52$$

2) Punto de Rocío.- El análisis para el punto de rocío es similar a la del punto de burbuja. Las ecuaciones que intervienen son :

$$y_i = z_i \quad 2-53$$

$$x_i = \frac{y_i}{K_i} = \frac{z_i}{K_i} \quad 2-54$$

Por lo tanto la ecuación (en función de la variable por determinar) a resolver es :

$$\sum \frac{z_i}{K_i(T, P, x_i, z_i)} = 1 \quad 2-55$$

3) Separación Instantánea (Flashing) .- Para realizar la separación instantánea (flashing), es necesario tener como datos iniciales la presión y temperatura del proceso para la determinación de la fracción de vapor o líquido. Previo cálculo debemos tener la seguridad de encontrarnos en la zona de dos fases

líquido-vapor. Para ello, la temperatura debe estar entre las temperaturas de rocío y de burbuja de la mezcla, si se mantiene constante la presión; o de otra forma, la presión debe estar entre las presiones de burbuja y rocío de la mezcla, si se mantiene constante la temperatura. Si la temperatura del sistema es menor que la temperatura de burbuja o la presión mayor que la presión de burbuja, se observa que

$$\sum z_i K_i < 1 \quad 2-56$$

debido a que a temperatura más bajas o presiones más altas se obtiene valores de K_i más bajos; mientras que si la temperatura del sistema es mayor que la temperatura de rocío o la presión es menor que la presión de rocío, se observa que :

$$\sum \frac{z_i}{K_i} < 1 \quad 2-57$$

debido a que a temperaturas más altas o presiones más bajas se obtienen valores de la inversa de K_i mas bajos. Luego si no se cumplieran ambas relaciones anteriores se procederá a realizar un cálculo de la fracción vaporizada, ya que se esta en

la zona líquido-vapor. Esta prueba que se realiza antes del procedimiento de cálculo tiene como objetivo eliminar la posibilidad de obtener valores negativos o mayores que la unidad para la fracción vaporizada, lo que físicamente no tiene sentido. La relación V/F en una mezcla multicomponente a presión y temperatura dadas en la región líquido-vapor, se obtiene con las siguientes ecuaciones :

$$x_i = \frac{z_i}{1 + \frac{V}{F}(K_i - 1)} \quad 2-58$$

$$y_i = \frac{z_i K_i}{1 + \frac{V}{F}(K_i - 1)} \quad 2-59$$

Restando ambas expresiones y aplicando la sumatoria de fracciones molares :

$$\sum y_i - \sum x_i = \frac{z_i (K_i - 1)}{1 + \frac{V}{F}(K_i - 1)} = 0 \quad 2-60$$

Cuando la sumatoria de las fracciones molares es igual a cero se ha hallado el valor correcto de V/F. Este método fue desarrollado por Rachford - Rice.³

2.2.2.2 COMPRESION Y EXPANSION ISOENTROPICA.

Los procesos de compresión y expansión pueden ser representados mediante la ecuación de la primera ley de la termodinámica para un proceso de flujo^{1,6,12}:

$$\Delta H = Q - W_p \quad 2-61$$

En un proceso adiabático, el calor entregado es igual a cero, y el cambio de entropía del fluido es nula, por lo tanto la ecuación se reduce a la siguiente expresión :

$$\Delta H = -W_p \quad 2-62$$

De acuerdo a la ecuación deducida, el trabajo necesario para efectuar una compresión adiabática o el trabajo suministrado por un expansión adiabática está dada por la diferencia de entalpía existentes entre el fluido saliente y entrante. En general en los diseños de compresores y expansores se especifican las condiciones de entrada (presión y temperatura) y la presión de salida deseada. Dado que la variación de entropía es nula para un fluido sometido a un proceso adiabático, la entropía del fluido que sale debe ser igual a la entropía del fluido que entra. Por lo tanto si conocemos dos

propiedades cualquiera del fluido que entra al proceso, podemos fijar el estado del fluido y determinar su entropía. De la entropía de entrada, conocemos la entropía de salida que junto a la presión de salida, fija el estado del fluido que sale del proceso.

2.2.2.3 EXPANSION ISOENTALPICA.

Razonamiento similar se efectua para procesos isoentálpicos. De la primera ley de la termodinámica, se deduce una ecuación para un proceso adiabático^{1,6,12}:

$$Q = W_p \qquad 2-63$$

La ecuación muestra que el calor generado se transforma en trabajo obtenido. Se trata sólo de expansión isoentálpica, realizada con un tipo de dispositivo, ya que la compresión isoentálpica es un proceso imposible de realizar experimentalmente.

Es por ello, que es necesario disponer de un juego de ecuaciones que a partir de la base de datos evaluen las propiedades termodinámicas (presión, temperatura, volumen, entalpía, entropía y demás derivadas), para poder construir los procedimientos de cálculos de los procesos termodinámicos^{1,6,12}.

2.3 PROCESO DE SEPARACION MULTICOMPONENTE: DESTILACION.

El diseño de equipos de separación multietapas que conduce a separación de multicomponentes (destilación) requiere rigurosamente determinar temperaturas, presiones, flujo de corrientes, composición de corrientes de flujo, y razones de transferencia de calor para cada etapa. Esta determinación es hecha resolviendo los balances de masa, energía y las relaciones de equilibrio para cada etapa. Desafortunadamente las relaciones no son del tipo lineal, y las ecuaciones encontradas interactúan fuertemente. Consecuencia de ello, la solución se hace relativamente dificultosa y tediosa.

2.3.1 MODELADO DEL PROCESO DE DESTILACION.

El modelo básico para el proceso de destilación radica en el equilibrio existente en las etapas y en el balance de masa y energía que se realiza alrededor de esta. A partir de este modelo básico se obtienen diferentes esquemas de equilibrio en la torre de destilación; según esto se realiza un análisis sobre el grado de libertad en cada etapa a la que se llamará módulo, el cual se integra dentro del proceso total para obtener el grado de libertad de la columna de destilación multicomponente

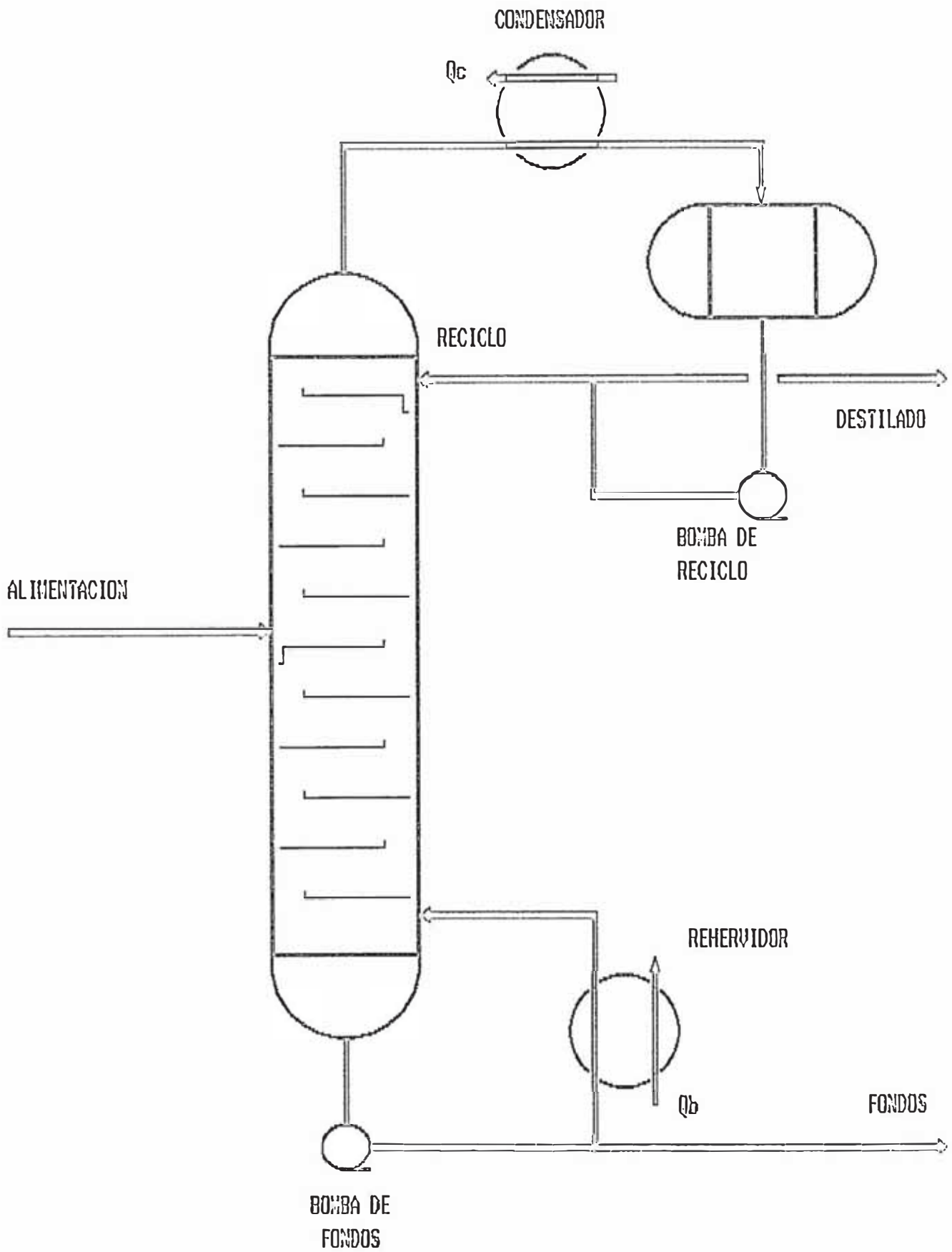


Figura 2.1

La torre de destilación la podemos dividir en tres tipos de módulos :

- 1) El módulo de análisis de equilibrio en una etapa.
- 2) El módulo de análisis condensador.
- 3) El módulo de análisis rehervidor.

Dentro de cada uno de los tipos de módulos existen variantes originado por el tipo de proceso que ocurre, pero se puede generalizar de tal manera que exista un módulo de análisis del fenómeno que enfoque todas las variantes existentes .

Luego de analizar individualmente cada proceso y plantear las variables y ecuaciones que se encuentran involucradas, se procederá a la construcción de la torre de destilación, entrelazando los módulos uno tras otro, de acuerdo al proceso y determinar el grado de libertad global del sistema integrado¹³.

2.3.2 BALANCE DE MATERIA Y ENERGIA.

Para realizar un Balance de Materia y de Energía en un proceso establecido es necesario tener las condiciones y especificaciones requeridas de operación y diseño. En el caso estudiado, en forma general, se plantearán dichos balances de la manera más general posible, primero por

medio de un balance de materia alrededor de toda la columna, en la que se incluye alimentaciones múltiples, salidas laterales de producto, intercambiadores de calor laterales, el condensador de tope parcial o total, y el rehervidor de fondos. Luego se efectúa un Balance de Materia y Energía simultáneo para cada una de las etapas de la columna. Este procedimiento de cálculo determina un modelo matemático consistente en un procedimiento de cálculo que varía de acuerdo al método planteado (método de Lewis-Matheson, método de Thiele-Geddes, método de la matriz tridiagonal, método θ , etc.)

Variables de las Corrientes¹⁰ .- Para cada corriente en una sola fase y conteniendo C componentes, se especifica mediante las C-1 fracciones molares, la temperatura y la presión. Aplicando la regla de fases

$$F = C + 2 - \phi \qquad 2-64$$

el valor de F para estas corrientes es

$$F = C + 2 - 1 - C + 1 \qquad 2-65$$

variables intensivas que deben ser especificadas. Esta puede ser añadida incluyendo el flujo como variable extensiva.

Finalmente se incluye la relación de la suma de las fracciones molares :

$$\sum z_i = 1 \quad 2-66$$

relación que siempre es tratada implícitamente. Luego, asociada a cada corriente se tiene $C + 3$ variables consistentes en :

- Fracción molar · $z_1, z_2, z_3, \dots, z_c$
- Flujo molar : F
- Temperatura · T
- Presión : P

2.3.3 ETAPA DE EQUILIBRIO.¹⁰

El módulo elemental para una etapa de equilibrio dentro de una torre de destilación multicomponente corresponde a una etapa adiabática de equilibrio donde se tiene cuatro corrientes : dos flujos de entrada, una como vapor y otra como líquido y dos corrientes de salida, también una como vapor y la otra como líquido. A partir de este módulo se puede obtener la correspondiente etapa con extracción de calor agregando o quitando calor mediante interrehervidores o intercondensadores. Una línea de alimentación añadida daría una etapa de alimentación, y finalmente se retiran dos líneas

laterales para el vapor y el líquido.

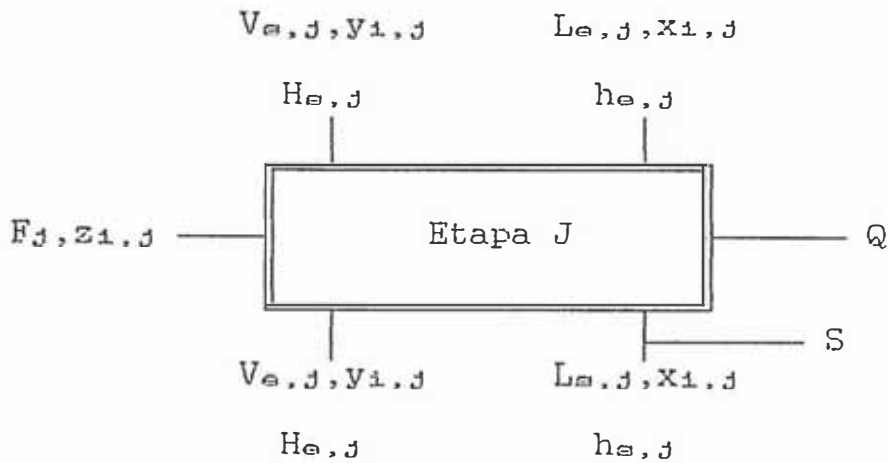


Figura 2.2

Tabla 2.2

Número de Variables	$6 (C + 3) + 1 = 6 C + 19$
Ecuaciones	
- Igualdad de Presiones	2
- Igualdad de Temperaturas	2
- Relaciones de Equilibrios de Fases	C
- Balance de Materia por componente	C - 1
- Balance Total de Materia	1
- Balance Total de Energía	1
- Sumatoria de las Fracciones	6
- Igualda de Composiciones	C - 1

Número de Ecuaciones	3 C + 10
Grado de Libertad	$(6 C + 19) - (3 C + 10) = 3 C + 9$
Especificaciones	
- Fracciones molares, fase líquida(entrada)	C - 1
- Fracciones molares, fase vapor(entrada)	C - 1
- Fracciones molares, alimentación	C - 1
- Flujo de líquido(entrada)	1
- Flujo de vapor(entrada)	1
- Flujo de alimentacion(entrada)	1
- Temperatura y Presión de flujos(entrada)	6
- Presión de la etapa	1
- Temperatura de la etapa	1
- Calor Transferido	1

Número de Especificaciones	3 C + 9

El modelo matemático se representa en la figura 2.2, con sus respectivas líneas de proceso; 5 corrientes, 3 de alimentación y 2 de salida (se incluye la corriente S en la variable $L + S$) de la etapa. Como se especifica anteriormente las corrientes están asociadas con $C + 3$ variables, más el calor transferido a la etapa.

2.3.4 CONDENSADOR DE TOPES Y REHERVIDOR DE FONDOS.¹⁰

Estos dos análisis pueden ser tratados en la misma forma, debido a que se trata de procesos reversos.

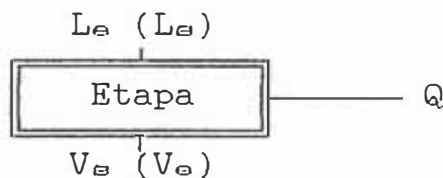


Figura 2.3

Las variables y ecuaciones así como el grado libertad se muestra a continuación:

Tabla 2.3

Número de Variables	$2 (C + 3) + 1 = 2 C + 7$
Ecuaciones	
- Balance de Materia por Componente	$C - 1$
- Balance Total de Materia	1
- Balance Total de Energía	1
- Sumatoria de Fracciones	2

Total de Ecuaciones	$C + 3$
Grado de Libertad :	$2 C + 7 - (C + 3) = C + 4$

En el caso de condensadores parciales o vaporizadores existen 3 corrientes, correspondientes a la corriente líquida de entrada y las corrientes de salida, una como vapor y la otra como líquido, tal como se muestra en la figura 2.4:

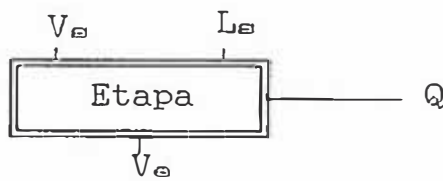


Figura 2.4

La tabla 2.4 muestra el cálculo de los grados de libertad para un condensador parcial o un rehervidor parcial.

Tabla 2.4

Número de Variables :	$3 (C + 3) + 1 = 3 C + 10$
Ecuaciones :	
- Balance de Materia por Componente	$C - 1$
- Balance Total de Materia	1
- Balance Total de Energía	1
- Igualdad de Presiones	1
- Igualdad de Temperaturas	1
- Relaciones de Equilibrio	C
- Sumatoria de Fracciones	3

Total de Ecuaciones	$2 C + 6$
Grados de Libertad :	$3 C + 10 - (2 C + 6) = C + 4$

Para ambos casos, el número de variables de diseño es el mismo.

2.3.5 DIVISION Y MEZCLA DE CORRIENTES.¹⁰

Estos procesos involucran 3 corrientes (dos corrientes de entrada para mezclarse en una corriente de salida, o una corriente de entrada para dividirse en dos corrientes de salida), tal como se muestra en la figura 2.5 :

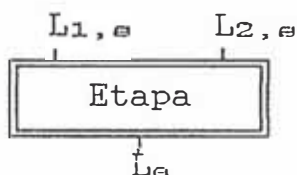


Figura 2.5

La tabla 2.5 muestra el número de variables, ecuaciones y el cálculo de los grados de libertad de la mezcla o separación de corrientes de mezclas multicomponentes.

Tabla 2.5

Número de Variables	$3 (C + 3) + 1 = 3 C + 10$
Ecuaciones	
- Balance de Material por Componente	$C - 1$
- Balance Total de Materia	1
- Balance Total de Energía	1
- Igualdad de Presiones	1
- Igualdad de Temperaturas	1
- Igualdad de Composiciones	$C - 1$
- Sumatoria de Fracciones	3
Total de Ecuaciones :	$2 C + 5$
Grados de Libertad :	$3 C + 10 - (2 C + 5) = C + 5$

2.3.6 INTEGRACION PARA EL PROCESO DE DESTILACION.

Al tenerse cada una de las partes de una columna de destilación definida por sus variables y ecuaciones que gobiernan el proceso se puede integrar para formar y definir todo el proceso global de operación de la columna, así como el total de variables y ecuaciones que intervienen y la selección de las variables de diseño y grados de libertad del sistema.

Si se considera la columna con N etapas correspondiente al número de platos físicos existentes (figura 2.1), al cual se agrega los módulos del condensador total en el tope, el rehervidor parcial en el fondo de la columna y la división del destilado y reflujo, se obtendrá que la suma total de las variables utilizadas en cada uno de los módulos descritos anteriormente vendría a ser las variables que interviene en todo el proceso de destilación, tal como se muestra en la tabla 2.6 :

Tabla 2.6

N etapas de contacto EQL	$N (6 C + 19)$
Condensador Total de Topes	$2 C + 7$
Rehervidor Parcial de Fondos	$3 C + 10$
Separación Destilado/Reflujo	$3 C + 10$
Número Total de Variables	$6NC + 19N + 8C + 27$

El número de ecuaciones para todo el proceso también es hallado de la misma forma, tal como se muestra en la tabla 2.7 :

Tabla 2.7

N etapas de contacto EQL N	$N (3 C + 10)$
Condensador Total de Topes	$C + 3$
Rehervidor Parcial de Fondos	$2 C + 6$
Separación Destilado/Reflujo	$2 C + 5$

Número Total de Ecuaciones	$3NC + 10N + 5C + 14$

Al integrar los módulos, se conecta en serie etapa por etapa mediante las corrientes de entrada y salida, produciendo una redundancia en ecuaciones y variables, como se muestra en la tabla 2.8:

Tabla 2.8

N etapas de contacto EQL N	$N (2 (C + 3))$
Condensador Total de Topes	$C + 3$
Rehervidor Parcial de Fondos	$C + 3$
Separación Destilado/Reflujo	$C + 3$

Número Total de Variables	$2NC + 6N + 3C + 9$

y también para las ecuaciones redundantes (tabla 2.9):

Tabla 2.9

N etapas de contacto EQL N	N
Condensador Parcial de Topes	1
Rehervidor Parcial de Fondos	1
Separación Destilado/Reflujo	1

Número Total de Ecuaciones	$N + 3$

Por cuanto se agrega una variable (Número de Etapas) por integrar todo el proceso y el grado de libertad para la torre de destilación se calcula según tabla 2.10:

Tabla 2.10

VARIABLES POR INTEGRACIÓN	$6NC + 19N + 8C + 27$
VARIABLES REDUNDANTES	$-(3NC + 6N + 3C + 9)$
<hr/>	
Total de Variables	$3NC + 13N + 5C + 18$
Ecuaciones por Integración	$2NC + 10N + 5C + 14$
Ecuaciones Redundantes	$-(N + 3)$
<hr/>	
Total de Ecuaciones	$2NC + 9N + 5C + 11$
Total de Variables	$3NC + 13N + 5C + 18$
Total de Ecuaciones	$-(2NC + 9N + 5C + 11)$
mas Variable por Integración	$-(1)$
<hr/>	
Grados de Libertad	$NC + 4N + 8$

Finalmente las variables de diseño típicas de este proceso son las que se muestran en la tabla 2.11:

Tabla 2.11

- N alimentaciones	$N (C + 3)$
- N transferencias de calor	N
- Número de Etapas	1
- Presión en el Tope y Fondo	2
- Flujo de Destilado	1
- Flujo de Fondos	1
- Relación de Reflujo	1
- Composición de Compuestos Claves	2
<hr/>	
Total de Variables	$NC + 4N + 8$

2.4 DISEÑO DE COLUMNAS DE DESTILACION.

Las variables, ecuaciones y grados de libertad, así como la determinación de las variables de diseño para un sistema de destilación de mezclas multicomponentes es el inicio a la solución del problema. A partir de este punto se tendrá que escoger un método de solución de la diversidad de métodos y procedimientos de solución propuestos por diferentes investigadores, de los cuales el elegido debe de moldearse a los requerimientos del problema y la capacidad disponible del computador.

Para el diseño es necesario dividir los cálculos en procedimientos :

- 1) Procedimiento Cálculo Preliminar.
- 2) Procedimiento de Cálculo Riguroso.
- 3) Procedimiento de Cálculo de Equipos Auxiliares.

2.4.1 ESPECIFICACIONES Y CONDICIONES DE OPERACION.

El estimado preliminar de los productos de una columna de destilación convencional requiere que la alimentación a la columna sea definida y también las especificaciones de la columna. La alimentación puede ser definida en unidades de volumen, peso o moles, pero en general los cálculos son llevados en unidades molares,

por la definición de equilibrio líquido vapor. De aquí es necesario para establecer estimaciones de producto, pesos moleculares de los componentes, y densidades de líquido deben estar disponibles para su necesaria conversión de unidades. Planteados todos estos conceptos se ha optado por establecer que la introducción de variables de diseño se realice en unidades de moles. Los datos de la alimentación son ingresados en la siguiente forma :

- 1) Fracciones molares o flujo molar para cada componente.
- 2) Si de los datos anteriores han sido introducidas las fracciones molares, se comprobará si la suma es igual a la unidad; de ser así se pedirá el flujo molar total de alimentación. En caso contrario se interpretará que se han introducido los datos de flujo molar por componente, calculando a partir de estos el flujo molar total y la composición.
- 3) Inmediatamente se procede al cálculo de la temperatura de rocío y burbuja de la alimentación, visualizando las temperaturas que limitan el estado físico de la mezcla que se alimenta.
- 4) Conociendo los límites entre los posibles estado físicos de la mezcla (líquido subenfriado, vapor sobrecalentado, líquido o vapor saturados, mezcla líquido-vapor), se introduce la temperatura de la alimentación. La presión de alimentación está fijada por la presión de operación de la columna.

En el caso de alimentaciones múltiples, se calcula una alimentación equivalente a todas las alimentaciones, con una composición y entalpía de mezcla equivalente a las demás alimentaciones. Las especificaciones de la columna usualmente son dadas en términos de componentes específicos. Estas expresiones pueden ser expresadas como:

- 1) Recuperación de componentes.
- 2) Limitaciones de la impureza de productos.
- 3) Limitaciones de pureza de productos.

La recuperación de componentes de la corriente de alimentación nos plantea un sistema que es sumamente sencilla y directa de calcular. Limitaciones en la pureza o impureza de los productos origina mayor dificultad en el proceso de cálculo, debido al método de distribución de los compuestos hacia el tope y fondo de la columna.

Es conveniente, y así se realiza, que los compuestos estén arreglados en forma creciente respecto al peso molecular, decreciente respecto a la presión de vapor, creciente a la temperatura normal de ebullición, o preferentemente decreciente por la volatilidad.

El establecimiento de las condiciones de operación se inicia estimando las composiciones del tope y fondo de la columna. El paso siguiente es fijar la temperatura y

presión de operación de estas zonas. Este proceso resulta ser iterativo debido a que no es posible determinar la distribución de los compuestos si no está dada la presión de operación. Es necesario pues introducir la presión del tope y fondo (produciendo un gradiente de presiones a lo largo del equipo si estas son diferentes), para luego obtener la distribución de los compuestos y su respectiva composición. Correcciones en la presión se podrán realizar ejecutando nuevamente las rutinas de cálculo e introduciendo los nuevos parámetros establecidos. Los resultados son siempre presentados para una inspección visual de como procede el diseño o evaluación de torres de destilación.

2.4.2 CALCULO ABREVIADO (SHORTCUT).

Los métodos abreviados (shortcuts) son usados para desarrollar estimaciones preliminares antes de ir a la computación o a estudios de proyecto. El procedimiento es muy utilizado para sistemas de hidrocarburos y otros sistemas donde la base de datos para la constantes de distribución (K_1) está disponible o puede ser calculada fácilmente. Este cálculo procede según:

- 1) Determinación de los Elementos Claves.- Los elementos claves son aquellos compuestos escogidos

que nos proporcionan el mejor rendimiento de productos con las características deseadas. La selección no es fácil por no existir una ecuación y correlación que nos diga cuales son los más favorables sino por regirse de diversos criterios de selección, de los cuales se puede citar a continuación .

- a) Es necesario dividir en 2 grupos a los compuestos de una mezcla multicomponentes tal que presente alguna característica común que los diferencie (peso molecular, linealidad de la cadena carbonada y/o familia de hidrocarburos a la pertenece, punto de ebullición cercano, volatilidades similares, etc).
- b) Se debe escoger dentro de cada grupo, los elementos que posiblemente sean los claves ligero y pesado, respectivamente, para lo cual es necesario observar una propiedad importante que influye en el proceso de destilación (componente con la mayor concentración de alimentación, el de menor o mayor volatilidad, etc).
- c) Es conveniente escoger los elementos claves ligero y pesado adyacentes, evitando de esta forma compuestos que se puedan distribuir.
- d) La selección de los elementos claves pueden ser

causadas por especificaciones del proceso.

- e) Existen ecuaciones que confirman la distribución de un compuesto.

La forma de seleccionar el componente clave que se ha escogido para el diseño o evaluación de columnas es el recuperar un porcentaje de dos de los compuesto alimentados por el tope de la columna.

- 2) Distribución de los Compuestos.- Seleccionados los elementos claves se procede a realizar la distribución de los compuestos por el tope y fondo de la columna de destilación. El método propuesto es el desarrollado por Henstebeck-Geddes^{10,14}. Este método asume que los componentes de una mezcla que se distribuyen, lo hacen exponencialmente y cumplen con la siguiente correlación:

$$\log\left(\frac{d_i}{b_i}\right) = A + B \log(\alpha_i) \quad 2-67$$

Un balance de material (ver figura 2.1) para el componente i en la alimentación es:

$$f_i = d_i + b_i \quad 2-68$$

La que podemos substituir en la ecuación de Henstebeck- Geddes dando:

$$\log \left(\frac{\frac{d_i}{f_i}}{1 - \frac{d_i}{f_i}} \right) = A + B \log(\alpha_i) \quad 2-69$$

La ecuación responde a la definición y datos disponibles que ingresamos como especificación del proceso. Realizada la distribución calculamos el flujo total del destilado y el flujo total de fondos:

$$D = \sum d_i \quad ; \quad B = \sum b_i \quad 2-70$$

y la composición en cada una de esta corrientes

$$x_{d,i} = \frac{d_i}{D} \quad ; \quad y_{d,i} = \frac{b_i}{B} \quad 2-71$$

quedando establecido el balance global de masa, total y por componente en toda la columna de destilación.

Realizado el balance de masa se calculan las temperaturas en el tope y fondo de la columna.

3) Número Mínimo de Etapas¹⁰. - Con la ecuación de Fenske es posible calcular el número de mínimo de etapas. Este número de etapas se origina al operar con un reflujo total del destilado en la columna. La ecuación se basa en un valor de la volatilidad constante entre los elementos claves a lo largo de toda la columna y asumiendo que la composición del líquido en el plato es igual a la del vapor que sube del plato anterior. La ecuación siguiente nos da el número mínimo de etapas :

$$N_m = \frac{\log\left(\frac{d_{LK} b_{HK}}{d_{HK} b_{LK}}\right)}{\log(\alpha_{LH, HK})_{prom}} \quad 2-72$$

4) Reflujo Mínimo. - Underwood y colaboradores¹⁰ encontraron dos ecuaciones para flujo molar y volatilidad constante. La primera ecuación de Underwood establece la búsqueda de un valor ϕ a partir de los datos de alimentación. Si los elementos claves no son compuestos adyacentes existirán dos o más valores de ϕ . Este valor de ϕ se encuentra entre la volatilidad del elemento clave ligero y 1.0. La raíz encontrada será reemplazada en la segunda ecuación de Underwood, que nos relaciona los valores del tope de la columna, determinando el reflujo mínimo del sistema. En el caso de existir

dos o más valores de ϕ , el valor del reflujo mínimo debe ser el mismo para ambas raíces, en caso contrario debe realizarse una nueva distribución de los elementos en el tope y fondo de la columna. Las ecuaciones de Underwood son :

$$\sum_{i=1}^n \frac{\alpha_i X_{f,i}}{\alpha_i - \phi} = 1 - q \quad 2-73$$

$$\sum_{i=1}^n \frac{\alpha_i X_{d,i}}{\alpha_i - \phi} = \frac{L}{D_{\min}} + 1 \quad 2-74$$

5) Número Teórico de Etapas.- Existen diversas correlaciones empíricas para determinar el número teórico de etapas. Eddar-Maddox¹⁵ usaron un método de ploteo para encontrar una relación del número de etapas con el reflujo de operación. Gilliland¹⁶ utilizó un método de ploteo en el cual introdujo dos variables que representan los ejes coordenados de su gráfica :

$$X = \frac{R - R_{\min}}{R + 1} \quad 2-75$$

$$Y = \frac{N - N_{\min}}{N + 1} \quad 2-76$$

$$Y = f(X) \quad 2-77$$

La explicación a esta de abscisa y ordenada es que tanto R como S varían entre sus valores mínimos y el infinito. Esto es :

$$N = N_{\min} \rightarrow R = \infty \quad 2-78$$

$$R = R_{\min} \rightarrow N = \infty \quad 2-79$$

El trabajo de Gilliland fue presentado en forma de un gráfico de ejes $X=f(R)$ e $Y=f(S)$. Para métodos de cálculos computacionales es necesario llevar la gráfica a una ecuación. La mejor ecuación¹⁶ viene dada por la siguiente expresión:

$$Y = 0.75 (1 - X^{0.5568}) \quad 2-80$$

- 6) Localización de la Etapa de Alimentación¹⁰ .- La correlación de Kirkbride¹⁰ nos proporciona la razón del número de etapas por encima de la alimentación con el número de etapas por debajo. Esta correlación

es empírica :

$$\log\left(\frac{m}{p}\right) = 0.206 \log\left[\frac{f_{HK}}{b_{LK}}\left(\frac{b_{LK}}{d_{HK}}\right)^2\right] \quad 2-81$$

El procedimiento abreviado es utilizado en el programa para realizar las primeras estimaciones de las variables de operación de la columna. Este proceso sólo ha sido desarrollado para columnas de destilación con una sola alimentación^{10,17,18,19}.

Para columnas con varias alimentaciones, salidas laterales y/o intercambiadores de calor laterales, no es posible aplicar un proceso rápido de cálculo para estimar los valores iniciales de los parámetros de diseño. Esto se debe a que se cambian las condiciones de operación de la columna (ejm. : flujos de vapor y líquido constantes), condiciones y asunciones en que se basan estas fórmulas de cálculo rápido.

Sin embargo los resultados que se obtienen a partir de aplicar los Cálculos Rápidos (Shortcuts) en columnas complejas, se pueden tomar los como valores iniciales, que luego serán corregidos mediante el empleo de un modelo riguroso.

2.4.3 CALCULO RIGUROSO.

El análisis riguroso de la destilación multicomponente requiere de la solución simultánea de las relaciones asociadas con cada etapa. Las ecuaciones asociadas con cada etapa son :

- 1) Balance de Materia.
- 2) Balance de Energía.
- 3) Relación de Equilibrio.
- 4) Sumatoria de composiciones.

Existen diversos métodos de resolver simultáneamente todas las ecuaciones involucradas en el sistema de destilación. El primer método desarrollado fue propuesto por Lewis-Matheson¹⁷, basado en un modelo a presión y flujos constantes. Lewis-Matheson establecen funciones lineales de las composiciones en función de los datos de diseño, siguiendo un procedimiento similar al de Mc.Cabe-Thiele¹⁷ sin tener en cuenta el balance de Energía.

Otro método fue presentado por Thiele-Geddes²⁰. Basándose en relación de equilibrio y la razón de reflujo evalúan toda la columna sin la necesidad de calcular directamente las composiciones y flujos. El método requiere de un procedimiento de prueba y error, para llegar a una solución.

El modelo tomado para desarrollar en el presente trabajo es el método matricial, método de la tridiagonal o método de Algebra Lineal, y se resuelve con métodos matriciales. Este método fue desarrollado por Wang-Henke¹⁶ al aplicar el álgebra lineal solo al balance de materia asociado a las relaciones de equilibrio, pero ampliamente ilustrado para manejar múltiples entradas y salidas múltiples laterales, así como el uso de equipos para remover calor entre las etapas. El método de solución es la técnica de evaluación de la matriz tridiagonal. El inicio de los cálculos se inicia con procedimientos de cálculos abreviados (shortcuts). Es necesario introducir datos, especialmente el número de etapas, la localización de la etapa de alimentación y la razón de reflujo externo. La evaluación y solución de la matriz tridiagonal requiere de mapas de perfiles de flujos internos de la torre de destilación y de temperaturas las inicialmente se pueden estimar constantes para los flujos y distribuciones lineales para la temperaturas con respecto a las temperaturas del tope y fondo de la columna.

El planteamiento de la matriz se hace a partir del balance de masa en cada etapa(n) para cada componente(i) desde el tope de la columna(1) (incluyendo el condensador, sea parcial o total) hasta los fondos(N) (incluyendo el rehervidor). El balance de masa^{17,18,21,22}

se puede escribir de la siguiente forma para una etapa j y un compuesto i :

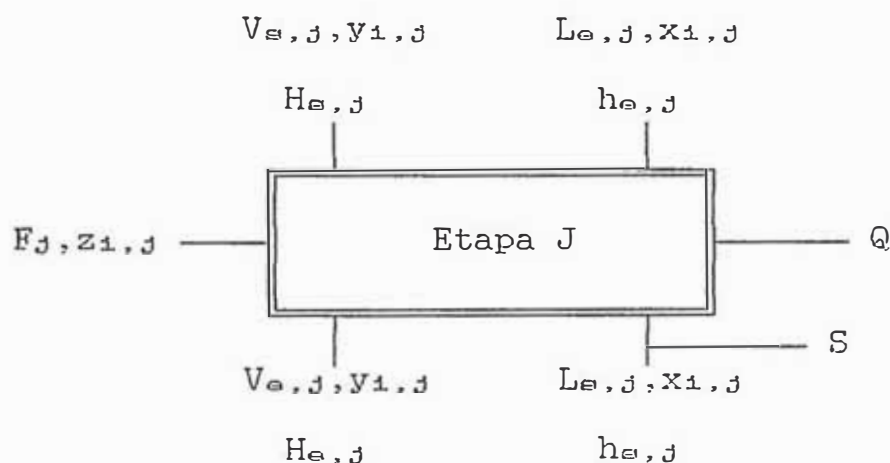


Figura 2.6

$$(l_{j,i} + l_{s,j,i}) + (v_{j,i} + v_{s,j,i}) = l_{j-1,i} + v_{j+1,i} + f_{j,i} \quad 2-82$$

$$\sum_{i=1}^n l_i = L \quad ; \quad \sum_{i=1}^n v_i = V \quad 2-83$$

$$x_i = \frac{l_i}{L} \quad ; \quad y_i = \frac{v_i}{V} \quad 2-84$$

Los flujos de vapor para cada componente puede ser reemplazado por :

$$v_{j,i} = S_{j,i} l_{j,i} \quad 2-85$$

$$S_{j,i} = K_{j,i} \left(\frac{V_j}{L_j} \right) \quad 2-86$$

en la ecuación planteada para obtener el siguiente patrón:

$$B_{j,i} = \left(1 + \frac{L_{s,j}}{L_j}\right) + \left(1 + \frac{V_{s,j}}{V_j}\right) S_{j,i} \quad 2-87$$

$$C_{j,i} = S_{j+1,i} \quad 2-88$$

$$-l_{j-1,i} + B_{j,i} l_{j,i} - C_{j,i} l_{j+1,i} = f_{j,i} \quad 2-89$$

Para etapas sin salidas laterales ni alimentación los valores de $L_{s,j}$, $V_{s,j}$ y $f_{j,i}$ son nulas. Para el condensador y separador, se plantea un balance especial sin alimentación, sin flujo de salida de vapor ni flujo de entrada del líquido a la etapa. La ecuación está escrita de la forma:

$$B_{1,i} = 1 + \frac{D_l}{L_1} + K_{1,i} \frac{D_v}{L_1} \quad 2-90$$

$$C_{1,i} = S_{2,i} \quad 2-91$$

$$B_{1,i} - C_{1,i} l_{2,i} = 0 \quad 2-92$$

Luego para la etapa N y el rehervidor de fondos parcial, la ecuación de balance de masa está escrita como:

$$B_{N,i} = 1 + S_{N,i} \quad 2-93$$

$$-l_{N-1,i} + B_{N,i} l_{N,i} = 0 \quad 2-94$$

Para cada componente "i" puede escribirse una matriz formada por el sistema de ecuaciones, arregladas de la siguiente forma :

$$\begin{bmatrix} B_1 & C_1 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 0 & 0 \\ -1 & B_2 & C_2 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & -1 & B_j & C_j & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & -1 & B_{N-1} & C_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & -1 & B_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_1 \\ l_2 \\ \cdot \\ l_j \\ \cdot \\ l_{N-1} \\ l_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \cdot \\ f_j \\ \cdot \\ f_{N-1} \\ f_N \end{bmatrix} \quad 2-95$$

La matriz N x N es tridiagonal en forma, y corresponde una matriz para cada componente. En cada matriz, los valores de los términos $l_{j,i}$ son de interés. En las operaciones de solución de la matriz, un buen camino para resolverla para los términos de $l_{j,i}$ es invertir la matriz y multiplicarla por el vector resultado. Simbólicamente si la matriz se representa por [ABC] esto es :

$$[ABC]^{-1} [ABC] [l_{N,i}] = [l_{n,i}] = [ABC]^{-1} [f_{N,i}] \quad 2-96$$

Esta matriz tridiagonal puede ser resuelta por

diferentes métodos. El utilizado para su solución es el método de eliminación Gaussiana modificado para una matriz tridiagonal²², esto es llevarla a la forma de una matriz diagonal. La resolución de este sistema de ecuaciones nos dá el perfil del flujo molar del líquido para el componente i.

Después de resolver los balances de materia, la suma de los valores de $l_{j,i}$ debe ser hallado, modificando el valor del flujo molar total para la fase líquida, y también para la fase gaseosa con la siguiente expresión :

$$V_j = \sum_{i=1}^n S_{j,i} l_{j,i} \quad 2-97$$

Calculados los flujos molares por componente para cada etapa, se puede estimar las fracciones molares para cada una de las fases.

Según los algoritmos encontrados en la bibliografía^{15,17,33}, se realiza el cálculo de la temperatura de burbuja en cada etapa con las composiciones anteriormente encontradas. Este cálculo permite establecer un nuevo perfil de temperaturas, luego calcular un perfil de flujos y nuevamente entrar en el ciclo de cálculos hasta obtener la convergencia. Determinar un adecuado perfil de temperaturas conlleva a

obtener una convergencia en un menor número de iteraciones. La temperatura de burbuja de cada etapa es determinada por las composiciones de la fase correspondiente, obtenidas al resolver las matrices. Dentro de las ecuaciones con las que se construyen las matrices, se introduce las relaciones de equilibrio líquido-vapor. Esto quiere decir que las matrices además de fijar nuevos perfiles de concentraciones, deben cumplir las condiciones de equilibrio. El valor de la constante de distribución no será el mismo al resolver el juego de matrices por estar referida a la iteración anterior. Si se corrige el valor de la constante de distribución y se resuelven nuevamente los balances de masa y el equilibrio líquido-vapor (iteración sobre la matriz), las composiciones obtenidas se acrecerán más al perfil final de la columna.

Para la corrección de la constante de distribución se tiene que en cada etapa de equilibrio se debe cumplir el equilibrio líquido-vapor en la etapa y la sumatoria de fracciones molares:

$$\sum K_i x_i = 1 \quad x_i = \frac{l_i}{\sum l_i} \quad 2-98$$

Reemplazando las fracciones molares en la relación de equilibrio se obtiene:

$$\sum K_i l_i = \sum l_i \quad 2-99$$

Esta relación no se cumple, por lo tanto para la constante K_i se corrige mediante:

$$K_i' = K_i \frac{\sum l_i}{\sum K_i l_i} \quad \text{para } \sum l_i > \sum k_i l_i \quad 2-100$$

$$K_i' = K_i \frac{\sum K_i l_i}{\sum l_i} \quad \text{para } \sum l_i < \sum k_i l_i \quad 2-101$$

La constante de equilibrio se modifica y nuevamente se resuelve la matriz el sistema de ecuaciones, realizando una nueva iteración con el cálculo de las matrices. La convergencia se halla cuando se cumpla:

$$\sum K_i l_i = \sum l_i \quad 2-102$$

La corrección del perfil de temperaturas se realiza hallando la temperatura de burbuja en cada etapa, y su correspondiente composición en el vapor, valores utilizados para la convergencia de los cálculos. La deducción del perfil de temperaturas es el procedimiento que controla la convergencia del procedimiento.

La distribución interna de los flujos es ajustado

utilizando los balances de energía. Esta requiere de las entalpías molares para sistemas relativamente ideales o las entalpías parciales molares si es más bien no ideal. La entalpía del vapor y del líquido son requeridos. Combinando el balance de energía con el balance global de materia alrededor de cada etapa encontramos las siguientes relaciones para cada etapa j ($j=2, \dots, N-1$) :

$$V_{j+1,i} = \frac{V_j(H_j - h_j) - L_{j-1}(h_{j-1} - h_j) - f_j(H_f - h_j)}{H_{j+1} - h_j} \quad 2-103$$

$$L_j = V_{j+1} - V_j + L_{j-1} + f_j \quad 2-104$$

Los balances realizados en el condensador de topes se expresan como :

$$Q_{cond} = V_2(H_2 - h_1) - D_v(H_1 - h_1) \quad 2-105$$

$$L_1 = V_2 - D_1 - D_v \quad 2-106$$

siendo $D_1 = 0$ para un condensador parcial y $D_v = 0$ para un condensador total. Para la zona de los fondos, para un rehervidor parcial :

$$Q_{reb} = V_N(H_N - h_N) - L_{N-1}(h_{N-1} - h_N) \quad 2-107$$

$$B = L_{N-1} - V_N \quad 2-108$$

El procedimiento finaliza cuando son encontrados nuevos valores en los perfiles de composición, flujos y temperaturas. Los cálculos son iterativos hasta minimizar la diferencia entre las composiciones de fase gaseosa halladas al resolver el sistema de ecuaciones con las encontradas en el cálculo de la temperatura de burbuja. Si se satisface el margen de error fijado, el proceso finaliza, de lo contrario se continúa con una nueva iteración.

2.4.4 DIMENSIONAMIENTO E HIDRODINAMICA.

La imposibilidad de definir matemáticamente un modelo de flujo que permita predecir con exactitud los perfiles de velocidad y concentración en los platos de equilibrio líquido-vapor corrientemente utilizados, ha hecho necesario el desarrollo de métodos de diseños basado principalmente en datos experimentales. Paralelamente, variables tan importantes como altura y densidad del lecho de burbujas deben ser evaluadas a partir de métodos empíricos. Todo ello ha motivado la existencia en la bibliografía de innumerables trabajos referentes al cálculo de platos, con lo que el diseñador puede optar a menudo por métodos de cálculo completamente

distintos que le proporcionen resultados dispares , sin tener a veces criterios suficientes para saber cual es el más adecuado.

Al no predecir con exactitud la forma de operación de un diseño determinado operando con un sistema dado, los métodos de cálculo tienden a ser conservadores para poder garantizar el funcionamiento del plato dentro de un amplio margen del valor de las variables alrededor del punto de diseño. Sucede a menudo que los modelos así obtenidos, sobredimensionados de origen , funcionan con cargas normales con baja eficacia, y ésta decae en forma muy importante cuando se requieren caudales de alimentación inferiores. Es necesario por ello la elaboración de diseños lo más ajustados posibles.

El procedimiento computadorizado se basa en el método de cálculo utilizado por Economopoulos^{23,24} (ver anexo 2).

2.4.5 DISEÑO DE EQUIPOS AUXILIARES.

Realizado el balance de Masa y Energía en el proceso de destilación, y satisfaciendo las especificaciones con respecto a pureza de los productos, es necesario establecer el dimensionamiento del equipo a ser diseñado

o evaluado y su hidrodinámica cuando esté en operación. Esto incluye tanto a los platos de separación de la columna, como a los equipos de intercambio de calor que son utilizados y a los dispositivos de compresión al aplicar el concepto de bomba calorimétrica alrededor de la columna de destilación. El dimensionamiento de estos equipos y su operación se calcula con procedimientos abreviados y generales, para que su evaluación sea rápida y aproximada en sus resultados. El diseño detallado de estos equipos, prolongaría el contenido de este trabajo, dejando así un punto posible para futuras tareas.

2.4.5.1 INTERCAMBIADORES DE CALOR.

Los equipos de intercambio de calor más utilizados en destilación son :

- Condensadores Parciales/Totales.

Rehervidores.

El diseño de estos equipos para los fines establecidos, consiste en la determinación del área de transferencia, mediante la ecuación :

$$Q = U A \Delta T$$

El rango de valores para el coeficiente global U en Btu/°F hr pie² de transferencia en servicios de refineras²⁰, va de 60 a 160 para rehervidores calentados con vapor y de 45 a 95 para condensadores enfriados con agua.

2.4.5.2 COMPRESORES.

La aplicación de compresores en procesos de destilación como equipos auxiliares, obedece al concepto de bomba calorimétrica aplicado al proceso, obteniendo de esta manera un ahorro de energía.

Aunque existen diversos tipos de compresores (axiales, rotativos, reciprocantes), solo se determinará la potencia necesaria para comprimir una corriente de vapor, mediante un proceso isoentrópico ($S_1 = S_2$), esto es :

$$H_p = m (H_2 - H_1) \qquad 2-110$$

Los valores de entalpía (H_2 y H_1) son calculados a partir de la base de datos, dada la presión y temperatura antes (o después) del compresor, se calcula la entalpía y entropía del vapor, dado que el proceso es isoentrópico, se conoce la entropía al otro extremo, y con la presión

de descarga (o succión) se puede determinar los valores de temperatura y entalpía.

Los compresores utilizados en la industria pueden ser empleados sobre un amplio rango de capacidades y presiones. El dimensionamiento de compresores abarca desde 1 a 3000 hp y pueden ser de varios tipos, aunque los más aplicados son los compresores reciprocantes.

2.4.5.3 BOMBAS.

Dentro de un proceso de destilación el uso de bombas es necesarios para realizar el reflujo de líquido, introducir las alimentaciones y evacuar los productos de topes y fondos (solo si todas las corriente mencionadas se encuentra en estado líquido).

Del balance de **energía** mecánica, el trabajo requerido para impulsar un líquido es :

$$W_o = (Z_2 - Z_1) + \frac{(V_2^2 - V_1^2)}{2g_c} + (P_2 - P_1) v + \sum F \quad 2-111$$

donde ΣF representa la pérdida total de carga.

2.5 BOMBAS CALORIMÉTRICAS PARA DESTILACION

Mejor que fijar la presión de destilación a un nivel suficientemente alto para permitir el uso de agua de enfriamiento en el condensador de topes, se puede bajar la presión de operación y usar un refrigerante en el condensador. Al disminuir la presión de operación la volatilidad relativa de una mezcla de multicomponentes aumenta, disminuyendo el número de etapas y la relación de reflujo. Ello disminuye el tamaño de la columna de destilación y los costos de operación.

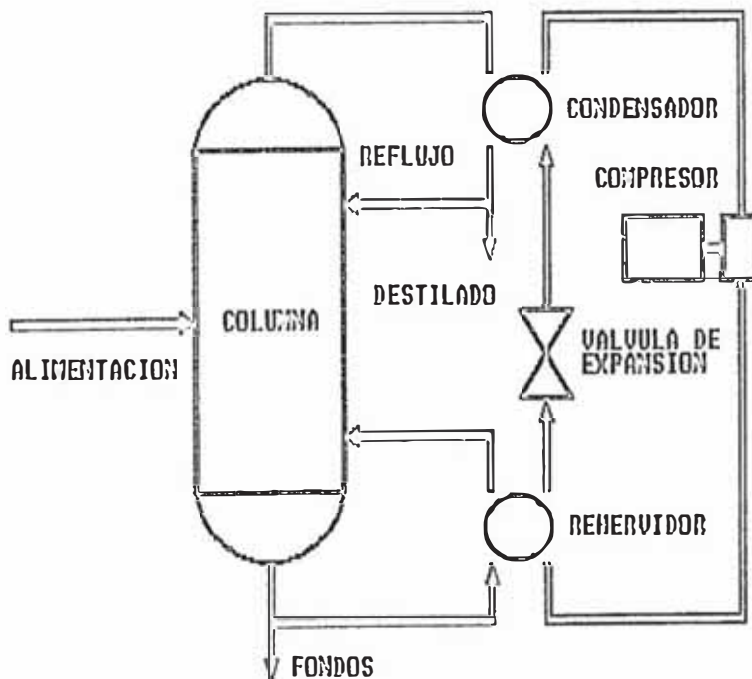


Figura 2.7

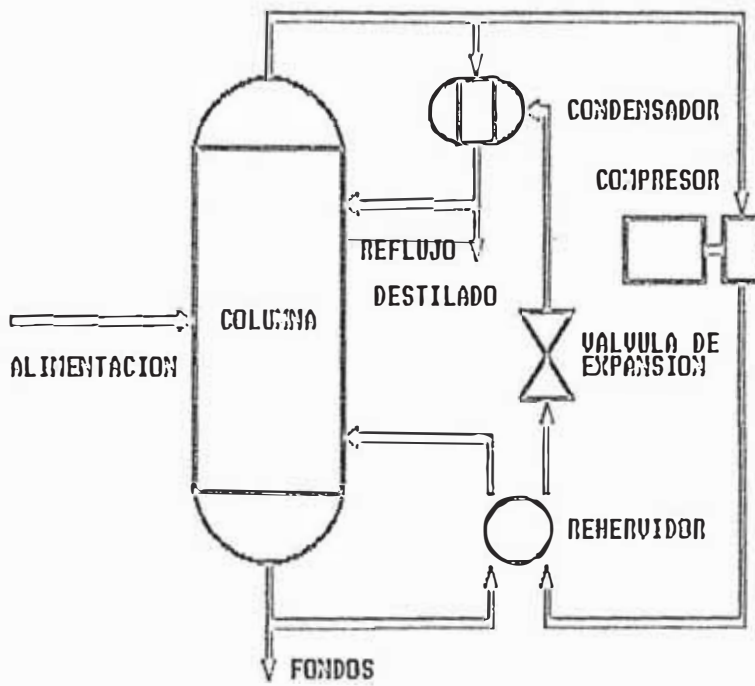


Figura 2.8

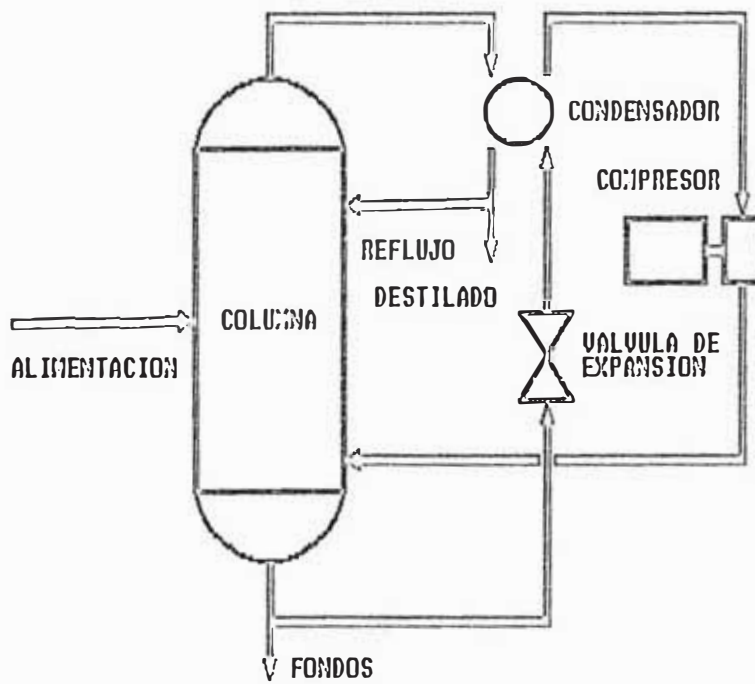


Figura 2.9

Como es discutido por Freshwater y Null³, requerimientos de energía en operaciones de baja temperatura de destilación (ej. sistema propano-propileno) puede ser a menudo reducidas por retención de un efecto simple y usando una bomba calorimétrica, para "bombear" calor del condensador al rehervidor. Tres esquemas son presentados en las figuras 2.7, 2.8 y 2.9.

En los tres esquemas^{26, 27, 28, 29}, una válvula de expansión y un compresor son usados para alterar las temperaturas de condensación-ebullición, tal que el calor removido por el condensador pueda ser usado para proveer el calor necesario en el rehervidor.

En el esquema mas simple (figura 2.7), un refrigerante es usado en un ciclo cerrado, envolviendo el condensador de topes y el rehervidor de fondos. El primero es el evaporador para el refrigerante y el último es el condensador para el refrigerante.

Cuando el condensado es buen refrigerante, el vapor del tope de la columna es comprimido (figura 2.8), tal que la temperatura de condensación de esta sea mayor que la temperatura del producto del fondo de la columna. El condensado que deja el rehervidor es vaporizado instantáneamente a través de la válvula de expansión a la presión del tope de la columna para proveer reflujo y

producto de destilado. Este esquema es referido a menudo como recompresión de vapor.

Cuando el producto de fondo es buen refrigerante (figura 2.9), el líquido de fondo es vaporizado a través de la válvula de expansión a la presión correspondiente a la temperatura de saturación del destilado. El condensador de topes entonces trabaja como el rehervidor. El vapor producido en el condensador es recomprimido hasta la presión del fondo antes de ingresar a la columna.

CAPITULO III DESARROLLO DEL PROGRAMA

La estructuración de un programa de diseño de columnas de destilación obliga a realizar un análisis profundo del problema para determinar un algoritmo y obtener una solución óptima del sistema de ecuaciones y fórmulas matemáticas del que se dispone, así como el adecuado flujo de información que se suministrará a lo largo de la ejecución del programa.

3.1 RESUMEN DEL EQUIPO UTILIZADO.

Una breve descripción del equipo utilizados dará una idea de la envergadura del trabajo realizado, como también sus limitaciones.

3.1.1 CAPACIDAD DEL EQUIPO.

El programa desarrollado puede funcionar en cualquier tipo de computador personal basado en el microprocesador 8086/8088, bajo el sistema operativo DOS (Disk Operative System). La memoria necesaria debe ser de

384 KB de memoria RAM, dos manejadores de diskettes y un monitor con adaptador de graficos.

3.1.2 LENGUAJE DE PROGRAMACION.

El Software utilizado consiste en un lenguaje de programación, en este caso, el lenguaje de programación estructurada utilizado es el Pascal (TURBO-PASCAL³⁰), desarrollando los programas de Termodinámica de Corrientes (TERCO.EXE), y Destilación Multicomponentes por Algebra Lineal (DESMUL.EXE). La función de los programa es la de evaluar todas las propiedades y procesos, como también los requerimientos de energía y dimensionamiento de equipos. Por último, en una hoja electrónica (LOTUS-123), se realizará las comparaciones entre los diversos esquemas de destilación con la finalidad de realizar la Optimización del caso, dando como resultado el esquema óptima para el proceso.

3.2 PROCEDIMIENTOS Y FUNCIONES. CALCULO DE PROPIEDADES.

El programa se desarrollará mediante un seguimiento del flujo de información que será necesario suministrar. La base de datos se conforma con los valores de propiedades y constantes físicas de los compuestos. Como

se ha planteado anteriormente, los modelos matemáticos tienen la forma de ecuaciones generalizadas, basadas en propiedades críticas de los compuestos. También, al realizar balances de energía, es necesario incluir en la base de datos valores las constantes que intervienen en la estimación de la entalpía. También se incluyen otras propiedades como es el peso molecular y la temperatura normal de ebullición.

La organización de la base de datos se realiza mediante vectores conteniendo registros. Se han escogido 18 hidrocarburos que conforman la base de datos. Las características que presentan son la de ser hidrocarburos saturados y lineales, aunque se han introducido compuestos que presentan otras propiedades, pero manteniendo la homogeneidad para la formación de subgrupos (sistemas propano-propileno, sistemas butano-isobutano). Esta base de datos puede ser incrementada para nuevos compuestos, o formar una nueva base de datos con otras características (sistema benceno-tolueno).

La base de datos es accesada solo una vez, al iniciar la corrida del programa, escogiendo de ella, solos los compuestos que intervienen en la destilación y cálculo de propiedades termodinámicas, y es almacenada en los vectores de propiedades de los programas. Cada

compuesto se codifica con un número para su identificación dentro del programa, y se ordenan por temperatura crítica, siendo el primer elemento el de menor valor de temperatura.

3.2.1 PROPIEDADES CRITICAS Y REDUCIDAS.

Las propiedades críticas de los compuestos están conformados por la presión, temperatura, y el factor acéntrico. Las propiedades reducidas son la razón entre la presión y la temperatura y sus respectivos valores críticos, para ello se define estos procedimientos de cálculo como funciones, cuyos argumentos son el número que identifica al compuesto en la base de datos, la presión y la temperatura de operación. La utilización de estas funciones puede ir dentro de fórmulas y ser accesada por un procedimiento de cálculo de cualquier parte del programa. El objetivo de las funciones es proporcionar los valores de presión y temperatura reducidas cuando estas sean requeridas.

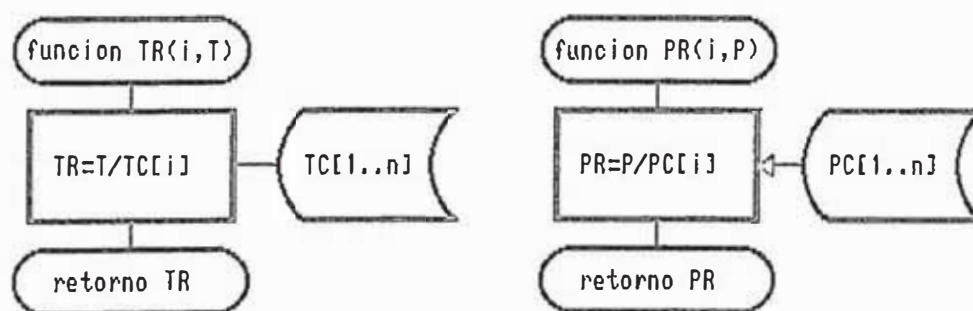


Figura 3.1

3.2.2 DENSIDAD MOLAR. ECUACION DE ESTADO.

La ecuación de estado utilizada es la de Soave⁷, aunque por la forma de programación estructurada puede utilizarse la ecuación de Peng-Robinson⁸, realizando pequeños cambios. Los objetivos de la ecuación de estado son :

- Cálculo de las Densidades Molares del fluido.
- Cálculo de la Constante de Distribución.
- Cálculo de la Entalpía real del fluido.

Para resolver la ecuación de estado es necesario evaluar las constantes de la ecuación mediante reglas de mezclas. Estos parámetros están en función de la composición de la mezcla y de las constantes evaluadas para los componentes puros. Se define para ello un procedimiento que evalúa el parámetro " m " de la ecuación de Soave para todos los elementos puros :

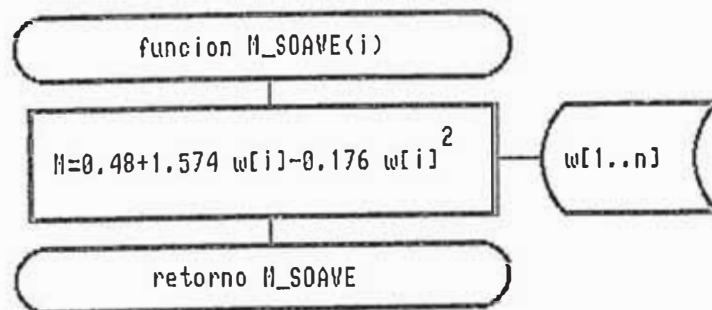


Figura 3.2

Luego para evaluar los valores de las constantes "a" y "b" de la ecuación de Soave, para los elementos puros :

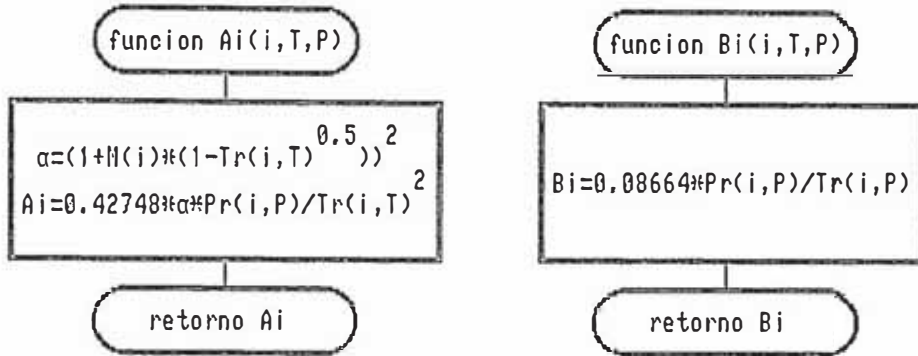


Figura 3.3

Estas funciones utilizan las funciones PR(I,P) y TR(I,P) anteriormente definidas. Debido a que se utilizan sistemas de multicomponentes es necesario introducir la regla de mezcla para la evaluación de las constantes de la ecuación de estado. Además, la ecuación de Soave se rearrregla en función del factor de compresibilidad, por lo que es necesario la evaluación de los parámetros "A" y "B", que están disponibles en forma de funciones :

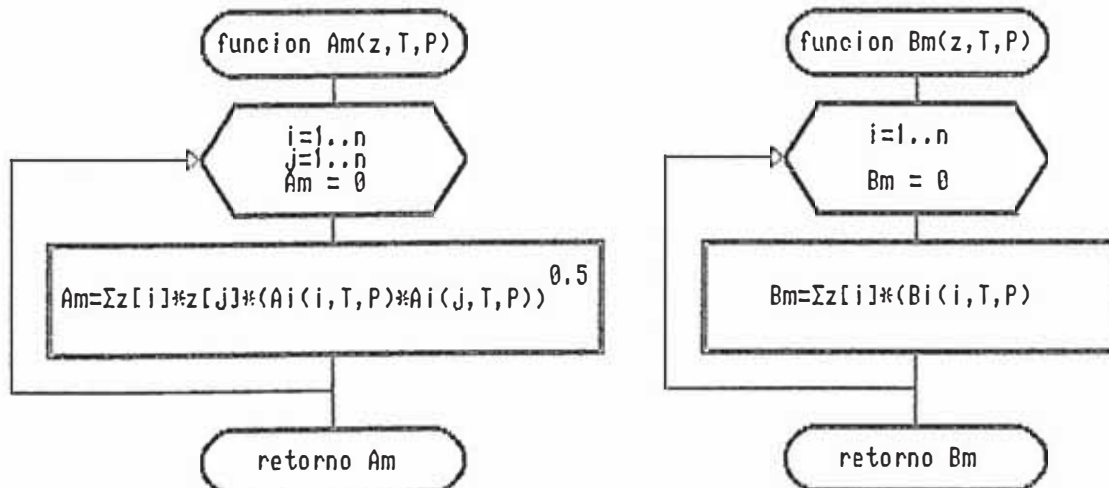


Figura 3.4

Para resolver la ecuación de estado utilizamos el procedimiento de convergencia de Richmond, el cual es general para encontrar las raíces en la fase vapor como en la fase líquida, a partir de un adecuado valor inicial para que se logre la convergencia :

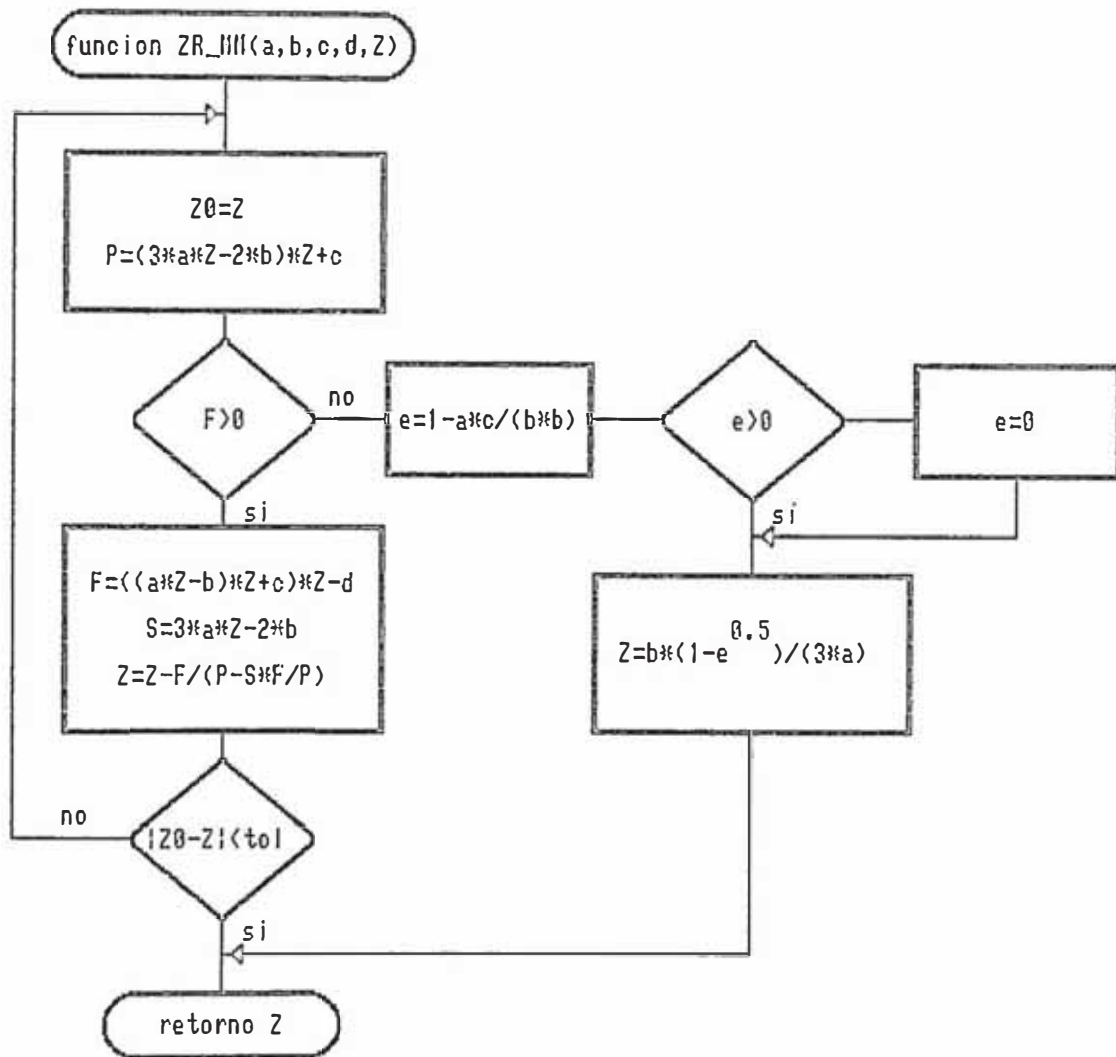


Figura 3.5

El método de Richmond de utiliza la primera, segunda y tercera derivada, que son evaluadas dentro del proceso de cálculo. De no existir la raíz, se calcula el valor máximo (para el vapor) o el mínimo (para líquidos). Para

la fase gaseosa como para la fase líquida, la ecuación de estado se plantea de la siguiente manera :

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

para que sea resuelta y converga al valor del Factor de Compresibilidad (Z) de la fase gaseosa. El valor inicial para la convergencia y los valores de los parámetros utilizados son :

$$ARM = 1 \quad 3-2$$

$$BRM = 1 \quad 3-3$$

$$CRM = A - B (1 + B) \quad 3-4$$

$$DRM = A B \quad 3-5$$

$$ZRM = 1 - CRM + \frac{DRM}{1 - CRM} \quad 3-6$$

Para la fase líquida, se requiere transformar la ecuación para la estabilidad de las raíces. Esto se consigue multiplicando la ecuación cúbica en Z por el factor $(B/Z)^3$, agrupando el término B/Z, para obtener :

$$B - \left(\frac{B}{Z}\right) + \left(\frac{A}{B} - 1 - B\right) \left(\frac{B}{Z}\right)^2 - \frac{A}{B} \left(\frac{B}{Z}\right)^3 = 0 \quad 3-7$$

donde el valor inicial para la convergencia y los parámetros del método de Richmond son :

$$ARM = \frac{A}{B} \quad 3-8$$

$$BRM = \frac{A}{B} - 1 - B \quad 3-9$$

$$CRM = 1 \quad 3-10$$

$$DRM = B \quad 3-11$$

$$ZRM = \frac{BRM}{ARM} - \frac{1}{BRM} + \frac{DRM}{BRM \left(\frac{BRM}{ARM} - \frac{1}{BRM} \right)} \quad 3-12$$

Los parámetros de entrada para la rutina de convergencia de Richmond son los coeficientes de la ecuación cúbica.

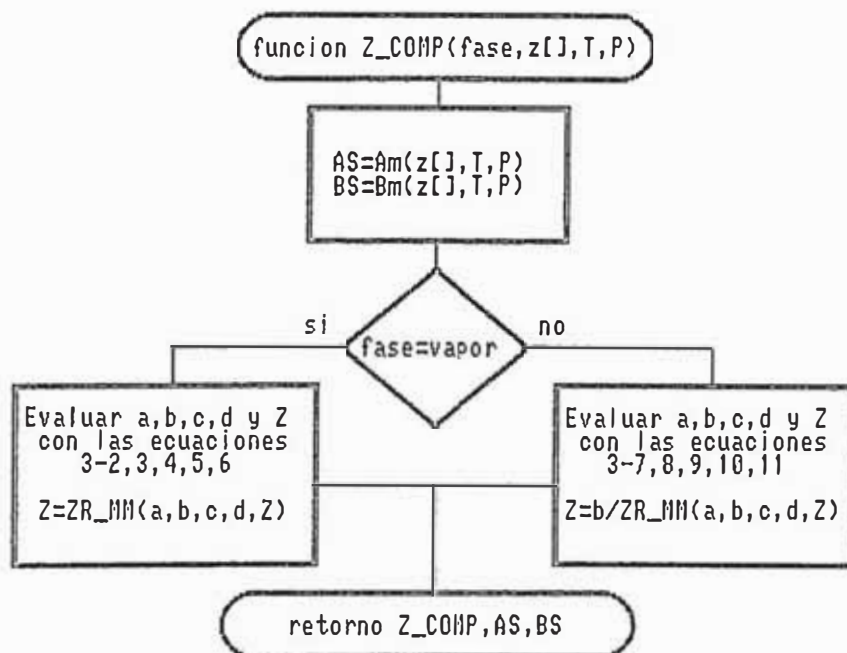


Figura 3.6

Estos coeficientes son evaluados para hallar el factor de compresibilidad para la fase vapor o para la fase líquida, según sea el caso. El factor de compresibilidad que retorna es directo para la fase vapor y para la fase líquida se requiere deshacer la transformación que se efectuó.

3.2.3 CONSTANTE DE DISTRIBUCION.

Para los procedimientos de cálculo donde interviene el proceso de equilibrio líquido-vapor, es necesario determinar las composiciones de las fases vapor y líquido, relacionando estas composiciones a través de la constante de distribución. Debido a que la constante de distribución es función de las composiciones en la fase líquida y gaseosa, e interviene para determinar composiciones de las mismas, se requiere de métodos iterativos para su evaluación. Estos métodos son aplicados en procesos de equilibrio líquido-vapor, como son el determinar las temperaturas de rocío y burbuja, y el cálculo de evaporación instantánea (flasheo).

Los métodos iterativos para su convergencia dependen bastante del valor inicial tomado al iniciar el proceso. Para ello se utilizan las correlaciones que determinan la constante de distribución de los compuestos puros. La

ecuación utilizada es la ecuación de Wilson⁹, siendo necesario evaluar la derivada respecto a la temperatura, necesaria para utilizar el método de convergencia de Newton-Raphson², muy adecuado para este tipo de cálculo por su rapidez. La evaluación de la constante de distribución y su derivada están en función del tipo de compuesto, la presión y la temperatura del sistema :

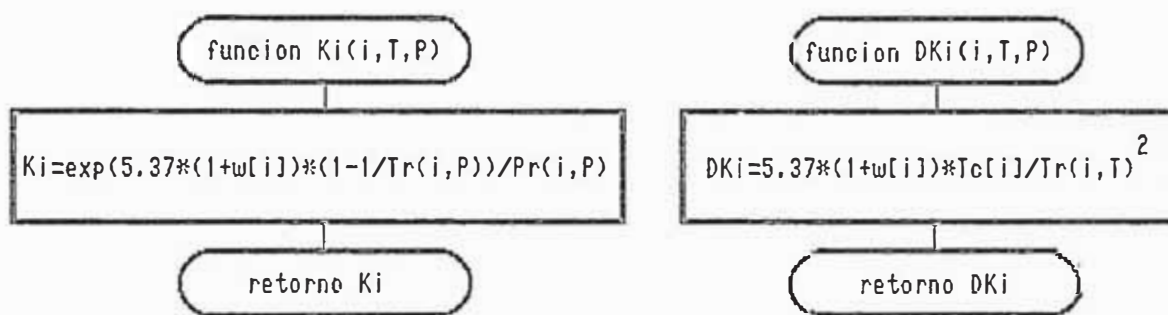


Figura 3.7

Los valores de obtenidos por la ecuación de Wilson, no difieren de los valores reales, siempre y cuando la mezclas esté formada por compuestos de una misma serie homóloga.

3.2.4 ENTALPIA Y ENTROPIA.

Este módulo de cálculo presenta un mayor programación y requerimiento de otras funciones antes descritas. La entalpía es calculada a partir de la ecuación de Passut y Danner³, cuyas constantes complementarán la base de datos, junto con la entalpía de

vaporización en el punto de ebullición normal. Si no se requiere de un cálculo utilizando un modelo real para fluidos, se retornará el valor hasta ahora hallado para la entalpía de vapor. Si la entalpía del líquido es requerida, se procede con el cálculo anterior adicionando un término más correspondiente a la entalpía de vaporización (con signo negativo), corregido para la temperatura de operación mediante la fórmula de Watson³.

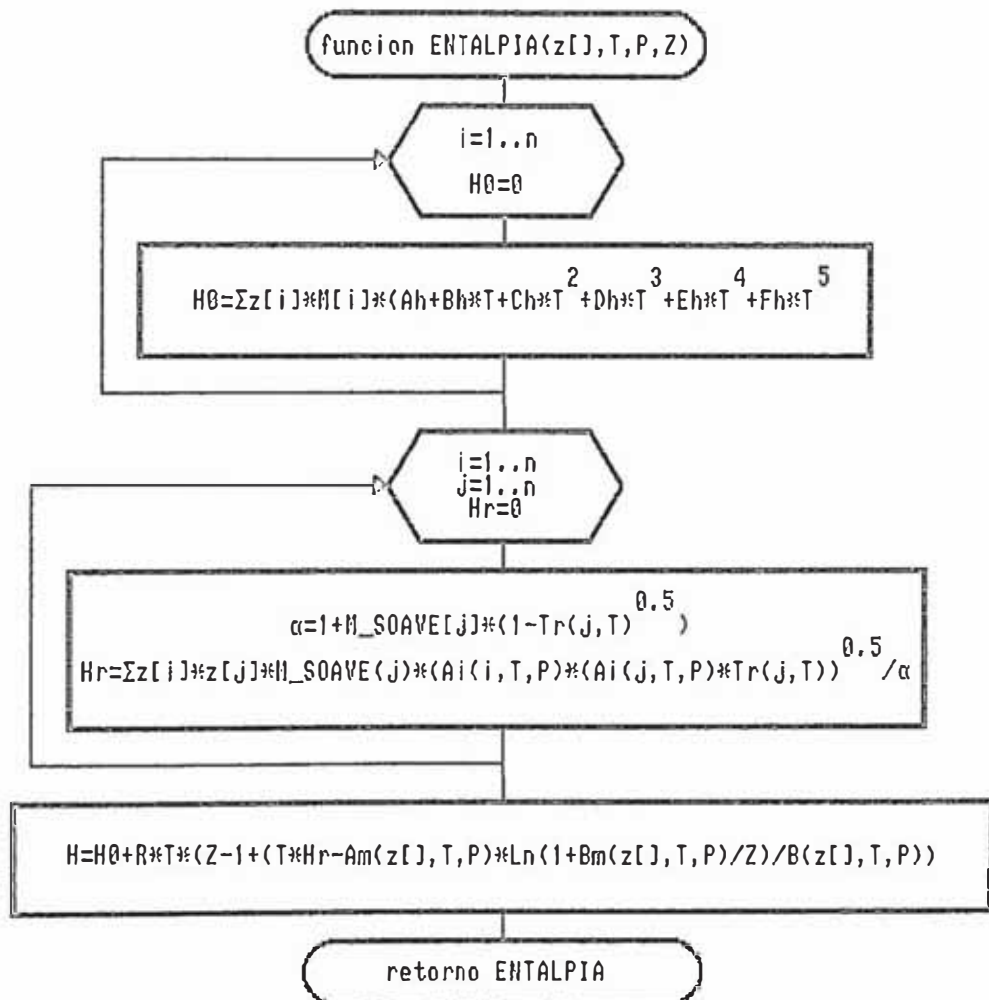


Figura 3.8

Para el cálculo de la entalpía utilizando un modelo real para fluidos, es necesario calcular el término de la

desviación de la entalpía real de un gas con respecto al valor ideal.

De forma análoga se realiza un tratamiento similar para la entropía :

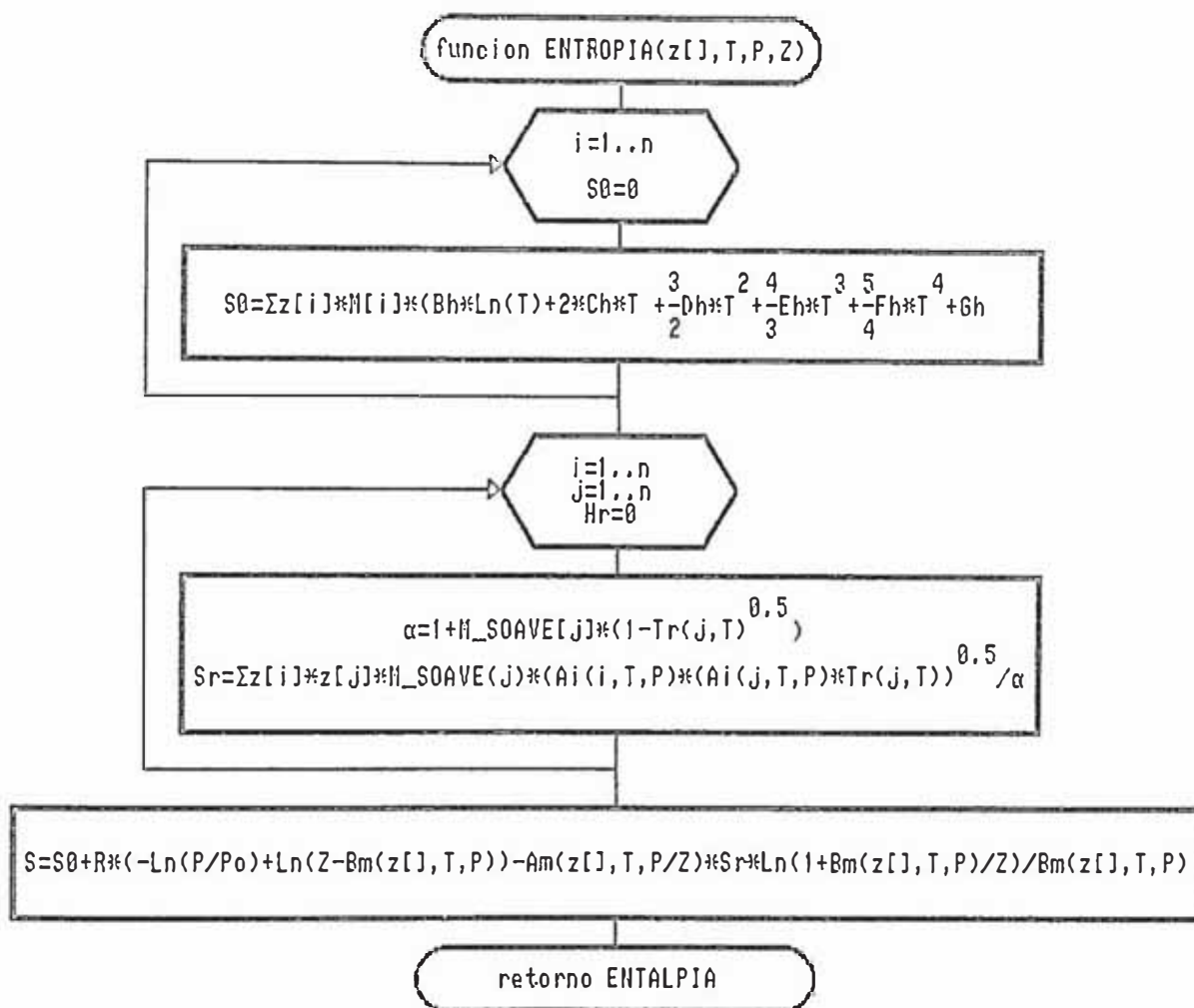


Figura 3.9

3.2.5 VISCOSIDAD Y TENSION SUPERFICIAL.

La viscosidad en la fase líquida está en función de las propiedades críticas, para compuestos puros. Debido a

que la viscosidad no es una propiedad aditiva, es necesario estimar temperaturas y presiones pseudocríticas, siguiendo la regla de mezclas utilizada en la ecuación de estado. Al disponer de las funciones AM y BM, las cuales utilizan la regla de mezcla, se puede determinar los valores de la presión y temperatura pseudoreducidas :

$$A(z, P, T) = 0.42748 \frac{P_{r,s}}{T_{r,s}^2} \quad 3-13$$

$$B(z, P, T) = 0.08664 \frac{P_{r,s}}{T_{r,s}} \quad 3-14$$

Despejando la presión y temperatura pseudoreducidas tenemos :

$$P_{r,s} = 4.934 \frac{B}{A} \quad 3-15$$

$$T_{r,s} = 56.95 \frac{B^2}{A} \quad 3-16$$

La propiedades pseudocríticas las obtenemos mediante los valores obtenidos con la presión y temperatura :

$$P_{c,s} = \frac{P}{P_{r,s}} \quad 3-17$$

$$T_{c,s} = \frac{T}{T_{x,s}} \quad 3-18$$

Luego, se calcula la viscosidad del líquido mediante la ecuación de Letson y Steil. La tensión superficial sigue el mismo tratamiento, evaluandose con la ecuación de Brock y Bird.

3.3 PROCEDIMIENTOS Y FUNCIONES PARA EL CALCULO DE PROCESOS TERMODINAMICOS.

Los procedimientos y funciones desarrollados en el punto anterior, conforman un nivel de programación de cálculos básicos para procesos más complejos. Estos se encuentra disponibles y serán llamados por toda rutina de cálculo que necesite evaluación de propiedades termodinámicas.

3.3.1 CALCULO DE PROPIEDADES TERMODINAMICOS. SISTEMA DE MULTICOMPONENTES.

De acuerdo con lo establecido en capítulos anteriores, fijando dos propiedades termodinámicas de una sustancia, se fija su estado termodinámico. La

determinación del estado termodinámico corresponde al cálculo de todas las propiedades termodinámicas (presión, temperatura, volumen, entalpía y entropía) que se necesita como variables diseño de procesos y equipos.

Los procesos termodinámicos utilizados en la simulación son aquellos en que se fija dos propiedades tales como la presión-temperatura, presión-entalpía, presión-entropía, temperatura-entalpía, temperatura-entropía. Por las ecuaciones utilizadas en la determinación de propiedades y las propiedades mencionadas, establecen métodos iterativos. Por las características que presentan los algoritmos de solución, estos puede reunirse en dos grupos :

```
Rutina PROPIEDADES_1(parametros : Z[1..N],PRESION,TEMPERATURA)
  evaluar : PUNTOS DE SATURACION para ESTADO FISICO
  evaluar : VOLUMEN según ESTADO FISICO
  evaluar : ENTALPIA según ESTADO FISICO
  evaluar : ENTROPIA según ESTADO FISICO
  retornar : VOLUMEN,ENTALPIA,ENTROPIA
```

Cuadro 3.1

Este primer algoritmo evalúa el volumen a partir de la presión y temperatura, utilizando la ecuación de estado. Los valores de la entalpía y entropía son calculados directamente, al disponer de valores de presión-temperatura-volumen, con lo cual determinamos el estado termodinámico del sistema.

```
Rutina PROPIEDADES_2(parametros : Z[1..N],PRESION,ENTALPIA)
  evaluar : TEMPERATURAS (PUNTOS DE SATURACION)
  evaluar : ENTALPIAS (PUNTOS DE SATURACION)
  evaluar : ESTADO FISICO (Comparar : ENTALPIAS)
  asumir : TEMPERATURA
  repetir
    evaluar : PROPIEDADES_1(Z[1..N],PRESION,TEMPERATURA)
    si ENTALPIA <> ENTALPIA(PROPIEDADES_1)
      corregir : TEMPERATURA
  hasta CONVERGER (ENTALPIA=ENTALPIA(PROPIEDADES_1)
  retornar : TEMPERATURA,VOLUMEN,ENTROPIA
```

Cuadro 3.2

El segundo algoritmo es aplicado cuando se define con una de las propiedades de estado, la presión o la temperatura, y la otra propiedad correspondiente a un valor de entalpía o entropía (el cuadro 3.2 es el caso cuando se dispone de la presión y entalpía).

Como se observa, el segundo algoritmo utiliza el primer algoritmo diseñado. De esta manera ahorramos programación, dejando al computador todo el trabajo.

Estas rutinas son de carácter general, para cualquier tipo de ecuaciones que determina el estado termodinámico de un sistema. Su aplicación es para fluidos puros y sistema de multicomponentes, donde obligadamente debe establecerse la composición del sistema.

3.3.2 CALCULOS DE PROCESOS TERMODINAMICOS.

Definido los procedimientos de cálculo de las propiedades termodinámicas, se facilita la determinación de procesos isotérmicos, isobáricos, isoentálpicos e isoentrópicos. Este tipo de procesos se caracterizan por ser aplicados a sistemas donde existe un solo estado físico (o un cambio de fases) y en donde hay que determinar la energía (calor o trabajo) que el sistema da o recibe. Evaluando los estados termodinámicos antes y después del proceso, el proceso queda establecido y todas las demás propiedades son fijadas.

Existen otros procesos, donde coexisten dos o mas estados físicos. Así caso presente, la fase vapor y la fase líquida, se caracterizan por el equilibrio entre las fases :

- 1) Determinar el punto de burbuja.
- 2) Determinar el punto de rocío.
- 3) Determinar la fracción vaporizada.

El equilibrio entre fases se calcula aplicando un modelo de ecuación de estado e involucra la determinación de la fugacidad para cada uno de los componentes. Para ello se define una función que evalúa el coeficiente de fugacidad por componente. Aquella se deriva de la ecuación de estado :

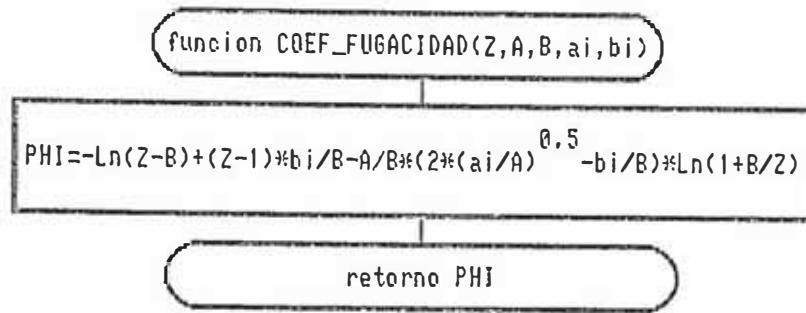


Figura 3.10

3.3.2.1 PUNTO DE BURBUJA Y ROCIO.

El procedimiento de cálculo del punto de saturación consiste en establecer igualdad de las fugacidades de la fase líquida con la fase vapor. Este cálculo puede abarcar :

- 1) Determinación del Punto de Burbuja.
- 2) Determinación del Punto de Rocío.

Ambas rutinas de cálculo son muy similares, diferenciadas solo en las ecuaciones para el punto de burbuja y para el punto de rocío. Ambos procedimientos pueden dar valores de presión o temperatura de saturación.

El cálculo se realiza en dos partes:

- a) Un cálculo preliminar utilizando la función que evalúa la constante de distribución para compuestos puros.

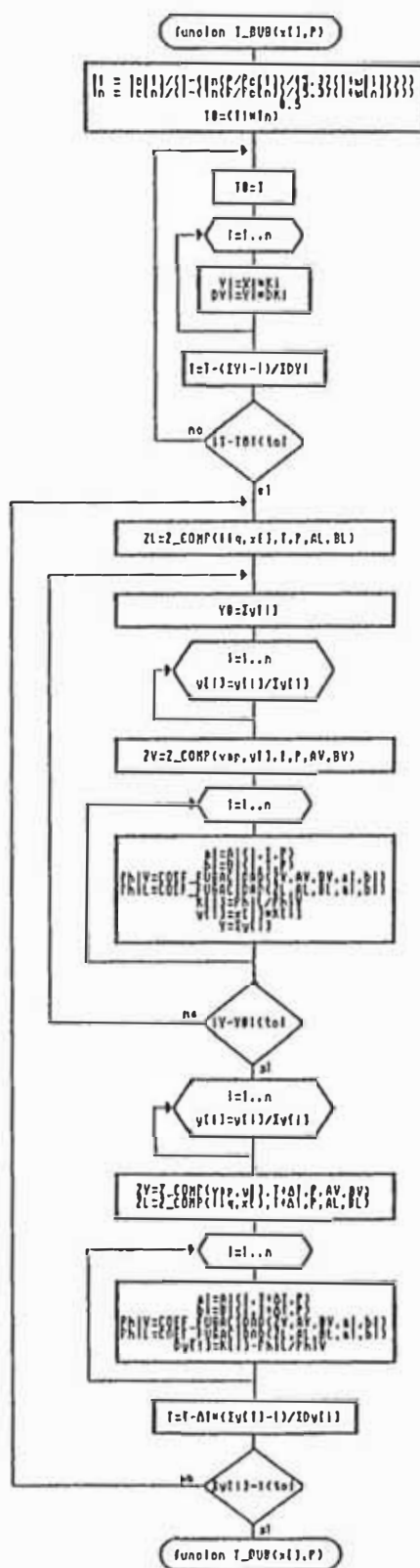
b) Corrigiendo los resultados obtenidos en la parte a), para fijar valores iniciales y calcular el equilibrio mediante la ecuación de estado.

La estimación inicial del procedimiento, consiste en evaluar un valor inicial para la propiedad a determinar (presión o temperatura). El método de convergencia utilizado es el de Newton², evaluando la derivada con respecto a la propiedad por determinar (presión o temperatura) El valor obtenido es aproximado, y se utiliza para en determinar el perfil de temperaturas dentro de una columna de destilación.

La estimación mas rigurosa, implica resolver la ecuación de estado y determinar los coeficientes de fugacidad. El método de convergencia aplicado es el de Newton². La derivada con respecto a la propiedad a determinar, necesaria para aplicar el método de convergencia, se determina numéricamente.

Se diseñan cuatro procedimientos de cálculo que determinan las siguientes variables en los puntos de saturación. :

- 1) Temperatura de Burbuja.
- 2) Temperatura de Rocío.
- 3) Presión de Burbuja.
- 4) Presión de Rocío.



Cuadro 3.11

Esta rutina es similar para determinar los otros puntos de saturación.

3.3.2.2 SEPARACION INSTANTANEA (FLASHING)

Los cálculos de evaporación instantánea se realizan para determinar la fracción vaporizada de una mezcla en equilibrio líquido-vapor.

Al igual que los procedimientos anteriores, se realiza prime una aproximación de la fracción vaporizada, utilizando la constante de distribución ideal, y luego la parte más compleja, debido a que será necesario evaluar la constante de distribución al variar la fracciones molares en ambas fases, en cada iteración.

El método de convergencia aplicado es una combinación de Newton-Rapson para encontrar la fracción vaporizada y el método de iteración directa para la determinación de las composiciones y cálculo de coeficientes de fugacidad. De esta manera, se diseña el algoritmo de solución :

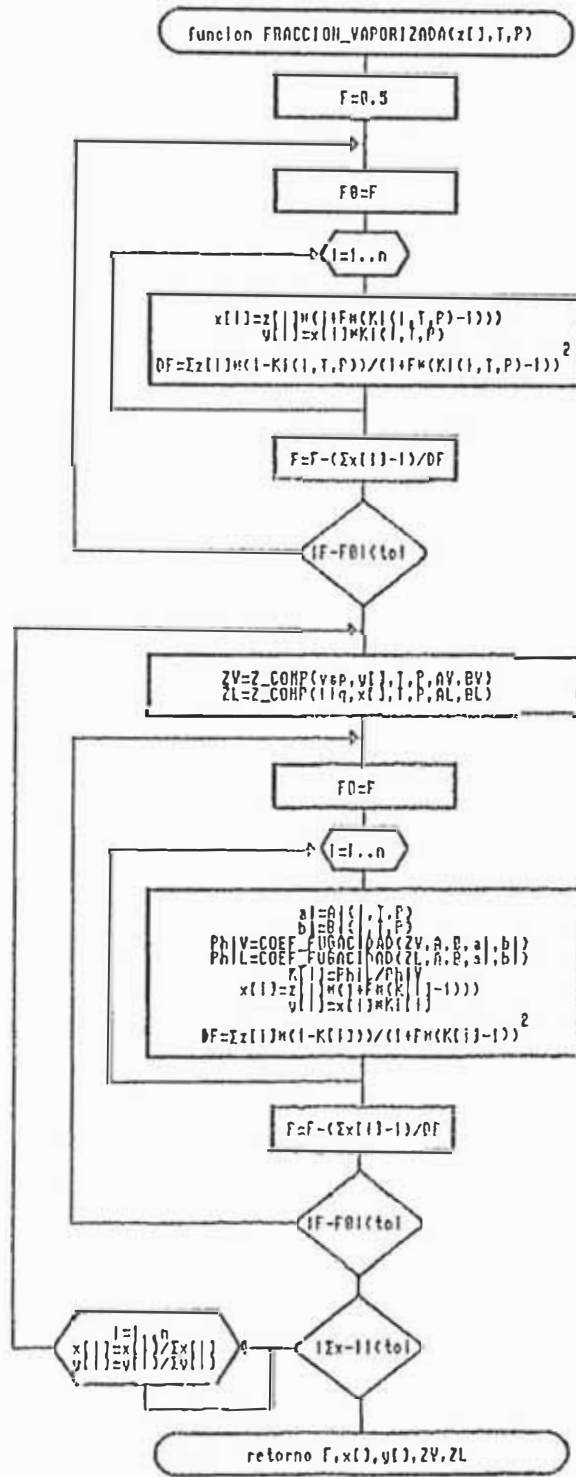


Figura 3.12

3.4 PROGRAMAS DESARROLLADOS PARA LA SIMULACION.

Para la simulación y evaluación de un sistema de multicomponentes, se ha seleccionado el proceso de destilación como ejemplo de aplicación, debido a la gran cantidad de cálculos que es necesario realizar. Inicialmente se ha definido la base termodinámica requerida para los diseños de procesos que se realiza en esta parte. El proceso de cálculo de destilación comprende el diseñar la columna de destilación y diseñar los equipos auxiliares para el proceso de destilación. Para ellos, se desarrollan programas que realizarán cálculos específicos a una zona determinada del proceso.

Los cuatro programas desarrollados son los siguientes :

- 1) Selección de Compuestos.
- 2) Diseño de la Columna de Destilación : Balance de Materia y Energía.
- 3) Diseño de la Columna de Destilación : Diseño de Platos Perforados.
- 4) Evaluación de Propiedades Termodinámicas.

3.4.1 PROGRAMA DE ACCESO A LA BASE DE DATOS.

Teniendo en cuenta que un sistema de multicomponentes puede estar formado por un sin número de

combinaciones de hidrocarburos, y dado que los programas fueron desarrollados de manera general, es necesario tener un programa para el manejo de la base de datos.

El programa consiste en la selección de los compuestos que conforman un sistema multicomponente, y en el mantenimiento para aumentar dicha base con nuevos sistemas y nuevos compuestos.

3.4.2 PROGRAMA DE DISEÑO DE COLUMNAS DE DESTILACION.

El programa de destilación multicomponentes se divide en 3 partes :

- Determinación de parámetros iniciales.
- Cálculo riguroso en destilación.
- Dimensionamiento y diseño de platos perforados.

3.4.2.1 ESPECIFICACIONES. CONDICIONES DE OPERACION.

Del análisis realizado en el punto 2.2.3.1 se estableció que las variables de diseño de la columna de destilación viene dada por :

- 1) La presión de operación de cada etapa (incluyendo el condensador y el rehervidor) o la presión en el tope y la caída de presión en cada etapa.

- 2) El flujo de alimentación, su composición y la presión y temperatura (para hallar la entalpía de alimentación).
- 3) El calor retirado en cada efecto ($Q=0$ si el plato es adiabático) mediante condensadores o hervidores laterales.
- 4) El flujo de líquido o vapor que se retira de la columna.
- 5) Dos composiciones de topes y/o fondos para el balance de masa por componente.

El flujo de información es introducido al programa de tal forma que es fácilmente accesible en cualquier momento, para realizar cambios y variaciones de los parámetros establecidos. Esto da una gran ventaja al simular o diseñar un proceso de destilación utilizando otras variables de diseño que son fijadas indirectamente, dando flexibilidad al manejo de la información.

3.4.2.2 DETERMINACION DE PARAMETROS INICIALES.

El método abreviado consiste en utilizar el recetario de ecuaciones y correlaciones deducidos teórica o empíricamente. Inicialmente, debe seleccionarse los elementos que componen la mezcla, en cada una de las alimentaciones. La selección se realiza a partir del

programa que maneja 18 de los compuestos de carbono (alcanos), con las propiedades y constantes requeridas por el programa (propiedades críticas, factor acéntrico, peso molecular, temperatura normal de ebullición, constantes para la entalpía a presión cero y entalpía de vaporización a la temperatura normal de ebullición). Estas propiedades están grabadas en archivos que son accedidos por el programa. De esta manera, no se maneja toda la biblioteca de compuestos, sino aquellos que son necesarios, ahorrando memoria en el computador y ganando velocidad al manejar un pequeño grupo de datos.

Rutina PARAMETROS_INICIALES

```
introducir : PRESION TOPEs y FONDOS
introducir : NUMERO DE ALIMENTACIONES
para J = 1..NUMERO DE ALIMENTACIONES
  para I = 1..N
    introducir : FLUJOS[I,J]
    evaluar : FLUJO[J] = FLUJO[J]+FLUJOS[I,J]
  para J = 1..NUMERO DE ALIMENTACIONES
    para I = 1..N
      evaluar : Z[I,J] = FLUJOS[I,J]/FLUJO[J]
  para J = 1..NUMERO DE ALIMENTACIONES
    evaluar : TEMPERATURA DE BURBUJA Y ROCÍO (de alimentación)
    introducir : TEMPERATURA (de alimentación)
    evaluar : PROPIEDADES_1
  evaluar : BALANCE MASA-ENERGIA (una alimentación equivalente)
  introducir : COMPUESTOS, CLAVES
  introducir : RECUPERACIÓN COMPUESTOS CLAVES
  evaluar : DISTRIBUCIÓN DE LOS COMPUESTOS (Ec. Genstebeck)
  evaluar : FLUJO DESTILADO-FONDOS (balance de masa)
  introducir : TIPO CONDENSADOR DE TOPEs
  evaluar : TEMPERATURA TOPE Y FONDO
  evaluar : REFLUJO MÍNIMO (Ec. Underwood)
  evaluar : NÚMERO MÍNIMO1 DE ETAPAS (Ec. Fenske)
  evaluar : REFLUJO DE OPERACIÓN
  evaluar : NÚMERO DE ETAPAS (Ec. Gilliland)
  evaluar : ETAPA DE ALIMENTACIÓN (Ec. Kirkbrigde)
```

El diagrama de flujo presentado nos muestra el proceso seguido en la determinación de los parámetros iniciales. Las ecuaciones utilizadas por el método abreviado (Genstebeck-Underwood-Fenske-Gilliland-Kirkbride)¹⁷ son aplicadas a columnas con una sola alimentación. Es por ello que al existir varias alimentaciones, se calcula una alimentación equivalente, el cual consiste en un balance de masa y energía con las corrientes de alimentación.

Aunque el programa diseña columnas con salidas laterales e intercambiadores de calor laterales (intercondensadores e interrehervidores), queda al criterio del usuario la ubicación de dichas salidas equipos. La solución sera encontrada luego que se realizen diferentes corridas.

3.4.2.3 CALCULO RIGUROSO.

Se puede considerar al cálculo riguroso el balance de masa y energía realizado plato a plato. Esta consistirá como la segunda parte del programa y proceso más laborioso y detallado. A continuación se presenta parte del listado correpondiente a este procedimiento de cálculo :

```
PROCEDIMIENTO CALCULO RIGUROSO
  INICIO { Procedimiento Principal }
  ITERACION := 0;
  PERFIL INICIAL TEMPERATURAS;
  PERFIL INICIAL FLUJOS;
  repetir
    CALCULO MATRIZ TRIDIAGONAL;
    PERFIL TEMPERATURA;
    PERFIL FLUJOS;
    ITERACION = ITERACION + 1;
  hasta (ACUM < 0.1) or (ITERACION > 10);
  IMPRIME RESULTADOS;
FIN ; { Procedimiento Riguroso }
```

Cuadro 3.4

Como se observa, la solución y determinación de los perfiles de composición, temperatura y flujos a lo largo de la columna se realiza mediante una serie de iteraciones, por la que el método de convergencia es por sustitución directa².

El perfil inicial de temperaturas se calcula mediante una distribución lineal entre las temperaturas del tope, fondo y alimentaciones. El perfil de flujos viene a ser una distribución de flujos equimolares como en una destilación McCabe-Thiele.

De esta forma se obtienen los perfiles iniciales necesarios para formar la matrices tridiagonales que expresan matemáticamente los balances de masa **y energía** de la columna de destilación y poder dar solución al sistemas de ecuaciones generadas.

La solución del sistema de ecuaciones son resueltas por eliminación Gaussiana, modificada para operaciones con matrices tridiagonales¹⁴. Esta solución genera nuevos perfiles de flujos y de composición en la fase líquida, siendo necesario calcular la temperatura de burbuja para cada etapa con las composiciones obtenidas, y luego efectuar los balances de energía para obtener el nuevo perfil de flujos para la fase vapor, repitiéndose los cálculos hasta obtener la convergencia, determinada por una función objetivo el cual es el cuadrado de la desviación relativa del perfil de temperaturas con el perfil anterior.

Una vez que la desviación es menor que la tolerancia del sistema, se genera un reporte, consistente en las especificaciones y datos, las propiedades termodinámicas para todas las etapas de separación.

Finalmente se evalúa la viscosidad y tensión superficial del líquido, densidad del vapor y del líquido y los flujos másicos del vapor y líquido. Estos parámetros son datos para el siguiente programa de evaluación y diseño de platos perforados.

Existen otras rutinas no mencionadas, ya que sólo son utilitarios para el manejo de archivos, presentación y el manejo de pantallas, mensajes al usuario, etc.

3.4.2.4 DIMENSIONAMIENTO E HIDRODINAMICA.

El procedimiento de diseño de platos²⁴ es prácticamente una traducción del proceso al lenguaje de programación que debido a la característica de ser un lenguaje estructurado, el listado del programa es legible para cualquier persona con conocimientos de programación. La rutina de cálculo del diseño de platos perforados ha sido dividida en dos procedimientos :

- 1) Cálculo de la Geometría del Plato.
 - a) Parámetros Iniciales.
 - b) Area Activa Inicial
 - c) Area del Vertedero.
 - d) Diámetro del Plato.
 - e) Area Activa.
 - f) Dimensionamiento del Plato.
 - g) Condiciones de Operación.
- 2) Cálculo de la Hidráulica del Plato.
 - a) Altura de líquido sobre el rebosadero.
 - b) Altura del líquido claro en el plato.
 - c) Pérdida de carga a la entrada del plato.
 - d) Pérdida de carga en el rebosadero de salida.
 - e) Pérdida de carga por efecto de la tensión superficial.
 - f) Condiciones de Operación.

Los datos son introducidos al correr el programa

anteriormente descrito, o por otro parte introducir nuevos datos correspondientes a otras columnas de destilación.

3.4.3 PROGRAMA DE EVALUACION DE PROPIEDADES TERMODINAMICAS Y PROCESOS TERMODINAMICOS.

Para el diseño de los procesos auxiliares que complementan al proceso de destilación, es necesario determinar las propiedades termodinámicas en cada una las corrientes existentes en el proceso.

Los procedimientos de la determinación de propiedades termodinámicas tendrán a su cargo la evaluación del proceso termodinámico. El dimensionamiento del equipo donde se realiza el proceso y las otras variables de diseño que intervienen se evalúa mediante una hoja de cálculo.

El diseño de los equipos auxiliares (condensador de tope, rehervidor de fondos, compresores, etc.) se calcula en forma simplificada, utilizando para ellos las fórmulas general y estimación de propiedades del fenómeno en forma aproximadas. Los cálculos son realizados utilizando una hoja de cálculos, pero las propiedades termodinámicas son evaluadas previamente.

1) Compresores.- El cálculo termodinámico de compresores se hace mediante un proceso adiabático. Generalmente se dispone de la presión y temperatura, la presión y el punto de saturación del vapor, o la temperatura o presión de saturación del vapor a la entrada del compresor. El programa de evaluación de propiedades termodinámicas (TERCO.EXE) determinará los valores de la entalpía y entropía. La presión después del proceso es dato y debe ser mayor (o no habría compresión) que la presión de entrada. Al ser el proceso isoentrópico, se asume que la entropía a la entrada es igual a la de salida, y se realiza un cálculo mediante los valores presión-entropía. La entalpía a la salida es evaluada, por lo que se calcula el requerimiento de energía. Variantes al cálculo se dan cuando la temperatura de salida es un dato (mayor que la temperatura de entrada) por lo que el cálculo es mediante los valores temperatura-entropía.

2) Turbinas.- El proceso es contrario al de compresores, pero se basa en el mismo principio. A partir de una presión o temperatura se recibirá trabajo del fluido, manteniendo la entropía constante, hasta que el fluido se encuentre saturado como vapor. Los cálculos pueden ser con las variables temperatura-entropía o presión-entropía, de acuerdo a los datos disponibles.

- 3) Intercambiadores de Calor.- Generalmente se disponen de datos de presión y temperatura, a la entrada y salida del equipo. Se evaluará las entalpías correspondientes a estos puntos y con ello la cantidad de calor requerida o que se recibe. Este tipo de cálculo presión-temperatura es aplicado para todo tipo de equipo de intercambio de calor, incluyendo condensadores y rehervidores, donde hay que tener en cuenta los puntos de saturación.
- 4) Válvulas de Expansión.- El proceso es isoentálpico en el cual, la presión disminuye y provoca la disminución de la temperatura. Generalmente se produce una evaporación parcial del fluido. Es necesario evaluar un equilibrio líquido-vapor entre las fases, tal que la entalpía sea igual a la entalpía antes de ingresar a la válvula. En caso que el fluido salga como vapor o como líquido, se detecta para el estado de la corriente de salida y se utiliza el cálculo adecuado.

3.5 INTEGRACION DE LOS PROGRAMAS PARA LA SIMULACION

Los programas desarrollados para la simulación de un proceso de separación multicomponente, han sido diseñados para utilizarse cada uno en forma independiente o como un paquete de programas.

La transferencia de datos se realiza mediante archivos textos y la generación de reportes parciales.

Para la simulación inicialmente se elige los compuesto que conforman el sistema de multicomponentes a evaluar. De no encontrar los compuestos dentro del archivo de constantes (SELECOMP.CTE), se tiene la opción de acceder un nuevo sistema de compuestos mediante un programa de acceso (SELECOMP.EXE: SELEccionar COMPuestos) que genera el archivo de constantes (DESMUL.CTE) que son utilizados por los programas de diseño de columnas de destilación (DESMUL.EXE: DESTilación MULTicomponente) y el programa de evaluación de propiedades termodinámicas (TERCO.EXE: TERmodinámica de CORrientes).

A continuación, se utiliza el programa DESMUL.EXE para la evaluación de las especificaciones en la separación de la mezcla de multicomponentes (composición en a los largo de la columna) y las etapas de necesarias, así como los calores removidos en los condensadores (tope y laterales) y los calores suministrado en los rehervidores (fondo y laterales). Para ello el programa cuando converge, escribe un reporte (DESMUL.RPT), donde incluye también los perfiles de temperatura, presión, y las demás propiedades de ambas fases. También se genera un archivo DESMULH.RPT (DESTilación MULTicomponente - Hidrodinámica y Dimensionamiento).

Establecido el diseño del proceso de destilación, es necesario calcular las dimensiones de la columna, altura y diámetro, y la hidrodinámica del plato de separación (plato perforados) para comprobar la caída de presión asumida.

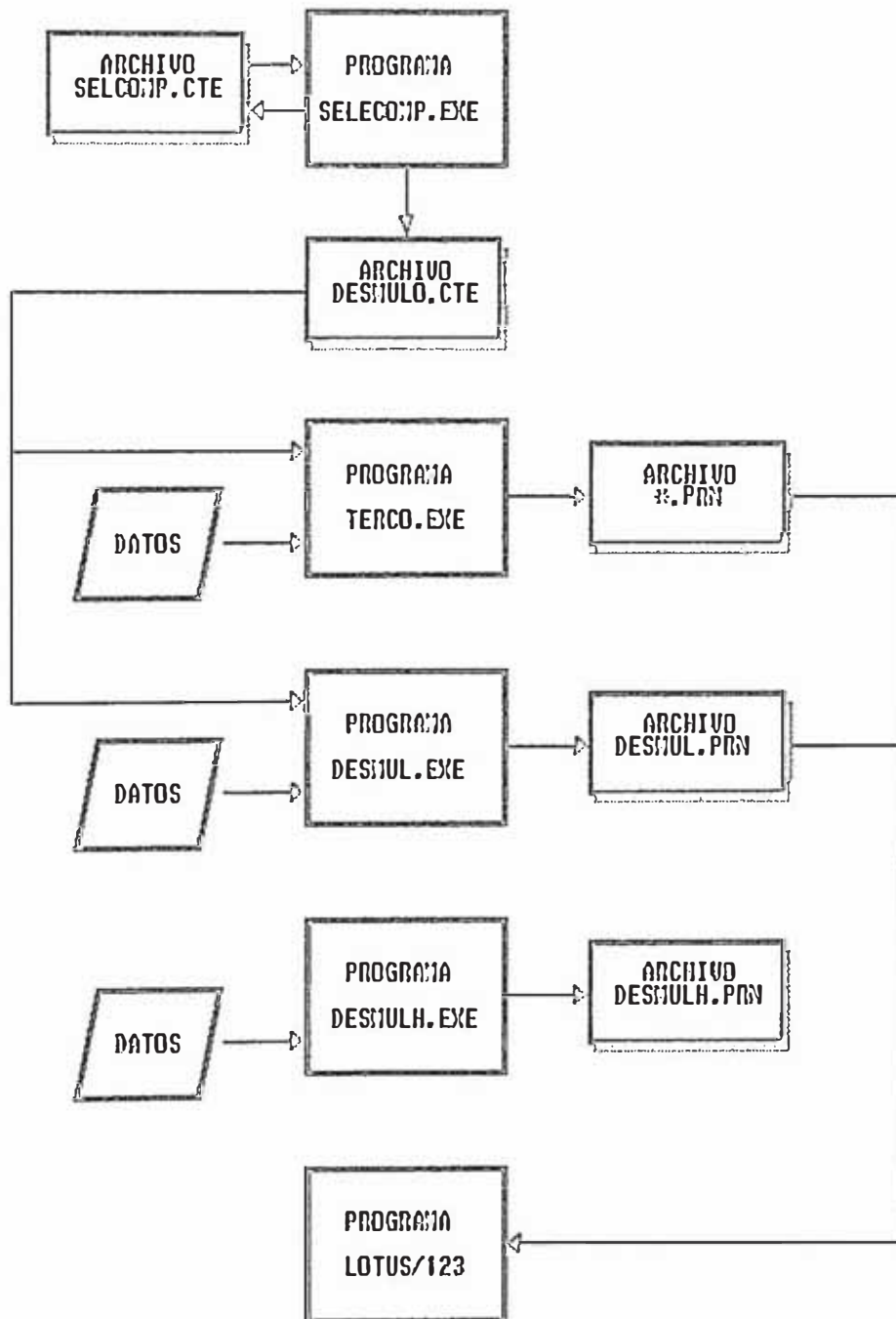


Figura 3.13

CAPITULO IV SIMULACION Y OPTIMIZACION.

4.1 CONFRONTACION DEL PROGRAMA CON OTRAS FUENTES.

Para verificar si el programa elaborado cumple con la finalidad para la que se ha creado, es necesario realizar comparaciones con valores experimentales, otros trabajos o datos tabulados. Los modelos matemáticos utilizados para realizar la simulación (determinación de propiedades termodinámicas), han sido evaluados anteriormente por investigadores, adjuntando en su trabajo la información y la exactitud del modelo con respecto a valores reales. No corresponde realizar el trabajo de verificar el modelo matemático contra datos experimentales, pero si realizar la comparación contra datos tabulados para tener la certeza que el modelo ha sido implementado correctamente y los resultados obtenidos están dentro del error permitido por el modelo.

4.1.1 PROPIEDADES TERMODINAMICAS VS. VALORES TABULADOS.

La determinación de propiedades termodinámicas es muy importante debido a que un error en la estimación de

esta afecta directamente al diseño de un proceso específico. Es por ello que se comparará de ciertas propiedades físico-químicas para observar el grado de exactitud con que se va a realizar la simulación. La comparación de los datos está dirigida al equilibrio entre fases y al cambio en las propiedades (entalpía y entropía).

Se presentan a continuación presenta una comparación de la temperatura normal de ebullición y la entalpía normal de vaporización para los hidrocarburos que conforman la base de datos :

Comparación de la temperatura normal de ebullición			
Compuesto	Valor Real	Calculado	Discrepancia
Metano	201.00	201.65	0.32 %
Etileno	305.10	305.18	0.03 %
Etano	332.20	331.71	0.15 %
Acetileno	339.10	335.80	0.97 %
Propileno	405.80	406.71	0.22 %
Propano	416.00	415.32	0.16 %
Isobutano	470.60	469.85	0.16 %
n-Butano	490.80	490.18	0.13 %
neo-Pentano	508.80	508.76	0.01 %
iso-Pentano	541.80	542.18	0.07 %
n-Pentano	556.60	556.88	0.05 %
n-Hexano	615.40	615.09	0.05 %
n-Heptano	668.90	669.28	0.06 %
n-Octano	717.90	717.97	0.01 %
n-Nonano	763.20	762.94	0.03 %
n-Decano	805.20	805.29	0.01 %
n-Pentadecano	978.20	976.89	0.13 %
n-Octadecano	1061.80	1058.70	0.29 %

Cuadro 4.1¹⁰

Los valores calculados han sido determinados por el programa de Termodinámica de Corrientes (TERCO), seleccionando el sistema para compuestos puros y confrontando los resultados con los valores tabulados en tablas termodinámicas¹⁰.

Los cuadros siguientes corresponden a compuestos puros y sistemas de varios componentes, donde se comparan los resultados obtenidos por el programa de Termodinámicas de Corrientes (TERCO) contra datos experimentales, encontrados en la referencia bibliográfica¹⁰.

Comparación de la Entalpía de Vaporización a la Temperatura Normal de Ebullición			
Compuesto	Valor Real	Calculado	Discrepancia
Metano	219.200	225.543	2.89 %
Etileno	207.700	209.264	0.75 %
Etano	210.400	212.057	0.79 %
Acetileno	280.000	273.258	2.41 %
Propileno	188.200	191.827	1.93 %
Propano	183.200	184.372	0.64 %
Isobutano	157.600	157.824	0.14 %
n-Butano	165.800	167.604	1.09 %
neo-Pentano	135.700	136.631	0.69 %
iso-Pentano	147.200	150.040	1.93 %
n-Pentano	153.700	156.372	1.74 %
n-Hexano	144.100	146.070	1.37 %
n-Heptano	136.100	139.068	2.18 %
n-Octano	129.600	132.370	2.14 %
n-Nonano	123.800	126.733	2.37 %
n-Decano	118.800	121.764	2.49 %
n-Pentadecano	100.200	103.695	3.49 %
n-Octadecano	92.000	93.194	1.30 %

Cuadro 4.2¹⁰

Comparación del cambio de Entalpía del Iso-butano Vapor para una Compresión Isotérmica a 190 °F de 10 psia hasta 229.3 psia

@190 °F (649.6 °R)	Real	Calculado	Error
@ 10.0 psia (Btu/lbmol)		9476.81	
@ 229.3 psia (Btu/lbmol)		10544.48	
Cambio de Entalpía en Btu/lbm	-17.60	-1067.67 -18.39	4.37 %

Glanville J.W., B.H. Sage y W.N. Lacey
Ind. Eng. Chem, 42, 508-513 (1950)

Cuadro 4.3

Comparación de la presión de saturación y la entalpía de vaporización para una temperatura de 280 °F para el n-hexano

@280 °F (739.6 °R)	Real	Calculado	Error
Psat (psia)	84.93	86.6	2.09 %
Hvap (Btu/lbmol)		19615.95	
Hliq (Btu/lbmol)		9335.81	
Entalpía de vaporización en Btu/lbm	116.83	10280.14 119.29	2.11 %

J. Chem. Eng. Data, 9, 536 (1964)

Cuadro 4.4

Comparación de la volatilidad para una mezcla de Isopentano y N-pentano para temperaturas desde 125 °F hasta 250 °F)

Temperatura	Volatilidad Real	Volatilidad Calculado	Error
125 °F	1.26	1.265	0.40 %
150 °F	1.23	1.236	0.49 %
175 °F	1.21	1.209	0.08 %
200 °F	1.18	1.186	0.51 %
225 °F	1.16	1.163	0.26 %
250 °F	1.14	1.141	0.09 %

J. Chem. Eng. Data, 8, 504 (1963)

Cuadro 4.5

Comparación de la temperatura de saturación para un mezcla de metano-etano-propano con composición líquida del 41.9 % de Metano y 37.83 % de etano, a 100 psia			
@100 psia	Real	Calculado	Error
----- Temperatura (°R) -----	284.6	285.81	0.43 %
Witchterle I. y R. Kobayashi J. Chem. Eng. Data 17, 4-18 (1872)			

Cuadro 4.6

Las discrepancias encontradas en los cálculos efectuados con los valores reales tabulados no exceden en promedio al 5% de discrepancia, error permitido en diseños de procesos. Cabe destacar que en el proceso de cálculo de torres de destilación, el valor de la volatilidad relativa es sumamente importante por relacionarse directamente con la distribución de los elementos claves, la determinación de los puntos de saturación, la determinación del numero de etapas y el reflujo mínimo. Una mala estimación arroja un error en el dimensionamiento de la columna de destilación y de la transferencia de calor que suceden. Los cuadros 4.5 y 4.6, arrojan discrepancias alrededor del 0.5%.

4.1.2 PROGRAMA DE DESTILACION VS. OTROS PROGRAMAS.

En el punto 4.1.1 se confrontaron las propiedades termodinámicas que calcula los rutinas elaboradas contra

valores reales. Es necesario ahora confrontar los algoritmos de cálculo del proceso de destilación, con otros algoritmos desarrollados existentes en la bibliografía citada.

Para la confrontación de los programas de destilación, tomamos dos ejemplos presentes en la publicación "Stagewise Computations"²¹, para los cuales los presentamos a continuación :

- a) Primer Caso.- Multicomponent Distillation²¹ - Design Case : Diseño de columnas de destilación multicomponentes, desarrollado por David M. Watt Jr., y Jean P. Leinroth Jr., utilizando para el diseño de columnas el método de Thiele-Geddes y cálculo de punto de rocío para cada etapa.

El problema plantea encontrar el número de etapas ideales para efectuar una separación específica de una mezcla multicomponente. El enunciado del problema y los resultados obtenidos se encuentran en el Anexo 3.

Los datos del problema corresponden a los datos para el diseño de columnas, los que serán accedidos directamente, con excepción del porcentaje de recuperación de los elementos claves por el tope de

la columna. El balance de masa alrededor de la columna se realiza mediante un proceso de prueba y error hasta encontrar las composiciones específicas del diseño. Los elementos claves seleccionados corresponde al n-Hexano como el ligero y n-Heptano como el pesado, debido a que representa la mayor carga en la alimentación y por gobernar el proceso de destilación, como también se utiliza por ser las especificaciones del problema (ver figura 4.1).

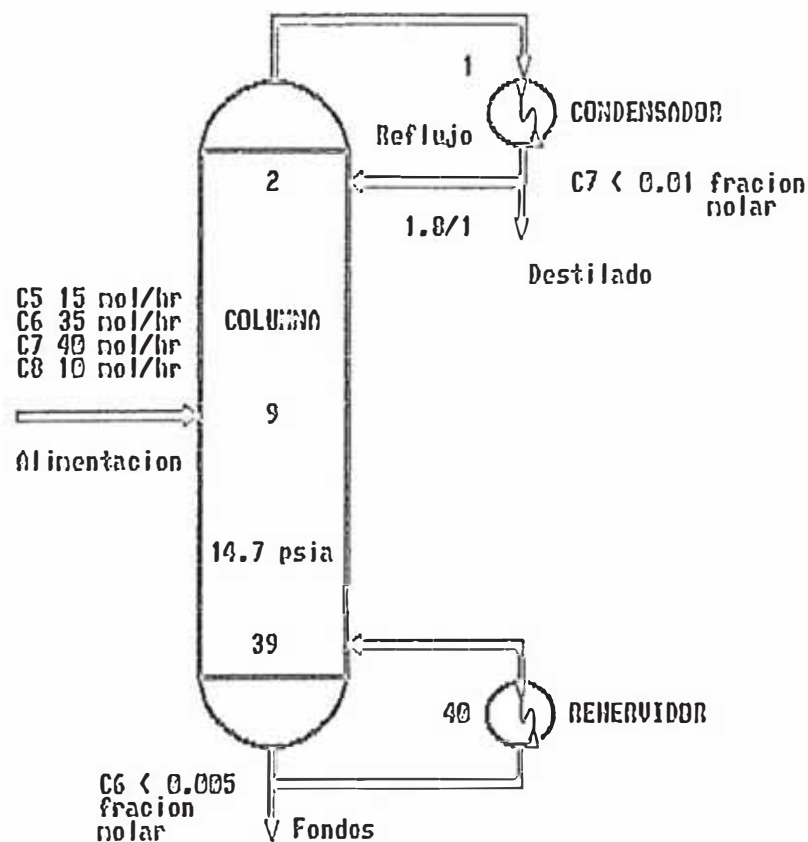


Figura 4.1

Utilizando la razón de reflujo de operación del problema, se obtiene según el programa DESMUL, 18 etapas. Para realizar la comparación con el programa CACHE se incluye una etapa más, debido a que el modelo utilizado en el programa incluye la etapa del condensador de tope, sea esta total o parcial.

La corrida se realizó con 19 etapas, con alimentación en la etapa 9, satisfaciendo las especificaciones del problema. El cuadro siguiente presenta una comparación entre los resultados de los dos programas :

Descripción	Programa CACHE	Programa DESMUL	Discrepancia
Número de Etapas	20	19	1
Temperaturas (°R)			
- Topes	603.79	602.62	1.17
- Fondos	675.93	675.60	0.33
Composición			
- Topes (LK)	0.6920	0.6942	-0.0022
- Fondos (HK)	0.7950	0.7952	-0.0002

Cuadro 4.7

Comparamos también las gráficas siguientes confeccionadas para los perfiles temperatura y de composición de los elementos clave ligero y clave pesado (ver figuras 4.2 y 4.3).

COMPARACION DE PROGRAMAS

Perfil de Temperaturas

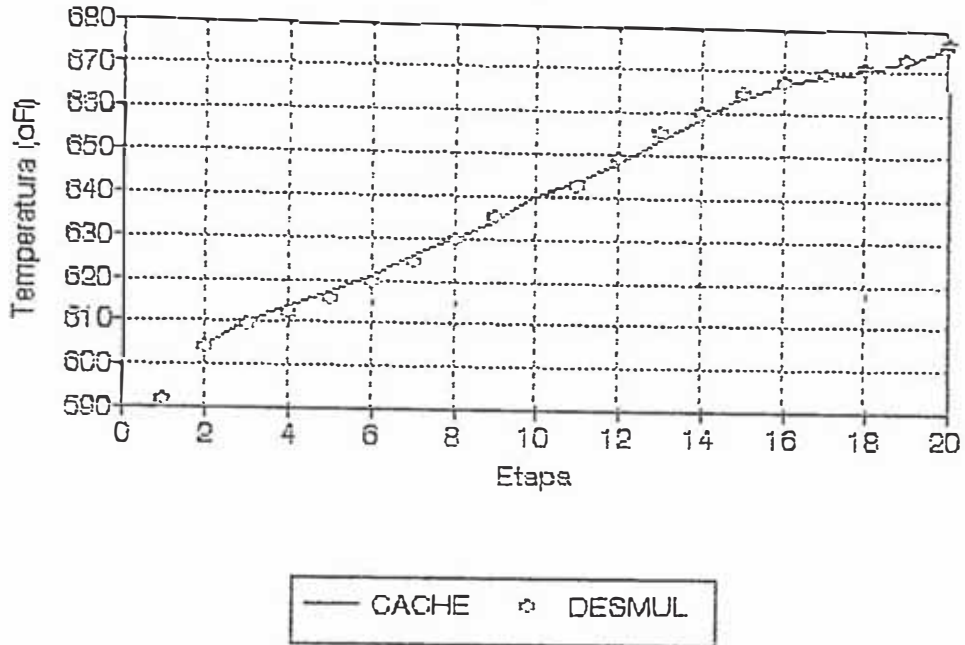


Figura 4.2

COMPARACION DE PROGRAMAS

Perfiles de Composiciones LK-HK

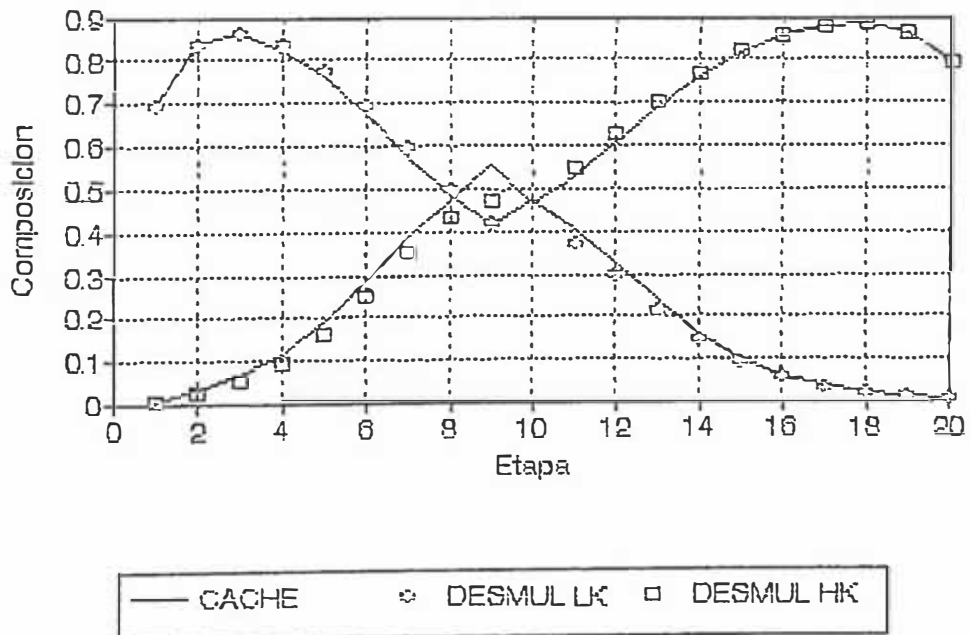


Figura 4.3

b) Segundo Caso. - WHENDI²¹ Computer Program (Wank Henke Distillation Method) basado en el método planteado por Admunson y Pontinem, y posteriormente extendido por J. C. Wang y G. E. Henke.

El problema plantea realizar una destilación utilizando dos alimentaciones, dos intercambiadores de calor laterales y dos salidas laterales, una líquida y otra gaseosa. El enunciado del problema y los resultados de ejecutar el programa DESMUL.EXE con las especificaciones del problema, se encuentran en el Anexo 4.

No se dan especificaciones con respecto a la pureza o impurezas de los topes o fondos, sólo se deduce que el destilado fluye a razón de 20 lbmol/hr.

Los valores necesarios para iniciar los cálculos iterativos son asumidos teniendo en cuenta las salidas laterales, realizando el proceso de cálculo con la ecuación de Wilson⁹, para los valores de la constante de distribución hasta conseguir un perfil más adecuado. Luego se realizan los cálculos de equilibrio líquido-vapor con la ecuación de estado, utilizando el concepto de fugacidades, cálculo más riguroso.

Para confrontar los resultados se compara los perfiles de temperaturas, flujo y la composición de los elementos claves (ver figuras 4.4 - 4.7) y observar la desviación existente en la comparación de resultados. También se tabula otros resultados como la temperatura de alimentación, los calores suministrados y removidos, y las composiciones en las corrientes laterales (ver cuadro 4.8).

Descripción		WHENDI	DESMUL	Discrepancia
Alimentación:	- Temperatura(°R)	673.60	670.26	0.50 %
Destilado :	- Flujo(lbmol/hr)	20.00	20.03	0.15 %
	- Temperatura(°R)	579.71	575.44	0.74 %
	- Calor(Btu/hr)	864820	871500	0.74 %
	- Composición: 1	0.14869	0.14639	
	2	0.82518	0.82244	
	3	0.02611	0.03114	
	4	0.00001	0.00027	
	5	0.00000	0.00000	
Fondos :	- Flujo(lbmol/hr)	40.00	39.97	0.08 %
	- Temperatura(°R)	767.51	747.51	2.68 %
	- Calor(Btu/hr)	1610300	1576000	2.18 %
	- Composición 1	0.00000	0.00000	
	2	0.00083	0.00176	
	3	0.23616	0.26443	
	4	0.65151	0.62122	
	5	0.11287	0.11260	
Salida Lateral:	- Temperatura(°R)	604.56	600.12	0.78 %
Etapa 3, líquido	- Composición 1	0.01217	0.01639	
	2	0.75605	0.69426	
	3	0.22819	0.28645	
	4	0.00126	0.06290	
	5	0.00000	0.00000	
Salida Lateral:	- Temperatura(°R)	723.62	713.10	1.45 %
Etapa 13, vapor	- Composición 1	0.00005	0.00024	
	2	0.03411	0.03557	
	3	0.71145	0.67502	
	4	0.24127	0.27554	
	5	0.01310	0.01364	

Cuadro 4.8

COMPARACION DE PROGRAMAS

Perfiles de Temperaturas

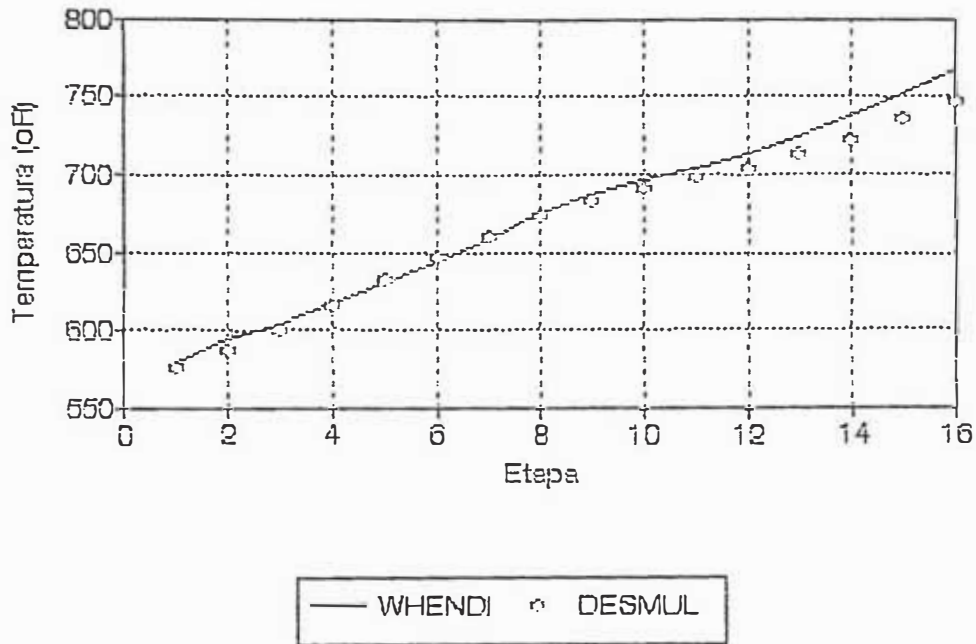


Figura 4.4

COMPARACION DE PROGRAMAS

Perfil de Composiciones LK-HK

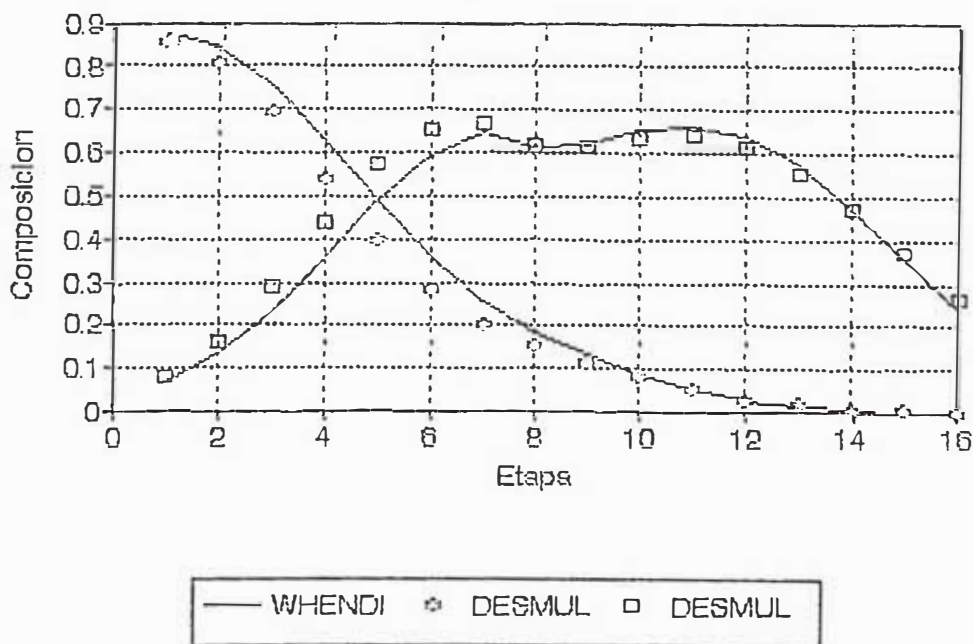


Figura 4.5

COMPARACION DE PROGRAMAS

Perfil del Vapor

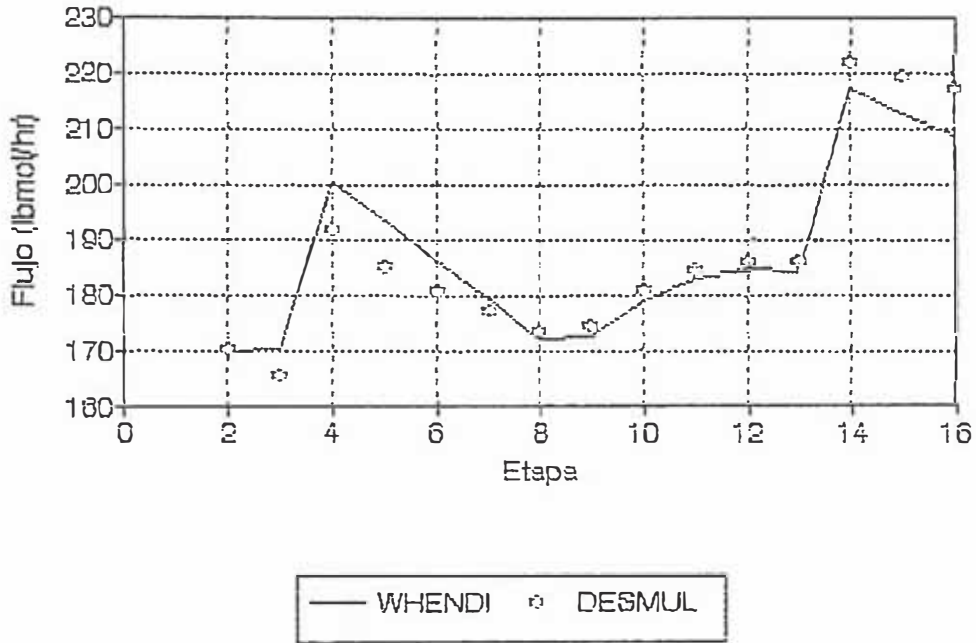


Figura 4.6

COMPARACION DE PROGRAMAS

Perfil del Liquido

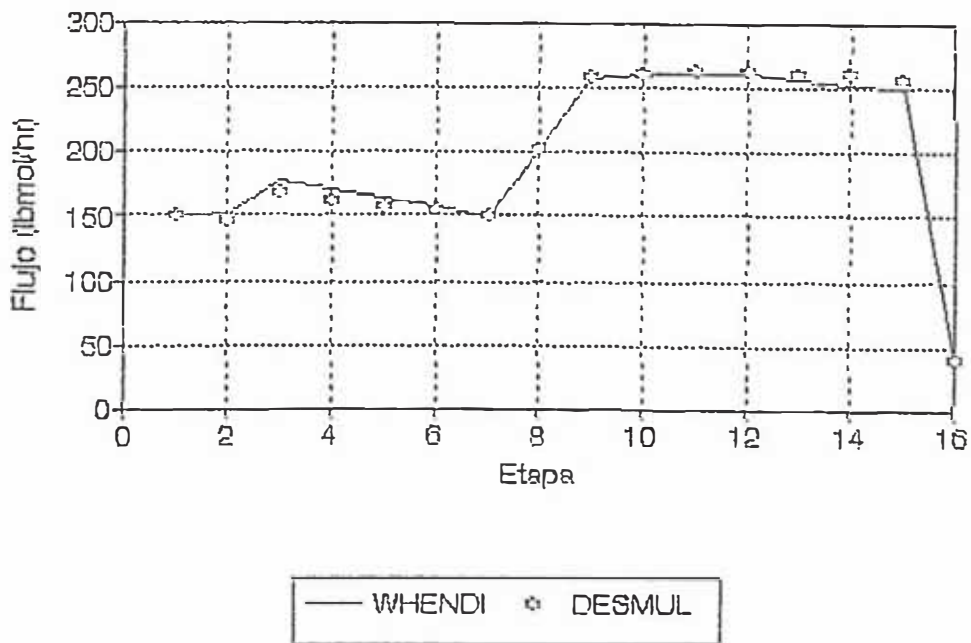


Figura 4.7

Las discrepancias encontradas son mínimas, teniendo en cuenta que se está utilizando diferentes algoritmos de cálculos, ecuaciones y técnicas de convergencia diferentes. Con ello, se llega a demostrar la veracidad de los resultados que se obtienen al ejecutar los programas diseñados.

4.2 SIMULACION Y OPTIMIZACION APLICADO A UNA UNIDAD DE SEPARACION.

La simulación realizada a un problema planteado para encontrar la solución óptima, se ha escogido de la referencia (25). Se han tomado en cuenta todas las especificaciones y las reglas para la simulación y optimización, aunque también queda la posibilidad en utilizar otros métodos de simulación.

4.2.1 DESCRIPCION DEL SISTEMA.

El sistema escogido consta de una planta de alquilación en la cual se produce gasolina del butileno e iso-butano. Para ello existe una columna con 50 platos, con diámetro y condiciones de diseño adecuados. Limitaciones en el condensador de topes hace necesario el uso de bombas calorimétricas, estableciendo 4 esquemas

que utiliza este concepto. El programa DESMUL.EXE determinará los flujos de destilado y fondos, sus composiciones y los requerimientos de calor. El programa TERCO.EXE calculará las propiedades termodinámicas de otros procesos vinculados con el sistema.

Del problema escogido, tenemos el enunciado en el Anexo 5, para lo cual se considera :

- 1) Selección de las condiciones de operación óptimas y configuración de equipos basados sobre los costos de servicios y los costos de capital para nuevos equipos. Los costos de capital para la unidad de alquiler para tendidos de tuberías, instrumentación y modificación de los platos de separación (si es requerido) pueden ser considerados constantes para todas los esquemas, de aquí solo el compresor, las bombas y los intercambiadores del fraccionador necesitan ser considerados para el análisis del costo de capital.
- 2) Preparación de un balance de Materia y Energía y un Diagrama de Flujo del Proceso para seleccionar el esquema del proceso. Se asume los siguientes puntos para el diseño de la columna de fraccionamiento con bomba calorimétrica :
 - a) Para cálculos de destilación, el propano en la alimentación debe asumirse que sale por los topes de la columna, y la separación es entre

el iso-butano y n-butano, que puede ser tratada como una separación binaria.

- b) Para este sistema una corriente equimolar constante es una razonable suposición por lo que el uso de un diagrama McCabe-Thiele puede dar resultados.
- c) La eficiencia del plato para sistemas de este tipo es aproximadamente 80 %.
- d) La temperatura óptima de la corriente fría de salida para la bomba calorimétrica debe caer entre 10 °F y 40 °F. Se asume que las temperaturas deben ser los puntos de rocío para las presiones de ingreso y el punto de burbuja para las presiones de salida.
- e) El intercambiador con la unidad de alquilación (30'000,000 Btu/hr) es atractivo porque el LMTD está referido a las condiciones del fondo del fraccionador, donde la elevación de la temperatura por efecto de la vaporización es mínima, en estas condiciones se supone una temperatura de ingreso y de salida de esta corriente de y hacia el reactor de 90°F. Esta temperatura fijará la presión de la columna de fraccionamiento.

4.2.2 PLANTEAMIENTOS DE ESQUEMAS. ALTERNATIVAS.

El proceso de separación se realiza utilizando una columna de fraccionamiento con 40 etapas. El propano contenido en la alimentación será removido, correspondiendo a separar los compuestos isómeros iso-Butano y n-Butano. El producto de topes irá a una unidad de alquilación. El propano puede ser eliminado de esta corriente fácilmente, pero no el n-Butano debido a la diferencia entre las temperaturas de ebullición entre el compuesto y el isómero. Es necesario establecer bajo que concepto se realiza la separación y si esta es posible. La destilación se efectúa utilizando el programa elaborado DESMUL.EXE, introduciendo las especificaciones dadas en el caso a estudiar.

4.2.2.1 DESTILACION CONVENCIONAL.

La destilación convencional utiliza un fluido refrigerante para el condensador de topes y vapor vivo para el rehervidor de fondos (ver figura 4.8). De acuerdo a los resultados obtenidos al ejecutar el programa DESMUL.EXE, la temperatura del reflujo proveniente del condensador parcial es de 521.66°R (61.99°F). La disponibilidad de agua de enfriamiento dado por el caso se encuentra a una temperatura de 543.69°R (90°F) al

ingreso del condensador. Es decir que el agua de enfriamiento se encuentra a mayor temperatura que la corriente a condensar. Por lo tanto no es posible utilizar este medio de enfriamiento.

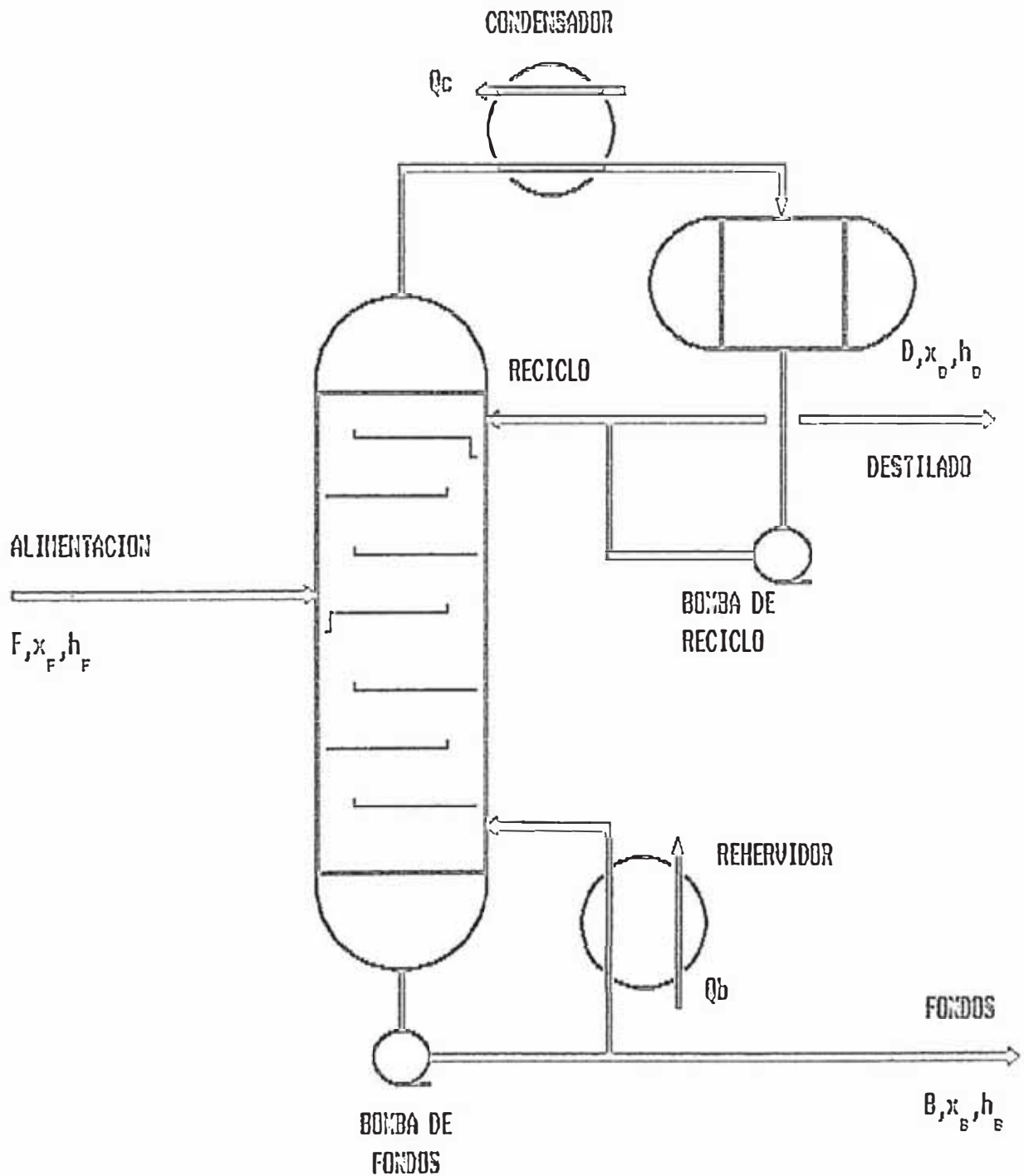


Figura 4.8

4.2.2.2 DESTILACION UTILIZANDO BOMBAS CALORIMETRICAS.

La destilación convencional aplicada a este proceso requeriría de agua de enfriamiento a baja temperatura (30°F por lo menos). El costo de este servicio es elevado. Para evitar el uso de este fluido de enfriamiento, es posible utilizar agua a temperatura normal (77°F), elevando la presión de la columna de fraccionamiento; de esta manera se eleva el punto de burbuja (la temperatura de ebullición del reflujo). A mayor presión la volatilidad relativa entre el iso-Butano y el n-Butano decrece, desfavoreciendo al proceso de separación. Es necesario encontrar un medio de enfriamiento que permita condensar fluidos a bajas presiones sin utilizar agua de enfriamiento u otro refrigerante.

El concepto de bomba calorimétrica utiliza la compresión del destilado (también es aplicado a la corrientes de fondos). La finalidad de este proceso es aumentar la presión del fluido (sin modificar la presión de operación de la columna) hasta que sea rentable el uso del fluido de enfriamiento de bajo costo en el condensador de tope y aprovechar la energía suministrada al aumentar la presión (utilización de compresores) para calentar los fondos. Este concepto es aplicado a sistemas que contenga compuestos con temperatura de ebullición muy

cercana (sistemas conteniendo propileno-propano, etileno-etano, buteno-2-isobutano, etilbenceno-xileno, agotadores de xilenos, recuperadores de butadienos). Para nuestro sistema de propano-isobutano-butano aplicamos el uso de bombas calorimétricas con recompresión de topes para mantener una destilación a baja presión para realizar la separación con las especificaciones y servicios disponibles.

Los diferentes esquemas planteados para el procesos se presentan a continuación (ver figuras 4.9 - 4.12). Se observa que estos esquemas presentan bombas calorimétricas, recomprimiendo el producto de tope. Aunque este esquema puede ser aplicado también a la corriente de fondo, se decide la utilización de compresores con el flujo del destilado ya que se tiene una disponibilidad de calor de 30×10^6 Btu para el rehervidor de fondos.

Los esquemas planteados presentan las mismas características en la utilización de bombas calorimétricas, diferenciándose solo en la disposición de las corrientes de flujo y la utilización de los equipos.

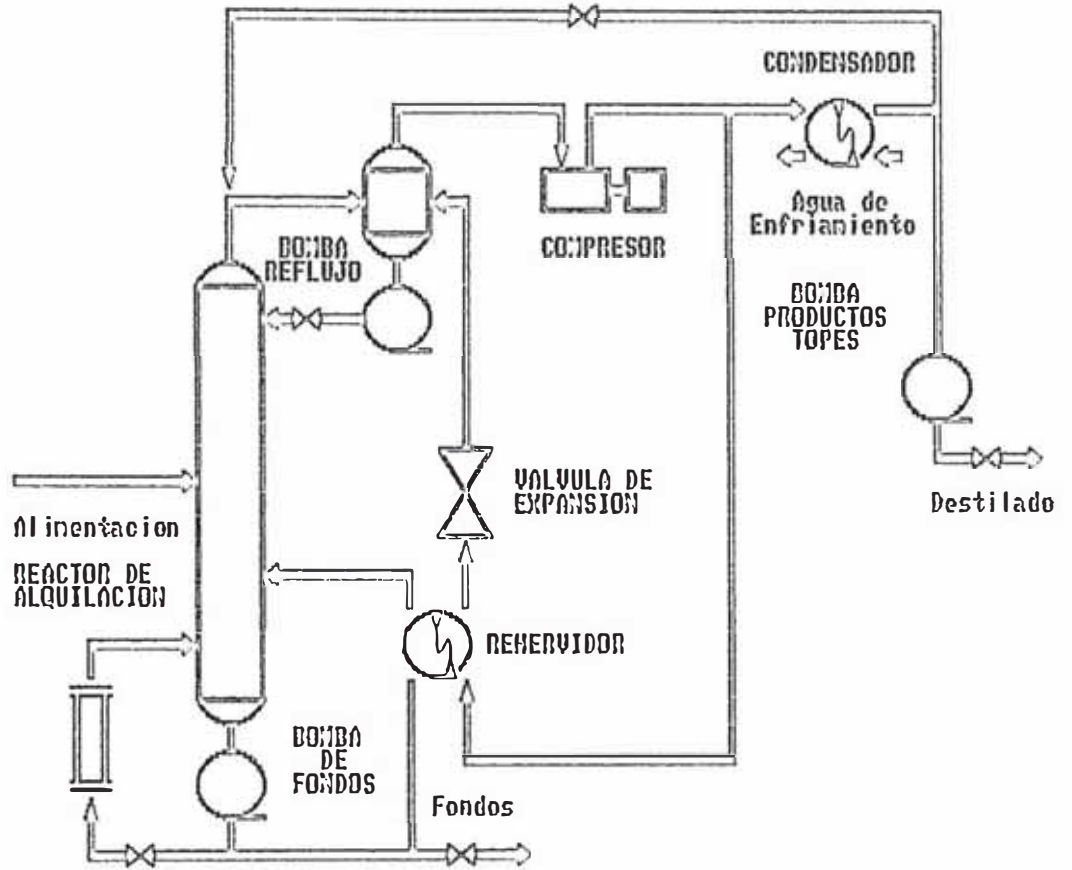


Figura 4.9

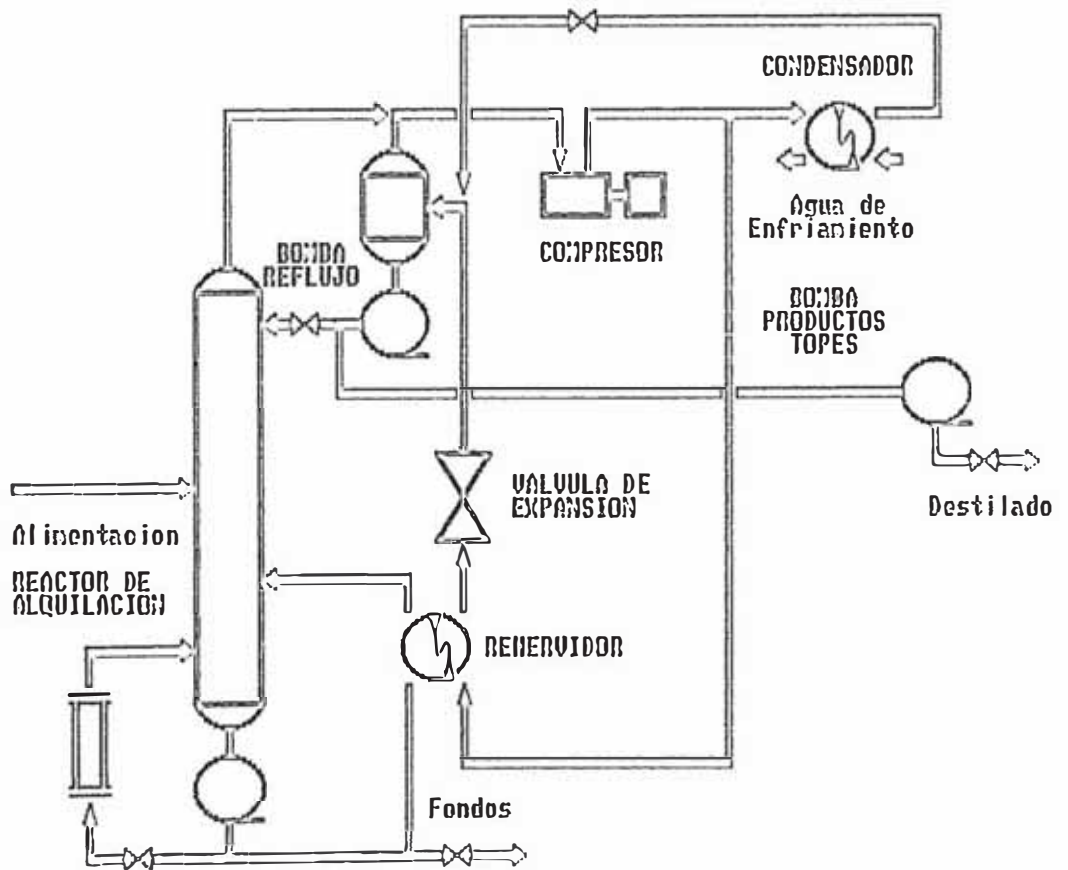


Figura 4.10

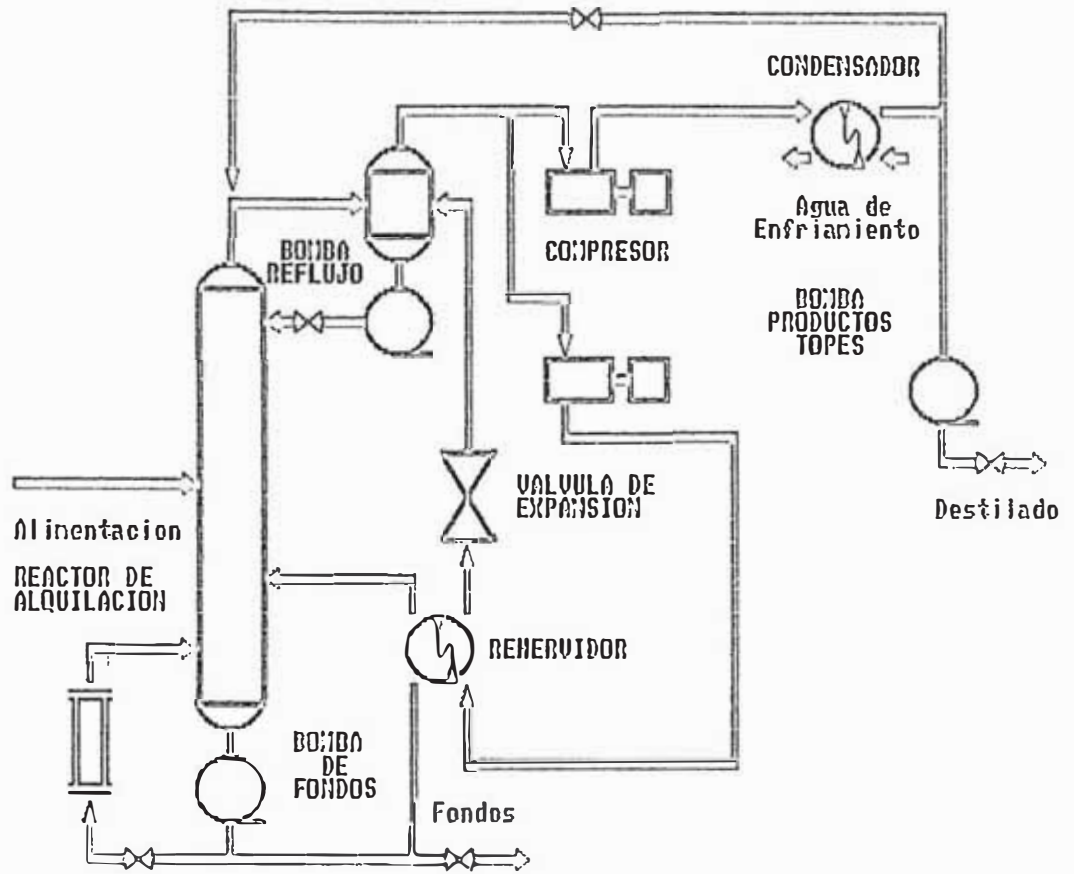


Figura 4.11

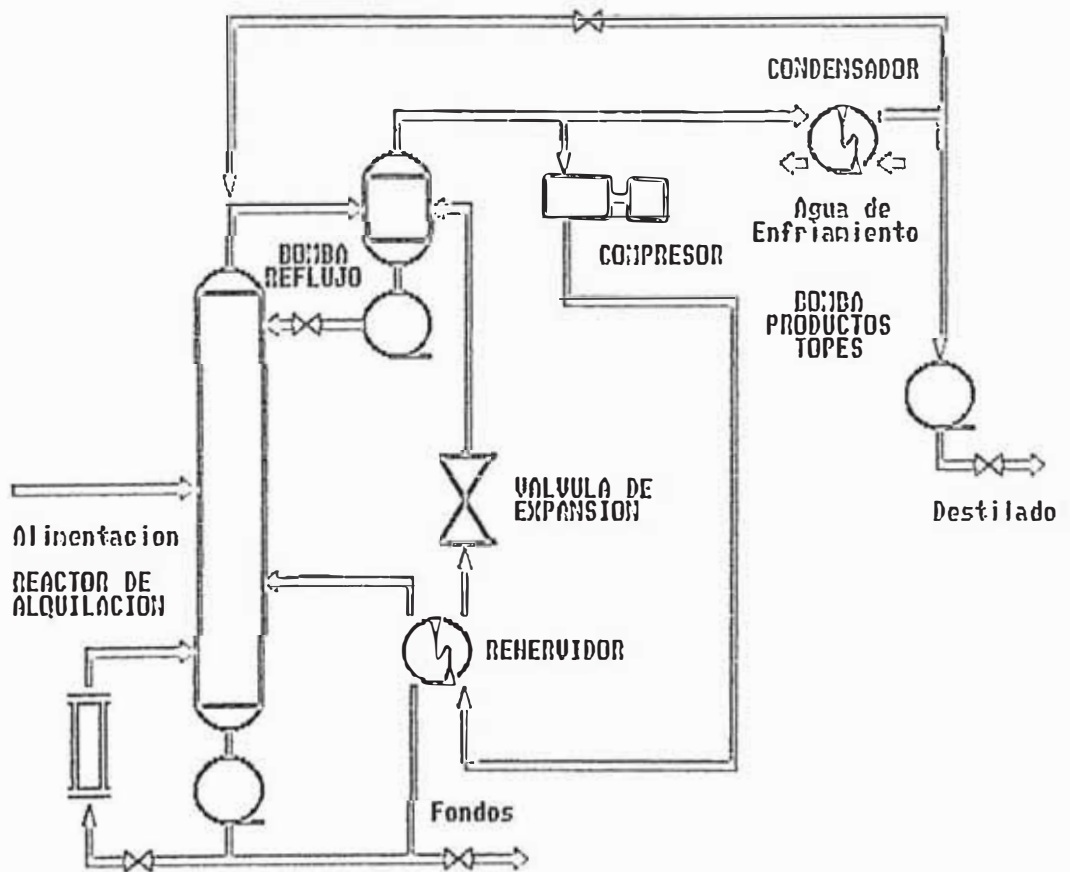


Figura 4.12

4.2.3 CRITERIO ECONOMICO PARA LA OPTIMIZACION DEL PROCESO.

El análisis económico utiliza el concepto del Valor Actual Neto. Debido a que solo se dispone del costo de equipos y de servicios, se utiliza técnica diferencial del Valor Actual Neto.

El Flujo Neto de Fondos está dado por:

$$FNF = (V - C - d) (1 - t) + d \quad 4-1$$

A partir del Flujo Neto de Fondos, se determina el Valor Actual Neto :

$$VAN = \sum \frac{FNF_i}{(1+k)^i} - I_0 \quad 4-2$$

El Valor Actual Neto Diferencial viene a ser la diferencia de dos proyectos:

$$\Delta VAN = \sum \frac{\Delta FNF_i}{(1+k)^i} - \Delta I_0 \quad 4-3$$

Asumiendo que las Ventas (V), la depreciación (d), y la tasa de impuestos son los mismos para el todos los esquemas, y que los costos de servcios es constantes

durante el tiempo de duración del proyecto. De esta forma reducimos el Valor Actual Neto Diferencial a la siguiente ecuación :

$$\Delta VAN = -\Delta C \sum \frac{(1-t)}{(1+k)^i} - \Delta I_0 \quad 4-4$$

El término de la sumatoria que involucra la tasa de impuestos, la tasa de costo de capital y el tiempo de duración del proyecto, se reemplaza por un factor que se interpreta como el "equivalente de los costos de servicios llevados a costo de equipos".

Asumiendo un esquema ficticio cuyos costos de servicios y equipos sea "cero", se tiene :

$$C_T = C f + I_0 \quad 4-5$$

El criterio económico para la optimización de los esquemas se establece en \$ 1.00 ahorrado en servicios equivalen a una inversión de \$ 1,300.00 en los costos de equipos.

4.2.4. SIMULACION DE LOS ESQUEMAS ESTABLECIDOS.

La utilización de una destilación convencional es imposible por la no disponibilidad de un fluido refrigerante. Se debe de realizar modificaciones en el esquema introduciendo los equipos requeridos y las corrientes necesarias para el control del proceso. Estos equipos introducidos viene a ser :

- Compresores.
- Tanques de Separación (drum de flasheo).
- Equipos de expansión (válvula).

Los esquemas de simulación presenta las siguientes características :

- Los vapores de topes serán comprimidos para elevar la temperatura de burbuja de la corriente y suministrar energía en el fondo de la columna cediendo su entalpía de vaporización.
- La corriente de salida de lado caliente del rehervidor estará como líquido saturado pero a alta presión. Para bajar la presión se realiza una expansión mediante una válvula (válvula isoentálpica), la cual evaporará parcialmente esta corriente.
- La corriente es introducida en un tanque de separación (flasheo) y separar la fase líquida de la fase gaseosa.

- Se realiza una recirculación de los vapores de topes por disponibilidad energética.

Se utiliza un condensador auxiliar para estabilidad energética y obtener la condiciones especificadas en el proceso.

Los esquemas se diferencian sólo en la disposición de las corrientes y utilizan los mismos equipos. En el esquema 1 (figura 4.9) los vapores del tope de la columna y los vapores obtenidas al pasar el líquida a presión a través de la válvula de expansión son mezclados en el tanque de separación. En toda la líneas de corriente de la bomba calorimétrica se tiene una composición constante e igual a la composición del destilado. También se aprovecha el tanque de separación como una etapa más de separación. En el esquema 2 (figura 4.10) las corrientes de vapores del tope de la columna y del tope del tanque separación se mezclan y recomprimen. Esto obliga a realizar un cálculo iterativo para determinar las composiciones de las líneas de corrientes de la bomba calorimétrica.

En ambos esquemas, 1 y 2, el tamaño del compresor utilizado estará en función de la temperatura de salida del rehervidor de fondos para el fluido caliente.

El producto de destilado en el esquema 2 se retira

de la corriente de recicló del tanque de separación hacia la columna, correspondiendo a una destilación equivalente a utilizar un condensador total.

En el esquema 1, como se comprimen los vapores de topes de la columna, se puede realizar una destilación equivalente a utilizar un condensador parcial, aprovechando que existe un tanque de separación (flasheo) para realizar una etapa más de separación (en el esquema 2 no se aprovecha este enriquecimiento del producto de tope). Esta disposición permite disminuir la corriente de reflujo y con ello los requerimientos de **energía a** suministrar o remover. Los vapores a la salida del tanque de evaporación instantánea deben cumplir con las especificaciones requeridas, retirando el producto de destilado de la corriente de salida del condensador auxiliar.

Para suministrar energía se utiliza solo un compresor y se remueve el calor de las corrientes de vapor comprimidas en el rehervidor y en el condensador auxiliar. Mientras mayor sea la presión de salida del compresor, mayor será la temperatura de burbuja a la salida de los equipos, mayor el gradiente de temperatura y menor el área de transferencia que presente el equipo, originando un menor costo de inversión. En el rehervidor es favorable este planteamiento, pero para el condensador

auxiliar es desfavorable por tenerse que remover mayor cantidad de energía, requiriendo una mayor cantidad de flujo del fluido refrigerante, elevando los costos de servicios.

Este razonamiento permite establecer un tercer esquema (figura 4.11), aplicable a los dos esquemas anteriores. Por ello que para ambos esquemas se adopta una modificación, la cual consiste utilizar dos compresores en vez de uno. Un compresor dará la **energía** que debe ser suministrada al rehervidor en los fondos de la columna. El otro elevará la temperatura de burbuja de los vapores de topes para poder utilizar el fluido refrigerante disponible en el condensador auxiliar, manteniendo una estabilidad en la bomba calorimétrica.

El esquema 4 (figura 4.12) no se tomará en cuenta por no tener el fluido refrigerante para condensar el vapor que pasa directamente del tanque de evaporación instantánea al condensador de topes.

Para la simulación, se utiliza los programas desarrollados para la destilación (DESMUL.EXE) evaluación de propiedades termodinámicas de las corrientes del proceso (TERCO.EXE). Las evaluaciones económicas se hacen en una hoja de cálculo (LOTUS 123), importando los resultados de los programas anteriores.

4.2.4.1 SIMULACION DEL ESQUEMA 1.

El procedimientos de cálculo seguido es el siguiente:

- a) Balance de Masa en todo el esquema del proceso, determinación los flujos y composiciones (especificaciones del problema) de las corrientes de producto del proceso.
- b) Determinación de la presión de fondos, evaluando las condiciones de punto de saturación y fijando la temperatura (especificación del problema). Evaluación de propiedades termodinámicas de la corriente de fondos.
- c) Cálculo la caída de presión a lo largo de la columna de destilación y evaluación la presión de topes.
- d) Cálculo del proceso de destilación, para determinar el reflujo de operación, los requerimientos de energía y flujo del refrigerante para que se cumpla con las especificaciones del problema. Se utiliza un condensador parcial en los topes.
- e) Evaluación del la Bomba Calorimétrica. Cálculo del las propiedades termodinámicas de la corriente que suministra energía a la entrada y salida del rehervidor de fondos, para determinar la presión de descarga del compresor. Asumir temperatura del fluido caliente a la salida del rehervidor de fondos.

- f) Cálculo en el compresor, para determinar la temperatura de descarga del compresor, considerando la eficiencia del equipo (especificación del problema).
- g) Cálculo de las propiedades termodinámicas a la salida del condensador auxiliar.
- h) Balance de Masa y Energía en el tanque de evaporación instantánea para la determinación de los flujos de las corrientes que intervienen en el sistema de Bomba Calorimétrica.
- i) Evaluación Económica del esquema presentado, realizando una optimización en el condensador auxiliar.
- j) Escoger diferentes temperaturas para el fluido caliente a la salida del rehervidor de fondos calcular los puntos e), f), g), h) e i). Los resultados son comparados para elegir el mas económico (ver anexo 5).

4.2.4.2 SIMULACION DEL ESQUEMA 2.

Para este esquema utilizamos el mismo procedimiento de cálculo descritos en los puntos a), b), c), i) y j) por ser especificaciones y datos generales al proceso, teniendo variación en los siguientes puntos:

- d) Cálculo del proceso de destilación, para determinar el reflujo de operación, los requerimientos de energía y flujo del refrigerante para que se cumpla con las especificaciones del problema. Se utiliza un condensador total en los topes.
- e) Asumir el flujo de vapor producto de la evaporación instantánea, debido a tener un flujo recirculante en el esquema establecido.
- f) Cálculo de la mezcla de vapores del tanque de separación instantánea con los vapores de la columna de destilación (Balance de Masa y Energía en punto de mezcla). Determinación de composiciones y flujo y propiedades termodinámicas de la corriente resultante.
- g) Se realizan los pasos e), f) g) y h) del esquema 1, para la determinación de las propiedades termodinámicas en las corrientes de entrada y salida del compresor, rehervidor y condensador auxiliar.
- h) Cálculo de la evaporación instantánea de la corriente proveniente del rehervidor de fondos en el tanque de separación. El flujo de la fracción vaporizada se compara con el asumido en el punto e). Se asume este nuevo flujo de vapor y se repite el cálculos de los puntos e), f) y g). El método converge.

4.2.4.3 SIMULACION DEL ESQUEMA 3.

De los esquemas anteriores se escoge el mas económico, para realizar una modificación con respecto al compresor de los vapores de tope de la columna. Se asume que esta modificación disminuirá la inversión total, lo que se verifica al final de la simulación. Las propiedades termodinámicas y las condiciones del sistemas no cambian, por lo que se puede expresar los flujos, composiciones, presiones, temperaturas y demás propiedades termodinámicas en función de la temperatura a la salida del rehervidor, y en función de la temperatura de salida del condensador auxiliar (regresión polinómica de propiedades termodinámicas de mezclas vs. temperatura del rehervidor). Se determinan ecuaciones polinómicas que relacionan estas propiedades, a partir de los datos de las corridas anteriormente descritas y realizadas (anexo 5).

4.2.5. SELECCION DEL ESQUEMA OPTIMO.

Los resultados de los esquemas se puede observar en las figuras 4.13 4.15, donde tenemos el costo de equipos, servicios y la inversión total en función de la temperatura del rehervidor de fondos, para los equipos

cuyos procesos tienen mayor incidencia en los costos, para todos los esquemas.

El análisis de selección del esquema óptimo se realiza utilizando el criterio económico, tratando de minimizar la función objetivo, producto de los costos de los equipos y sus respectivos servicios capitalizados.

COMPARACION DE COSTOS

Determinación del Esquema Óptimo

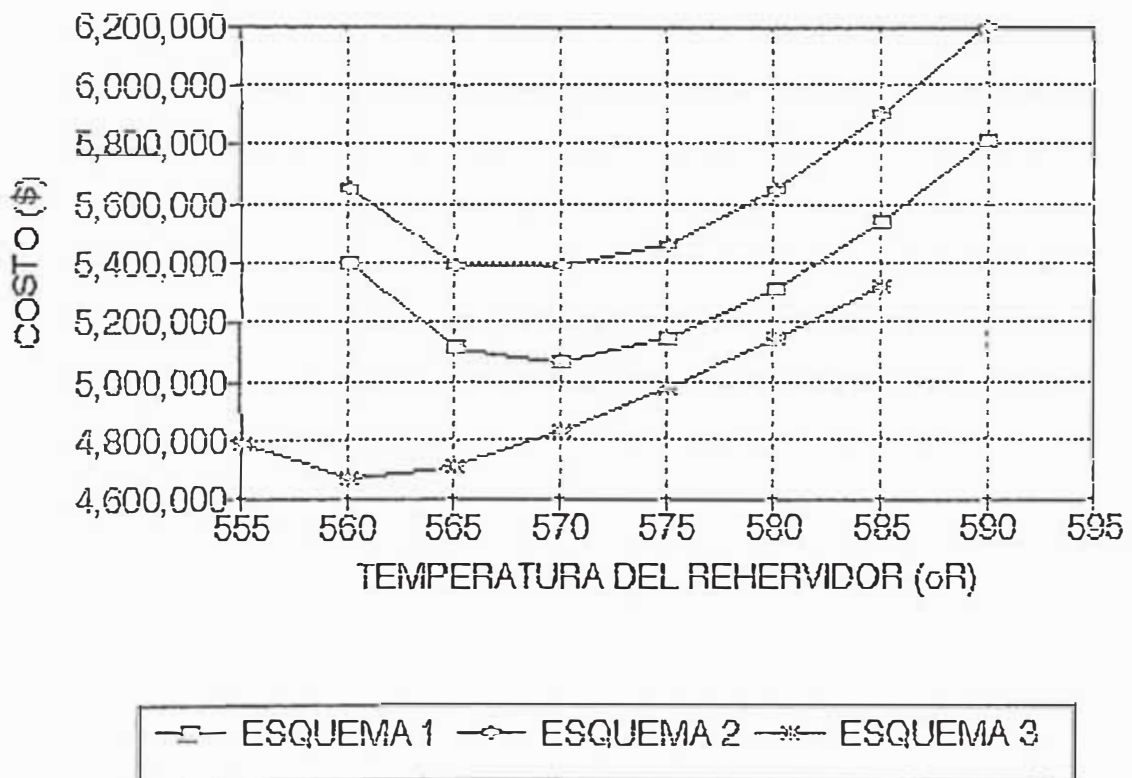


Figura 4.13

COMPARACION DE COSTOS

Costo de Equipos

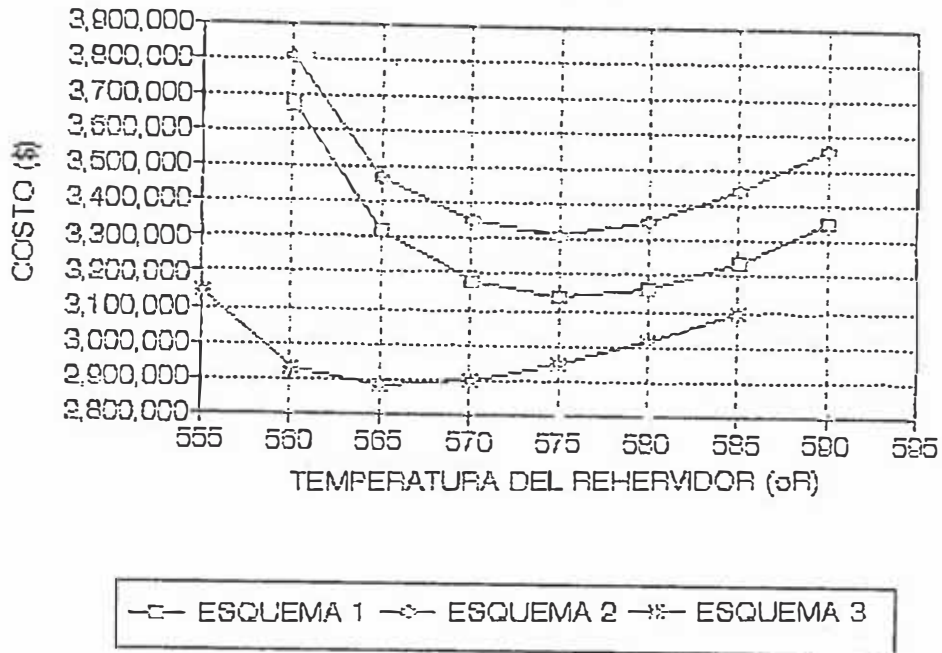


Figura 4.14

COMPARACION DE COSTOS

Costo de Servicios

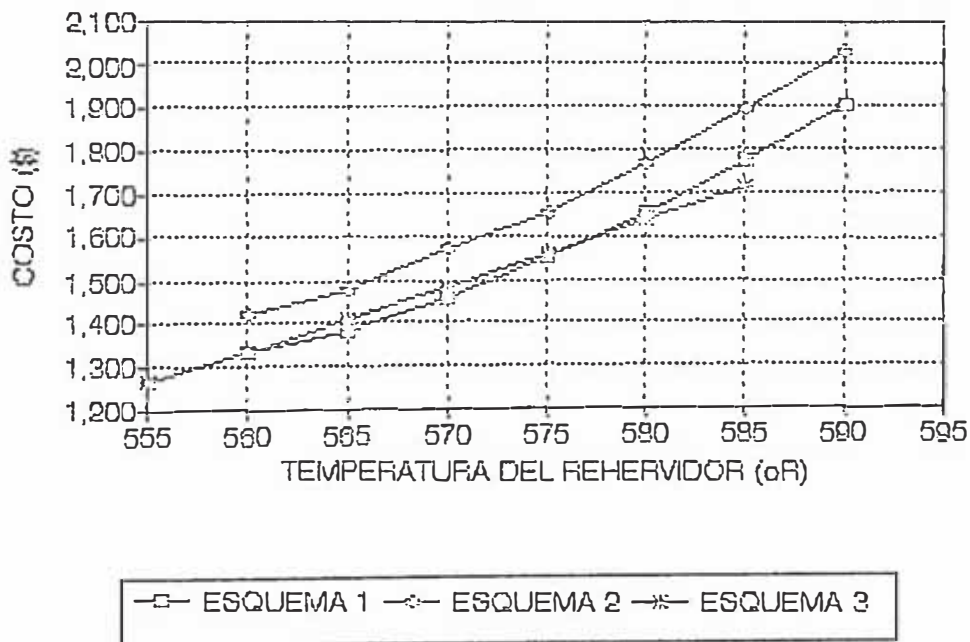


Figura 4.15

4.2.5.1. OPTIMO DEL PUNTO DE VISTA ECONOMICO.

Analizando las gráficas de los costos de equipos y servicios para el rehervidor, compresores y condensador auxiliar (figuras 4.16 - 4.20) obtenidas en las diferentes corridas de los 3 esquemas escogidos, los costos de los compresores y del condensador auxiliar, están por encima del costo del rehervidor. Además, las curvas presentan una mayor pendiente, susceptible a un mayor cambio al variar la temperatura de salida del fluido caliente del rehervidor de fondos. Sus incidencias, tanto de los compresores como del condensador auxiliar se reflejan el análisis económico realizado.

COMPARACION DE COSTOS

Rehervidor de Fondo

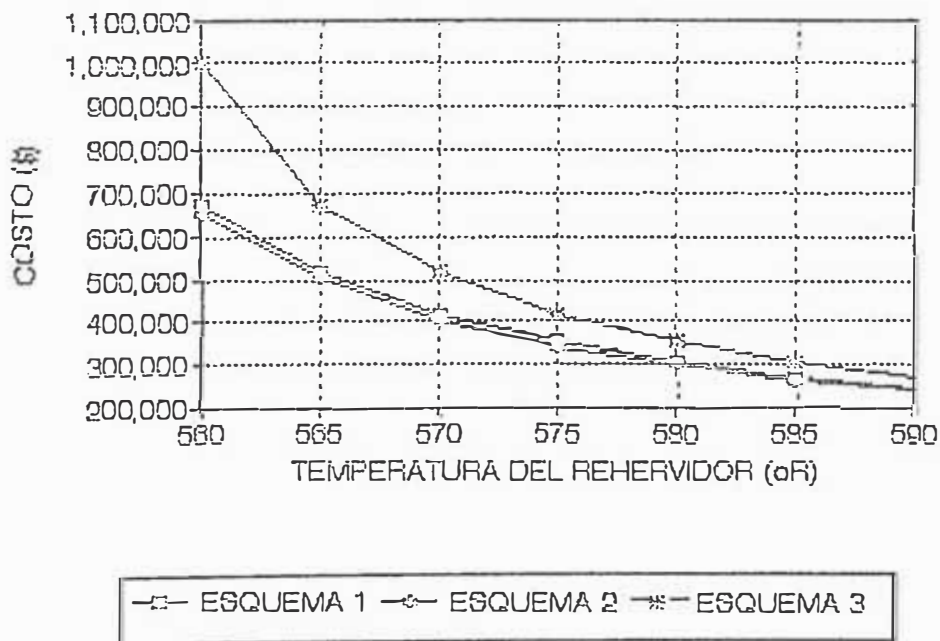


Figura 4.16

COMPARACION DE COSTOS

Condensador Auxiliar

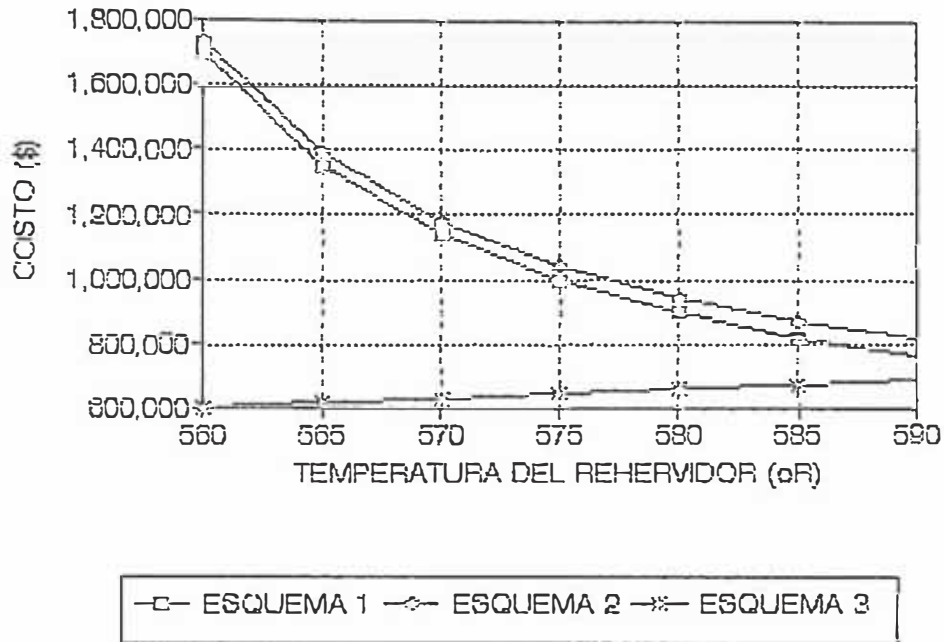


Figura 4.17

COMPARACION DE COSTOS

Servicios al Condensador Auxiliar

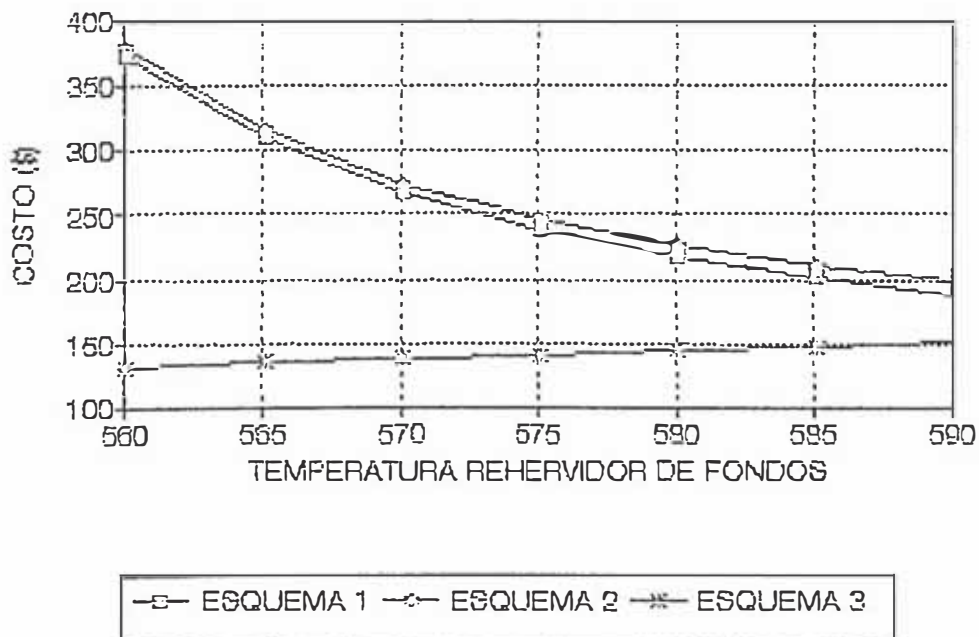


Figura 4.18

COMPARACION DE COSTOS

Compresor de Topes

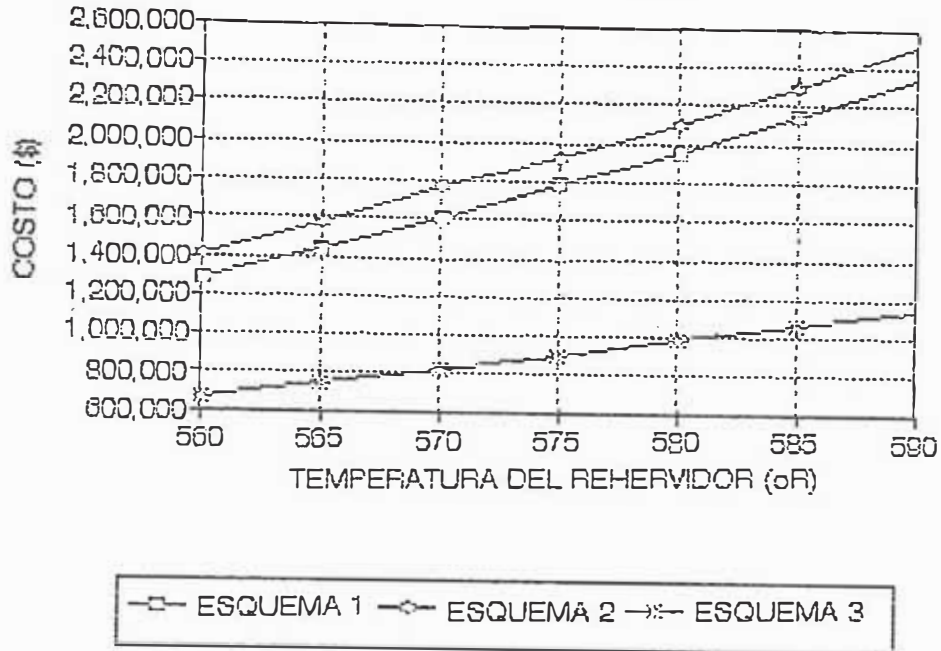


Figura 4.19

COMPARACION DE COSTOS

Servicios al Compresor de Topes

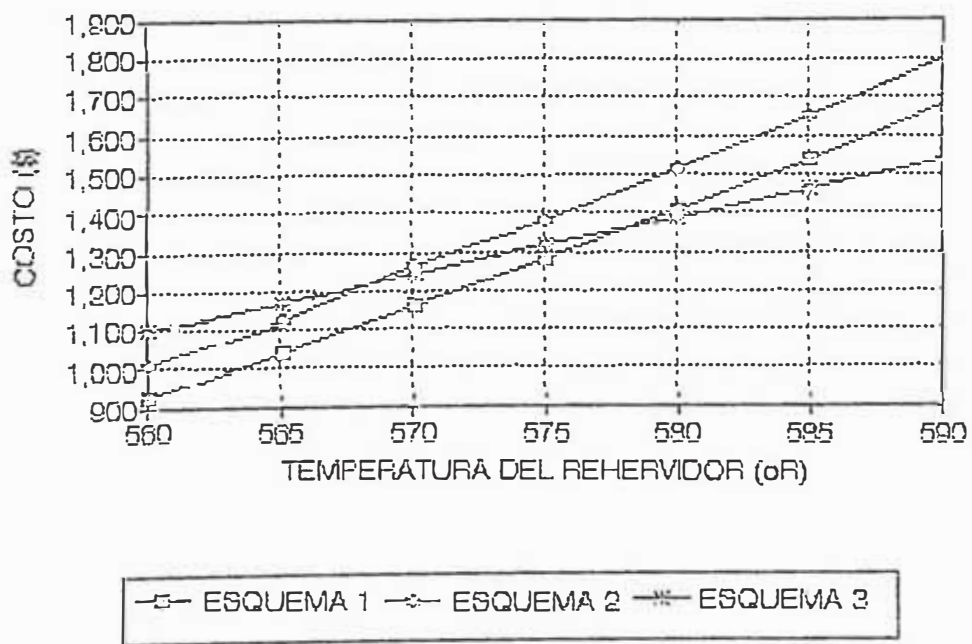


Figura 4.20

De esta manera, los equipos que inciden en el proceso son los compresores y el condensador auxiliar.

El aumento de la temperatura, incrementa los costos y servicios para los compresores para los esquemas planteados, mientras que los costos y servicios del condensador auxiliar disminuyen. La razón de ello se explica que a mayor temperatura se requiere mayor energía para realizar el proceso de compresión, por lo tanto los compresores necesitan mayor potencia, por lo tanto un mayor costo. Por el lado del condensador auxiliar el comprimir más los vapores de tope de la columna, aumenta la temperatura de estos, aumentando el gradiente de temperaturas y la transmisión de calor, hasta un cierto punto, ya que una temperatura excesiva aumentaría los servicios al equipo.

En el rango de temperatura trabajado, para los esquemas 1 y 2, que presentan sólo un compresor, un aumento de temperatura origina un aumento en el costo del equipo y sus servicios, mientras que en el condensador auxiliar sucede lo contrario. Esto origina un punto de equilibrio donde se obtiene un mínimo, correspondiente a la solución óptima en cada esquema.

Una optimización posterior es encontrada al utilizar dos compresores por separado para cada una de las líneas

que se dirigen a los equipos que inciden en el análisis (ver esquema 3) de tal manera que las condiciones de operación del condensador auxiliar, no dependan de la temperatura del fluido caliente a la salida del rehervidor. De esta manera no se sobredimensiona los equipos, minimizando el costo y servicios de cada uno de ellos. El cuadro de resultados de los esquemas establecidos y las simulaciones efectuadas están a continuación :

Cuadro de Resultados de las Simulaciones para Esquemas Establecidos				
Simulaciones	T(°R) Esquemas ->	Eficiencia		
		1	2	3
1	555.07	--	--	4,789,299
2	560.07	5,401,623	5,657,081	4,667,786
3	565.07	5,111,247	5,389,434	4,715,508
4	570.07	5,063,284	5,392,013	4,828,434
5	575.07	5,146,346	5,463,311	4,975,309
6	580.07	5,312,956	5,650,463	5,143,230
7	585.07	5,540,343	5,899,339	5,325,962
8	560.07	5,816,679	6,198,953	--

Cuadro 4.9

Finalmente, se puede optimizar el esquema seleccionado mediante la utilización de equipos y servicios auxiliares que representan menos costo de inversión, como es el caso de seleccionar impulsores de turbinas a vapor y motor eléctrico, refrigeración mediante aire o agua, optimización económica del condensador auxiliar, etc.

Esquema óptimo para el sistema planteado		
Equipo	Costo	Servicio
REHERVIDOR DE FONDOS	\$ 673,271	-
- Carga Calorífica	56 420,000	Btu/hr
- Area	26,930	pie ²
- ΔT_{lmtd}	17.46	$^{\circ}R$
CONDENSADOR AUXILIAR	\$ 790,937	134.79 \$/día
- Carga Calorífica	43 769,207	Btu/hr
- Area	24,628	pie ²
- ΔT_{lmtd}	19.75	$^{\circ}R$
COMPRESOR 1	\$ 716,708	538.23 \$/día
- Potencia	2,987	Hp
- ΔP_o	48	psi
- Pout	91	psi
COMPRESOR 2	\$ 883,720	636.45 \$/día
- Potencia	3,535	Hp
- ΔP_o	84	psi
- Pout	126	psi
BOMBA DE PRODUCTOS FONDOS	\$ 4,923	12.92 \$/día
- Capacidad	778	gpm
- Potencia	33	Hp
BOMBA DE FONDOS	\$ 1,287	3.38 \$/día
- Capacidad	2163	gpm
- Potencia	9	Hp
BOMBA DE REFLUJO	\$ 5,177	13.59 \$/día
- Capacidad	1994	gpm
- Potencia	35	Hp

Cuadro 4.10

4.2.5.2. OPTIMO DEL PUNTO DE VISTA DEL AHORRO DE ENERGIA.

La conservación y ahorro de energía ha llevado a realizar análisis termodinámicos utilizando la segunda ley de la termodinámica, relacionada con la pérdida de energía en un proceso termodinámico por la generación o aumento de la entropía del proceso. La primera ley de la termodinámica establece un balance energético, que fórmula la conservación de la energía e imponen

condiciones en intercambios de calor y de trabajo, y las alteraciones experimentadas por la energía. La segunda ley establece que cantidad de energía puede ser intercambiada o variada dentro de un sistema. La formulación de ambas leyes nos dan la noción de la "exergía", definida como la energía útil o parte de la energía que puede ser transformada en trabajo útil.

La exergía de un fluido definida de esta manera¹⁰, puede ser expresada por la función Darrieus, entre el estado termodinámico del fluido y un estado muerto tomado de referencia (P_o, T_o, H_o, S_o). La siguiente fórmula termodinámica expresa la exergía de un fluido :

$$e = (H - T_o S) - (H_o - T_o S_o) = B - B_o \quad 4-6$$

Cuando el flujo de exergía viene o va hacia una fuente de calor a T_o , la exergía se expresa como :

$$e_q = Q \left(1 - \frac{T_o}{T} \right) \quad 4-7$$

donde Q es la cantidad de calor transferida. Esta expresión es derivada de la máquina de calor del ciclo de Carnot. Es posible con estos términos, realizar un balance de exergía y determinar la pérdida de energía de un procesos o sistema :

$$mB + \sum W_u + \sum Q \left(1 - \frac{T_o}{T}\right) = T_o S \quad 4-8$$

donde S es el término de generación de entropía, y $T_o S$ representa la pérdida de exergía del proceso.

Debido a la generación de entropía de los procesos, presentan una irreversibilidad en el intercambio de calor y de trabajo, por lo tanto es posible expresar una "eficiencia termodinámica", comparando calores o trabajos intercambiados como objetivos y la pérdidas de exergía dentro de un procesos o sistema.

De los esquemas establecidos, se evalúa la eficiencia termodinámica de la bomba calorimétrica o el procesos de recompresión de vapores del tope y transferencia de calor en los fondos de la columna. La eficiencia para una bomba calorimétrica se expresa como la cantidad de calor removida entre el trabajo suministrado al compresor :

$$n = \frac{\sum Q \left(1 - \frac{T_o}{T}\right)}{\sum W_u} \quad 4-9$$

Los análisis se presentan en el anexo 6, extrayendo el siguiente cuadro para las diferentes corrida de

simulación :

Cuadro de Resultados de las Simulaciones para Esquemas Establecidos				
Simulaciones	T(°R) Esquemas ->	Eficiencia		
		1	2	3
1	555.07	--	--	37.60%
2	560.07	42.28%	40.74%	39.88%
3	565.07	44.06%	42.74%	41.85%
4	570.07	45.38%	44.11%	43.57%
5	575.07	46.33%	45.43%	45.07%
6	580.07	47.01%	46.30%	46.38%
7	585.07	47.45%	46.93%	47.52%
8	590.07	47.70%	47.37%	--

Cuadro 4.10

Las eficiencias encontradas están dentro de un rango del 39% y el 45%. La eficiencia termodinámico expresa que procesos utiliza mejor la disponibilidad de energía (calor o trabajo). Un análisis de los elementos que intervienen en el procesos, y cual la pérdida generada por cada uno de ellos, permiten visualizar donde se encuentra la zona de mayor pérdida de **energía**, permitiendo una optimización desde el punto de vista termodinámico.

En los esquemas planteados, para elevar la eficiencia del procesos, es necesario minimizar el trabajo suministrado a los compresores y aumentar el calor removido en el rehovidor de fondos y condensador de topos. La mayor pérdida de energía la se produce en la

válvula de expansión, debido a la irreversibilidad del proceso de expansión isoentálpica. La utilización de una turbina de expansión podría mejorar el sistema de bombeo de calor, mediante la recirculación del trabajo generado hacia el compresor, aunque también introducimos irreversibilidades (eficiencia del compresor) originando más pérdida de **exergía**. De esta manera, se podría disminuir el trabajo suministrado hacia la bomba calorimétrica, y consecuentemente aumentamos la eficiencia del proceso.

CAPITULO V CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

5.1 DISCUSION DE RESULTADOS.

La discusión de resultados de las confrontaciones contra otros resultados para un mismo sistema consiste en el análisis de la discrepancia en los resultados obtenidos al compararlos con las respuestas dadas por otros autores.

En la comparación de propiedades termodinámicas, los resultados obtenidos son satisfactorios por presentar una pequeña desviación con respecto a valores experimentales. Esto se debe a que el sistema no se encuentra en condiciones extremas de presión o temperatura, permitiendo al modelo matemático tomado representar con gran exactitud estas propiedades (presiones y temperaturas moderadas).

En la comparación entre el programa CACHE²¹ vs DESMUL, el método de cálculo utilizado en el programa CACHE, no contempla un balance de masa de la alimentación con las corrientes de vapor y líquido, por lo que se observa en las curvas que representa los perfiles de

composición, no empalma correctamente el cálculo de las composiciones desde el tope y desde el fondo. No necesariamente, la destilación se realiza con 20 etapas, por lo que el programa CACHE no representa la respuesta correcta.

En la comparación entre el programa WHENDI²¹ y DESMUL, existe una discrepancia entre los resultados encontrados en las temperaturas de topes y fondos. La explicación de ello vendría a ser la presión de operación de la columna. Existen una diferencia de 4.27 °R en los topes y 20.0 °R para los fondos. Las ecuaciones utilizadas por el programa WHENDI para la determinación de la constante de distribución son de forma polinómica, determinadas empíricamente. Mientras que el programa DESMUL calcula por medio de las fugacidades. Otra razón es la aplicación de la ecuación de Soave a presiones altas, y con mezclas no tan "homogéneas" (etano n-hexano) producen un error por restricción del modelo. Es necesario considerar el concepto de coeficientes de actividad de la fase líquida.

En la simulación del sistema de alquilación, se puede realizar una comparación contra los resultados presentados en la bibliografía, por ser estimados con datos, ecuaciones y métodos de cálculos para gases ideales. Existe una discrepancia en los flujos de calor

removidos, debido a que se utiliza un modelo de gases reales para la determinación de la entalpía de los fluidos. Los resultados que si concuerdan están en el orden de magnitud de los resultados presentados (costo total de equipos y servicios, dimensionamientos de equipos, condiciones de operación, equipos mas importantes en el proceso, servicios utilizados) aunque presenta una discrepancia.

5.2. LIMITACIONES.

La limitación presentada por los programas implementados se caracterizan en dos clases :

- Limitación por el modelo matemático.
- Limitación por el equipo disponible.

5.2.1. LIMITACIONES POR MODELOS MATEMATICOS.

Aunque los métodos de cálculos y procedimientos de convergencia utilizados sean correctos, el modelo matemático determina la aproximación de los resultados con los valores reales. En este caso, el modelo de gases reales utilizado (ecuación de Soave), permite estimaciones con gran aproximación para el equilibrio de fases. El comportamiento de la ecuación para gases es

satisfactoria, mientras que el comportamiento para la región de líquidos presenta no es muy exacta.

En el cálculo del equilibrio líquido-vapor, la determinación de la constante de distribución mediante los coeficientes de fugacidad, limita los cálculos para presiones y temperaturas moderadas. También influye el asumir la constante de interacción binaria utilizada en la regla de mezclas de un sistema multicomponentes igual a cero, lo que limita a usar sistemas multicomponentes formadas por una serie homóloga de hidrocarburos (alcanos, isómeros, polares, bencénicos, etc.).

Una mayor exactitud se encontrará al utilizar modelos mucho más rigurosos, tal vez desarrollados para casos especiales (presencia de hidrógeno, anhídrido carbónico, elementos polares) a condiciones extremas (baja o alta presión) en sistemas complejos (superfraccionadoras o azeotrópicos).

5.2.2. LIMITACIONES POR EL EQUIPO UTILIZADO.

Uno de los motivos para la selección de la ecuación de Soave para la predicción de propiedades termodinámicas, fue la capacidad del equipo disponible. El modelar con la ecuación de Soave permite generalizar

las propiedades termodinámicas y expresarlas como ecuación de estado correspondientes, lo cual es posible utilizar cualquier tipo de compuesto si se dispone de sus propiedades críticas. La organización de los datos se realiza mediante estructuras simples, almacenados en archivos (diskettes). Con ello se sacrifica exactitud y se la cambia por simplicidad del algoritmo de cálculo.

También influye la disponibilidad del equipo desde el punto de vista del Hardware. El tiempo de ejecución del programa se puede optimizar con un microprocesador matemático, debido a que la tarea más importante del programa es la evaluación de expresiones matemáticas complejas (iteraciones, sumatorias, funciones, etc.). De esta forma se puede implementar modelos mas complejos (Ecuación de BWR, Peng-Robinson para la ecuación de estado; UNIFAC, UNIQUAC para el equilibrio de fases, etc.).

5.3. LINEAMIENTOS PARA FUTUROS TRABAJOS.

Futuros trabajos de tesis permitirán ampliar los límites del presente trabajo. La incorporación un mayor número de compuestos, modelos matemáticos más complejos y de mayor número de variables, diseños de algoritmos más elaborados para la convergencia de resultados, requerirán

de una revisión de los programas. La utilización de un lenguaje estructurado como es el PASCAL, permite modificar el programa realizando un número mínimo de cambios, o utilizar rutinas de cálculos utilizados para otro tipo de sistemas que requiera de evaluar propiedades termodinámicas.

5.3.1. AMPLIACION DE LA BASE DE DATOS.

La ampliación de la base de datos se puede realizar de dos formas :

- a) Introducir más compuestos.
- b) Introducir mas parámetros para cada compuestos.

La primera forma de ampliar la base de datos fue tomada en cuenta al desarrollar el paquete de programas. Es posible ampliar la base de datos introduciendo los propiedades físicas y críticas de los compuestos, como también los coeficientes requeridos por los modelos matemáticos. Si es necesario realizar una simulación de separación multicomponentes para un sistema de una familia hidrocarburos, podemos actualizar la base de datos y transferir los parámetros requeridos a los otros programas.

La segunda forma de ampliar la base de datos

requiere de una revisión a todo el paquete de programas, procedimientos y funciones de cálculo. Esta tarea se realizará al utilizar nuevos modelos matemáticos para la predicción de propiedades.

5.3.2. BIBLIOTECA DE PROCEDIMIENTOS Y FUNCIONES.

El lenguaje PASCAL permite el diseño de bloques de programación que pueden implementarse en forma de subrutinas de cálculo. Esta característica permite almacenar estas subrutinas en archivos para formar librerías de rutinas.

Para este trabajo, se diseñaron los programas en la siguiente secuencia :

- a) Base Datos de Propiedades Físicas y Termodinámicas.
- b) Subrutinas de Predicción de Propiedades Termodinámicas, utilizando la base de datos :
 - Volumen Específico.
 - Entalpía.
 - Entropía.
- c) Subrutinas de Cálculos de Procesos Termodinámicos, utilizando las rutinas de predicción de propiedades termodinámicas :
 - Temperaturas de Saturación.
 - Evaporación Instantánea (Flashing).

- Cambios de Propiedades Termodinámicos.

d) Subrutina del Proceso de Destilación, utilizando las rutinas de predicción de propiedades termodinámicas..

Por ellos los programas DESMUL y TERCO, presenta la mismas subrutinas para la predicción de propiedades termodinámicas. Modificando las subrutinas de predicción de propiedades termodinámicas, se pueden utilizar las mismas rutinas de convergencia o cálculo de propiedades termodinámicas.

5.4. CONCLUSIONES.

El desarrollo del programa fue realizado teniendo en cuenta diferentes puntos de vistas matemáticos y de informática, mientras que en la simulación y optimización se tuvo en cuenta los puntos de vistas termodinámico, energético y económico.

La importancia para el desarrollo del algoritmo de solución en problemas de procesos en Ingeniería Química, radica en una programación y modelamiento óptimo (resultados precisos y convergencia de los modelos en un tiempo mínimo). Ello se refleja en este trabajo en el cálculo de puntos de saturación (temperaturas de burbuja

y rocío). En esta rutina de cálculo se tienen hasta cuatro ciclos de iteraciones anidados de cálculos con diferentes criterios y métodos de convergencia. El determinar un valor en forma iterativa, requiere de mayor tiempo para encontrar la convergencia, y con ello aumento el tiempo de ejecución. El algoritmo utilizado para la determinación del perfil de temperaturas en la columna de destilación, requiere de calcular la temperatura de burbuja en cada una de las etapas. Este cálculo es el que mayor tiempo utiliza en el programa de destilación. En el programa de Termodinámica de Corrientes, los cálculos que mayor tiempo requiere para evaluar resultados es la temperatura y presión de saturación (burbuja y rocío) y separación líquido-vapor.

El algoritmo aplicado para la determinación de los perfiles de composiciones-temperatura-flujos en el diseño de la columna destilación, establece :

- a) El perfil de composiciones a partir de datos de flujos y la constante de distribución (balance de masa).
- b) El perfil de temperatura y los nuevos valores de la constante de distribución, a partir del perfil de composiciones calculado anteriormente (equilibrio líquido-vapor).
- c) El perfil de flujos a partir del perfil de temperaturas (balance de energía).

Este algoritmo presenta una lenta convergencia, requiriendo un gran número de iteraciones a mayor número de componentes. Aplicando este algoritmo a los casos anteriormente descritos se obtiene entre 25 y 30 iteraciones. Es necesario acelerar la convergencia del sistema de ecuaciones. Existen métodos (método Φ , el método T, etc) que permiten obtener la solución con un menor número de iteraciones, por tener una variable aceleradora de la convergencia (Θ). El método de Newton-Rapson², utiliza este tipo de variable aceleradora, pero requiere de gran cantidad de memoria para almacenar las matrices de derivadas parciales.

Un análisis matemático realizado encontró que la convergencia del sistema de ecuaciones depende mayormente del perfil de composiciones. Asumiendo una distribución lineal de temperaturas entre el tope y fondo para la primera iteración, los perfiles de composiciones están muy alejados del perfil final, requiriendo muchas iteraciones para obtener la convergencia. En la solución de las matrices tridiagonales, se realizan los balances de masa, pero no se realiza el equilibrio líquido-vapor. Las constantes de equilibrio tienen una gran influencia en los resultados de los perfiles de composiciones. Es por ello que se modifica la constante de equilibrio mediante la normalización del producto de la constante de distribución y los flujos molares, para satisfacer el

equilibrio líquido-vapor (ver Anexo 1). Se realiza una nueva iteración hasta que se cumplan los balances de masa y el equilibrio líquido-vapor, y se obtenga la convergencia, procediendo luego al cálculo del perfil de temperaturas.

Los resultados de esta modificación del algoritmo, encuentra la convergencia entre 3 a 5 iteraciones, 6 veces más rápida que el algoritmo anterior. Con ello obtenemos menor tiempo de ejecución del programa, y mayor tiempo para realizar un mayor número de simulaciones.

La aplicación de este método de cálculo no es aplicable en aquellos sistemas que presentan mezclas azeotrópicas o soluciones altamente no ideales, debido a que la normalización de los valores del K_1 es válida en el rango de temperatura donde las curvas de la constante de distribución vs. presión son paralelas.

5.5 RECOMENDACIONES

La ampliación del trabajo no tiene límites. Se puede optimizar aún más los procedimientos de cálculos, utilizar modelos matemáticos más exactos y más complejos. Se puede desarrollar trabajos similares utilizando otro tipo de lenguaje de programación (Lenguaje C) o un hardware más avanzado en cuanto velocidad de

procesamiento, memoria disponible y capacidad de almacenamiento.

El análisis y la estructura del diseño de los programas permitirá a futuras aplicaciones desarrollar trabajos efectivos en cuanto a resultados y de alto performance. Seguir las pautas citadas a lo largo del tema darán un software de alta calidad y confiabilidad.

Se recomienda realizar en futuros trabajos, la estructuración de la información (bases de datos) y de los procedimientos de cálculos (biblioteca de procedimientos y funciones), para un eficaz flujo de información entre diferentes trabajos que siguen una misma línea de diseño, ello significa llegar a una estandarización de aplicaciones en Ingeniería Química.

BIBLIOGRAFIA

1. Smith, J.M.
Van Ness, H.C. : Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química. Editorial McGraw Hill, 1980.
2. Gjumbir, Marijana
Olujić, Zarko : "Effective Ways to Solve Single Nonlinear Equations", Chemical Engineering, pag 51-56, July 21, 1984.
3. Edmister, Wayne C.
Lee, Byung K. : Applied Hydrocarbon Thermodynamics, 2da Edición, vol 1, Gulf Publishing Company, 1984.
4. Ried, R.C.
Sherwood : Propiedades de los Líquidos y Gases. 3ra. Edición, McGraw Hill, New York, 1977.
5. Lee, Ik Byung
Kesler, Michael G. : "A Generalized Thermodynamic Correlation Based on Three-Parameter Corresponding States", AIChE Journal, Vol 21, N°3, pag 510-527, May 1975.
- Daubert, Thomas E. : Chemical Engineering Thermodynamics. Editorial McGraw Hill, 1985.
7. Soave, Giorgio : "Equilibrium Constants from a Modified Redlich-Kwong Equation of State", Chemical Engineering Science, pag 1197-1203, vol 27, 1972.
- 8 Peng, Ding Yu
Robinson, Donald B. : "A New Two-Constant Equation of State", Ind. Eng. Chem, Fund., pag 59-64, vol 15, #1, 1976.
9. Conrad, Patrick G.
Gravier, J.F. : "Peng-Robinson Equation of State Checks Validity of PVT Experiments", Oil & Gas Journal, pag 77-86, April 21, 1980.
10. Henley, Ernest J.
Sealer, J.D. : Equilibrium-Stage Separation in Chemical Engineering. John Wiley & Sons, 1986.

11. Pan, W.P.
Maddox, R.N. : "Determining Properties of Saturated Liquids and Vapors", Chemical Engineering, pag 79-87, November 2, 1981.
12. Balhaizer, Richar
Samuels, Michael
Eliassen, John : Termodinámica Química para Ingenieros. Prentice/Hall, 1974.
13. Castellanos, Julian
Telles, Máximo
Del Rosal, Rodolfo
Cano, José Luis
Zepeda, Ricardo : "Simulación de Torres de Destilación Primaria de Crudo", del Instituto Mexicano de Petróleo, pag 63-81, vol XIII, N°1, Enero, 1981.
14. Pierucci S, .J.
Ranzi E.M.
Biardi G.E.
Dentle M. : "T-method computes distillation", Hydrocarbon Processing, pag 179, September 1981.
15. Erbar, J.H.
Maddox, R.N. : "Latest Score: Reflux vs. Tray". Hydrocarbon Processing, Vol 40, N°5, pag 183-188, May 1961.
16. Eduljee, H.E : "Equations Replace Gilliland Plot". Hydrocarbon Processing, pag 120-122, September 1975.
17. Treybal, Robert E. : Operaciones de Transferencia de Masa. 2da Edición, McGraw Hill, 1980.
18. Holland, Charles D. : Multicomponent Distillation. Prentice Hall, 1963.
19. Fair, J.R.
Boles, W.L. : "Modern Design of Distillations Columns", Chemical Engineering, April 22, 1968.
20. Thiele, E.W.
Geddes, R.L. : "Computation of Distillation Aparatus for Hydrocarbon Mixture", Ind. Eng. Chem, vol 25, pag 289 (1933).
21. Christensen, J. : Computer Programs for Chemical Engineering Stagwise Computations. Aztec Publishing, 1972.

22. Russel, Richard A. : "A flexible and Reliable Method Solves Single Tower and Crude Distillation-Columns Problems", Chemical Engineering, pag 53-59, October 17, 1983.
23. Economopoulos, Alexander P. : "Computer Design of Sieve Trays and Tray Columns", Chemical engineering, pag 109-120, December 4, 1978.
24. López Bonillo, F. Francisc Castell, F. : "Diseño de Platos Perforados para Columnas de Destilación", Revista Española de Ingeniería Química, parte I, pag 135-141, Setiembre, 1984; parte II, pag 99-109, Octubre, 1984; parte III, pag 73-81, Noviembre, 1984.
25. UOP Process Division : Students Constants Problem Statement, 1980. American Institute of Chemical Engineering, New York, 1980.
26. Finelt, Stanley : "Beeter C3 Distillation pressure", Hydrocarbon Processing, pag 95-98, February, 1979.
27. Barnwell, J. Morris, C. P. : "Heats Pumps Cuts Energy use", Hydrocarbon Processing, pag 117-119, July, 1982.
28. Flores, J. Castells, F. Ferré, J.A. : "Recompression Saves Energy", Hydrocarbon Processing, pag 59-62, July, 1984.
29. Quadri, G. P. : "Use Heat Pump for P-P Splitter", Hydrocarbon Processing, parte 1, pag 119-126, February, 1981; parte 2, pag 147-150, March, 1981.
30. Borland, Inc. : Turbo Pascal Owner's Handbook. 1ra. Edición, 1987.