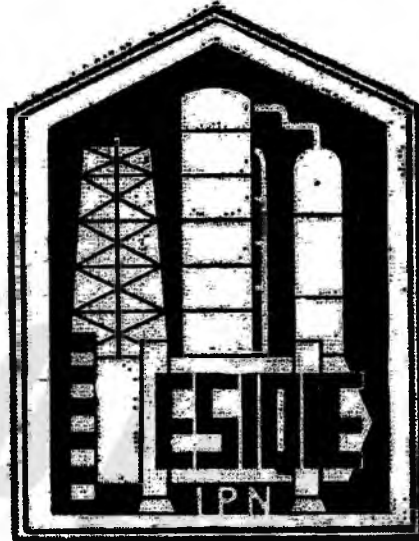


Instituto Politécnico Nacional

**Escuela Superior de Ingeniería Química e
Industrias Extractivas**



**Desarrollo de un programa para la simulación de
columnas de destilación de multicomponentes.**

T E S I S

**Que para obtener el título de :
INGENIERO QUIMICO INDUSTRIAL**

P r e s e n t a n

**Miguel Angel Cruz Rodríguez
José Antonio Sáenz de Navarrete Moreno
José Francisco Torres Felix**

México, D.F.

Julio 1987



SECRETARÍA DE
EDUCACIÓN
PÚBLICA

T.-72

INSTITUTO POLITECNICO NACIONAL
ESCUELA SUPERIOR DE INGENIERIA QUIMICA E INDUSTRIAS EXTRACTIVAS
DIVISION DE SISTEMAS DE TITULACION

México, D. F., a 29 de Abril de 1987

Al(los) C. Pasante(s):	Carrera:	Generación:
MIGUEL ANGEL CRUZ RODRIGUEZ.	I.Q.I.	1976-1982
JOSE ANTONIO SAENZ DE NAVARRETE MORENO	I.Q.I.	1980-1985
JOSE FRANCISCO TORRES FELIX.	I.Q.I.	1980-1986
Presente.		

Mediante la presente se hace de su conocimiento que esta División acepta que el C. Ing. DR. ENRIQUE ARCE MEDINA sea orientador en el Tema de Tesis que propone(n) usted(es) desarrollar como prueba escrita en la opción SEMINARIO DE TITULACION bajo el título y contenido siguientes: APLICACION DE LOS METODOS NUMERICOS EN LA SOLUCION DE PROBLEMAS DE INGENIERIA QUIMICA.

"DESARROLLO DE UN PROGRAMA PARA LA SIMULACION DE COLUMNAS DE DESTILACION DE MULTICOMPONENTES."

- RESUMEN.
- I.- INTRODUCCION.
 - II.- ENUNCIAMIENTO DEL PROBLEMA.
 - III.- DESARROLLO DEL MODELO MATEMATICO.
 - IV.- ALGORITMO GENERAL.
 - V.- CONVERGENCIA.
 - VI.- ACCESO DE DATOS.
 - VII.- RESULTADOS.
- BIBLIOGRAFIA.
APENDICE.

Se concede plaza máxima de un año para presentarlo a revisión por el Jurado.

DR. RAFAEL TORRES ROJAS.

VOCAL DE CAMBIA

M.C. RUBEN LEMUS BARRON.

EL JEFE DE LA DIVISION DE SISTEMAS
DE TITULACION

DR. ENRIQUE ARCE MEDINA.

EL PROFESOR ORIENTADOR

M.C. IGNACIO VARGAS BRAVO.

EL SUBDIRECTOR TECNICO

mgj*

SOLO LECTURA

Con cariño y amor para mi esposa,
agradeciéndole el esfuerzo y apoyo que me
brindó para el logro de mi carrera.

Gracias, querida esposa.

Miguel Angel.

SOLO LECTURA

Con agradecimiento para los Drs.
Arnoldo Amaya y Javier Pema por el apoyo
brindado durante el transcurso de mi carrera.

Miguel Angel.

SOLO LECTURA

Con amor, cariño y respeto para mis
padres que me brindaron la oportunidad de
planear, trazar y construir mi futuro, dándome
los elementos para hacerlo.

Miguel Angel.

SOLO LECTURA

Quiero, por medio de este trabajo, expresar mi profundo cariño a las dos personas que más contribuyeron a mi formación profesional, mis padres, Martha y Josechu.

Gracias, por compartir una parte tan importante de mi vida.

José Antonio

SOLO LECTURA

Para uno de los mejores amigos y
compañeros con quien he vivido tantas alegrías
desde hace 19 años, mi hermano Eduardo.

José Antonio

SOLO LECTURA

Para el grupo de amigos tan especial,
con quienes comparto mi desarrollo como
profesionista y como persona: The Muu Babies.

Gracias a Norma, Eduardo, Gina, Paty
y Alma por su amistad.

José Antonio

SOLO LECTURA

Gracias a mis amigos, profesores,
familiares y a todos los que de una u otra
forma contribuyeron al logro de uno de mis más
importantes objetivos.

José Antonio

SOLO LECTURA

A Rodolfo y Luisa como un testimonio de agradecimiento que por el apoyo, cariño, confianza y consejos brindados desde el inicio de mis días, me han llevado al logro de una de mis metas y sobre todo por haberme dado el mejor y más valioso regalo que poseo: el tener la dicha que sean mis padres.

José Francisco.

SOLO LECTURA

A mis hermanos Tere, Genny y Fito que con su amor filial demostrado en todo momento, también han contribuido a mi formación como persona.

José Francisco.

SOLO LECTURA

A Paco y Ana por el cariño y apoyo
con que me recibieron y siguen demostrando.

José Francisco.

SOLO LECTURA

A mis compañeros y amigos por
brindarme su amistad, respeto y compañía en
todo momento.

José Francisco.

I N D I C E

<u>CAPITULO</u>	<u>CONTENIDO</u>	<u>HOJA No.</u>
	RESUMEN	1
I	INTRODUCCION	2
II	PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	5
	a) Objetivos	5
	b) Características	6
	c) Aplicaciones	7
	d) Suposiciones	8
	e) Criterios a considerar en la columna	9
	f) Equilibrio líquido - vapor	11
	g) Alimentaciones y salidas	12
	h) Condensador	13
	i) Rehervidor	14
	j) Relación de reflujo	15
III	DESARROLLO DEL MODELO MATEMATICO	16
	a) Balance de materia	16
	b) Estimaciones iniciales	22
IV	ALGORITMO GENERAL	24
V	CONVERGENCIA	26
VI	ACCESO DE DATOS	28
VII	RESULTADOS	30
VIII	APENDICE	40
IX	BIBLIOGRAFIA	51

RESUMEN

Se presenta un programa de computo para simular una torre de destilación para multicomponentes, con posibilidad de efectuar extracciones y/o alimentaciones en cualquier plato de la torre; teniendo, asimismo, la opción de que estas alimentaciones se encuentren en una o dos fases.

Los métodos empleados son:

- 1) Para el cálculo de las temperaturas de ebullición, el método de Newton-Raphson, por medio del punto de burbuja.
- 2) Para el cálculo del nuevo perfil de temperaturas de la torre se emplea el algoritmo de Thomas, a través del cual se llega a la obtención de los valores del balance de materiales, los cuales, sustituidos regresivamente, nos darán temperaturas para recomenzar la iteración.

Se concluye, que este método es de los más adecuados para la simulación de columnas de destilación de multicomponentes, ya que se puede obtener con rapidez y precisión el resultado en caso de modificarse una ó más variables de operación. Además, se tiene una gran capacidad de simulación con 20 componentes, lo cual permite recrear con facilidad las condiciones que podrían existir en un complejo petrolero.

Se tiene también una aproximación efectiva al llevar a cabo modificaciones en las especificaciones de diseño; por ejemplo, al cambiar la localización en el plato de alimentación, siendo este programa una herramienta cuantitativa y semicualitativa en la evaluación de sistemas de separación.

CAPITULO I

INTRODUCCION

El objetivo de la destilación, es la separación de mezclas cuyos componentes tienen diferentes presiones de vapor a una temperatura dada. La palabra destilación como es usada aquí se refiere a la separación física de una mezcla en dos ó más fracciones que tienen diferentes puntos de ebullición.

Si una mezcla líquida de dos compuestos volátiles es calentada, el vapor que se desprende tendrá una alta concentración del compuesto que tenga más bajo punto de ebullición; que el líquido del cuál fué extraído. Inversamente, si un vapor es enfriado, el material de más alto punto de ebullición tendrá una tendencia a condensar en mayor proporción que el de más bajo punto de ebullición.

La necesidad de disponer de simuladores de carácter general en el ámbito de la Ingeniería Química para el desarrollo de control de procesos, a forzado la creación y desarrollo de los mismos. Por el carácter dinámico de los procesos químicos, la simulación se ha de basar en modelos dinámicos que, conjuntamente con la complejidad de las operaciones y procesos en Ingeniería Química, hacen de su simulación un verdadero problema, abordado inicialmente con los calculadores analógicos y actualmente con los digitales.

El simulador presenta, sobre la planta real, la posibilidad de una rápida modificación del sistema, permitiendo el diseño de sistemas más eficaces y de plantas más controlables.

Las dos condiciones requeridas de manejo de modelos complejos y posibilidad de rápidas modificaciones del sistema simulado son importantes para la eficacia del simulador. La solución aquí adoptada, ha sido la de descomponer el sistema en subsistemas simulados por módulos o subrutinas (cada módulo es el modelo de un elemento del sistema ó de una operación unitaria) que, al combinarlos de diferentes maneras, permiten obtener infinidad de sistemas.

Distintos módulos permiten efectuar el cálculo a distinta precisión, según se pretende llegar a una exigencia ó necesidad en los resultados. De esta manera se pretende llegar a un óptimo en tiempo de cálculo.

Un punto importante en la destilación es la determinación del número de variables que deben y pueden ser fijadas para definir el sistema de destilación. El número de elecciones para estas variables es casi infinita. Hay, sin embargo, algunos valores que son normalmente especificados. En una destilación típica las variables que incluyen son:

1. Composición y condición de alimentación.
2. Pérdida o ganancia de calor en cada plato.
3. Presión del sistema.
4. Presión en el plato de alimentación, condensador y rehevador.
5. Pérdida de calor en el sistema.

Las otras variables son usualmente tomadas de las siguientes:

1. Relación de reflujo.
2. Número de platos en la columna.
3. Localización del plato de alimentación.
4. Porcentaje recuperado de componentes.

Una columna de destilación convencional es aquella que tiene una alimentación, una salida de destilado, una salida de residuo, un condensador y un rehervidor.

Si una columna tiene cualquier número de entradas ó de salidas en adición a las que presenta una columna convencional, se clasifica como una columna compleja.

La generalización de este programa para cualquier número de alimentaciones y salidas es posible. A pesar de la sencillez del algoritmo al no utilizar el balance de energía, los resultados en algunos casos compiten en exactitud con los de los métodos rigurosos.

SOLO LECTURA

CAPITULO II

PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

A) OBJETIVOS

El propósito de este programa es la simulación de columnas de destilación de multicomponentes con múltiples condiciones de operación, control del algoritmo de solución y cálculo de equilibrio. El algoritmo es flexible y robusto, capaz de resolver un gran número de problemas típicos de destilación, teniendo los siguientes objetivos:

- A.1. Alimentación y aceptación de especificaciones de forma sencilla.
- A.2. Cálculo de perfiles de concentración y temperaturas en cada plato, que incluyen los productos a régimen permanente.
- A.3. Versatilidad en base a su modularidad.
- A.4. Presenta características de método riguroso con simplificaciones que reducen el tiempo de cómputo y la memoria utilizada.
- A.5. Estabilidad numérica.
- A.6. Base para la evaluación de alternativas de proceso.

B) CARACTERISTICAS

De acuerdo a los objetivos que presenta el programa se toman en cuenta las siguientes características:

- B.1. Emplea el método de punto de burbuja, con el algoritmo de Newton-Raphson para el cálculo de temperaturas de ebullición.
- B.2. Puede haber cualquier número de corrientes de alimentación ó extracción, líquida y/o vapor en la columna.
- B.3. El condensador puede ser de operación total ó parcial.
- B.4. Emplea un número mínimo de propiedades físicas y termodinámicas. Se recomienda el empleo de ecuaciones polinomiales para las constantes de equilibrio en función de la temperatura. Este tipo de ecuaciones se obtienen de datos experimentales.
- B.5. Tiene una estructura modular, considerando una subrutina para la lectura, corroboración e impresión de datos. Otra para formar las matrices del balance de materiales, una más para resolver las ecuaciones resultantes empleando el algoritmo de Thomas. Una para determinar el nuevo perfil de temperaturas y finalmente otra para imprimir resultados.
- B.6. Maneja un máximo de 50 platos y hasta 20 componentes.

C) APLICACIONES

Las suposiciones usadas en este programa no permiten una representación precisa de columnas que tengan un comportamiento altamente no ideal. Sin embargo, el programa sirve como una herramienta útil, en las siguientes situaciones:

- C.1. Para la simulación de sistemas en los que las constantes de equilibrio se expresan como polinomios de la temperatura.
- C.2. Para la simulación de columnas ya existentes en las que las constantes de equilibrio se determinan empíricamente.
- C.3. Para la predicción del efecto a cambios en las variables de operación.
- C.4. Para predecir el efecto producido al modificar las especificaciones de diseño, por ejemplo, cambiar la localización del plato de alimentación, adición de platos, etc.
- C.5. Como una herramienta cuantitativa y semicualitativa en la evaluación de sistemas de separación.

D) SUPOSICIONES

Para lograr reducir el tiempo de cómputo y la capacidad de memoria utilizada las siguientes suposiciones son utilizadas:

- D.1. Los flujos globales de masa se suponen constantes. Esta suposición reduce el esfuerzo de cómputo, ya que el perfil de flujos en la columna se determina sin hacer un balance de energía.
- D.2. El programa trata con etapas ideales, esto implica un 100% de eficiencia por plato.
- D.3. Todas las corrientes internas en la columna existen como líquido ó vapor saturado. Esto implica que no se admiten enfriadores ó calentadores entre los platos.
- D.4. Sólo se permite una fase líquida por etapa.
- D.5. En caso de tener una mezcla líquido vapor en cualquier alimentación, se supone que la fracción de vapor entra al plato debajo del plato de alimentación.
- D.6. El reflujo líquido al plato del domo se especifica por el usuario.
- D.7. Todas las corrientes de alimentación y reflujo que admite la columna son saturadas.
- D.8. Tanto el condensador como el recalentador son considerados como platos.

ES CRITERIOS A CONSIDERAR EN LA COLUMNA

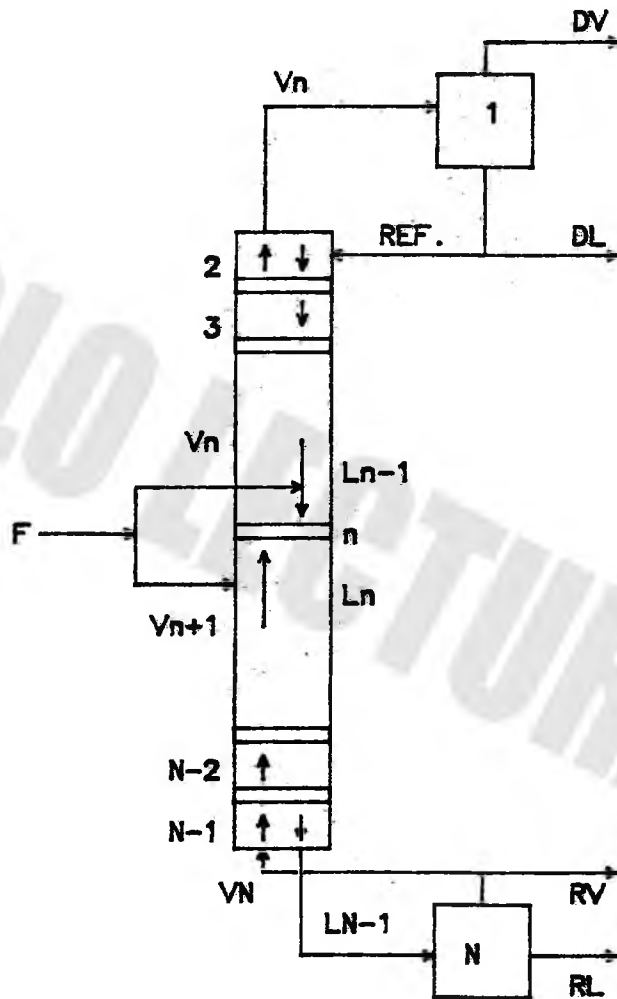
Las etapas se numeran a partir del condensador hacia abajo, el condensador y el rehervidor son considerados siempre como platos (condensador = plato 1 ; rehervidor = plato N).

Aún cuando un condensador ó un rehervidor no son platos de equilibrio se consideran como platos para facilitar la alimentación del programa.

Al formular el problema, el usuario debe seleccionar una base de cálculo del flujo en moles por unidad de tiempo y todos los demás flujos serán referidos a esta base. Por ejemplo, se puede especificar una base de 100 moles para la alimentación, por lo tanto, todas las demás corrientes de alimentación y salida de la columna deben de ser referidas a esta base.

La figura No. 1 muestra un esquema de la columna a emplear.

**DIAGRAMA BASICO DE UNA TORRE DE DESTILACION
(FIGURA No. 1)**



F) EQUILIBRIO LIQUIDO - VAPOR

El coeficiente de equilibrio liquido-vapor "K" para el componente "i" está definido como:

$$K_i = y_i / x_i$$

donde "x" y "y" son las composiciones en la fase líquida y vapor respectivamente.

Se considera el coeficiente de equilibrio polinomial en función de la temperatura:

$$K_i = a + bT + cT^2 + dT^3$$

Este tipo de ecuaciones se obtiene de datos experimentales.

G) ALIMENTACIONES Y SALIDAS

El programa permite cualquier número de corrientes de alimentación y/o vapor y que pueden ser alimentadas a cualquier plato. El fluido que se alimenta a la columna puede estar en un estado ó en dos, pero no se admite más de una fase en el estado líquido. La alimentación líquida se añade cayendo en el plato de alimentación. La alimentación en fase vapor se añade a la corriente de vapor que va subiendo al plato de alimentación.

Todas las corrientes de alimentación se consideran saturadas. Si se alimentan en la misma corriente una mezcla líquido-vapor, se supone que la composición en cada fase es la misma. Si se alimenta en dos fases se toman como dos corrientes y en este caso las composiciones en cada fase se especificarán separadamente y no necesariamente serán las mismas.

El programa permite que el producto sea extraído de cualquier plato, además de las que se extraen del condensador y del rehornador, y pueden ser extracciones líquidas y/o vapor.

El líquido se extrae de la corriente que cae del plato superior. El vapor se extrae de la corriente que sube del plato inferior.

H) CONDENSADOR

Se debe especificar la cantidad de destilado líquido y de destilado vapor que se desea obtener, en moles (DL y DV)

Si se especifica que $DV > 0$ implica que es un condensador parcial y como es un flasheo, se supone que el vapor y el líquido tendrán composiciones de equilibrio.

Si se especifica que $DV = 0$ se tiene un condensador total.

SOLO LECTURA

I) REHERVIDOR

Se debe especificar las cantidades de residuo líquido y vapor que se obtienen (RL y RV), en moles.

Si se especifica que $RL = 0$, implica que es un rehervidor total.

Si $RL > 0$, quiere decir que está operando en forma parcial y la composición del líquido se considerará en equilibrio con la del vapor.

SOLO LECTURA

J) RELACION DE REFLUJO

Se especificará cuanto de destilado se regresará del condensador al domo de la torre

Se supone que el reflujo es un líquido saturado.

SOLO LECTURA

CAPITULO III

DESARROLLO DEL MODELO

A) BALANCE DE MATERIA

Para establecer el modelo matemático que simula la columna de destilación, se fijan los correspondientes balances de materia para condensador, rehervidor y plato teórico.

- Balance de Materia en el Condensador.

De acuerdo a la figura No. 2:

$DV1 = SV1$ Destilado Vapor.

$DL1 = SL1$ Destilado Liquido.

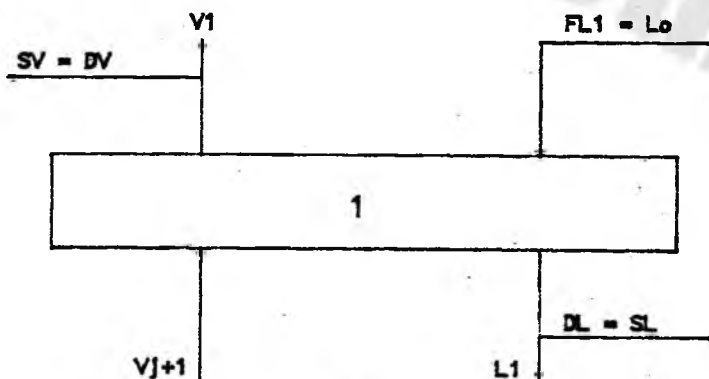
$V1 = 0$

$L0 = 0$

$L1 = \text{Destilado} \times \text{Reflujo}$

$V_{j+1} + FL1 = V1 + SV + SL + L1$

DIAGRAMA ESQUEMATICO PARA EL CONDENSADOR (FIGURA No. 2)



- Balance de Materia para el Rehervidor.

De acuerdo con la figura No. 3

$RLN = SLN = \text{Fondos líquidos.}$

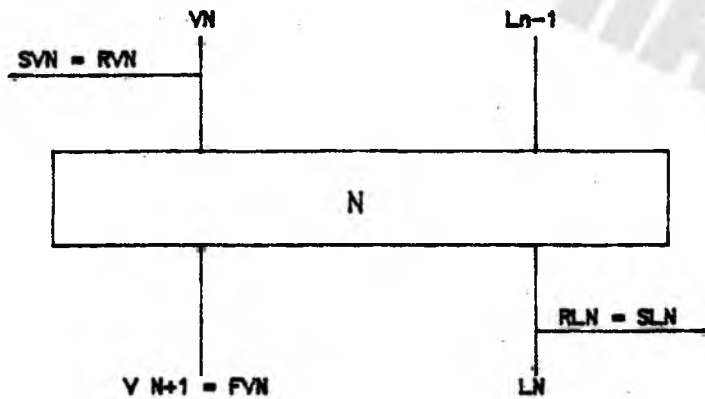
$RUN = SUN = \text{Fondos vapor.}$

$UN+1 = FUN = 0$

$LN = 0$

$FUN + LUN-1 = UN + SUN + SLN + LN$

**DIAGRAMA ESQUEMATICO PARA EL REHERVIDOR
(FIGURA No. 3)**



- Balance General para el plato teórico " j " .

De la figura No. 4

$$L_{j-1} + U_{j+1} + FL_j + FU_j = U_j + SU_j + L_j + SL_j$$

donde:

L = flujo de líquido .

U = flujo de vapor .

SL = extracción lateral líquida .

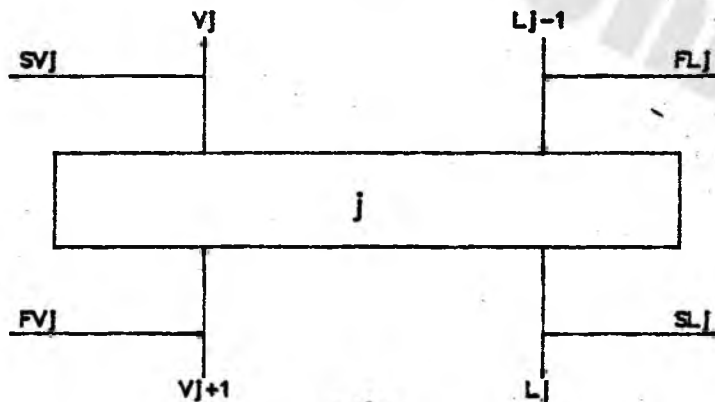
SU = extracción lateral vapor .

FL = alimentación líquida .

FU = alimentación vapor .

j = número de plato .

DIAGRAMA ESQUEMATICO PARA EL PLATO TEORICO "j"
(FIGURA No. 4)



- Balance por componentes para las etapas intermedias de:

$$j = 2, \dots, N-1$$

$$\begin{aligned} L_{j-1} * X_{i,j-1} + U_{j+1} * Y_i + FL_j * Z_{i,j} &= \\ = (U_j + SU_j) * Y_{i,j} + (L_j + SL_j) * X_{i,j} &\quad (1) \end{aligned}$$

donde:

X_i = composición en la fase líquida.

Y_i = composición en la fase vapor.

Z_i = composición en la alimentación.

i = indica el componente ($1 < i < M$)

j = indica el plato ($2 < j < N-1$)

Sustituyendo las composiciones de la fase vapor y utilizando las relaciones de equilibrio por componente:

$$Y_i = X_i * K_i \quad (2)$$

se obtiene:

$$\begin{aligned} (U * K_i * X_i)_{j+1} - (L + SL)_{j+1} + (U + SU) * K_i * X_{i,j} + (L * X_i)_{j-1} &= \\ = - (FL * Z_i)_{j+1} + (FU * Z_i)_{j+1} + K_{i,j} &\quad (3) \end{aligned}$$

- Balance General de la Columna.

De la figura No. 5 se obtiene la siguiente ecuación, aunque está únicamente ejemplificada una alimentación y cuatro extracciones laterales.

$$0 = - \sum_1^N FL - \sum_1^N FU + \sum_1^N SU + \sum_1^N SL \quad (4)$$

De la ecuación 3 de balance por componentes y agrupando en función de $X_{i,j+1}$, $X_{i,j}$, $X_{i,j-1}$ se obtiene una matriz tridiagonal de la siguiente forma:

$$\begin{bmatrix} B_1 & C_1 & & & \\ A_2 & B_2 & C_2 & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & A_{N-1} & B_{N-1} & C_{N-1} \\ & & & A_N & B_N \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_{N-1} \\ X_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_1 \\ D_2 \\ \vdots \\ D_{N-1} \\ D_N \end{bmatrix}$$

donde:

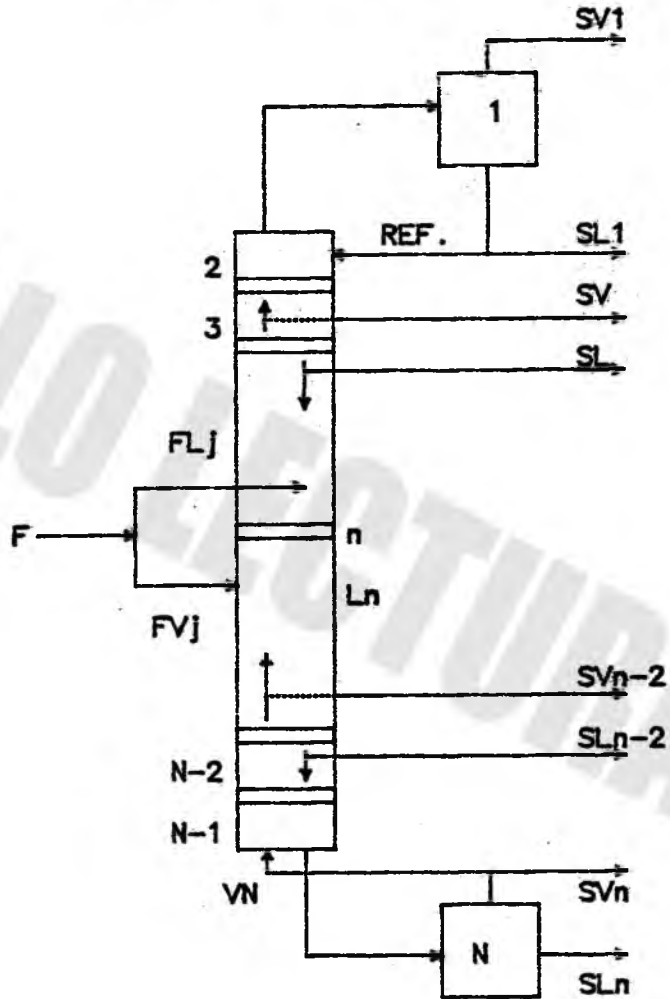
$$A_j = U_{j+1} + K_i$$

$$B_j = -j(L + SL)_i + (U + SU)_{j2} + K_i$$

$$C_j = L_{j-1}$$

$$D_j = - (FL + FU + K_i) + Z_j$$

DIAGRAMA DE LA COLUMNA
(FIGURA No. 5)



Dadas estas características de la matriz tridiagonal la información se almacena en una matriz de cuatro columnas y N renglones en vez de una matriz de N renglones y N columnas, en donde la primera columna es el vector de las A's, el segundo es el de las B's, el tercero el de las C's y el cuarto para las D's.

Se resuelve mediante el uso de algoritmo de Thomas, que es una eliminación Gaussiana, para matrices en banda. Las ecuaciones del algoritmo de Thomas son las siguientes:

$$P_1 = C_1 / B_1$$

$$Q_1 = D_1 / B_1$$

$$P_j = C_j / (B_j - A_j * P_{j-1}) \quad j = 2, 3, \dots, N-1$$

$$Q_j = (D_j - A_j * Q_{j-1}) / (B_j - A_j * P_{j-1}) \quad j = 2, 3, \dots, N$$

$$X_j = Q_j \quad j = N$$

$$X_j = Q_j - P_j * X_{j+1} \quad j = N-1, N-2, \dots, 1$$

B) ESTIMACIONES INICIALES

Se supone que los flujos masa en la columna son constantes.

- Para los flujos de líquido

$$L_1 = \text{Destilado} + \text{Reflajo} \quad \text{en el domo}$$

$$L_j = L_{j-1} + FL_j - SL_j \quad j = 2, 3, \dots, N-1$$

$$L_N = 0 \quad \text{en el fondo}$$

Para los flujos de vapor

$$U_1 = 0$$

$$U_{j+1} = SL_1 + SU_1 - FL_1 - FU_1 + L_1$$

$$U_j = SU_{j-1} - FU_j + U_{j-1} \quad j = 1, 2, \dots, N-2$$

La estimación inicial de temperaturas se puede efectuar de la siguiente manera:

El usuario debe proporcionar la temperatura de la mezcla en el plato de alimentación y se efectúa una estimación lineal, obteniéndose las temperaturas del fondo y del domo, calculándose posteriormente:

$$T_j = \frac{T_{\text{fondo}} - T_{\text{domo}}}{N-1} + T_{\text{domo}} \quad j = 2, 3, \dots, N-1$$

CAPITULO IV

ALGORITMO GENERAL

- 1.- Suponer los perfiles de líquido y vapor a través de la columna, asignando un flujo molar constante, esto puede hacerse conociendo el reflujo, el destilado, las entradas de alimentación y las salidas.

Dichas corrientes se consideran como líquido y vapor saturados en donde el líquido entrará por la parte superior y el vapor por la parte inferior.

- 2.- Se calcula un perfil de temperaturas de acuerdo a la temperatura de alimentación.
- 3.- Se calcula la constante de equilibrio para cada plato y para cada componente.
- 4.- Mediante los balances de materiales de la columna y las constantes de equilibrio, se calculan los coeficientes A, B, C y D para la matriz tridiagonal.
- 5.- Se aplica el algoritmo de Thomas para resolver el sistema y obtener las composiciones a través de la columna, lo anterior es por componente y por plato.

- 6.- Los valores de las composiciones obtenidas se normalizan mediante la siguiente ecuación:

$$(X_{in})_{NOR} = \frac{X_{in}}{\sum_1^n (X_{i,n})} \quad (5)$$

- 7.- Se evalúa la condición de equilibrio para cada plato:

$$NCOMP \sum_1 X_i * K_i = 1$$

Si ésta se cumple se imprimen los resultados como valores correctos para el funcionamiento de la columna, si no se cumplen pasa al siguiente punto.

- 8.- Se aplica el método de Newton-Raphson para obtener una temperatura nueva, que sirva para evaluar en el paso número 3.
- 9.- Se considera que el método converge cuando la suma de $K_i * X_i$ es aproximadamente igual a 1, en un error aproximado de ± 0.0001 .

CAPITULO V

CONVERGENCIA

La solución del método, está basada en la suposición de un perfil de $K_{ref,n}$, correspondientes a un perfil de temperaturas supuesto en la columna.

Para una solución de convergencia el vapor y liquido en cualquier plato debe estar en equilibrio de acuerdo al punto de burbuja del liquido. La comprobación si el perfil de temperaturas es correcto, es que la suma de la fracción mol de los componentes en el vapor debe ser la unidad.

En el punto de burbuja:

$$1.0 = \sum_1^{NCOMP} Y_{i,n} = \sum_1^{NCOMP} K_{in} X_{in}$$

En cada plato se requiere de hacer la suma de las fracciones mol.

El valor de $K_{ref,n}$ utilizado para la siguiente iteración, será:

$$K_{ref,n} = a + bT_{j+1} + cT_{j+1} + dT_{j+1} \quad (6)$$

$$T_{j+1} = T_j - \frac{f(T)}{f'(T)} \quad (7)$$

Para determinar si los cálculos han convergido, se tiene:

$$\text{ERROR} = \left| (K_i * X_i)_{\text{ref}} - (K_i * X_i) \right| \quad n = 1, 2, \dots, \text{NPLAT}$$

Los cálculos terminan cuando:

$$\text{ERROR} \leq 0.0001$$

o cuando el número de iteraciones llega al máximo.

SOLO LECTURA

CAPITULO VI

ACCESO DE DATOS

El número de datos depende del número de alimentaciones, del número de corrientes laterales y de los valores para la evaluación de las constantes de equilibrio.

La alimentación de estos datos puede realizarse de dos formas:

1. Por medio de un archivo.
2. Por alimentación interactiva.

En cualquiera de los dos casos, el formato de alimentación es libre, teniendo el siguiente orden:

<u>Dato No.</u>	<u>Contenido</u>
1	Título del problema.
2	Número de componentes.
3	Número de platos.
4	Número de iteraciones.
5	Frecuencia de impresión.
6	Nombre del componente(s).
7	Valor del destilado líquido.
8	Valor del residuo líquido.
9	Valor del destilado vapor.
10	Valor del residuo vapor.

<u>Dato No.</u>	<u>Contenido</u>
11	Reflujo externo.
12	Grado de exactitud.
13	Número de alimentaciones.
14	Número de plato(s) de alimentación su(s) flujo(s) y temperatura(s).
15	Composición de la alimentación.
16	Número de salidas.
17	Número de plato(s) de salida y su(s) flujo(s) de líquido y vapor.
18	Presión de la columna.
19	Coefficientes de las constantes de equilibrio.

CAPITULO VII

RESULTADOS

1. El programa cumple con el requisito de ser modular, lo cual le permite ser modificable con gran facilidad, siendo los módulos que lo forman independientes uno del otro, pudiendo funcionar por separado en caso de que lo requiera el usuario.
2. La alimentación de datos, al ser interactiva con el usuario, resulta ser muy sencilla, teniéndose la opción de que estos, se proporcionen a través de una base de datos; gracias a esto, el usuario puede emplear el programa aunque no tenga un conocimiento muy profundo del lenguaje de programación.
3. Usando los métodos numéricos de Newton-Raphson y de Thomas para la solución de sistemas de multicomponentes, se obtuvo una rápida convergencia para llegar a los resultados, siendo el número de cálculos menor que si se utilizara otro método numérico de aproximación, como los de Gauss-Seidel o el de Gauss.
4. Se tiene un auxiliar muy útil en la simulación de procesos de destilación, sin tener que recurrir a la simulación en plantas piloto, obteniéndose resultados totalmente válidos, con rapidez y a bajo costo; pudiendo llegar a simular condiciones críticas de operación, no malgastando recursos.

```

ESCRIBE EL TITULO
CHEJ
NUMERO DE COMPONENTES
NUMERO DE PLATOS
NUMERO DE ITERACIONES
ESCRIBA EL VALOR DE LA FRECUENCIA DE ITERACION
CHEJ
NOMBRE DEL COMPONENTE      1
NOMBRE DEL COMPONENTE      2
NOMBRE DEL COMPONENTE      3
VALOR DEL DESTILADO LIQUIDO
VALOR DEL RESIDUO LIQUIDO
VALOR DEL DESTILADO DEL VAPOR
VALOR DEL RESIDUO DEL VAPOR
REFLUJO EXTERNO
GRADO DE EXACTITUD
CHEJ
ESCRIBA EL NUMERO TOTAL DE ALIMENTACIONES
ESCRIBA EL NUMERO DEL PLATO DE ALIMENTACION
Y SUS FLUJOS DE ALIMENTACION LIQUIDA Y VAPOR
Y LA TEMPERATURA DE ALIMENTACION
ESCRIBA LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION
PARA EL PLATO      7 DEL COMPONENTE BUTANO
ESCRIBA LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION
PARA EL PLATO      7 DEL COMPONENTE PENTANO
ESCRIBA LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION
PARA EL PLATO      7 DEL COMPONENTE HEXANO
CHEJ
ESCRIBA EL NUMERO TOTAL DE SALIDAS
ESCRIBA EL NUMERO DEL PLATO DE EXTRACCION
Y SUS FLUJOS DE EXTRACCION LIQUIDA Y VAPOR
ESCRIBA EL VALOR DE LA PRESION
CHEJ
DE LOS VALORES DE LOS COEFICIENTES PARA LA
CONSTANTE DE EQUILIBRIO: A, B, C Y D PARA EL BUTANO
DE LOS VALORES DE LOS COEFICIENTES PARA LA
CONSTANTE DE EQUILIBRIO: A, B, C Y D PARA EL PENTANO
DE LOS VALORES DE LOS COEFICIENTES PARA LA
CONSTANTE DE EQUILIBRIO: A, B, C Y D PARA EL HEXANO
CHEJ

```

*** SIMULACION DE UNA COLUMNA DE DESTILACION ***

DATOS DE LA COLUMNA

```

NUMERO DE COMPONENTES      = 3
NUMERO DE PLATOS TEORICOS  = 16
NUMERO TOTAL DE ALIMENTACIONES = 1
NUMERO TOTAL DE EXTRACCIONES = 0

```

PARAMETROS DE CONTROL DE LA COLUMNA

```

NUMERO MAXIMO DE ITERACIONES = 50
FRECUENCIA DE IMPRESION DE RESULTADOS = 10
SE UTILIZARAN CONSTANTES POLINOMIALES
TOLERANCIA DE CONVERGENCIA = .1000E-03

```

CARACTERISTICAS DEL PROBLEMA

```

DESTILADO LIQUIDO          = .3025E+02
DESTILADO VAPOR            = .0000E+00
RELACION DE REFLUJO        = .4000E+01
RESIDUO LIQUIDO            = .6975E+02
RESIDUO VAPOR              = .0000E+00
PRESION DE LA COLUMNA      = .1000E+03

```

DATOS SOBRE LA ALIMENTACION DE LA COLUMNA

```

PLATO DE ALIMENTACION      = 7
FLUJO DE ALIMENTACION LIQUIDA = .1000E+03

```

FLUJO DE ALIMENTACION VAPOR = .0000E+00
 TEMPERATURA DE ALIMENTACION = .2054E+03

COMPOSICIONES EN LA ALIMENTACION

COMPONENTE 1 = .3000
 COMPONENTE 2 = .3500
 COMPONENTE 3 = .3500

DATOS SOBRE LAS CORRIENTES DE EXTRACCION

PLATO DE EXTRACCION = 0
 FLUJO DE EXTRACCION-LIQUIDA = 0.000E+00
 FLUJO DE EXTRACCION VAPOR = 0.000E+00

ESTIMACION INICIAL DE TEMPERATURAS

LA ESTIMACION DE TEMPERATURAS ES EN FUNCION DE LA TEMPERATURA DE ALIMENTACION

SE UTILIZARAN ECUACIONES DE TIPO POLINOMIAL

1 - .1770E+00 .4950E-02 - .4150E-05 .2000E-07
 2 - .3790E-01 .1270E-02 .2310E-06 .1310E-07
 3 - .9300E-01 .1539E-02 .1037E-04 .1090E-08

LOS NOMBRES DE LOS COMPONENTES SON

1 BUTANO
 2 PENTANO
 3 HEXANO

PERFIL DE FLUJOS DE LIQUIDO Y VAPOR EN LA COLUMNA

PLATO	TEM(N)	L(N)	V(N)	FL(N)	FV(N)	SL(N)	SV(N)
7	171.144	1.000	151.000	.000	.000	30.250	.000
6	182.554	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
5	193.254	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
4	193.963	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
3	195.663	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
2	197.363	1.000	151.000	100.000	.000	.000	.000
1	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
0	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
1	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
2	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
3	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
4	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
5	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
6	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
7	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
8	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
9	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
10	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
11	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
12	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
13	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
14	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
15	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
16	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
17	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
18	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
19	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
20	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
21	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
22	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
23	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
24	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
25	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
26	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
27	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
28	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
29	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
30	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
31	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
32	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
33	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
34	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
35	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
36	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
37	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
38	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
39	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
40	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
41	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
42	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
43	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
44	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
45	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
46	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
47	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
48	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
49	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
50	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
51	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
52	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
53	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
54	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
55	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
56	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
57	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
58	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
59	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
60	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
61	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
62	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
63	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
64	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
65	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
66	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
67	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
68	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
69	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
70	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
71	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
72	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
73	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
74	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
75	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
76	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
77	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
78	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
79	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
80	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
81	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
82	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
83	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
84	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
85	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
86	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
87	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
88	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
89	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
90	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
91	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
92	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
93	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
94	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
95	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
96	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
97	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
98	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
99	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000
100	171.144	1.000	151.000	.000	.000	.000	.000

LOS RESULTADOS PARCIALES PARA LA ITERACION 10

PTO	TEM(N)	BUTAN	PENTA	HEXAN
1	171.144	.3431	.0598	.0000
2	171.144	.3653	.1145	.0000
3	171.144	.3191	.1384	.0015
4	171.144	.7157	.2768	.0076

ESCRIBE EL TITULO
 CHEJ
 NUMERO DE COMPONENTES
 NUMERO DE PLATOS
 NUMERO DE ITERACIONES
 ESCRIBA EL VALOR DE LA FRECUENCIA DE ITERACION
 CHEJ
 NOMBRE DEL COMPONENTE 1
 NOMBRE DEL COMPONENTE 4
 NOMBRE DEL COMPONENTE 3
 NOMBRE DEL COMPONENTE 5
 NOMBRE DEL COMPONENTE 5
 VALOR DEL DESTILADO LIQUIDO
 VALOR DEL RESIDUO LIQUIDO
 VALOR DEL DESTILADO DEL VAPOR
 VALOR DEL RESIDUO DEL VAPOR
 REFLUJO EXTERNO
 GRADO DE EXACTITUD

CHEJ
 ESCRIBA EL NUMERO TOTAL DE ALIMENTACIONES
 ESCRIBA EL NUMERO DEL PLATO DE ALIMENTACION
 Y SUS FLUJOS DE ALIMENTACION LIQUIDA Y VAPOR
 Y LA TEMPERATURA DE ALIMENTACION
 ESCRIBA LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION
 PARA EL PLATO 9 DEL COMPONENTE ETANO
 ESCRIBA LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION
 PARA EL PLATO 8 DEL COMPONENTE PROPANIO
 ESCRIBA LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION
 PARA EL PLATO 8 DEL COMPONENTE BUTANO
 ESCRIBA LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION
 PARA EL PLATO 9 DEL COMPONENTE PENTANO
 ESCRIBA LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION
 PARA EL PLATO 8 DEL COMPONENTE HEXANO

CHEJ
 ESCRIBA EL NUMERO DEL PLATO DE ALIMENTACION
 Y SUS FLUJOS DE ALIMENTACION LIQUIDA Y VAPOR
 Y LA TEMPERATURA DE ALIMENTACION
 ESCRIBA LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION
 PARA EL PLATO 9 DEL COMPONENTE ETANO
 ESCRIBA LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION
 PARA EL PLATO 9 DEL COMPONENTE PROPANIO
 ESCRIBA LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION
 PARA EL PLATO 3 DEL COMPONENTE BUTANO
 ESCRIBA LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION
 PARA EL PLATO 9 DEL COMPONENTE PENTANO
 ESCRIBA LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION
 PARA EL PLATO 9 DEL COMPONENTE HEXANO

CHEJ
 ESCRIBA EL NUMERO TOTAL DE SALIDAS
 ESCRIBA EL NUMERO DEL PLATO DE EXTRACCION
 Y SUS FLUJOS DE EXTRACCION LIQUIDA Y VAPOR
 ESCRIBA EL NUMERO DEL PLATO DE EXTRACCION
 Y SUS FLUJOS DE EXTRACCION LIQUIDA Y VAPOR
 ESCRIBA EL VALOR DE LA PRESION

CHEJ
 DE LOS VALORES DE LOS COEFICIENTES PARA LA
 CONSTANTE DE EQUILIBRIO: A, B, C y D PARA EL ETANO
 DE LOS VALORES DE LOS COEFICIENTES PARA LA
 CONSTANTE DE EQUILIBRIO: A, B, C y D PARA EL PROPANIO
 DE LOS VALORES DE LOS COEFICIENTES PARA LA
 CONSTANTE DE EQUILIBRIO: A, B, C y D PARA EL BUTANO
 DE LOS VALORES DE LOS COEFICIENTES PARA LA
 CONSTANTE DE EQUILIBRIO: A, B, C y D PARA EL PENTANO
 DE LOS VALORES DE LOS COEFICIENTES PARA LA
 CONSTANTE DE EQUILIBRIO: A, B, C y D PARA EL HEXANO

CHEJ

*** SIMULACION DE UNA COLUMNA DE DESTILACION ***

DATOS DE LA COLUMNA

NUMERO DE COMPONENTES	=	5
NUMERO DE PLATOS TEORICOS	=	16
NUMERO TOTAL DE ALIMENTACIONES	=	2
NUMERO TOTAL DE EXTRACCIONES	=	2

PARAMETROS DE CONTROL DE LA COLUMNA

NUMERO MAXIMO DE ITERACIONES = 20
 FRECUENCIA DE IMPRESION DE RESULTADOS = 10
 SE UTILIZARAN CONSTANTES POLINOMIALES =
 TOLERANCIA DE CONVERGENCIA = .1000E-04

CARACTERISTICAS DEL PROBLEMA

COMUNICACION ESTILADO LIQUIDO = .2000E+02
 COMUNICACION ESTILADO VAPOR = .0000E+00
 COMUNICACION DE REFLUJO = .7500E+01
 COMUNICACION LIQUIDO = .2000E+02
 COMUNICACION VAPOR = .0000E+00
 PRESION DE LA COLUMNA = .1000E+03

DATOS SOBRE LA ALIMENTACION DE LA COLUMNA

PLATO DE ALIMENTACION = 0
 FLUJO DE ALIMENTACION LIQUIDA = .5000E+02
 FLUJO DE ALIMENTACION VAPOR = .0000E+00
 TEMPERATURA DE ALIMENTACION = .2111E+03

COMPOSICIONES EN LA ALIMENTACION

COMPONENTE 1 = .0300
 COMPONENTE 2 = .2000
 COMPONENTE 3 = .3700
 COMPONENTE 4 = .3500
 COMPONENTE 5 = .0500

PLATO DE ALIMENTACION = 0
 FLUJO DE ALIMENTACION LIQUIDA = .5000E+02
 FLUJO DE ALIMENTACION VAPOR = .0000E+00
 TEMPERATURA DE ALIMENTACION = .2111E+03

COMPOSICIONES EN LA ALIMENTACION

COMPONENTE 1 = .0300
 COMPONENTE 2 = .2000
 COMPONENTE 3 = .3700
 COMPONENTE 4 = .3500
 COMPONENTE 5 = .0500

DATOS SOBRE LAS CORRIENTES DE EXTRACCION

PLATO DE EXTRACCION = 4
 FLUJO DE EXTRACCION LIQUIDA = .3700E+02
 FLUJO DE EXTRACCION VAPOR = .0000E+00

DATOS SOBRE LAS CORRIENTES DE EXTRACCION

PLATO DE EXTRACCION	=	14
FLUJO DE EXTRACCION LIQUIDA	=	.3000E+01
FLUJO DE EXTRACCION VAPOR	=	.0000E+00

ESTIMACION INICIAL DE TEMPERATURAS

LA ESTIMACION DE TEMPERATURAS ES EN FUNCION DE LA TEMPERATURA DE ALIMENTACION

SE UTILIZARAN ECUACIONES DE TIPO POLINOMIAL

1	.1665E+01	-.1500E-03	.7330E-04	-.3000E-07
2	.8400E+00	-.4660E-02	.4940E-04	-.3033E-07
3	-.1770E+00	.4950E-02	-.4150E-05	.2200E-07
4	-.8750E-01	-.1770E-02	.2031E-06	-.1310E-07
5	-.9300E-01	-.1539E-02	.1037E-04	-.1590E-08

LOS NOMBRES DE LOS COMPONENTES SON

1	ETANO
2	PROPANIO
3	BUTANO
4	PENTANO
5	HEXANO

PERFIL DE FLUJOS DE LIQUIDO Y VAPOR EN LA COLUMNA

PLATO	TEM(L)	L(N)	V(N)	FL(N)	FV(N)	SL(N)	SV(N)
1	144.4	1000.000	170.000	.000	.000	20.000	.000
2	144.4	1000.000	170.000	.000	.000	.000	.000
3	144.4	1000.000	170.000	.000	.000	.000	.000
4	144.4	1000.000	170.000	.000	.000	37.000	.000
5	144.4	1000.000	170.000	.000	.000	.000	.000
6	144.4	1000.000	170.000	.000	.000	.000	.000
7	144.4	1000.000	170.000	.000	.000	.000	.000
8	144.4	1000.000	170.000	.000	.000	.000	.000
9	144.4	1000.000	170.000	.000	.000	.000	.000
10	144.4	1000.000	170.000	.000	.000	.000	.000
11	144.4	1000.000	170.000	.000	.000	.000	.000
12	144.4	1000.000	170.000	.000	.000	.000	.000
13	144.4	1000.000	170.000	.000	.000	.000	.000
14	144.4	1000.000	170.000	.000	.000	.000	.000
15	144.4	1000.000	170.000	.000	.000	3.000	.000
16	144.4	1000.000	170.000	.000	.000	.000	.000
17	144.4	1000.000	170.000	.000	.000	90.000	.000

LOS RESULTADOS PARCIALES PARA LA ITERACION 10

PTO	T(N)	ETANO	PROP	BUTAN	PENTA	HEXAN
1	144.4	.1400	.5958	.2589	.0013	.0000
2	144.4	.0436	.4998	.4512	.0066	.0000
3	144.4	.0145	.3594	.6077	.0184	.0000
4	144.4	.0079	.2418	.7067	.0447	.0000
5	144.4	.0050	.1688	.7337	.0955	.0000
6	144.4	.0040	.1214	.7116	.1620	.0004
7	144.4	.0032	.1010	.6569	.2403	.0036
8	144.4	.0033	.0878	.5699	.3180	.0205
9	144.4	.0033	.0638	.5411	.3635	.0294
10	144.4	.0033	.0332	.5287	.4063	.0313
11	144.4	.0001	.0165	.4922	.4575	.0337
12	144.4	.0000	.0079	.4373	.5179	.0370
13	144.4	.0000	.0036	.3694	.5850	.0420
14	144.4	.0000	.0016	.2947	.6527	.0510

ESCRIBE EL TITULO
 CHEJ
 NUMERO DE COMPONENTES
 NUMERO DE PLATOS
 NUMERO DE ITERACIONES
 ESCRIBA EL VALOR DE LA FRECUENCIA DE ITERACION
 CHEJ
 NOMBRE DEL COMPONENTE 1
 NOMBRE DEL COMPONENTE 2
 NOMBRE DEL COMPONENTE 3
 NOMBRE DEL COMPONENTE 4
 NOMBRE DEL COMPONENTE 5
 VALOR DEL DESTILADO LIQUIDO
 VALOR DEL RESIDUO LIQUIDO
 VALOR DEL DESTILADO DEL VAPOR
 VALOR DEL RESIDUO DEL VAPOR
 REFLUJO EXTERNO
 GRADO DE EXACTITUD

CHEJ
 ESCRIBA EL NUMERO TOTAL DE ALIMENTACIONES
 ESCRIBA EL NUMERO DEL PLATO DE ALIMENTACION
 Y SUS FLUJOS DE ALIMENTACION LIQUIDA Y VAPOR
 Y LA TEMPERATURA DE ALIMENTACION
 ESCRIBA LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION
 PARA EL PLATO 3 DEL COMPONENTE ETANO
 ESCRIBA LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION
 PARA EL PLATO 3 DEL COMPONENTE PROPANO
 ESCRIBA LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION
 PARA EL PLATO 5 DEL COMPONENTE BUTANO
 ESCRIBA LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION
 PARA EL PLATO 8 DEL COMPONENTE PENTANO
 ESCRIBA LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION
 PARA EL PLATO 8 DEL COMPONENTE HEXANO

CHEJ
 ESCRIBA EL NUMERO DEL PLATO DE ALIMENTACION
 Y SUS FLUJOS DE ALIMENTACION LIQUIDA Y VAPOR
 Y LA TEMPERATURA DE ALIMENTACION
 ESCRIBA LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION
 PARA EL PLATO 9 DEL COMPONENTE ETANO
 ESCRIBA LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION
 PARA EL PLATO 9 DEL COMPONENTE PROPANO
 ESCRIBA LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION
 PARA EL PLATO 9 DEL COMPONENTE BUTANO
 ESCRIBA LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION
 PARA EL PLATO 9 DEL COMPONENTE PENTANO
 ESCRIBA LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION
 PARA EL PLATO 9 DEL COMPONENTE HEXANO

CHEJ
 ESCRIBA EL NUMERO TOTAL DE SALIDAS
 ESCRIBA EL NUMERO DEL PLATO DE EXTRACCION
 Y SUS FLUJOS DE EXTRACCION LIQUIDA Y VAPOR
 ESCRIBA EL VALOR DE LA PRESION

CHEJ
 DE LOS VALORES DE LOS COEFICIENTES PARA LA
 CONSTANTE DE EQUILIBRIO: A, B, C y D PARA EL ETANO
 DE LOS VALORES DE LOS COEFICIENTES PARA LA
 CONSTANTE DE EQUILIBRIO: A, B, C y D PARA EL PROPANO
 DE LOS VALORES DE LOS COEFICIENTES PARA LA
 CONSTANTE DE EQUILIBRIO: A, B, C y D PARA EL BUTANO
 DE LOS VALORES DE LOS COEFICIENTES PARA LA
 CONSTANTE DE EQUILIBRIO: A, B, C y D PARA EL PENTANO
 DE LOS VALORES DE LOS COEFICIENTES PARA LA
 CONSTANTE DE EQUILIBRIO: A, B, C y D PARA EL HEXANO

*** SIMULACION DE UNA COLUMNA DE DESTILACION ***

DATOS DE LA COLUMNA

NUMERO DE COMPONENTES	=	5
NUMERO DE PLATOS TEORICOS	=	16
NUMERO TOTAL DE ALIMENTACIONES	=	10
NUMERO TOTAL DE EXTRACCIONES	=	5

PARAMETROS DE CONTROL DE LA COLUMNA

NUMERO MAXIMO DE ITERACIONES = . 15
 FRECUENCIA DE IMPRESION DE RESULTADOS = 5
 SE UTILIZARAN CONSTANTES POLINOMIALES = .1000E-05
 TOLERANCIA DE CONVERGENCIA = .1000E-05

CARACTERISTICAS DEL PROBLEMA

DESTILADO LIQUIDO = .5000E+02
 DESTILADO VAPOR = .0000E+00
 RELACION DE REFLUJO = .5000E+01
 RESIDUO LIQUIDO = .5000E+02
 RESIDUO VAPOR = .0000E+00
 PRESION DE LA COLUMNA = .1000E+03

DATOS SOBRE LA ALIMENTACION DE LA COLUMNA

PLATO DE ALIMENTACION = 8
 FLUJO DE ALIMENTACION LIQUIDA = .5000E+02
 FLUJO DE ALIMENTACION VAPOR = .0000E+00
 TEMPERATURA DE ALIMENTACION = .2111E+03

COMPOSICIONES EN LA ALIMENTACION

COMPONENTE 1 = .0300
 COMPONENTE 2 = .2000
 COMPONENTE 3 = .3700
 COMPONENTE 4 = .3500
 COMPONENTE 5 = .0500

PLATO DE ALIMENTACION = 9
 FLUJO DE ALIMENTACION LIQUIDA = .5000E+02
 FLUJO DE ALIMENTACION VAPOR = .0000E+00
 TEMPERATURA DE ALIMENTACION = .2168E+03

COMPOSICIONES EN LA ALIMENTACION

COMPONENTE 1 = .0400
 COMPONENTE 2 = .2100
 COMPONENTE 3 = .3800
 COMPONENTE 4 = .3500
 COMPONENTE 5 = .0600

DATOS SOBRE LAS CORRIENTES DE EXTRACCION.

PLATO DE EXTRACCION = 0
 FLUJO DE EXTRACCION LIQUIDA = .0000E+00
 FLUJO DE EXTRACCION VAPOR = .0000E+00

C A P I T U L O V I I I

APENDICE

SOLO LECTURA

```

00001000 *CONTROL USLINIT,INIT
00002000 PROGRAM TORRE
00003000 DIMENSION K(50),SAK(20),SB(20),SC(20),SD(20)
00004000 DIMENSION NAMEX(20)
00005000 DIMENSION AC(20),B(20),C(20),D(20)
00006000 DIMENSION SUMX(20),KI(50,20),EQUI(20),EQD(20)
00007000 DIMENSION FL(50),FV(50),SL(50),SV(50)
00008000 DIMENSION K(50,20),K(50,20)
00009000 DIMENSION Z(50,20),L(50),V(50)
00010000 DIMENSION NUMBER(20)
00011000 DIMENSION NUMBER(20)
00012000 REAL K,L,V,FL,FV,SL,SV,Z,KI,DKI
00013000
00014000
00015000
00016000
00017000
00018000
00019000
00020000
00021000
00022000
00023000
00024000
00025000
00026000
00027000
00028000
00029000
00030000
00031000

```

PROGRAMA PRINCIPAL PARA LA SIMULACION DE UNA COLUMNA DE DESTILACION DE MULTICOMPONENTES. ESTE PROGRAMA DE COMPUTADORA UTILIZARA SUBROUTINAS PARA LECTURA, ESCRITURA, CORROBORACION DE DATOS, ALGORITMO DE THOMAS NEWTON-RAPHSON Y CORROBORACION DE RESULTADOS. CALCULARA EL PERFIL DE COMPOSICIONES Y DE TEMPERATURAS EN CADA PLATO. PUEDEN UTILIZARSE UNA COLUMNA DE DESTILACION QUE UTILIZE HASTA 50 PLATOS Y 20 COMPONENTES COMO MAXIMO. ESTE PROGRAMA CONSIDERA EL CONDENSADOR Y EL REHEVEDOR TAMBIEN COMO PLATOS, ASIGNANDOLE AL CONDENSADOR EL NUMERO 1 Y AL REHEVEDOR SE LE ASIGNARA EL PLATO NPLAT.

ESTE PROGRAMA UTILIZA METODOS ITERATIVOS PARA EL CALCULO DE TEMPERATURAS.

CALL LECTURA

15 CALL SINUL

STOP

END

PROGRAM UNIT TORRE COMPILED

```

00032000
00033000
00034000
00035000
00036000
00037000
00038000
00039000
00040000
00041000
00042000
00043000
00044000
00045000
00046000
00047000
00048000
00049000
00050000
00051000
00052000
00053000
00054000
00055000
00056000
00057000
00058000
00059000
00060000
00061000
00062000
00063000
00064000
00065000
00066000
00067000
00068000
00069000
00070000
00071000
00072000
00073000
00074000
00075000
00076000
00077000
00078000
00079000
00080000
00081000
00082000
00083000
00084000
00085000
00086000
00087000
00088000

```

C000

C0000

```

SUBROUTINE LECTURA
COMMON NAMEC(20)
COMMON /CERO/RV,RL,NTOTS,NA,NTOTA,NS,NPLAT,NCOMP,REF,DL,DV
COMMON /UNO/L(50),V(50),FL(50),FV(50),SL(50),SV(50)
COMMON /DOS/T(50),SA(20),SB(20),SC(20),SD(20)
COMMON /3/50,20)
COMMON /CUATRO/ITPRT,NUMIT,ERROR,P
COMMON NUMBER2(20)
COMMON NUMBER(20)
REAL K,L,V,FL,FV,SL,SV,Z,KI,DKI
ESTA SUBROUTINA SIRVE PARA PROPORCIONAR LAS CONDICIONES A
LAS QUE OPERARA LA COLUMNA DE DESTILACION Y TAMBIEN ESTAN CONTEM-
PLADOS EL GRADO DE EXACTITUD, NUMERO DE ITERACIONES Y -
VALOR DE FRECUENCIA DE ITERACION QUE SE DESEA EN EL PRO-
GRAMA
CHARACTER NAME*10,TITULO*50
DISPLAY " ESCRIBE EL TITULO "
CALL LPAN
READ(5,*)TITULO
DISPLAY "NUMERO DE COMPONENTES"
READ(5,*)NCOMP
DISPLAY "NUMERO DE PLATOS "
READ(5,*)NPLAT
DISPLAY "NUMERO DE ITERACIONES "
READ(5,*)NUMIT
DISPLAY "ESCRIBA EL VALOR DE LA FRECUENCIA DE ITERACION "
READ(5,*)ITPRT
CALL LPAN
DO 5 N=1,NCOMP
DISPLAY "NOMBRE DEL COMPONENTE ",N
READ(5,*)NAME(N)
5 CONTINUE
DISPLAY "VALOR DEL DESTILADO LIQUIDO "
READ(5,*)DL
DISPLAY "VALOR DEL RESIDUO LIQUIDO "
READ(5,*)RL
DISPLAY "VALOR DEL DESTILADO DEL VAPOR "
READ(5,*)DV
DISPLAY "VALOR DEL RESIDUO DEL VAPOR "
READ(5,*)RV
DISPLAY " REFLUJO EXTERNO "
READ(5,*)REF
DISPLAY " GRADO DE EXACTITUD"
READ(5,*)ERROR
CALL LPAN
DISPLAY " ESCRIBA EL NUMERO TOTAL DE ALIMENTACIONES"
READ(5,*)NTOTA
DO 10 N=1,NTOTA
DISPLAY "ESCRIBA EL NUMERO DEL PLATO DE ALIMENTACION"
DISPLAY "Y SUS FLUJOS DE ALIMENTACION LIQUIDA Y VAPOR"
DISPLAY " Y LA TEMPERATURA DE ALIMENTACION"
READ(5,*)NA,(L(NA),FV(NA),T(NA))
NUMBER(N)=NA
DO 20 I=1,NCOMP

```

PAGE 0003 LECTURA

```
00089000      DISPLAY"ESCRIBA LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION"  
00090000      DISPLAY"PARA EL PLATO",NA," DEL COMPONENTE",NAME(I)  
00091000      READ(S,*)Z<NA,I)  
00092000      20  CONTINUE  
00093000      CALL LPAN  
00094000      10  CONTINUE  
00095000      DISPLAY"ESCRIBA EL NUMERO TOTAL DE SALIDAS"  
00096000      READ(S,*)NTOTS  
00097000      DO I N=1,NTOTS  
00098000      DISPLAY"ESCRIBA EL NUMERO DEL PLATO DE EXTRACCION"  
00099000      DISPLAY"Y SUS FLUJOS DE EXTRACCION LIQUIDA Y VAPOR"  
00100000      READ(S,*)NS,(SL<NS),SV<NS)  
00101000      NUMBER2<N)=NS  
00102000      CONTINUE  
00103000      DISPLAY" ESCRIBA EL VALOR DE LA PRESION"  
00104000      READ(S,*)P  
00105000      CALL LPAN  
00106000      DO 30 N=1,NCOMP  
00107000      DISPLAY" DE LOS VALORES DE LOS COEFICIENTES PARA LA"  
00108000      DISPLAY" CONSTANTE DE EQUILIBRIO: A, B, C y D PARA EL",NAME<N)  
00109000      READ(S,*)SA<N),SB<N),SC<N),SD<N)  
00110000      30  CONTINUE  
00111000      CALL LPAN  
00112000      RETURN  
00113000      END
```

PROGRAM UNIT LECTURA COMPILED

```

00114000 C
00115000 C
00116000 C
00117000 C
00118000 C
00119000 C
00120000 C
00121000 C
00122000 C
00123000 C
00124000 C
00125000 C
00126000 C
00127000 C
00128000 C
00129000 C
00130000 C
00131000 C
00132000 C
00133000 C
00134000 C
00135000 C
00136000 C
00137000 C
00138000 C
00139000 C
00140000 C
00141000 C
00142000 C
00143000 C
00144000 C
00145000 C
00146000 C
00147000 C
00148000 C
00149000 C
00150000 C
00151000 C
00152000 C
00153000 C
00154000 C
00155000 C
00156000 C
00157000 C
00158000 C
00159000 C
00160000 C
00161000 C
00162000 C
00163000 C
00164000 C
00165000 C
00166000 C
00167000 C
00168000 C
00169000 C
00170000 C

```

EN ESTA SUBROUTINA SE CALCULAN LOS FLUJOS A TRAVES DE LA COLUMNA, ASI COMO LAS CONSTANTES DE EQUILIBRIO QUE SE UTILIZARAN EN LAS ITERACIONES. ASI MISMO TAMBIEN SE HACEN LAS ASIGNACIONES DE LOS COEFICIENTES QUE SE UTILIZAN EN EL ALGORITMO DE THOMAS.

```

SUBROUTINE SIMUL
D/MENSION AK(20),B(20),C(20),D(20),XA(50)
COMMON Z(50,20)
COMMON /TRES/X(50,20),K(50,20)
COMMON /CERO/RV,RL,NTOTS,NA,NTOTA,NS,NPLAT,NCOMP,REF,DL,DV
COMMON /UNO/L(50),Y(50),FL(50),FV(50),SL(50),SV(50)
COMMON /DOS/T(50),SA(20),SB(20),SC(20),SD(20)
COMMON /CUATRO/ITPPT,NUMIT,ERROR,P
REAL K,L,V,FL,FV,SL,SV,Z,KI,DKI
EN ESTA ETAPA SE CALCULA UNA TEMPERATURA EN FUNCION DE LAS TEMPERATURAS DE ALIMENTACION EL MECANISMO ES SACAR UNA TEMPERATURA PROMEDIO PARA EL INICIO DEL CALCULO.
IF(NTOTA.EQ.1)GO TO 2
SUMTA=0.0
DO 30 I=1,NTOTA
SUMTA=SUMTA+T(NA)
30 CONTINUE
T(NA)=SUMTA/NTOTA
2 CONTINUE
T(1)=T(NA)*.8
T(NPLAT)=T(NA)*1.2
EN ESTA PARTE DE LA SUBROUTINA SE EFECTUA EL CALCULO DEL PERFIL DE TEMPERATURAS EN TODA LA COLUMNA.
DELTA=(T(NPLAT)-T(1))/NPLAT-1
DO 55 I=2,NPLAT-1
T(I)=T(I-1)+DELTA
55 CONTINUE
COMIENZA EL CALCULO DE LOS FLUJOS LIQUIDOS Y VAPORES EN LA COLUMNA.
V(1)=0.0
LX(1)=REF*(DL+DV)
SV(1)=DV
SL(1)=DL
Y(2)=SL(1)+SV(1)-FL(1)-FV(1)+REF*(DL+DV)
DO 800 I=2,NPLAT
N=I+1
M=N+1
LC(N)=L(N-1)+FL(N)-SL(N)
VM(N)=V(N)-FV(N)+SV(N)
800 CONTINUE
SUMW=0.0
DO 1000 I=1,NPLAT
SUMW=SUMW+(FL(I)+FV(I))
1000 CONTINUE
SLL=0.0
SLV=0.0
DO 950 I=2,NPLAT
SLW=SLV+SV(I)
SLL=SLL+SL(I)

```

PAGE 0005 SIMUL

```
00171000 950 CONTINUE
00172000 L(NPLAT)=0.0
00173000 W=SUMU-SLL-SLV-(DL+DW)
00174000 FRL=RL/(RL+RV)
00175000 FRV=1-FRL
00176000 SL(NPLAT)=W*FRL
00177000 SV(NPLAT)=W*FRV
00178000 SL(NPLAT)=RL
00179000 SV(NPLAT)=RV
00180000 CALL ESC1
00181000 C ENPIEZA EL CALCULO DE LAS CONSTANTES DE EQUILIBRIO PARA
00182000 C TODOS LOS COMPONENTES A TRAVES DE LA COLUMNA.
00183000 NUMITT=0.0
00184000 1001 DO 6000 NUMPE=1,ITPRT
00185000 DO 1003 J=1,NPLAT
00186000 DO 1004 I=1,NCOMP
00187000 TT=0
00188000 TT2=TT*TT
00189000 TT3=TT2*TT
00190000 K(J,I)=SA(I)+SB(I)*TT+SC(I)+TT2+SD(I)*TT3
00191000 1004 CONTINUE
00192000 1003 CONTINUE
00193000 C SE EMPIEZAN A HACER LAS ASIGNACIONES QUE SE UTILIZARAN EN
00194000 C EL ALGORITMO DE THOMAS.
00195000 DO 1005 I=1,NCOMP
00196000 K(NPLAT)=0.0
00197000 B(NPLAT)=-V(NPLAT)+SV(NPLAT)*K(NPLAT,I)-(SL(NPLAT)+L(NPLAT))
00198000 C(NPLAT)=L(NPLAT)
00199000 D(NPLAT)=-CFL(NPLAT)+FV(NPLAT)*K(NPLAT,I)*Z(NPLAT,I)
00200000 DO 1006 M=2,NPLAT-1
00201000 J=NPLAT-M+1
00202000 AK(J)=V(J+1)*K(J+1,I)
00203000 BK(J)=-CFL(J)+SL(J)+CFL(J)+SV(J)*K(J,I)
00204000 DC(J)=L(J)
00205000 DK(J)=-FV(J)*K(J,I)+FL(J)*Z(J,I+1)
00206000 1006 CONTINUE
00207000 AK(1)=V(2)*K(2,I)
00208000 BK(1)=-CFL(1)+SL(1)+CFL(1)+SV(1)*K(1,I)
00209000 DC(1)=0.0
00210000 DK(1)=-FV(1)+FV(1)*K(1,I)*Z(1,I)
00211000 CALL THOMAS(NPLAT,A,B,C,D,KA)
00212000 DO 125 J=1,NPLAT
00213000 IF(XAK(J).LT.0.0)XAK(J)=.00001
00214000 X(J,I)=XAK(J)
00215000 125 CONTINUE
00216000 1005 CONTINUE
00217000 1005 CONTINUE
00218000 CALL ITE
00219000 NUMITT=NUMITT+1
00220000 IF(NUMPE.EQ.ITPRT)CEDI=1
00221000 IF(CEDI.NE.1)GO TO 5000
00222000 WRITE(6,213)NUMITT
00223000 213 FORMAT(///,10X,"LOS RESULTADOS PARCIALES PARA LA ITERACION ",12)
00224000 CALL ESC2
00225000 5000 CEDI=2
00226000 6000 CONTINUE
00227000 IF(NUMITT.EQ.NUMIT)GO TO 1002
00227000 GO TO 1001
```

PAGE 0006 SIMUL

00228000 1002 END

PROGRAM UNIT SIMUL COMPILED

```

00230000 C
00231000 C
00232000 C
00233000 C
00234000 C
00235000 C
00236000 C
00237000 C
00238000 C
00239000 C
00240000 C
00241000 C
00242000 C
00243000 C
00244000 C
00245000 C
00246000 C
00247000 C
00248000 C
00249000 C
00250000 C
00251000 C
SUBROUTINE THOMAS(NPLAT,AA,BB,CC,DD,X)
DIMENSION VT(50),W(50),X(50),AK(50),BK(50),CK(50),DD(50)
LA SUBROUTINA THOMAS NOS AYUDA A LA RESOLUCION DE MATRI-
CES TRIANGONALES, EN LA CUAL EL VECTOR SOLUCION SERAN
LOS VALORES DE LAS COMPOSICIONES, QUE SON LOS RESULTADOS
QUE LA SUBROUTINA NOS ENTREGA AL TERMINAR.
N=NPLAT
VT(N)=CC(NPLAT)/BB(NPLAT)
W(N)=DD(NPLAT)/BB(NPLAT)
DO 10 J=2,N
I=N-J+1
VT(I)=CC(I)/(BB(I)-AA(I)*VT(I+1))
W(I)=(DK(I)-AA(I)*W(I+1))/(BB(I)-AA(I)*VT(I+1))
10 CONTINUE
X(I)=W(I)
DO 15 L=2,N
X(L)=W(L)-VT(L)*X(L-1)
15 CONTINUE
RETURN
END

```

PROGRAM UNIT THOMAS COMPILED

```

00252000 C
00253000 C
00254000 C
00255000 C
00256000 C
00257000 C
00258000 C
00259000 C
00260000 C
00261000 C
00262000 C
00263000 C
SUBROUTINE LPAN
CHARACTER J,E,H
J=2112C
E=233C
H=2119C
WRITE(6,200)E,H,E,J
200 FORMAT(1X,4A1)
RETURN
END

```

PROGRAM UNIT LPAN COMPILED

```

00264000 C
00265000 C
00266000 SUBROUTINE ITE
00267000 DIMENSION SUMX(20),KI(50,20),EQUI(50),EQD(50)
00268000 DIMENSION TNK(50),EGDI(50)
00269000 COMMON /TRES/X(50,20),K(50,20)
00270000 COMMON /CERB/RV,RL,NTOTS,NA,NTOTA,NS,NPLAT,NCOMP,REF,DL,DV
00271000 COMMON /CUATRO/ITPRT,NUMIT,ERROR,P
00272000 COMMON /DOS/T(50),SA(20),SB(20),SC(20),SD(20)
00273000 REAL K,L,V,FL,FV,SL,SV,Z,KI
00274000 DO 400 I=1,NPLAT
00275000 SUMX(I)=0
00276000 DO 399 J=1,NCOMP
00277000 SUMX(I)=SUMX(I)+X(I,J)
00278000 399 CONTINUE
00279000 400 CONTINUE
00280000 DO 500 I=1,NPLAT
00281000 DO 501 J=1,NCOMP
00282000 X(I,J)=X(I,J)/SUMX(I)
00283000 501 CONTINUE
00284000 500 CONTINUE
00285000 DO 1013 I=1,NPLAT
00286000 EQUI(I)=0
00287000 EQD(I)=0
00288000 EGDI(I)=0
00289000 DO 1011 J=1,NCOMP
00290000 KI(I,J)=SB(J)+2*SC(J)*T(I)+3*SD(J)*T(I)**2
00291000 K(I,J)=SA(J)+SB(J)*T(I)+SC(J)*T(I)**2+SD(J)*T(I)**3
00292000 EQUI(J)=EQUI(I)+K(I,J)*X(I,J)
00293000 EGDI(J)=EGDI(I)+KI(I,J)*X(I,J)
00294000 1011 CONTINUE
00295000 1010 CONTINUE
00296000 DO 1012 J=1,NPLAT
00297000 TNK(J)=T(J)-(EQUI(J)-1)/EQD(J)
00298000 1012 CONTINUE
00299000 DO 1014 I=1,NPLAT
00300000 IF(EQUI(I).LT.ERROR)GO TO 2000
00301000 1014 CONTINUE
00302000 2000 DO 200 I=1,NPLAT
00303000 IF(ABS((TNK(I)-T(I))/TNK(I)).LT.0.1)GO TO 1000
00304000 200 CONTINUE
00305000 1000 DO 1013 J=1,NPLAT
00306000 T(J)=TNK(J)
00307000 1013 CONTINUE
00308000 RETURN
00309000 END

```

PROGRAM UNIT ITE COMPILED

00310000
00311000
00312000
00313000
00314000
00315000
00316000
00317000
00318000
00319000
00320000
00321000
00322000
00323000
00324000
00325000
00326000
00327000
00328000
00329000
00330000
00331000
00332000
00333000
00334000
00335000
00336000
00337000
00338000
00339000
00340000
00341000
00342000
00343000
00344000
00345000
00346000
00347000
00348000
00349000
00350000
00351000
00352000
00353000
00354000
00355000
00356000
00357000
00358000
00359000
00360000
00361000
00362000
00363000
00364000
00365000
00366000

CCCC
CCCC
CCCC

```

SUBROUTINE ESC1
DIMENSION NOMB(20)
REAL K,L,V,FL,FV,SL,SV,Z,KI,DKI
CHARACTER NAME*10,NOMB*5
COMMON NAME(20)
COMMON Z(50,20)
COMMON /CERO/RV,RL,NTOTS,NA,NTOTA,NS,HPLAT,NCOMP,REF,DL,DLV
COMMON /UNO/AL(50),V(50),FL(50),FV(50),SL(50),SV(50)
COMMON /DOS/T(50),SA(20),SB(20),SC(20),SD(20)
COMMON CUATRO/ITPRT,NUMIT,ERROR,P
COMMON NUMBER(20)
COMMON NUMBER(20)
SUBROUTINA DE ESCRITURA PRIMERA PARTE

WRITE(6,201) NCOMP
WRITE(6,202) NPLAT,NTOTA,NTOTS
WRITE(6,203) NUMIT,ITPRT
WRITE(6,204) ERROR
WRITE(6,205) DL,DV,REF,RL,RV,P
DO 250 I=1,NTOTA
NA=NUMBER(I)
WRITE(6,206) NA,FL(NA),FV(NA),T(NA)
DO 250 J=1,NCOMP
WRITE(6,207) J,Z(NA,J)
250 CONTINUE
DO 249 N=1,NTOTS
NS=NUMBER(2(N))
WRITE(6,214) NS,SL(NS),SV(NS)
2 9 CONTINUE
WRITE(6,208)
DO 251 N=1,NCOMP
WRITE(6,209) N,SA(N),SB(N),SC(N),SD(N)
251 CONTINUE
WRITE(6,210)
DO 252 N=1,NCOMP
WRITE(6,211) N,NAME(N)
252 CONTINUE
DO 255 N=1,NCOMP
NOMB(N)=NAME(N)
WRITE(6,212)
DO 253 J=1,NPLAT
WRITE(6,213) J,T(J),L(J),V(J),FL(J),FV(J),SL(J),SV(J)
253 CONTINUE
RETURN
201 FORMAT(///,9X,"*** SIMULACION DE UNA COLUMNA DE DESTILACION ***",
*///,5X,"DATOS DE LA COLUMNA",//,10X,"NUMERO DE COMPONENTES",T50,
*///,13)
202 FORMAT(10X,"NUMERO DE PLATOS TEORICOS",T50,"=",13,/,10X,
*"NUMERO TOTAL DE ALIMENTACIONES",T50,"=",13,/,10X,
*"NUMERO TOTAL DE EXTRACCIONES",T50,"=",13)
203 FORMAT(///,5X,"PARAMETROS DE CONTROL DE LA COLUMNA",//,10X,

```

```

00370000    **NUMERO MAXIMO DE ITERACIONES",T50,"=",I4,/,10X.
00371000    **FRECUENCIA DE IMPRESION DE RESULTADOS",T50,"=",I4,/,10X.
00372000    **SE UTILIZARAN CONSTANTES POLINOMIALES")
00373000    204 FORMAT(10X,"TOLERANCIA DE CONVERGENCIA",T50,"=",E10.4,/)
00374000    C **PARAMETRO DE CONVERGENCIA",T50,"=",S4)
00375000    205 FORMAT(//,5X,"CARACTERISTICAS DEL PROBLEMA",//,10X.
00376000    **DESTILADO LIQUIDO",
00377000    **T50,"=",E10.4,/,10X,"DESTILADO VAPOR",T50,"=",E10.4,/,10X.
00378000    **RELACION DE REFLUJO",T50,"=",E10.4,/,10X,"RESIDUO LIQUIDO"
00379000    **T50,"=",E10.4,/,10X,"RESIDUO VAPOR",T50,"=",E10.4,/,
00380000    **10X,"PRESION DE LA COLUMNA",T50,"=",E10.4,/,/,5X.
00381000    **DATOS SOBRE LA ALIMENTACION DE LA COLUMNA")
00382000    206 FORMAT(//,10X,"PLATO DE ALIMENTACION",T50,"=",I2,/,10X.
00383000    **FLUJO DE ALIMENTACION LIQUIDA",T50,"=",E10.4,/,10X.
00384000    **FLUJO DE ALIMENTACION VAPOR",T50,"=",E10.4,/,10X.
00385000    **TEMPERATURA DE ALIMENTACION",T50,"=",E10.4,/,/,5X.
00386000    **COMPOSICIONES EN LA ALIMENTACION")
00387000    207 FORMAT(//,15X,"COMPONENTE",I3,T30,"=",F7.4)
00388000    208 FORMAT(//,5X,"ESTIMACION INICIAL DE TEMPERATURAS",//.
00389000    *5X,"DE LA ESTIMACION DE TEMPERATURAS ES EN FUNCION",//.
00390000    *5X,"DE LA TEMPERATURA DE ALIMENTACION",//.
00391000    *5X,"SE UTILIZARAN ECUACIONES DE TIPO POLINOMIAL",//.
00392000    209 FORMAT(3X,I3,T13,E10.4,T11,E10.4,T13,E10.4,T15,E10.4)
00393000    210 FORMAT(2X,I3,T13,S)
00394000    211 FORMAT(2X,I3,T13,S)
00395000    212 FORMAT(//,5X,"PERFIL DE FLUJOS DE LIQUIDO Y VAPOR EN LA COLUMNA"
00396000    //,"PLATO",I10,"TEM(N)",I22,"L(N)",I32,"V(N)",I41,"FL(N)",
00397000    *T51,"FV(N)",T51,"SL(N)",T71,"SV(N)")
00398000    213 FORMAT(2X,I3,T10,F7.3,T20,F7.3,T30,F7.3,T40,F7.3,T50,F7.3.
00399000    *T60,F7.3,T70,F7.3)
00400000    214 FORMAT(//,10X,"DATOS SOBRE LAS CORRIENTES DE EXTRACCION".
00401000    **10X,"PLATO DE EXTRACCION",T50,"=",I2,/,10X.
00402000    **FLUJO DE EXTRACCION LIQUIDA",T50,"=",E10.4,/,10X.
00403000    **FLUJO DE EXTRACCION VAPOR",T50,"=",E10.4,/,/)
00404000    END

```

PROGRAM UNIT ESC1 COMPILED

PAGE 0012 HEWLETT-PACKARD 32102B 01.11 FORTRAN/3000 MON, JUN 15, 1987, 12:53

```

00402000    C
00403000    SUBROUTINE ESC2
00404000    CHARACTER NAME*10,NOMB*5
00405000    COMMON /CERO/RV,RL,NTOTS,NA,NTOTA,NS,NPLAT,NCOMP,REF,DL,UV
00406000    COMMON /CUATRO/ITPRT,NUMIT,ERROR,P
00407000    DIMENSION NOMB(20)
00408000    COMMON NAME(20)
00409000    COMMON /DOS/T(50),SA(20),SB(20),SC(20),SD(20)
00410000    COMMON /TRES/X(50,20),K(50,20)
00411000    C SUBROUTINA DE ESCRITURA SEGUNDA PARTE
00412000    DO 253 I=1,NCOMP
00413000    253 NOMB(I)=NAME(I)
00414000    WRITE(6,214)(NOMB(I),I=1,NCOMP)
00415000    DO 254 J=1,NPLAT
00416000    WRITE(6,215)J,(X(J,I),I=1,NCOMP)
00417000    254 CONTINUE
00418000    RETURN
00419000    214 FORMAT(//,2X,"PTO ",T(N)",,2X
00420000    *S,1X,S,1X,S,1X,S,1X,S,1X,S,1X
00421000    *S,1X,S,1X,S,1X,S,1X,S,1X,S,1X
00422000    *S,1X,S,1X,S,1X,S,1X,S,1X,S,1X
00423000    *)
00424000    215 FORMAT(1X,I2,1X,F8.2,1X,F5.4,1X,F5.4,1X,F5.4,1X,F5.4,
00425000    *1X,F5.4,1X,F5.4,1X,F5.4,1X,F5.4,1X,F5.4,1X,F5.4,
00426000    *1X,F5.4,1X,F5.4,1X,F5.4,1X,F5.4,1X,F5.4,1X,F5.4,
00427000    *F5.4,1X,F5.4)
00428000    END

```

PROGRAM UNIT ESC2 COMPILED

CAPITULO IX

BIBLIOGRAFIA

1. Wang, J.C., & G.E. Henke
"Triagonal Matrix for Distillation"
Hydrocarbon Processing, Vol. 45 (8), 155 (1966)
2. Naphtali, L.M. & D.G. Sandholm
"Multicomponent Separation Calculation by Linearization"
AIChE J., Vol. 17 (1), 148 (1971)
3. Holland, C.D.
"Multicomponent Distillation"
McGraw Hill, N.Y. 1963.
4. Holland, C.D.
"Fundamentals and Modeling of Separation Process. Absorption, Distillation, Evaporation and Extraction"
Prentice Hall Inc., Englewood Cliffs, N.J. 1975.
5. Holland, C.D. & E. Gallun
"Solve More Distillation Problems"
Hydrocarbon Processing, Vol. 55 (1), 137 (1976).
6. Coldstein, R.P., & R.B. Stanfield
"Flexible Method for the Solution of Distillation Design Problems Using the Newton-Raphson Technique"
Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., Vol. 9 (1), 78 (1970).
7. Tomich, T.F.
"A New Simulation Method for Equilibrium Stage Process"
AIChE J. Vol. 16 (2), 229 (1970).
8. Thiele, E.W. & R.L. Gedes
"Computation of Distillation Apparatus for Hydrocarbon Mixtures"
Ind. Eng. Chem., Vol. 25 (23), 289 (1933).