

Propuesta numérica para el cálculo de columnas complejas en la destilación de multicomponentes

Hermes A. Rangel Jara

Ingeniero Químico, M.Sc. I.Q.

Profesor Asociado, U.N.

Jorge E. Linares Rodríguez

Ingeniero Químico Profesor Asociado, U.N.

En este artículo se propone y desarrolla un método numérico compacto y numéricamente estable para la solución de la distribución de los productos en una destilación de multicomponentes en columnas complejas. El método riguroso desarrollado utiliza el algoritmo de Thomas en la resolución de la matriz tridiagonal - NT - resultante de la linealización de las ecuaciones del balance de materia y un método mejorado de memoria - IMM - para el cálculo del perfil mejorado de temperatura en la columna y que se utiliza como contraste para la convergencia del proceso iterativo. Este se inicializa con un perfil de flujo de vapor y un perfil lineal de temperatura. En la fase inicial se emplea un método mejorado de memoria para la caracterización de las corrientes de alimentación a la columna. Al final se presentan algunas comparaciones que muestran la bondad de las técnicas numéricas propuestas en la formulación del problema. Adicionalmente se determinó un parámetro de relajación que optimiza el proceso iterativo.

Introducción

La solución del modelo matemático originado en una torre de destilación, en un primer intento, fue propuesto por Lewis-Matheson (10) y Thiele-Geddes (16), que implica un método clásico de cálculo etapa a etapa y ecuación a ecuación, dentro de un proceso iterativo para la resolución de separadores sencillos con una alimentación

y dos productos. Holland y sus colaboradores (9) desarrollaron un método theta - **Método θ** - acoplado con el método de Thiele-Geddes, que ha sido utilizado en diferentes versiones con un éxito considerable. Los métodos anteriores son numéricamente inestables y no muy seguros en el cálculo de columnas complejas con múltiples alimentaciones y corrientes laterales.

Paralelamente fueron desarrollados **métodos rigurosos** para la solución del sistema algebraico no lineal del modelo -ecuaciones que interaccionan entre sí fuertemente- y en consecuencia los métodos de resolución se vuelven complejos y tediosos (7), (17). Wang y Henke (17) proponen un método iterativo que utiliza una matriz tridiagonal en la solución de la ecuación linealizada del balance de materia y desarrolla un método de Muller (4) para el cálculo del perfil de temperatura. El balance de materia se soluciona simultáneamente para cada componente y utiliza una técnica gaussiana más eficiente que las técnicas alternativas de inversión de matrices (1), método de relajación (13) y descomposición matricial (6). Friday y Smith (5) hicieron un excelente análisis del problema y su convergencia.

La propuesta numérica y su desarrollo en este trabajo es un procedimiento riguroso con poderosas técnicas numéricas asociadas que pueden ser una eficiente solución numérica al problema planteado. Se utiliza un método mejorado de memoria (14) IMM en la caracterización de las corrientes de alimentación y en el cálculo iterativo del perfil de temperatura en la torre. Emplea un algoritmo de Thomas (3) de elevada eficacia y seguridad en la solución del sistema linealizado del balance de materia de cada componente.

Modelo matemático

La presentación del modelo matemático es similar al propuesto por Wang y Henke (17). En la Figura 1 se muestra una columna que tiene n etapas en equilibrio incluyendo un condensador parcial o total y un rehevador. La numeración de los platos se hace en una forma creciente desde la cima hasta el fondo de la torre. La primera etapa es el condensador y la última corresponde al rehevador.

En cada etapa, excepto en el condensador y en el rehevador, hay flujos constantes F_j de alimento, W_j de vapor, U_j de líquido y de calor Q_j . Para una columna convencional todas las corrientes externas, excepto F_F , Q_D , Q_B , D y B , son nulas.

Cada plato en el modelo de la columna se supone es una etapa en equilibrio y es representada en la Figura 2.

Las ecuaciones MESH

Corresponden a las ecuaciones de balance de materia (M), de equilibrio (E), de sumatoria de fracciones molares (S) y de calor (H). Constituyen cuatro grupos de ecuaciones que deben ser

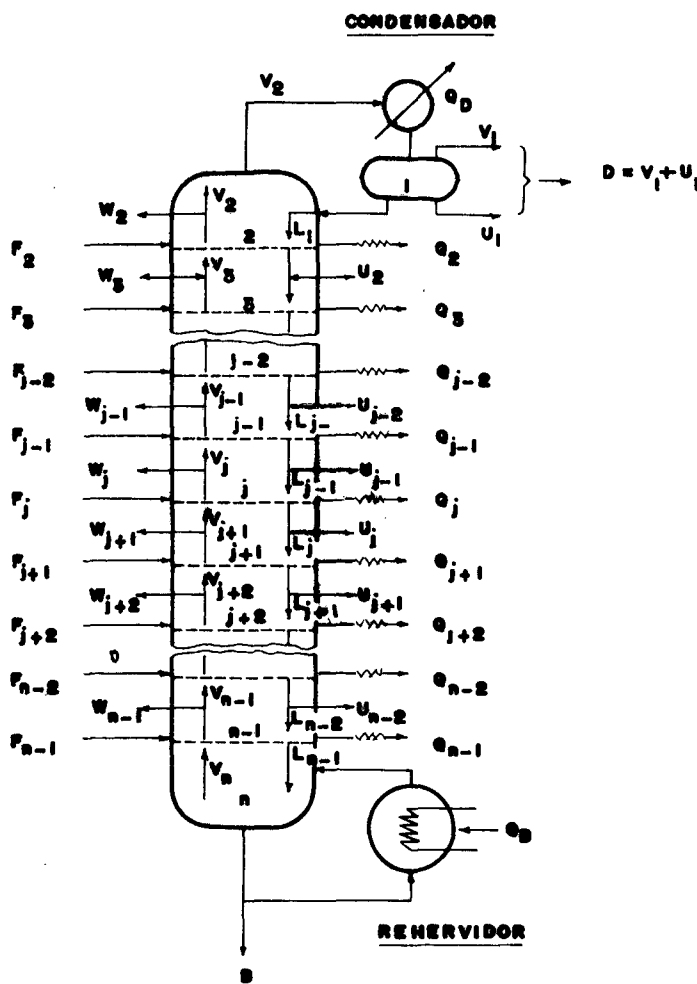


Figura 1. Diagrama de una torre de destilación compleja.

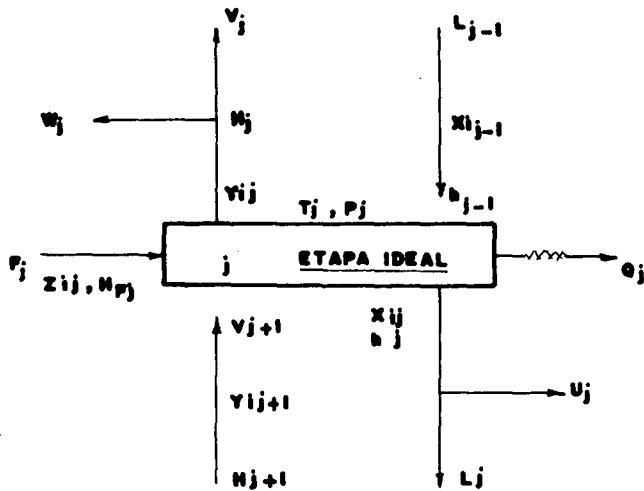


Figura 2. Representación de una etapa ideal

satisfechas en un cálculo riguroso de una etapa en equilibrio, los balances de materia y de calor se escriben alrededor de cada etapa y las variables independientes son las fracciones molares X_{ij} , los flujos de vapor V_j y el perfil de temperatura T_j

Las ecuaciones MESH para el modelo de la columna son:

M - Ecuaciones

$$M_{ij}(x_{ij}, V_j, T_j) = L_{j-1}x_{ij-1} - (V_j + W_j)y_{ij} - (L_j + U_j)x_{ij} + V_{j+1}y_{ij+1} + F_j z_{ij} = 0$$

E - Ecuaciones

$$E_j(x_{ij}, V_j, T_j) = y_{ij} - K_{ij}x_{ij} = 0$$

S - Ecuaciones

$$S_j(x_{ij}, V_j, T_j) = \sum_{i=1}^m y_{ij} - 1 = 0$$

$$S_j(x_{ij}, V_j, T_j) = \sum_{i=1}^m x_{ij} - 1 = 0$$

H - Ecuaciones

$$H_j(x_{ij}, V_j, T_j) = L_{j-1}h_{j-1} - (V_j + W_j)H_j - (L_j + U_j)h_j + V_{j+1}H_{j+1} + F_j H_{Fj} - Q_j = 0 \tag{4}$$

Un balance total de materia desde el condensador hasta la j ésima etapa produce:

$$L_j = V_{j+1} + \sum_{k=2}^j (F_k - W_k - U_k) - D, \tag{5}$$

con $2 \leq j \leq n-1$

donde, $D = V_1 + L_1$

Combinando las ecuaciones 1 y 2 y utilizando la ecuación 5 las M - Ecuaciones se reducen a una forma de matriz tridiagonal.

$$B_1 x_{i1} + C_1 x_{i2} = D_1 \tag{6}$$

$$A_j x_{ij-1} + B_j x_{ij} + C_j x_{ij+1} = D_j, \tag{7}$$

con $2 \leq j \leq n-1$

$$A_n x_{in-1} + B_n x_{in} = D_n \tag{8}$$

o en una notación matricial como,

$$\begin{bmatrix} B_1 & C_1 & & & \\ A_2 & B_2 & C_2 & & \\ & A_j & B_j & C_j & \\ & & & A_{n-1} & B_{n-1} & C_{n-1} \\ & & & & A_n & B_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{i1} \\ x_{i2} \\ x_{ij} \\ x_{in-1} \\ x_{in} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_j \\ D_{n-1} \\ D_n \end{bmatrix}$$

(1) y en una forma más sencilla,

$$[A_{BC}] \{x_{ij}\} = \{D_j\}, \tag{10}$$

con $1 \leq i \leq n-1$

(2) Donde:

$$\begin{aligned} B_1 &= -(V_1 K_{i1} + L_1 + U_1) \\ C_1 &= V_2 K_{i2} \\ D_1 &= 0 \\ \text{con } 2 \leq i \leq n-1 \end{aligned} \tag{11}$$

$$\begin{aligned} A_j &= L_{j-1} = \\ &= V_j + \sum_{k=2}^{j-1} (F_k - W_k - U_k) - D \end{aligned} \tag{12}$$

para lo cual $2 \leq i \leq n-1$

$$B_j = -[(V_j + W_j) K_{ij} + V_{j+1}] - [\sum_{k=2}^j (F_k - W_k - U_k) - D + U_j],$$

en donde $2 \leq i \leq n-1$

$$C_j = V_{j+1} K_{ij+1}$$

$$D_j = -F_j Z_{ij}$$

con $2 \leq i < n-1$

$$A_n = V_n + B$$

$$B_n = -(V_n K_{in} + B)$$

$$D_n = 0$$

El sistema **MESH** para una columna compleja, con las adecuaciones anteriores y algunas manipulaciones algebraicas, puede resumirse así:

$$M_{ij}(x_{ij}, V_j, T_j) = [A_{BC}] \{x_{ij}\} - \{D_j\} = 0$$

$$S_j(x_{ij}, T_j) = \sum_{i=1}^m K_{ij} x_{ij} - 1 = 0,$$

con $1 \leq j \leq n$

$$H_j(x_{ij}, V_j, T_j) = (H_{j+1} - h_j) V_{j+1} - (H_j - h_j) (V_j + W_j) - (h_j - h_{j-1}) L_{j-1} + F_j (H_{Fj} - h_j) - Q_j = 0,$$

$1 \leq j \leq n$

Es un sistema algebraico consistente de $n(m + 2)$ ecuaciones no lineales y $n(m + 2)$ variables independientes. El problema es encontrar el conjunto de valores x_{ij} , V_j y T_j que satisfagan este sistema no lineal. Una solución simultánea es casi imposible y es por esta razón que la solución compromete un proceso iterativo.

Proceso iterativo

Si se especifican las características de todas las corrientes de alimentación y las cantidades de todos los productos, F_j , Z_j , W_j , U_j , D y B son constantes. En el proceso iterativo es necesario suponer un perfil de V , y un perfil de T , y de esta manera los valores de $[A_{BC}]$ y $\{D\}$ quedan especificados. Al proceder en esta forma las M

ecuaciones es un sistema lineal y dada la característica tridiagonal de la matriz pueden obtenerse los valores de x_j , mediante el algoritmo de Thomas (3).

Resumiendo, el algoritmo completo para la resolución de un sistema de ecuaciones tridiagonal es

$$x_{in} = q_n$$

$$x_{ij} = q_j - p_j x_{ij+1},$$

$j = n-1, n-2, \dots, 1.$

en el que los valores p y q se determinan mediante las siguientes fórmulas de recurrencia

$$p_1 = C_1 / B_1$$

$$q_1 = D_1 / B_1$$

$$p_j = C_j / (B_j - A_j p_{j-1}),$$

con $j = 2, 3, \dots, n-1$

$$q_j = (D_j - A_j q_{j-1}) / (B_j - A_j p_{j-1}),$$

con $j = 2, 3, \dots, n$

Con los valores de x , obtenidos mediante el procedimiento anterior se hace que satisfagan la S -Ecuaciones. Para el cálculo de la temperatura de burbuja se utiliza un método mejorado de memoria -IMM- (14), (15). Los coeficientes de distribución se expresan, en función de T_j , de la forma

$$K_{ij} = a_{1i} + a_{2i} T_j + a_{3i} T_j^2 = a_{4i} T_j^3,$$

$1 \leq i \leq m$

En el artículo se presenta y desarrolla un Método Mejorado de Memoria -IMM- que trabaja con una interpolación inversa basada en fracciones continuas. Estas técnicas de interpolación han sido propuestas en informaciones recientes [11], [14]. La técnica de fracciones parciales continuas para representar una ecuación no lineal reduce el número de operaciones matemáticas, cuando se compara con métodos tradicionales, y adicionalmente la representación en fracciones permite una fácil adaptación algorítmica muy útil para ser implementada a nivel de computación (12).

Para un estudio detallado de la fundamentación y desarrollo del método mejorado de memoria se remite el lector a (8), (14), (15). Aquí se presenta un algoritmo muy resumido y con la nomenclatura compatible con el programa de computación elaborado.

Si cualquier ecuación S, se reemplaza por la función no lineal yy_j , resulta el siguiente algoritmo.

Algoritmo (IMM)

1. Seleccionar dos valores iniciales, tt_0 y tt_1 .
Evaluar yy_0 y yy_1 .

$$aa_0 = tt_0$$

$$aa_1 = (yy_1 - yy_0) / (tt_1 - tt_0)$$

$$tt_2 = aa_0 - yy_0 / aa_1$$

2. Calcular tt_2 , así:
3. $mm = 2$ y evaluar yy_2
4. Calcular tt_{mm+1} utilizando las siguientes ecuaciones de recurrencia:

$$bb_0 = tt_{mm}$$

$$bb_i = (yy_{mm} - yy_{i-1}) / (bb_{i-1} - aa_{i-1}) \quad 4.1$$

$$(i=1, 2, 3, \dots, mm-1)$$

$$\phi_{mm} = aa_{mm} = (yy_{mm} - yy_{mm-1}) / (bb_{mm-1} - aa_{mm-1}) \quad 4.2$$

$$\phi_{i-1} = aa_{i-1} - yy_{i-1} / \phi_i \quad 4.3$$

$$(i = mm, mm-1, mm-2, \dots, 1)$$

$$tt_{mm+1} = \phi_0 \quad 4.4$$

5. Calcular yy_{mm+1}
6. Observar el criterio de convergencia. Si convergencia no es satisfecho, $mm = mm + 1$ y regresar al numeral 4.

Con el nuevo perfil de temperaturas se originan nuevos valores para el perfil V_j , por medio de las H - Ecuaciones. Las entalpías del vapor y del líquido se calculan a partir de,

$$H_j = \sum_{i=1}^m y_{ij} (b_{1i} + b_{2i}T_j + b_{3i}T_j^2 + b_{4i}T_j^3), \quad (22)$$

$$1 \leq i \leq m$$

$$h_j = \sum_{i=1}^m x_{ij} (c_{1i} + c_{2i}T_j + c_{3i}T_j^2 + c_{4i}T_j^3), \quad (23)$$

$$1 \leq i \leq m$$

El criterio inicial de convergencia utilizado fue (17)

$$\sum_{j=1}^m [(T_j)_k - (T_j)_{k-1}]^2 \leq \epsilon_T \quad (24)$$

para $\epsilon = 0.00001n$

Donde k es el número de la iteración y n el número de etapas. Posteriormente se analizará un criterio de convergencia más riguroso presentado en (2). Adicionalmente se estudiará la posibilidad de encontrar un parámetro de relajación para los nuevos valores del perfil V_j , que actúa como una función de peso acelerando la convergencia y evitando que el proceso iterativo oscile.

Resultados y conclusiones

Como casos de aplicación se estudió primero el ejemplo numérico presentado por Amundson y Pontinen (1). De allí se tomaron los valores de las constantes para los coeficientes de distribución y los coeficientes de las expresiones para las entalpías del líquido y del vapor. Este primer ejemplo considera la destilación de un alimento con la composición:

C_2	0.03	C_5	0.35
C_3	0.20	C_6	0.05
C_4	0.37		

La columna tiene 16 etapas, incluyendo el rehevador y un condensador parcial, y opera a una presión de 250 psia.

$$F = 100 \text{ mol/hr}$$

$$D = 22,6 \text{ mol/hr}$$

$$B = 77,4 \text{ mol/hr}$$

El alimento se precalienta hasta una temperatura tal que 16,4 moles son vapor. Se adoptó un reflujo de 154.3 moles, para hacer un análisis comparativo de la propuesta numérica desarrollada en este artículo y la presentada por Wang y Henke (17). Para iniciar el proceso iterativo se supone un perfil lineal de temperatura y un flujo de vapor constante.

Utilizando un mismo criterio de convergencia, ecuación 24, fueron necesarias seis iteraciones, para las dos propuestas. La propuesta (17) utiliza un método de Muller, para caracterizar las corrientes de entrada y el cálculo del nuevo perfil de temperatura, y el aquí propuesto emplea un IMM. El número de iteraciones para el lazo externo es igual; sin embargo, el número de iteraciones en el lazo interno se reduce sustancialmente, lo mismo que el tiempo de computación.

El criterio de convergencia utilizado anteriormente no es muy estricto. Angel y Kehat, en un trabajo reciente (2), recomiendan criterios más

drásticos. Se estudió la búsqueda de un parámetro de relajación (3) con el fin de optimizar el proceso iterativo, pues se vuelve lento debido al gran número de iteraciones requeridas para satisfacer el criterio de convergencia.

El parámetro de relajación actúa en la recuperación de nuevos valores para el flujo de vapor, así

$$V_j^{k+1} = V_j^k + w [V_j^{Ecuac.18} - V_j^k] \quad (25)$$

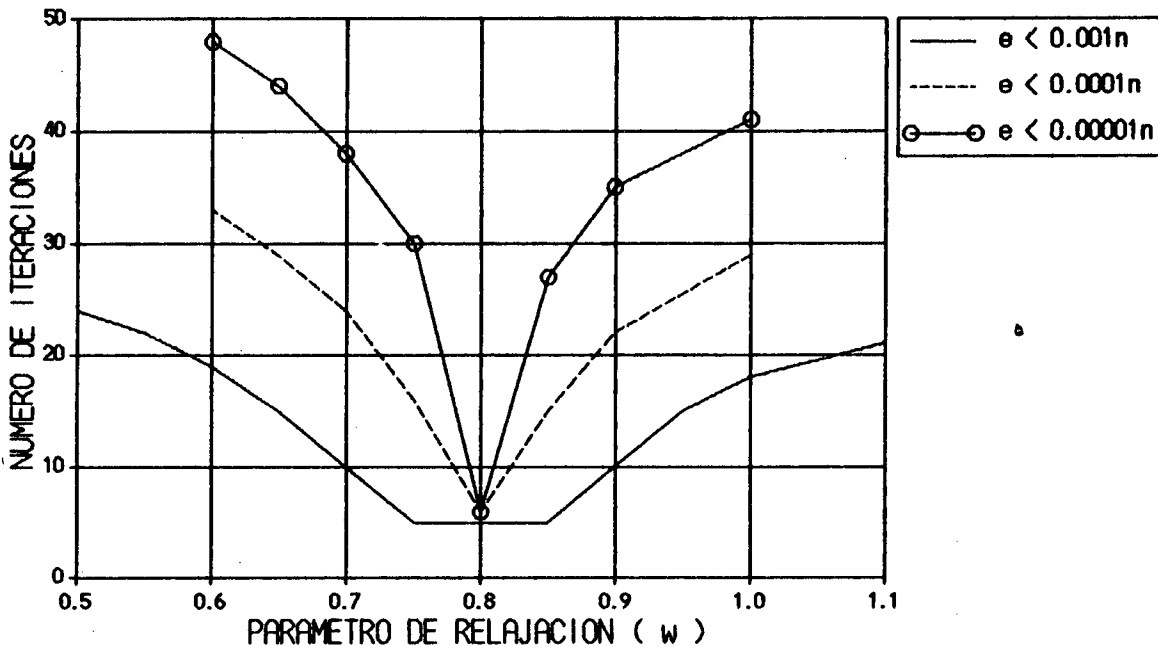
en donde w es el parámetro de relajación.

Si w es igual a uno coincide exactamente con la propuesta de Wang y Henke. En la Figura 3 se presentan los resultados obtenidos en la búsqueda del parámetro de optimización. Para un criterio de convergencia, sugerido en (2) para simuladores modernos de torres de destilación complejas, de

$$\sum_{j=1}^m [(T_j)_k - (T_j)_{k-1}]^2 \leq \epsilon_T = 0.00001n$$

puede observarse que el número de iteraciones es de 41 para w = 1 y de tan solo 6 para la

FIGURA 3. PARAMETRO OPTIMO DE RELAJACION



formulación propuesta, con un $w = 0.8$ como parámetro óptimo de relajación. Un parámetro óptimo de relajación reduce de cinco a cien veces el número de iteraciones (3).

En la Tabla 1 se presentan los resultados para cada iteración de los perfiles de temperatura, flujo de vapor, flujo de líquido, composiciones normalizadas del líquido y el error originado, para un $w = 0.80$. Este parámetro óptimo de relajación es válido para el caso de un fraccionador convencional.

Como segundo caso numérico de aplicación se estudió un problema más complicado de (1). Corresponde a una torre de destilación compleja que tiene 52 platos, incluidos el rehervidor y el condensador, con dos alimentaciones y una corriente lateral de salida. La columna opera a una presión de 250 psia y la mezcla a separar tiene los mismos compuestos que el primer caso de estudio. F_{26} se alimenta al plato 26 y F_{41} al plato 41. La corriente lateral de salida es del líquido del plato 16. El flujo de vapor se adoptó como 130 moles por cada 100 moles de alimento.

	$Z_{1,26}$	$Z_{1,41}$
C_2	0.03 0.01	$V_1 = 28$ moles
C_3	0.48 0.20	$U_{16} = 8$ moles
C_4	0.330.44	$B = 64$ moles
C_5	0.15 0.29	$F_{26} = 50$ moles
C_6	0.01 0.06	$F_{41} = 50$ moles

Se inició con un perfil lineal de temperatura, de 100 °F en la cima y 275 °F en el fondo. Empleando un parámetro de relajación de $w = 1.925$ fueron necesarias 15 iteraciones. Utilizando la propuesta de Wang y Henke (17) se requiere de 86 iteraciones. El criterio de convergencia fue de $E = 0.00001n$. En la Tabla 2 se presentan los resultados, para algunas iteraciones, del perfil de temperatura.

Con la propuesta numérica de cálculo riguroso de columnas complejas de destilación presentada en este artículo - MT, IMM y parámetro óptimo de relajación -, resulta un método numérico compacto, ágil y numéricamente estable. Podría ser una de las mejores alternativas para el cálculo expedito de una torre de destilación compleja.

NOMENCLATURA

- a_{ki} ^{15k54} y ^{1515 m} Constantes de las expresiones para los coeficientes de distribución K_j
- $[A_{BC}]$ Matriz tridiagonal como definida como en la Ecuación 9
- A_j Elementos de la diagonal inferior de $[A_{BC}]$
- b_{ki} ^{15k54} y ^{1515 m} Coeficientes de las expresiones para H_j
- B Producto de fondo, moles
- B_j Elementos de la diagonal de la matriz $[A_{BC}]$
- C_{ki} ^{15k54} y ^{1515 m} Coeficientes de las expresiones para h_j
- C_i Elementos de la diagonal superior de la matriz $[A_{BC}]$
- D Destilado, moles
- $\{D\}$ Vector columna en la Ecuación 10
- E_j Funcione de equilibrio
- F_j Corriente de alimento al plato de alimento, moles
- F_i Corriente de alimento a la etapa j , moles
- h_j Entalpía de la corriente del líquido L_j , Btu/lbmol
- H_i Entalpías de la corriente del vapor V_i , Btu/lbmol
- H_{Fj} Entalpías de la corriente de alimento F_j , Btu/lbmol
- i Número del componente
- j Número de la etapa
- k Número de iteración
- K_i Coeficiente de distribución del componente i en la etapa j
- L_j Corriente líquida de la j -ésima etapa a la $(j + 1)$ -ésima etapa
- m Número total de componentes de la mezcla a separar
- M_i Funciones del balance de materia
- n Número total de etapas
- p_i, q_i Expresiones auxiliares en el algoritmo de la matriz tridiagonal
- Q_D Calor suministrado por el rehervidor
- Q_C Calor retirado por el condensador
- S_j Funciones de sumatoria
- T_j Temperatura en la j -ésima etapa, °F

Continúa texto pág. 45

Tabla 1

Plato	Temperatura	Vapor	Líquido	Composición normalizada x_{ij}				
				C_2	C_3	C_4	C_5	C_6
Iteración N°1								
1	110.000	22.600	154.300	0.049425	0.915982	0.034557	0.000033	9.577E-9
2	123.000	176.900	154.300	0.020919	0.904787	0.074110	0.000182	1.401E-7
3	136.000	176.900	154.300	0.011370	0.849074	0.138713	0.000839	1.705E-6
4	149.000	176.900	154.300	0.008103	0.756109	0.232399	0.003370	0.000017
5	162.000	176.900	154.300	0.006835	0.632904	0.348334	0.011781	0.000143
6	175.000	176.900	154.300	0.006128	0.494338	0.462981	0.035576	0.000974
7	188.000	176.900	154.300	0.005471	0.359144	0.538369	0.091677	0.005336
8	201.000	176.900	237.000	0.004642	0.241043	0.534298	0.196907	0.023107
9	214.000	160.500	237.000	0.001370	0.184235	0.596773	0.195278	0.022341
10	227.000	160.500	237.000	0.00377	0.129705	0.651258	0.196820	0.021836
11	240.000	160.500	237.000	0.000098	0.084918	0.689461	0.203737	0.021784
12	253.000	160.500	237.000	0.00024	0.052259	0.706033	0.219184	0.022498
13	266.000	160.500	237.000	5.853E-6	0.030479	0.69762	0.247293	0.024557
14	279.000	160.500	237.000	1.306E-6	0.016859	0.660745	0.293111	0.029281
15	292.000	160.500	237.000	3.046E-7	0.008713	0.589578	0.361711	0.039996
16	305.000	160.500	77.400	6.269E-8	0.003988	0.476638	0.454450	0.064921
Iteración N° 2								
1	119.111	22.600	154.300	0.050342	0.913657	0.035953	0.00046	1.357E-8
2	130.143	176.900	154.829	0.021576	0.903754	0.074432	0.000236	1.841E-7
3	138.068	177.429	152.857	0.12075	0.849237	0.137618	0.001065	2.176E-6
4	146.845	175.457	149.429	0.008850	0.757093	0.229759	0.004274	0.000022
5	157.796	172.029	144.957	0.007527	0.634354	0.342935	0.014993	0.000189
6	171.241	167.557	139.214	0.006718	0.495618	0.451239	0.045123	0.001299
7	187.741	161.814	132.440	0.006003	0.359531	0.513716	0.113799	0.006969
8	209.336	1387.640	211.505	0.005764	0.249330	0.487536	0.229854	0.027512
9	218.212	134.105	213.586	0.001876	0.207420	0.529439	0.233655	0.027608
10	226.431	136.186	215.912	0.000581	0.162558	0.570646	0.238441	0.027773
11	233.847	138.512	218.307	0.000172	0.120320	0.606744	0.244754	0.028009
12	240.475	140.907	220.305	0.00048	0.084254	0.632810	0.254456	0.028429
13	246.859	142.905	221.547	0.00013	0.055754	0.643146	0.271666	0.029419
14	254.044	144.147	221.725	3.476E-6	0.034535	0.629414	0.303858	0.032188
15	263.542	144.325	220.298	8.536E-7	0.019469	0.578407	0.361635	0.040486
16	277.423	142.898	77.400	1.843E-7	0.009308	0.473915	0.452178	0.064597
Error = 3016.511259								

INGENIERIA QUIMICA

Tabla 1

Plato	Temperatura	Vapor	Líquido	Composición normalizada x_{ii}				
				C_2	C_3	C_4	C_5	C_6
Iteración N° 3								
1	118.984	22.600	154.300	0.050343	0.913829	0.035781	0.00045	1.344E-8
2	129.999	176.900	154.931	0.021576	0.904053	0.074136	0.000234	1.827E-7
3	137.816	177.531	152.958	0.012066	0.849634	0.137239	0.001056	2.166E-6
4	146.539	175.558	149.483	0.008830	0.757480	0.229420	0.004245	0.000022
5	157.569	172.083	144.870	0.007499	0.634614	0.342777	0.014918	0.000189
6	171.389	167.470	138.800	0.006693	0.495788	0.451304	0.044912	0.001301
7	188.845	161.400	133.880	0.006008	0.359971	0.514024	0.113061	0.006933
8	210.337	140.080	216.464	0.005754	0.249596	0.488856	0.228507	0.027284
9	218.095	139.064	218.374	0.001859	0.206296	0.531013	0.233310	0.027519
10	225.376	140.974	220.053	0.000573	0.161062	0.571860	0.238722	0.027780
11	232.346	142.653	221.759	0.000169	0.119040	0.607394	0.245326	0.028069
12	238.905	144.359	223.208	0.000047	0.083366	0.632977	0.255095	0.028512
13	245.238	145.808	223.826	0.000013	0.055222	0.643023	0.272235	0.029505
14	252.180	146.426	222.871	3.418E-6	0.034259	0.629201	0.304271	0.032263
15	261.498	145.471	219.630	8.403E-7	0.019350	0.578255	0.361858	0.040534
16	275.995	142.230	77.400	1.818E-7	0.009269	0.473946	0.452185	0.064598

Error = 20.651787

Iteración N° 4

1	118.969	22.600	154.300	0.050336	0.913858	0.035758	0.000045	1.341E-8
2	129.974	176.900	154.926	0.021573	0.904094	0.074098	0.000233	1.823E-7
3	137.787	177.526	152.942	0.012064	0.849688	0.137189	0.001055	2.161E-6
4	146.513	175.542	149.458	0.008828	0.757543	0.229364	0.004241	0.000022
5	157.553	172.058	144.854	0.007497	0.634681	0.342726	0.014905	0.000188
6	171.373	167.454	138.874	0.006691	0.495846	0.451284	0.044878	0.001299
7	188.753	161.474	133.895	0.006003	0.359969	0.514083	0.113015	0.006928
8	210.198	140.0952	15.923	0.005746	0.249521	0.488953	0.228489	0.027289
9	18.221	1138.523	218.190	0.001858	0.206320	0.531263	0.233069	0.027487
10	225.616	140.790	220.085	0.000572	0.160984	0.572253	0.238449	0.027739
11	232.594	142.685	221.879	0.000168	0.118863	0.607820	0.245113	0.028033
12	239.111	144.479	223.343	0.000047	0.083160	0.633338	0.254965	0.028487
13	245.389	145.943	223.944	0.000013	0.055043	0.643273	0.272178	0.029491
14	252.277	146.544	222.958	3.403e-6	0.034132	0.629343	0.304263	0.032257
15	261.549	145.558	219.693	8.364e-7	0.019272	0.578319	0.361872	0.040534
16	276.005	142.293	77.400	1.809e-7	0.009231	0.473966	0.452201	0.064600

Error = 0.242940

Tabla 1

Plato	Temperatura	Vapor	Líquido	Composición normalizada x_{ij}				
				C_2	C_3	C_4	C_5	C_6
Iteración N° 5								
1	118.969	22.600	154.300	0.050337	0.913863	0.035753	0.000045	1.340E-8
2	129.972	176.900	154.925	0.021573	0.904102	0.074089	0.000233	1.823E-7
3	137.783	177.525	152.942	0.012064	0.849702	0.137175	0.001055	2.161E-6
4	146.508	175.542	149.458	0.008828	0.757561	0.229346	0.004240	0.000022
5	157.548	172.058	144.854	0.007497	0.634700	0.342709	0.014903	0.000188
6	171.367	167.454	138.863	0.006690	0.495862	0.451272	0.044875	0.001299
7	188.753	161.463	133.875	0.006003	0.359983	0.514077	0.113008	0.066928
8	210.211	140.075	215.968	0.005747	0.249539	0.488953	0.228473	0.027286
9	218.198	138.568	218.148	0.001858	0.206315	0.5312523	0.233083	0.027490
10	225.602	140.748	220.029	0.000572	0.160991	0.572242	0.238452	0.027740
11	232.601	142.629	221.840	0.000168	0.118875	0.607821	0.245101	0.028032
12	239.131	144.440	223.325	0.00047	0.038169	0.633350	0.254947	0.028484
13	245.413	145.925	223.941	0.00013	0.055047	0.643287	0.272163	0.029488
14	252.299	146.541	222.963	3.403E-6	0.034132	0.629352	0.304256	0.032255
15	261.566	145.563	219.700	8.364E-7	0.019272	0.578322	0.361870	0.040533
16	276.015	142.300	77.400	1.809E-7	0.009230	0.473966	0.452201	0.064600

Error = 0.002771

Iteración N° 6

1	118.968	22.600	154.300	0.050337	0.913863	0.035753	0.000045	1.340E-8
2	129.971	176.900	154.925	0.021573	0.9041102	0.074089	0.000233	1.8.23E-7
3	137.782	177.525	152.942	0.012064	0.849702	0.137175	0.001055	2.161E-6
4	146.507	175.542	149.458	0.008828	0.757561	0.229346	0.004240	0.000022
5	157.547	172.058	144.854	0.007497	0.634700	0.342709	0.014903	0.000188
6	171.365	167.454	138.863	0.006690	0.495862	0.451272	0.044875	0.001299
7	188.751	161.463	133.875	0.006003	0.359983	0.514077	0.113008	0.006928
8	210.207	140.075	215.968	0.005747	0.249539	0.488953	0.228473	0.027286
9	218.200	138.568	218.148	0.001858	0.206315	0.531252	0.233083	0.027490
10	225.602	140.748	220.029	0.000572	0.160991	0.572242	0.238452	0.027740
11	232.598	142.629	221.840	0.000168	0.118875	0.607821	0.245101	0.028032
12	239.128	144.440	223.325	0.00047	0.083169	0.633350	0.254947	0.028484
13	245.411	145.925	223.941	0.000013	0.055047	0.643287	0.272163	0.029488
14	252.298	146.541	222.963	3.403E-6	0.034132	0.629352	0.304256	0.032255
15	261.566	145.563	219.700	8.64E-7	0.019272	0.578322	0.361870	0.040553
16	276.015	142.300	77.400	1.809E-7	0.009230	0.473966	0.452201	0.064600

Error = 0.000056

Tabla 2. Perfiles de temperatura

Plato 15	Iteración 1	Iteración 3	Iteración 8	Iteración 10	Iteración 14	Iteración
1	110.000	122.717	122.664	122.603	122.581	122.580
2	113.235	126.209	126.182	126.152	126.140	126.140
3	116.470	127.237	127.219	127.197	127.190	127.190
4	119.705	127.547	127.529	127.509	127.501	127.501
5	122.941	127.657	127.629	127.608	127.600	127.600
6	126.176	127.724	127.677	127.651	127.642	127.642
7	129.411	127.809	127.724	127.690	127.679	127.679
8	132.647	127.951	127.798	127.749	127.734	127.733
9	135.882	128.203	127.928	127.852	127.829	127.829
10	139.117	128.646	128.161	128.037	128.001	128.001
11	142.352	129.413	128.574	128.369	128.309	128.309
12	145.588	130.702	129.297	128.995	128.855	128.854
13	148.823	132.775	130.525	129.966	129.803	129.802
14	152.058	135.915	132.520	131.651	131.396	131.394
15	155.294	140.321	135.563	134.310	133.937	133.935
16	158.529	145.975	139.836	138.199	137.707	137.705
17	161.764	152.558	145.285	143.383	142.808	142.807
18	165.000	158.972	151.075	149.132	149.549	148.550
19	168.235	164.714	156.688	154.921	154.403	154.406
20	171.470	169.600	161.727	160.277	159.871	158.876
21	174.705	173.277	165.997	164.908	164.626	164.632
22	177.941	176.183	169.513	168.753	168.579	168.586
23	181.176	178.501	172.471	171.967	171.874	171.880
24	184.411	180.669	175.266	174.936	174.892	174.897
25	187.647	183.353	178.586	178.359	178.339	178.343
26	190.882	187.529	183.625	183.449	183.435	183.438
27	194.117	194.292	189.721	189.552	189.543	189.547
28	197.352	199.812	194.784	194.642	194.641	194.644
29	200.588	204.329	199.089	198.985	198.993	198.996
30	203.823	207.904	202.669	202.605	202.621	202.624
31	207.058	210.624	205.547	205.522	205.544	205.546
32	210.294	212.620	207.790	207.797	207.823	207.825
33	213.529	214.041	209.497	209.528	209.556	209.557
34	216.764	215.027	210.778	210.825	210.852	210.853
35	220.000	215.700	211.743	211.798	211.824	211.825
36	223.235	216.171	212.503	212.560	212.583	212.584
37	226.470	216.555	213.184	213.237	213.256	213.256
38	229.705	217.021	213.975	214.018	214.032	214.032
39	232.941	217.893	215.232	215.259	215.266	215.266
40	236.176	219.893	217.746	217.753	217.753	217.753
41	239.411	224.761	223.432	223.417	223.410	223.410
42	242.647	227.824	227.193	227.162	227.149	227.149
43	245.882	230.397	230.483	230.438	230.420	230.420
44	249.117	232.763	233.512	233.455	233.434	233.433
45	252.352	233.056	236.356	236.289	236.265	236.264
46	255.588	237.352	239.049	238.975	238.948	238.948
47	258.823	239.709	241.628	241.547	241.519	241.519
48	262.058	242.206	244.157	244.071	244.042	244.041
49	265.294	244.995	246.783	246.693	246.662	246.662
50	268.529	248.413	249.860	249.764	249.732	249.732
51	271.764	253.238	254.292	254.191	254.158	254.158
52	275.000	261.665	262.680	262.575	262.542	262.542

Viene de la pág. 40

U_j Corriente líquida lateral de la j -ésima etapa, moles
 V_j Corriente de vapor de la j -ésima etapa a la $(j-1)$ -ésima etapa, moles
 w Parámetro de relajación
 W_j Corriente de vapor lateral de la j -ésima etapa, moles
 x_j Composiciones de la corriente líquida de la j -ésima etapa, fracciones molares
 $\{x_j\}$ Vector columna en Ecuación 10
 y_j Composiciones de la corriente de vapor de la j -ésima etapa, fracciones molares
 z_j Composición de la corriente de alimentación líquida a la j -ésima etapa, fracciones molares
 $aa, bb, mm, tt, yy, o,$ variables auxiliares en el algoritmo IMM

BIBLIOGRAFIA

1. AMUNDSON, N.R., PONTINEN, A.J., Multicomponent distillation calculations on a large digital computer. *Ind. Eng. Chem.* 50, 730-736, 1958.
2. ANGEL, S., MARMUR, A., KEHAT, E. Comparison of methods of prediction of vapor-liquid equilibria and enthalpy in a distillation simulation program. *Computers & Chemical Eng.*, Vol. 10, No. 2, 169, 1986.
3. CARNAHAN, B., LUTHER, A. *Applied Numerical Methods*. Wiley, J. O., 1969.
4. CONTE, S.D., DE BOOR, C. *Análisis numérico elemental*. Edit. McGraw-Hill. Segunda Edición, 1974.
5. FRIDAY, J.R., SMITH, B.D. An analysis of the equilibrium stage separations problem. Formulation and convergence. *AIChE J.*, 10, 698, 1964.
6. GOLDSTEIN, R.P., STANFIELD, R.B. Flexible method for the solution of distillation design problems using the Newton-Raphson technique. *Ind. Eng. Chem. Des. Develop.*, Vol. 9, No. 1, January, 1970.
7. HENLEY, J.E., SEADER, J.D., *Operaciones de separación por etapas de equilibrio en ingeniería química*. Editorial Reverté, 1988.
8. HILDEBRAND, F.B., *Introduction to Numerical analysis*. Second Edition. McGraw-Hill, 1974.
9. HOLLAND, C.D. *Fundamentos de destilación de mezclas multicomponentes*. McGraw-Hill. Book Co., Ed. Limusa, 1988.
10. LEWIS, W.K., MATHESON, G.L., *Ind. Eng. Chem.*, 24, 496-498, 1932.
11. PANG, T., KNOPF, F.C. Numerical analysis of single variable problems with the use of continued fractions. *Computers & Chemical Eng.*, Vol. 10, No. 1, 87, 1986.
12. RANGEL, H.A., SPINEL, J.E. Cálculo numérico mejorado de una vaporización instantánea. Caso generalizado de una mezcla de hidrocarburos ligeros. *Ingeniería e Investigación*. No. 22, Vol. 6, No. 3, 1er trimes. 1991.
13. ROSE, A., SWEENEY, F., VERLE, N.S. Continuous distillation calculations by relaxation method. *Ind. Eng. Chem.*, 50, 737, 1958.
14. SHACHAM, M. An improved memory method for the solution of a nonlinear equation. *Chem. Eng. Sc.* 44, p. 1495, 1989.
15. SHACHAM, M., KEHAT, E. An iteration method with memory for the solution of a nonlinear equation. *Chem. Eng. Sc.* 27, 2099, 1972.
16. THIELE, E.W., GEDDES, R.I., *Ind. Eng. Chem.* 25, 290, 1933.
17. WANG, J.C., HENKE, G.E., Tridiagonal matrix for distillation. *Hydrocarbon Processing*, 45, 155-163, 1966.