DESTILACIÓN DE MEZCLAS MULTICOMPONENTES

Número de variables de diseño:

Caldera + Sector de agotamiento + Etapa de alimentación + Sector de enriquecimiento + <u>Condensador parcial</u>

$(C+7)$ o $(C+8)$

V_D fijas = $C+3$ $(A, z_{i,A}, T_A, P_A, P_D)$

V_D libres = 4 o 5

Caldera + Sector de agotamiento + Etapa de alimentación + Sector de enriquecimiento + <u>Condensador total</u>

DESTILACIÓN DE MEZCLAS MULTICOMPONENTES

Variables de diseño libres: 4 o 5

Lewis – Matheson:

- **Razón de reparto de CL y CP entre destilado y residuo: r_{CL}/d_{CL}; r_{CP}/d_{CP}**
- **Razón de reflujo: L_D/D**
- **Posición óptima de alimentación: a_{opt}**
- **Temperatura de reflujo, T_D (condensador total)**

Thiele – Geddes:

- **Razón de reflujo: L_D/D**
- **Caudal de destilado: D**
- **Número de pisos sector enriquecimiento: N**
- **Número de pisos sector de agotamiento: M**
- **Temperatura de reflujo, T_D (condensador total)**

MÉTODOS DE CÁLCULO APROXIMADOS

Método de Fenske – Underwood – Gilliland

1. Leer A, $z_{i,A}$, T_A, P_A, L_D/D, r_{CL}/d_{CL}, r_{CP}/d_{CP}

2. Estimar d_i, r_i; $i \neq CL, CP$

3. Estimar P_D, $P_{columna}$, y el tipo de condensador

4. Si $P_A > P_{columna}$ destilación súbita del alimento

5. Calcular $(M + N)_{\mathrm{min}}$: Fenske

6. Calcular d_i, r_i : Fenske

¿$d_i, r_i)_{\mathrm{cal}} = d_i, r_i)_{\mathrm{est}}$?

NO

SI

7. Estimar $(L_D/D)_{min}$: Underwood

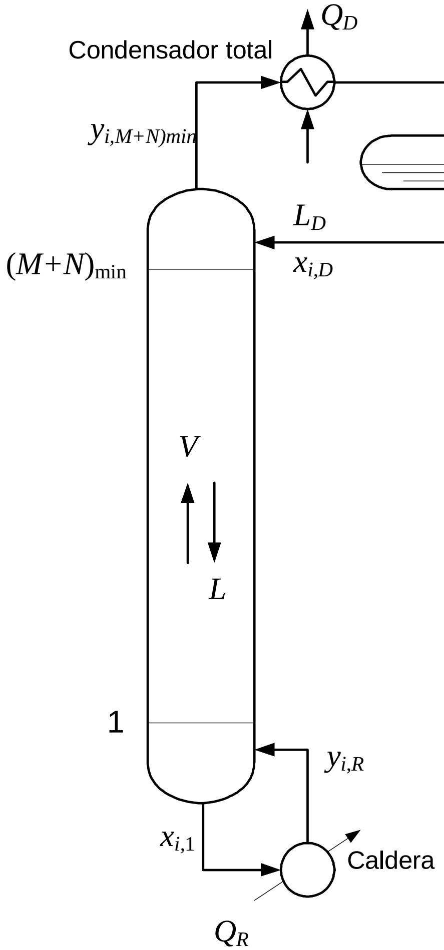
8. Para L_D/D, calcular $M+N$: Gilliland

9. Calcular M, N : Kirkbride

10. Calcular Q_D, Q_R

MÉTODO DE FENSKE – UNDERWOOD – GILLILAND

Ecuación de Fenske

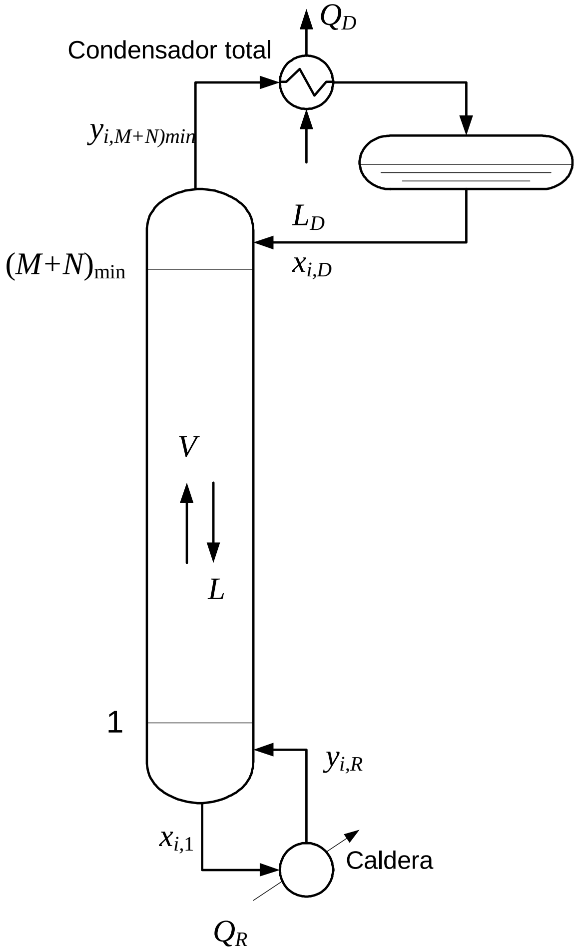


$$L_{n+1} = V_n \;; \quad n = 1,\ldots, M+N$$
$$x_{i,n+1} = y_{i,n} \;; \quad i = 1,\ldots, C; \quad n = 1,\ldots, M+N$$
$$Q_D = Q_R$$

$$(M+N)_{\min} = \frac{\log\left[\left(\frac{x_{i,D}}{x_{i,R}}\right)\left(\frac{x_{j,R}}{x_{j,D}}\right)\right]}{\log(\alpha_{ij})_m} - 1$$

MÉTODO DE FENSKE – UNDERWOOD – GILLILAND

Ecuación de Winn



$$\xi_{ij} = \frac{K_i}{K_j^{\varphi_{ij}}}$$

$$(M+N)_{\min} = \frac{\log\left[\left(\frac{x_{i,D}}{x_{i,R}}\right)\left(\frac{x_{j,R}}{x_{j,D}}\right)^{\varphi_{ij}}\right]}{\log(\xi_{ij})_m} - 1$$

MÉTODO DE FENSKE – UNDERWOOD – GILLILAND

Ecuación de Fenske

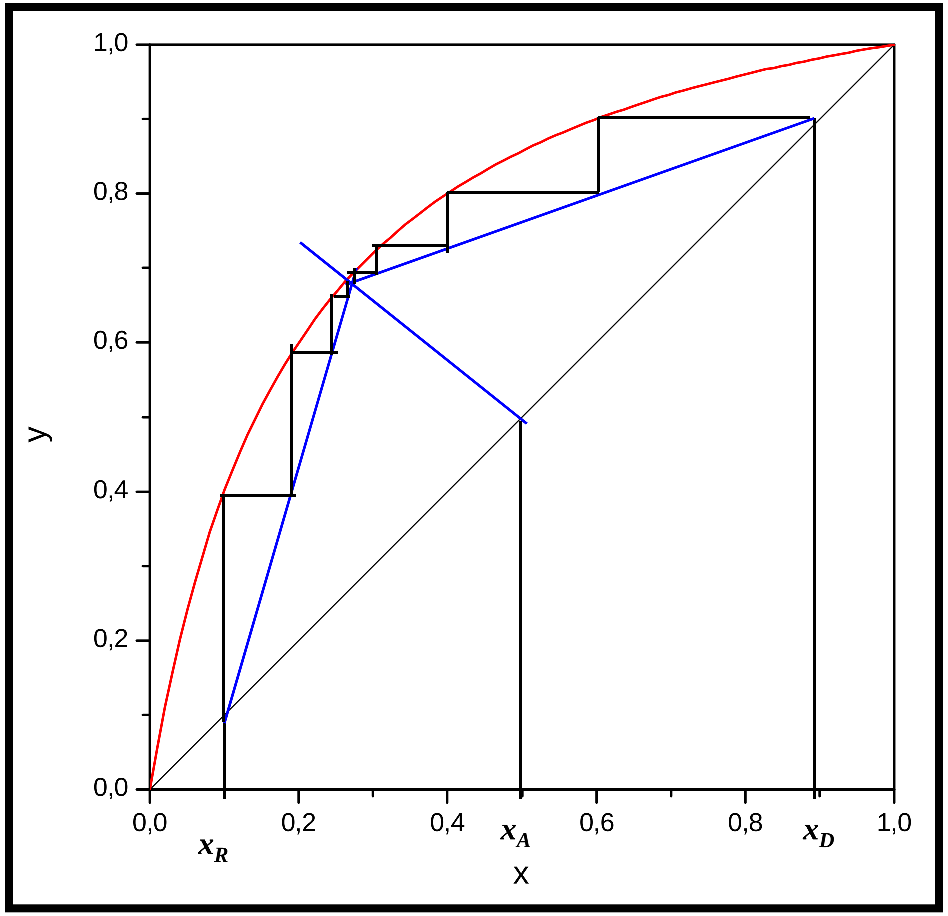
$$\left(\frac{d_i}{r_i}\right) = \left(\frac{d_{CP}}{r_{CP}}\right)\left(\alpha_{i,CP}\right)_n^{(M+N)_{\min}+1}$$

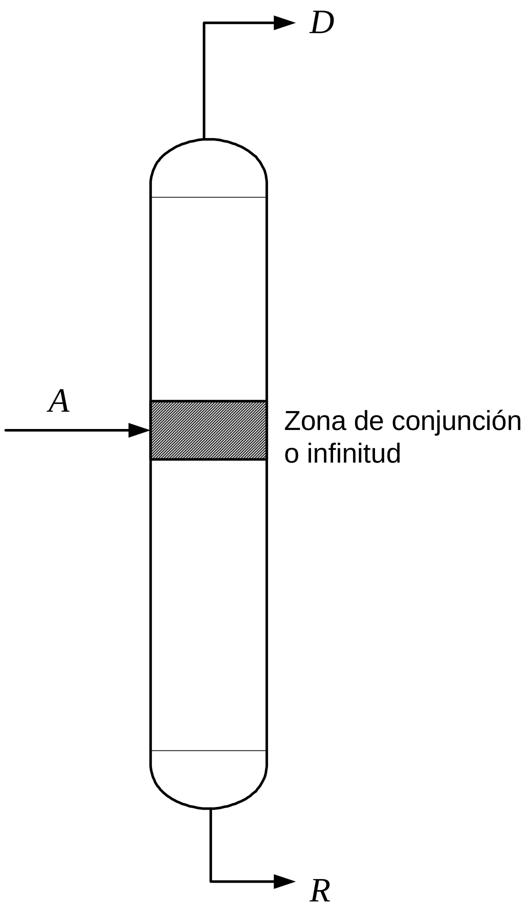
$$a_i = d_i + r_i$$

$$r_i = \frac{a_i}{1+\left(\frac{d_{CP}}{r_{CP}}\right)\left(\alpha_{i,CP}\right)_m^{(M+N)_{\min}+1}}$$

MÉTODO DE FENSKE – UNDERWOOD – GILLILAND

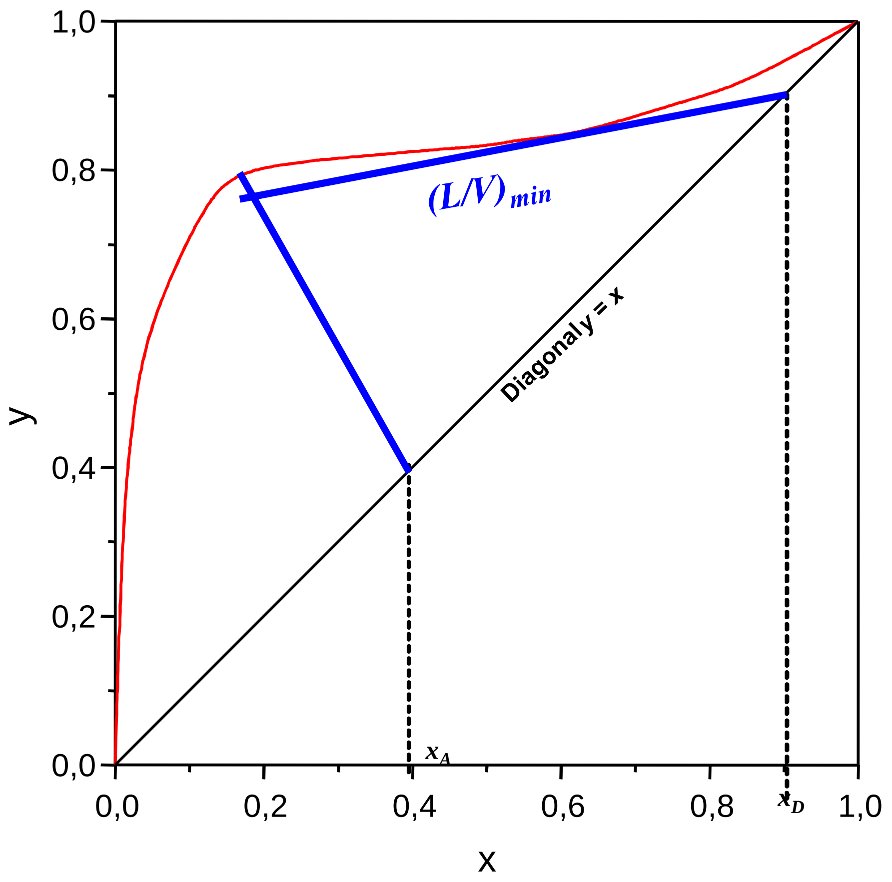
Método de Underwood

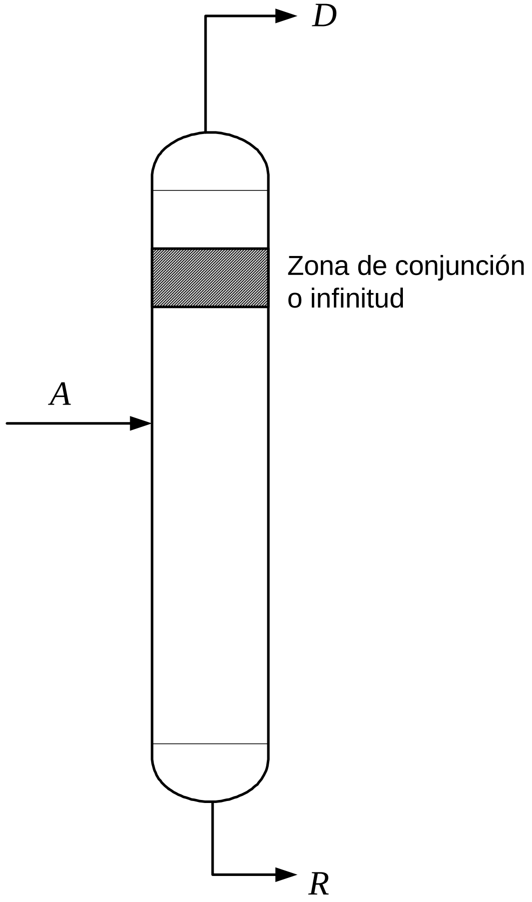




MÉTODO DE FENSKE – UNDERWOOD – GILLILAND

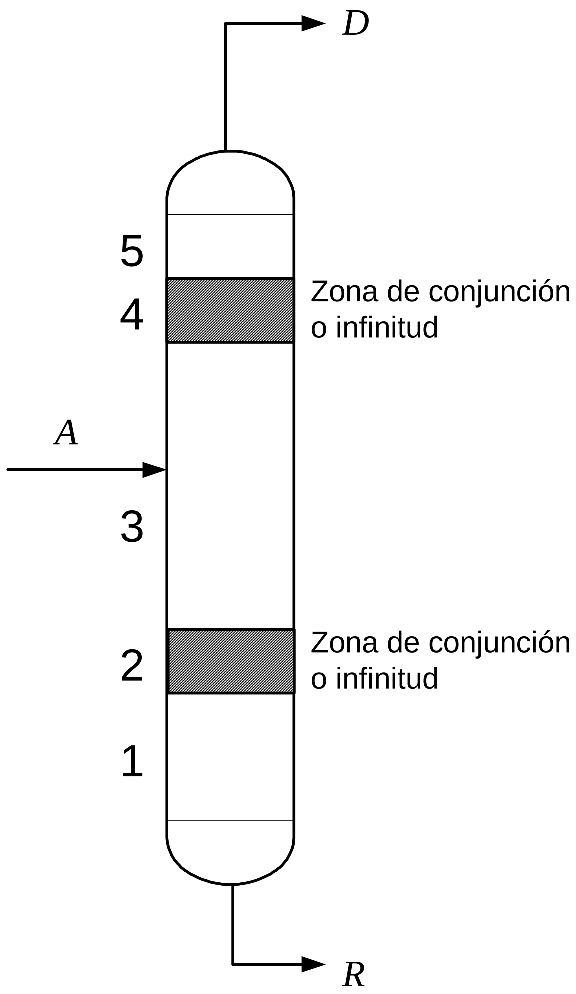
Método de Underwood





MÉTODO DE FENSKE – UNDERWOOD – GILLILAND

Método de Underwood



MÉTODO DE FENSKE – UNDERWOOD – GILLILAND

Método de Underwood

$$\sum_{i=1}^{C} \frac{\alpha_{i,r}\ z_{i,A}}{\alpha_{i,r} - \theta} = 1 - q; \qquad \sum_{i=1}^{C} \frac{\alpha_{i,r}\ x_{i,D}}{\alpha_{i,r} - \theta} = \left(\frac{L_D}{D}\right)_{\min} + 1 \qquad \alpha_{CL,r} > \theta > \alpha_{CP,r}$$

$$\alpha_{CL,r} > \theta_1 > \alpha_{IC,r}$$

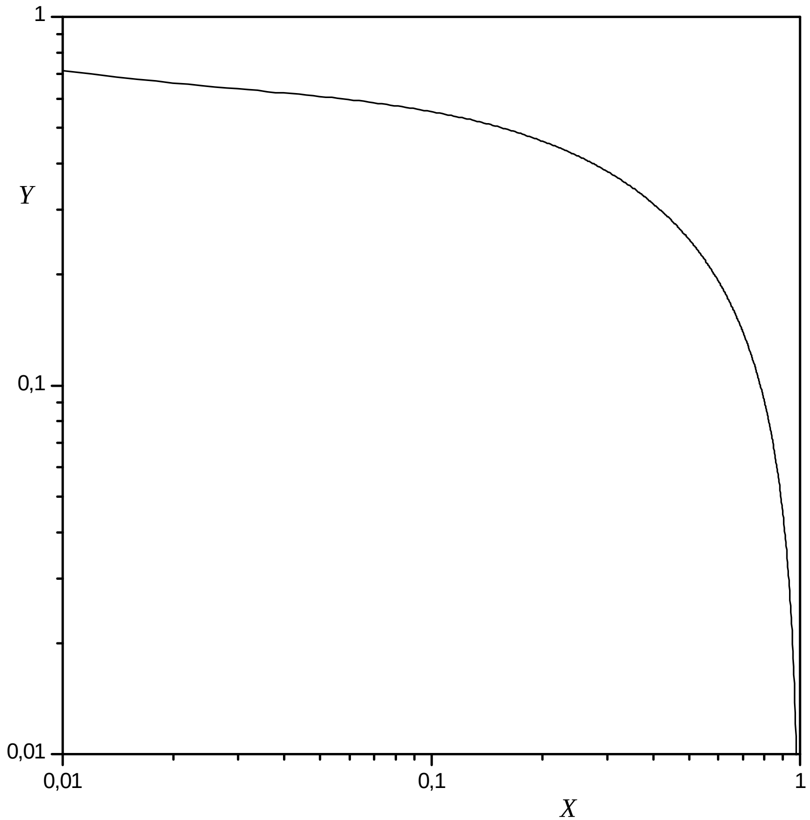
$$\alpha_{IC,r} > \theta_2 > \alpha_{CP,r}$$

$$\frac{\alpha_{IC,r}\ x_{IC,D}}{\alpha_{IC,r} - \theta_1} + \sum_{i \neq IC}^{C} \frac{\alpha_{i,r}\ x_{i,D}}{\alpha_{i,r} - \theta_1} = \left(\frac{L_D}{D}\right)_{\min} + 1$$

$$\frac{\alpha_{IC,r}\ x_{IC,D}}{\alpha_{IC,r} - \theta_2} + \sum_{i \neq IC}^{C} \frac{\alpha_{i,r}\ x_{i,D}}{\alpha_{i,r} - \theta_2} = \left(\frac{L_D}{D}\right)_{\min} + 1$$

MÉTODO DE FENSKE – UNDERWOOD – GILLILAND

Método de Gilliland



$$X = \frac{\left(\frac{L_D}{D}\right) - \left(\frac{L_D}{D}\right)_{\min}}{\left(\frac{L_D}{D}\right) + 1}$$

$$Y = \frac{(M + N + 1) - (M + N + 1)_{\min}}{(M + N + 1) + 1}$$

$$Y = 1 - \exp\left[\left(\frac{1 + 54{,}4\ X}{11 + 117{,}2\ X}\right)\left(\frac{X - 1}{X^{0{,}5}}\right)\right]$$

MÉTODO DE FENSKE – UNDERWOOD – GILLILAND

Método de Kirkbride

$$\frac{N}{M+1} = \left[\left(\frac{z_{CP,A}}{z_{CL,a}} \right) \left(\frac{x_{CL,R}}{x_{CP,D}} \right)^2 \left(\frac{R}{D} \right) \right]^{0,206}$$

MÉTODO DE KREMSER

Factor de absorción

$$A_{i,p} = \frac{l_{i,p}}{v_{i,p}} = \frac{L_p \; x_{i,p}}{V_p \; y_{i,p}} = \frac{L_p}{V_p \; K_{i,p}}$$

Factor de desorción

$$S_{i,p} = \frac{v_{i,p}}{l_{i,p}} = \frac{V_p \; y_{i,p}}{L_p \; x_{i,p}} = \frac{V_p \; K_{i,p}}{L_p} = \frac{1}{A_{i,p}}$$

MÉTODO DE KREMSER

Sector de enriquecimiento

$$v_{i,n} - l_{i,n+1} = d_i \qquad \frac{v_{i,n}}{d_i} = \frac{l_{i,n+1}}{d_i} + 1 \qquad \frac{v_{i,n}}{d_i} = A_{i,n+1}\,\frac{v_{i,n+1}}{d_i} + 1$$

$$v_{i,M+N} - l_{i,D} = d_i \qquad \frac{v_{i,M+N}}{d_i} = \frac{l_{i,D}}{d_i} + 1 \qquad \frac{v_{i,M+N}}{d_i} = A_{i,D} + 1$$

MÉTODO DE KREMSER

Sector de enriquecimiento

$$\overline{v_{i,a}} - l_{i,a+1} = d_i \qquad \frac{\overline{v_{i,a}}}{d_i} = \frac{l_{i,a+1}}{d_i} + 1 \qquad \frac{\overline{v_{i,a}}}{d_i} = A_{i,a+1}\,\frac{v_{i,a+1}}{d_i} + 1$$

$$\boxed{\frac{\overline{v_{i,a}}}{d_i} = \frac{A_{i,ef}^{N+1} - 1}{A_{i,ef} - 1} + A_{i,ef}^{N}\;A_{i,D}}$$

MÉTODO DE KREMSER

Sector de agotamiento

$$l_{i,m+1} - v_{i,m} = r_i \qquad \frac{l_{i,m+1}}{r_i} = \frac{v_{i,m}}{r_i} + 1 \qquad \frac{l_{i,m+1}}{r_i} = S_{i,m} \frac{l_{i,m}}{r_i} + 1$$

$$\frac{\overline{l_{i,a+1}}}{r_i} = S_{i,a} \frac{l_{i,a}}{r_i} + 1$$

$$\boxed{\frac{\overline{l_{i,a+1}}}{r_i} = \frac{S_{i,ef}^{M+1} - 1}{S_{i,ef} - 1} + S_{i,ef}^{M} \; S_{i,R}}$$

MÉTODO DE KREMSER

Etapa de alimentación

$$l_{i,a+1} = \overline{l_{i,a+1}} - a_{i.L}$$

$$\frac{l_{i,a+1}}{d_i} = \frac{\overline{v_{i,a}}}{d_i} - 1 = \frac{A_{i,ef}^{N+1} - 1}{A_{i,ef} - 1} + A_{i,ef}^{N} \; A_{i,D} - 1$$

$$\frac{l_{i,a+1}}{r_i} = \frac{\overline{l_{i,a+1}}}{r_i} - \frac{a_{i,L}}{r_i} = \frac{S_{i,ef}^{M+1} - 1}{S_{i,ef} - 1} + S_{i,ef}^{M} \; S_{i,R} - \frac{a_{i,L}}{r_i}$$

$$\boxed{\frac{r_i}{d_i} = \frac{\dfrac{A_{i,ef}^{N+1} - 1}{A_{i,ef} - 1} + A_{i,ef}^{N} \; A_{i,D} - 1}{\dfrac{S_{i,ef}^{M+1} - 1}{S_{i,ef} - 1} + S_{i,ef}^{M} \; S_{i,R} - \dfrac{a_{i,L}}{r_i}}}$$

MÉTODO DE EDMISTER

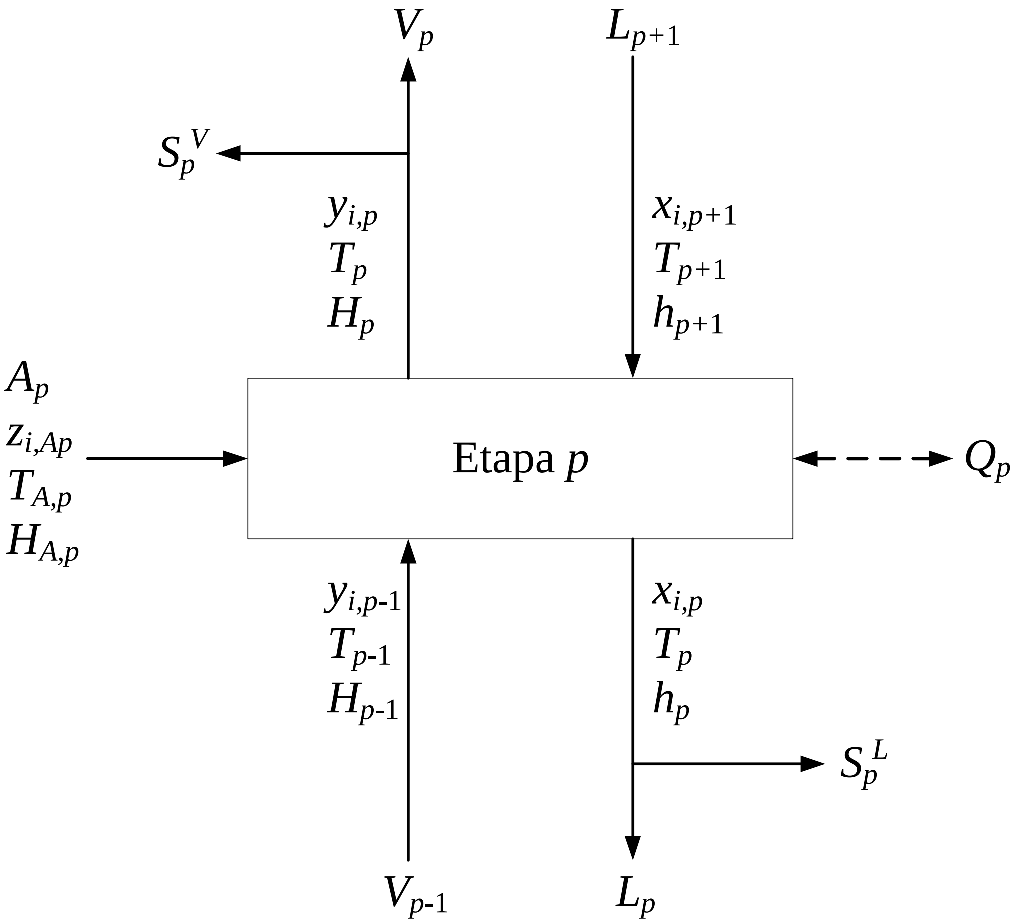
Factores efectivos de Edmister

$$A_{i,ef} = \sqrt{A_{i,M+1}(A_{i,M+N}+1)+0,25}-0,5$$

$$S_{i,ef} = \sqrt{S_{i,M}(S_{i,1}+1)+0,25}-0,5$$

MÉTODOS DE CÁLCULO RIGUROSOS

Modelo de etapa de equilibrio



MÉTODOS DE CÁLCULO RIGUROSOS

Modelo de etapa de equilibrio

Ecuaciones M

$$M_{i,p} \equiv l_{i,p+1} + v_{i,p-1} + a_{i,p} - \left(v_{i,p} + s_{i,p}^{V}\right) - \left(l_{i,p} + s_{i,p}^{L}\right) = 0$$

$$M_{i,p} \equiv L_{p+1}\, x_{i,p+1} + V_{p-1}\, y_{i,p-1} + A_p\, z_{i,A_p} - \left(V_p + S_p^V\right) y_{i,p} - \left(L_p + S_p^L\right) x_{i,p} = 0$$

$$s_p^V = \frac{s_{i,p}^V}{v_{i,p}} = \frac{S_p^V\, y_{i,p}}{V_p\, y_{i,p}} = \frac{S_p^V}{V_p}; \qquad s_p^L = \frac{s_{i,p}^L}{l_{i,p}} = \frac{S_p^L\, x_{i,p}}{L_p\, x_{i,p}} = \frac{S_p^L}{L_p}$$

$$\boxed{M_{i,p} \equiv l_{i,p+1} + v_{i,p-1} + a_{i,p} - \left(1 + s_p^V\right) v_{i,p} - \left(1 + s_p^L\right) l_{i,p} = 0}$$

$$\boxed{M_{i,p} \equiv L_{p+1}\, x_{i,p+1} + V_{p-1}\, y_{i,p-1} + A_p\, z_{i,A_p} - \left(1 + s_p^V\right) V_p y_{i,p} - \left(1 + s_p^L\right) L_p x_{i,p} = 0}$$

MÉTODOS DE CÁLCULO RIGUROSOS

Modelo de etapa de equilibrio

Ecuaciones *E*

$$\boxed{E_{i,p} \equiv y_{i,p} - K_{i,p}\; x_{i,p} = 0}$$

$$\boxed{E_{i,p} = v_{i,p} - K_{i,p} l_{i,p} \frac{\sum v_{i,p}}{\sum l_{i,p}} = 0}$$

$$K_{i,p} = f\left(T_p, P_p, x_{1,p}, \ldots, x_{C,p}, y_{1,p}, \ldots, y_{C,p}\right)$$

MÉTODOS DE CÁLCULO RIGUROSOS

Modelo de etapa de equilibrio

Ecuaciones *S*

$$S_{y,p} \equiv \sum_{i=1}^{C} y_{i,p} - 1 = 0; \qquad S_{y,p} \equiv \sum_{i=1}^{C} \frac{v_{i,p}}{V_p} - 1 = 0$$

$$S_{x,p} \equiv \sum_{i=1}^{C} x_{i,p} - 1 = 0; \qquad S_{x,p} \equiv \sum_{i=1}^{C} \frac{l_{i,p}}{L_p} - 1 = 0$$

MÉTODOS DE CÁLCULO RIGUROSOS

Modelo de etapa de equilibrio

Ecuaciones *H*

$$\boxed{H_p \equiv L_{p+1}h_{p+1} + V_{p-1}H_{p-1} + A_p H_{A_p} - \left(1+s_p^V\right)V_p H_p - \left(1+s_p^L\right)L_p h_p \pm Q_p = 0}$$

$$\boxed{\begin{aligned} H_p \equiv\ & h_{p+1}\sum l_{i,p+1} + H_{p-1}\sum v_{i,p-1} + H_{A_p}\sum a_{i,p} \\ & - \left(1+s_p^V\right)H_p\sum v_{i,p} - \left(1+s_p^L\right)h_p\sum l_{i,p} \pm Q_p = 0 \end{aligned}}$$

$$H_p = f\left(T_p, P_p, y_{1,p}, \ldots, y_{C,p}\right)$$

$$h_p = f\left(T_p, P_p, x_{1,p}, \ldots, x_{C,p}\right)$$

MÉTODOS DE CÁLCULO RIGUROSOS

Métodos precomputacionales

Lewis – Matheson:

- **Razón de reparto de CL y CP entre destilado y residuo: r_{CL}/d_{CL}; r_{CP}/d_{CP}**
- **Razón de reflujo: L_D/D**
- **Posición óptima de alimentación: a_{opt}**
- **Temperatura de reflujo, T_D (condensador total)**

Thiele – Geddes:

- **Razón de reflujo: L_D/D**
- **Caudal de destilado: D**
- **Número de pisos sector enriquecimiento: N**
- **Número de pisos sector de agotamiento: M**
- **Temperatura de reflujo, T_D (condensador total)**

MÉTODOS DE CÁLCULO RIGUROSOS

Métodos de cálculo

1. Métodos de Punto de Burbuja (PB)
2. Métodos de Suma de Caudales (SC)
3. Métodos de Newton 2N
4. Métodos de Corrección Simultánea (CS)
5. Métodos de bucle de tanteo interior - exterior
6. Métodos de relajación
7. Métodos de homotopía - continuación
8. Métodos de Etapas de No Equilibrio

MÉTODOS DE CÁLCULO RIGUROSOS

Estrategia de resolución

1. Definición del problema
2. Valores iniciales de todas las variables *MESH*
3. Cálculo propiamente dicho
4. Comprobación de la solución
5. Salida y evaluación por parte del ingeniero

MÉTODOS DE CÁLCULO RIGUROSOS

Algoritmo de la matriz tridiagonal

$$\boxed{M_{i,p} \equiv L_{p+1}\, x_{i,p+1} + V_{p-1}\, y_{i,p-1} + A_p\, z_{i,A_p} - \left(1+s_p^V\right) V_p y_{i,p} - \left(1+s_p^L\right) L_p x_{i,p} = 0}$$

$$\boxed{L_{p+1} x_{i,p+1} + V_{p-1} K_{i,p-1} x_{i,p-1} - \left(1+s_p^V\right) V_p K_{i,p} x_{i,p} - \left(1+s_p^L\right) L_p x_{i,p} = -A_p z_{i,A_p}}$$

$$\boxed{L_{p+1} x_{i,p+1} + \left[-\left(1+s_p^V\right) V_p K_{i,p} - \left(1+s_p^L\right) L_p\right] x_{i,p} + V_{p-1} K_{i,p-1} x_{i,p-1} = -A_p z_{i,A_p}}$$

$$\boxed{A_p x_{i,p+1} + B_p x_{i,p} + C_p x_{i,p-1} = D_p}$$

$$\boxed{A_p = L_{p+1}; \qquad R \le p \le M + N}$$

$$\boxed{B_p = \left[-\left(1+s_p^V\right) V_p K_{i,p} - \left(1+s_p^L\right) L_p\right]; \qquad R \le p \le D}$$

$$\boxed{C_p = V_{p-1} K_{i,p-1}; \qquad 1 \le p \le D}$$

$$\boxed{D_p = -A_p z_{i,A_p}; \qquad R \le p \le D}$$

MÉTODOS DE CÁLCULO RIGUROSOS

Algoritmo de la matriz tridiagonal

$$
\begin{pmatrix}
B_D & C_D & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\
A_{M+N} & B_{M+N} & C_{M+N} & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & A_{M+N-1} & B_{M+M-1} & C_{M+N-1} & \cdots & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & A_2 & B_2 & C_2 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & A_1 & B_1 & C_1 \\
0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 & A_R & B_R
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
x_{i,D} \\ x_{i,M+N} \\ x_{i,M+N-1} \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ x_{i,2} \\ x_{i,1} \\ x_{i,R}
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
D_D \\ D_{M+N} \\ D_{M+N-1} \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ D_2 \\ D_1 \\ D_R
\end{pmatrix}
$$