

Diseño, Simulación, Optimización y Seguridad de Procesos

OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS QUÍMICOS

EJEMPLOS DE APLICACIÓN

Dr. Nicolás José Scenna

Dr. Néstor Hugo Rodríguez

Dr. Juan Ignacio Manassaldi

Diseño, Simulación, Optimización y Seguridad de Procesos.

Diámetro económico de tubería.

El órgano de transporte de los fluidos en las plantas de procesos es a través de tuberías principalmente. Como se sabe de materias como fenómenos de transporte y principalmente de Operaciones Unitarias, las tuberías no son perfectamente lisas oponiéndose al movimiento de fluidos en su interior.

En los simuladores de procesos los objetos correspondientes ("Streams" o "Material Streams") son en realidad, para el PFD, líneas de información más que de materia propiamente dicha. El único objetivo de los mismos es transferir la información desde la salida de un módulo a la entrada de otro tales como flujo, composición, temperatura y presión (el resto de las propiedades se derivan de las anteriores) pero no del material, tamaño y menos topología del mismo.

Sin embargo sí cuentan con otros objetos que se insertan en el medio que emulan el comportamiento no sólo de la tubería en sí sino también de su aislación.

Objetivo:

En general el dato más importante a considerar es el flujo y condiciones de la corriente, e incluso, quizás del material (atendiendo al fluido a transporte y su interacción con las paredes del tubo) o el espesor aproximado de la pared (atendiendo a la presión interna) pero no del propio diámetro. Como se aprecia a primera vista y sin otra consideración habría infinitas posibilidades pero al final todo recae en costo. Efectivamente, una tubería de gran diámetro facilita el flujo por lo que la pérdida de carga (por lo tanto la potencia de bombeo) es baja pero se encarece por el material debido a la importante masa del mismo.

Por otro lado, un tubo de diminuto diámetro haría que el costo de materia (fijo) sea bajo pero la presión y potencia de bombeo sean altas (variables). Entre ambos extremos existe un diámetro que minimiza el costo total (fijos más variables) que se denomina diámetro óptimo (o económico) de tubería.

Aunque en la bibliografía puedan existir referencias e incluso nomogramas nada sustituye la potencia de un simulador que además permite ajustar los parámetros a las condiciones de lugar y tiempo en particular. Esto es debido a que los costos de energía difieren de una zona a otra lo mismo que el del material haciendo que debamos elegir soluciones particulares sesgadas por estas condiciones. Por ejemplo, si el material es particularmente caro quizás debamos sacrificar costo operativo (bombeo) a fin de mantener reducido el del materia o al contrario, si el material es barato o la energía cara debamos tomar un diámetro más grande. Todo esto se ilustrará con ejemplos.

Ejemplo 1: Se desea bombear 100 [kg/h] de agua por una tubería de 1000 [m] horizontal y adiabática 25[°C] y 1 [atm] a 25 [°C] y 2 [atm]. Los costos son los siguientes y se utilizará el Hysys®

- Acero dulce ($\epsilon=4,572 \times 10^{-5}$ [m])
- El flujo de 1000 [kg/h] y tubería de acero al carbono ($\epsilon=2,5790 \times 10^{-5}$ [m])

$$\text{Costo potencia: } C_{OPERATIVO} = C_1 \left[\frac{us\$}{KJ} \right] * H_{OP} \left[\frac{Hr}{año} \right] POTENCIA \left[\frac{KJ}{h} \right]$$

Siendo $C_1 : 0,058823$ y $H_{Op} = 8500$ queda:

$$C_{OPERATIVO} = 500 \left[\frac{us\$}{KJ} \right] * POTENCIA \left[\frac{KJ}{h} \right]$$

$$\text{Costo tubería: } C_{FLJO} = C_2 \left[\frac{us\$}{mm^2} \right] * L[m] * (D_1)^2 [mm^2] * (1 + 0,20) * 0,15$$

Siendo $C_2 = 0,27777$ y $L = 1000$, para un 20 % de instrumentación y 15 % TIR queda

$$C_{FLJO} = 50 \left[\frac{us\$}{mm^2} \right] * (\text{DIÁMETRO INTERIOR TUBERÍA})^2 [mm^2]$$

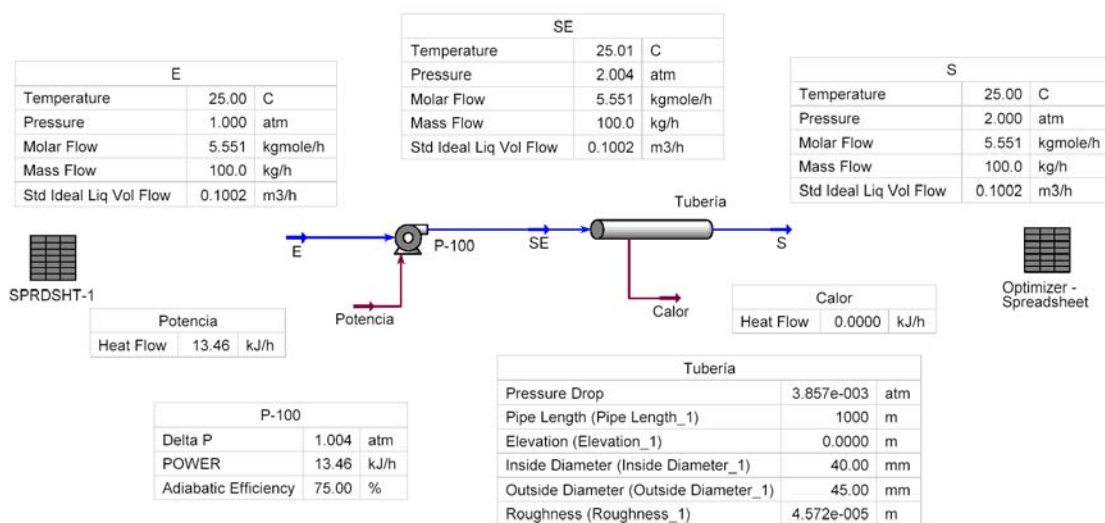
$$\text{Costo total: } C_{TOTAL} = C_{OPERATIVO} + C_{FLJO}$$

Armado del Flowsheet:

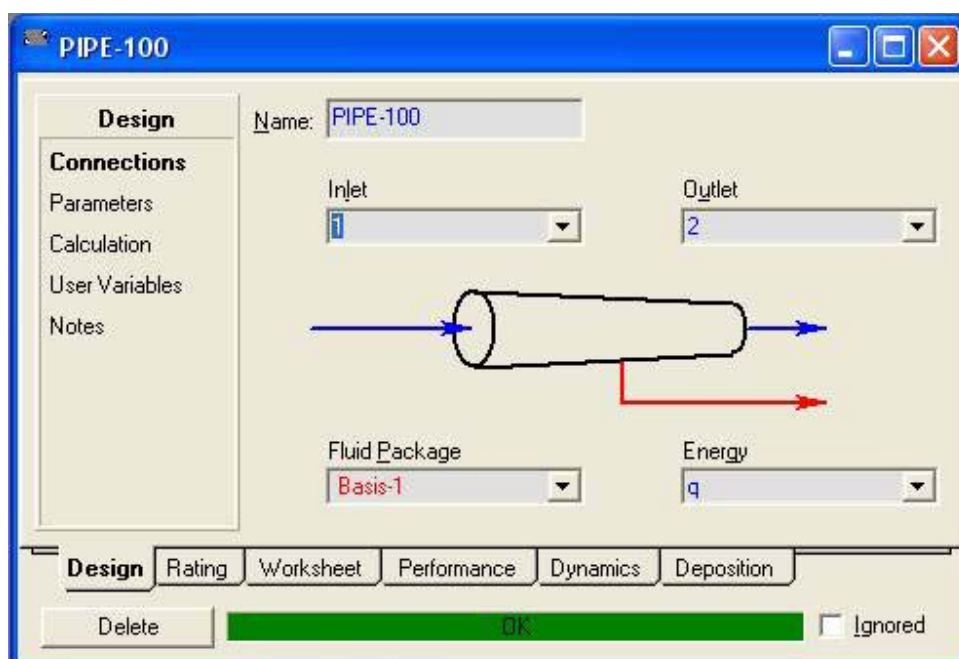
- Acero dulce

Se inicia un caso nuevo con agua como componente y UNIQUAC-ideal como paquete FQ. Se instalan los objetos necesarios que incluyen:

- 3 Corrientes materiales.
- 2 Corrientes de energía.
- Una bomba centrífuga
- Un tubería



Configuración tubería



PIPE-100

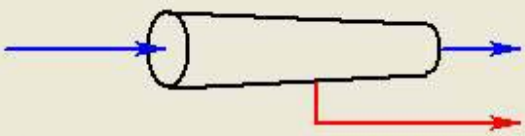
Design

Connections
Parameters
Calculation
User Variables
Notes

Pipe Flow Correlation

Aziz, Govier and Fogarasi
Baxendell and Thomas
Beggs and Brill

View Correlation...



Delta P: 0.3908 Duty: 0.0000

Gravitation Energy Change 0.0000 kW

Design Rating Worksheet Performance Dynamics Deposition

Delete **OK** ☐ Ignored

PIPE-100

Rating

Sizing
Heat Transfer

Length - Elevation Profile

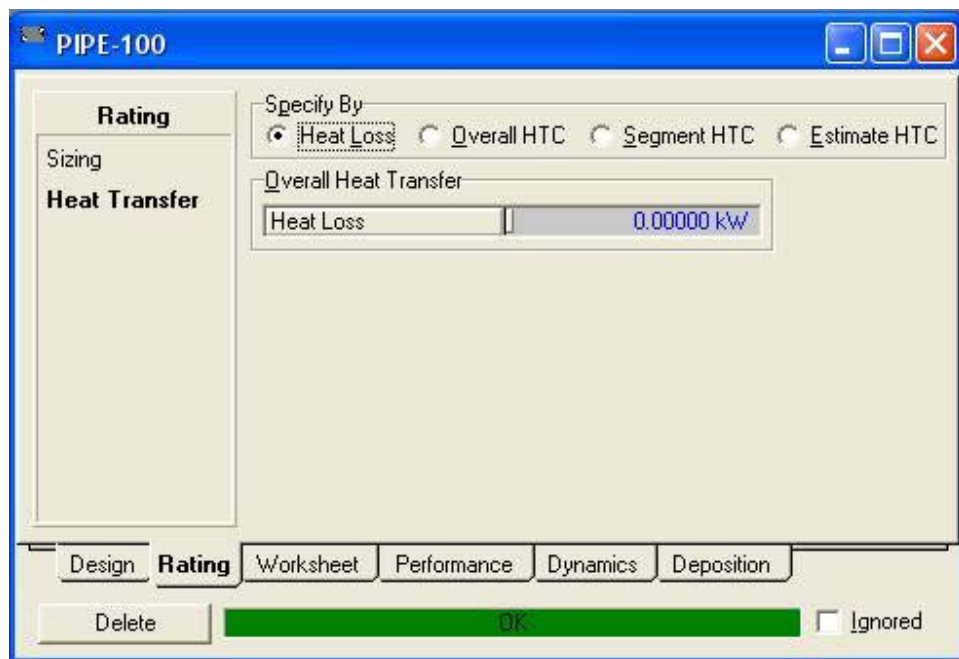
Segment	1
Fitting/Pipe	Pipe
Length	1000
Elevation Change	0.0000
Outer Diameter	45.00
Inner Diameter	40.00
Material	Mild Steel
Increments	5

Append Segment Insert Segment View Segment...

Delete Segment Clear Profile

Design **Rating** Worksheet Performance Dynamics Deposition

Delete **OK** ☐ Ignored



Implementación:

La celda A1 contiene la potencia de bombeo mientras que la B1 su costo. La celda A2 el diámetro de la tubería y la B2 su costo. La celda B4 el costo total. La celda A2 el diámetro interno (variable manipulada). Las celdas A4 y A3 ($A3+0.5$) se exportan al módulo tubería.

SPRDSHT-1

Spreadsheet Name: SPRDSHT-1

Imported Variables

Cell	Object	Variable Description
A1	Potencia	Heat Flow

Edit Import...
Add Import...
Delete Import

Exported Variables

Cell	Object	Variable Description
A3	Tubería	Outside Diameter (Outside Diame
A4	Tubería	Inside Diameter (Inside Diameter_

Edit Export...
Add Export...
Delete Export

Connections Parameters Formulas Spreadsheet Calculation Order Variables

Delete Function Help... Spreadsheet Only... ☐ Ignored

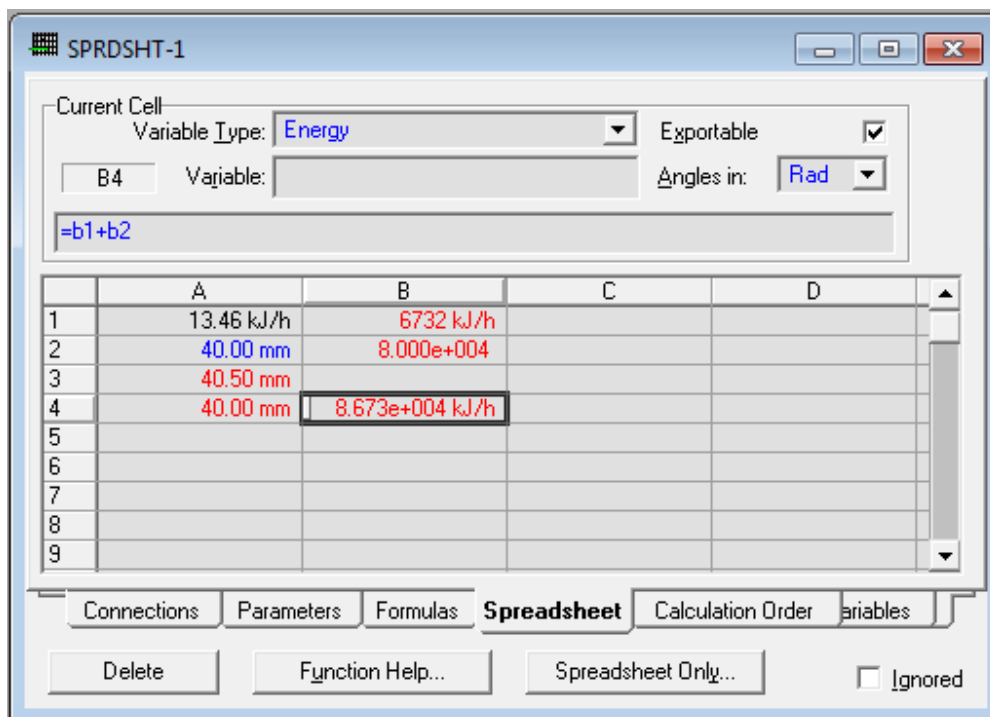
SPRDSHT-1

Formula Summary

Cell	Formula	Result
A3	=A2+0.5	40.50 mm
A4	=A2	40.00 mm
B1	=a1*500	6732 kJ/h
B2	=a2*a2*50	8.000e+004
B4	=b1+b2	8.673e+004 kJ/h

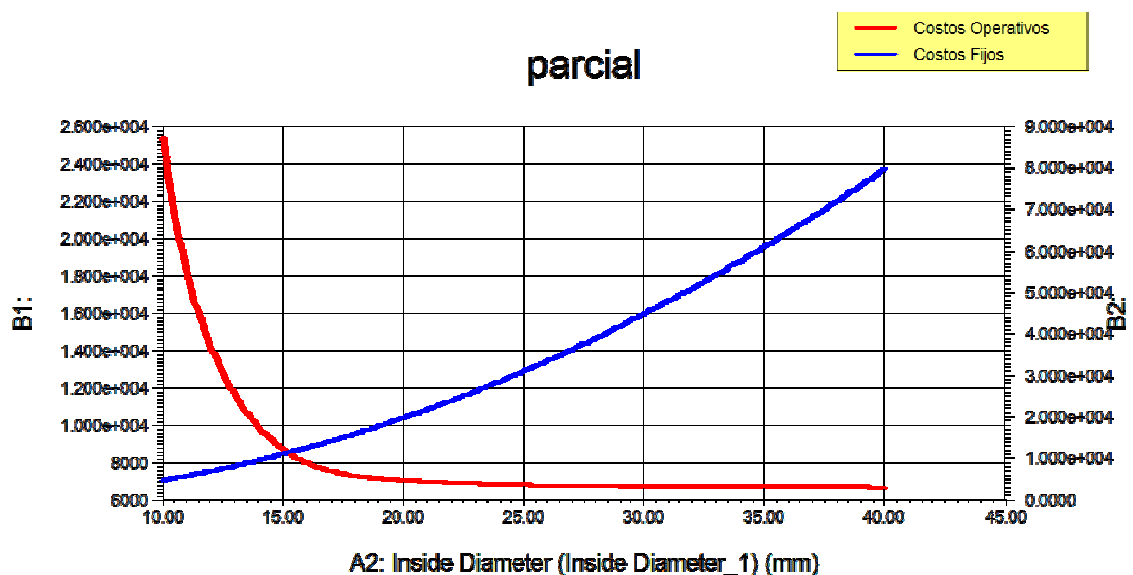
Connections Parameters Formulas Spreadsheet Calculation Order Variables

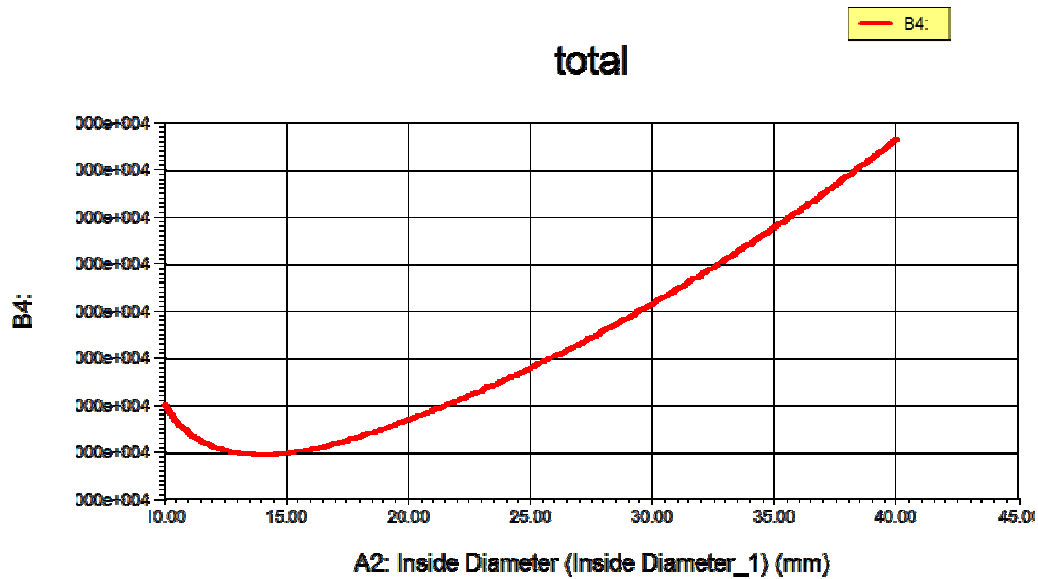
Delete Function Help... Spreadsheet Only... ☐ Ignored



Resultados:

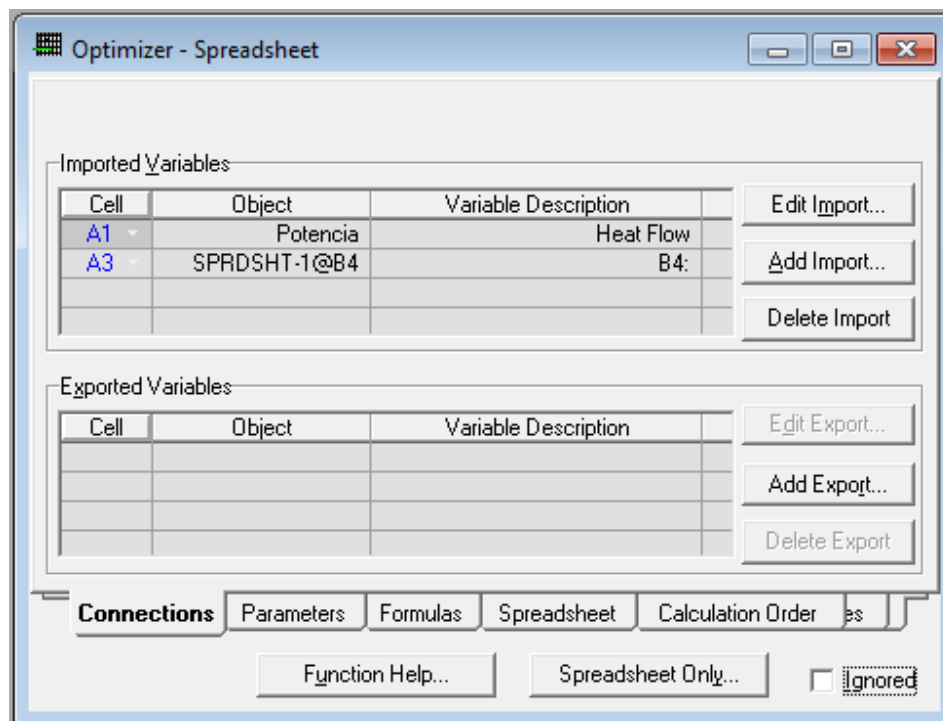
Si se parametriza con la celda A2 (diámetro interno) y su función costo total se obtiene las siguientes curvas.

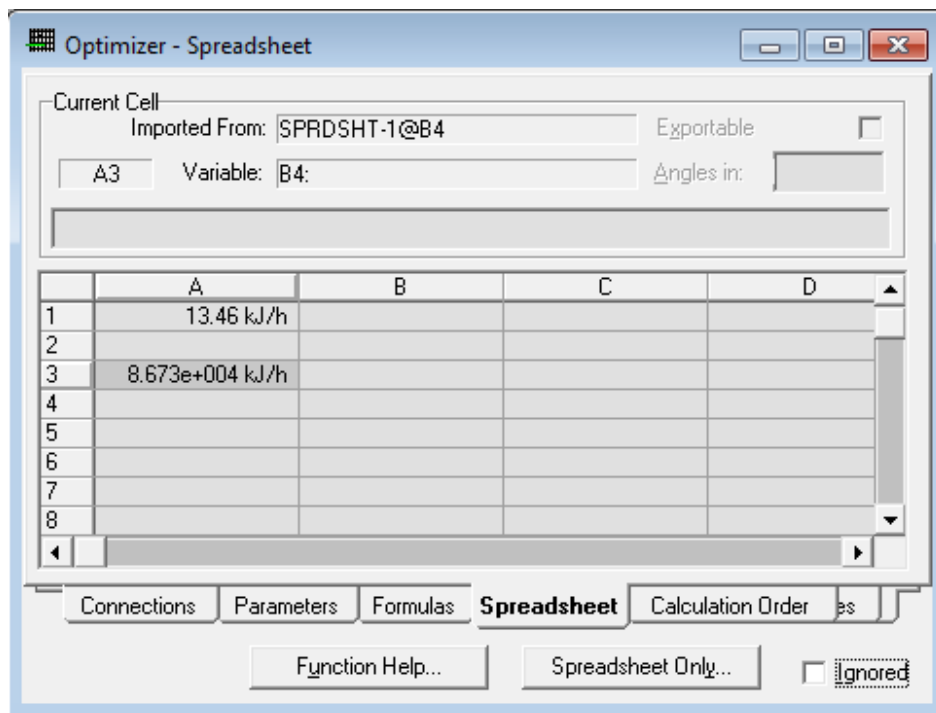




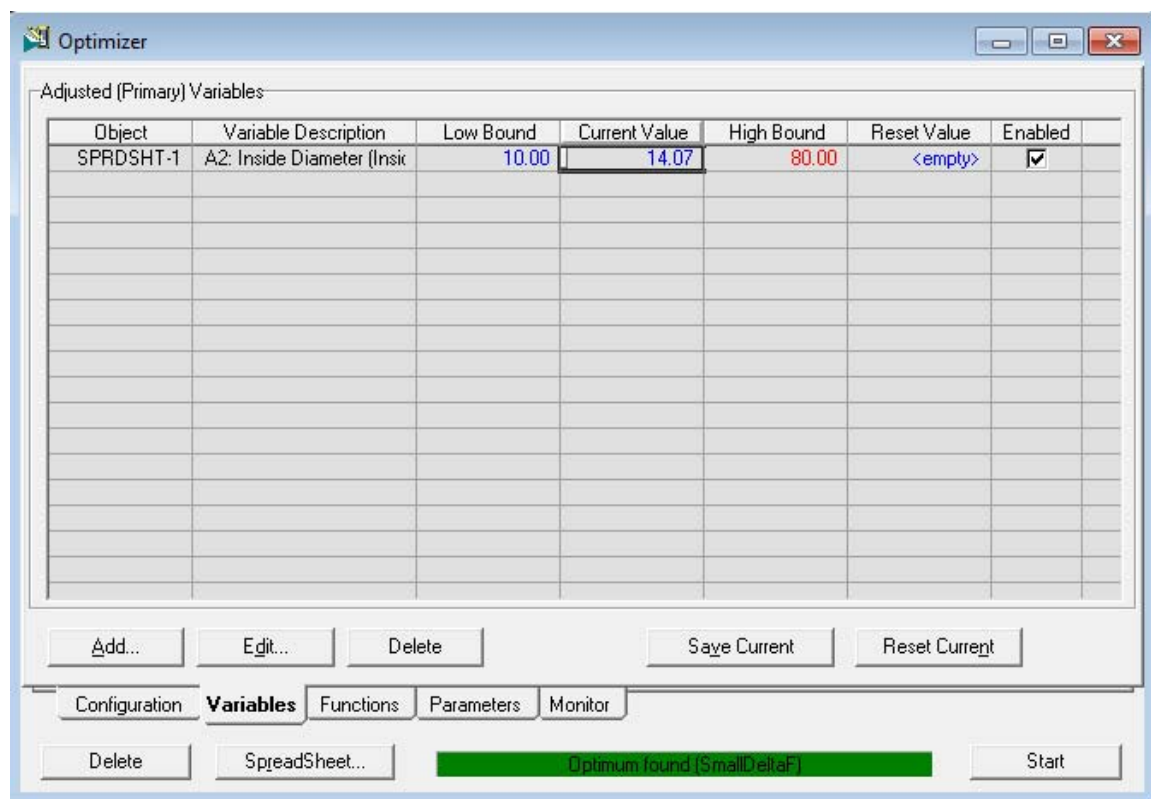
Optimización:

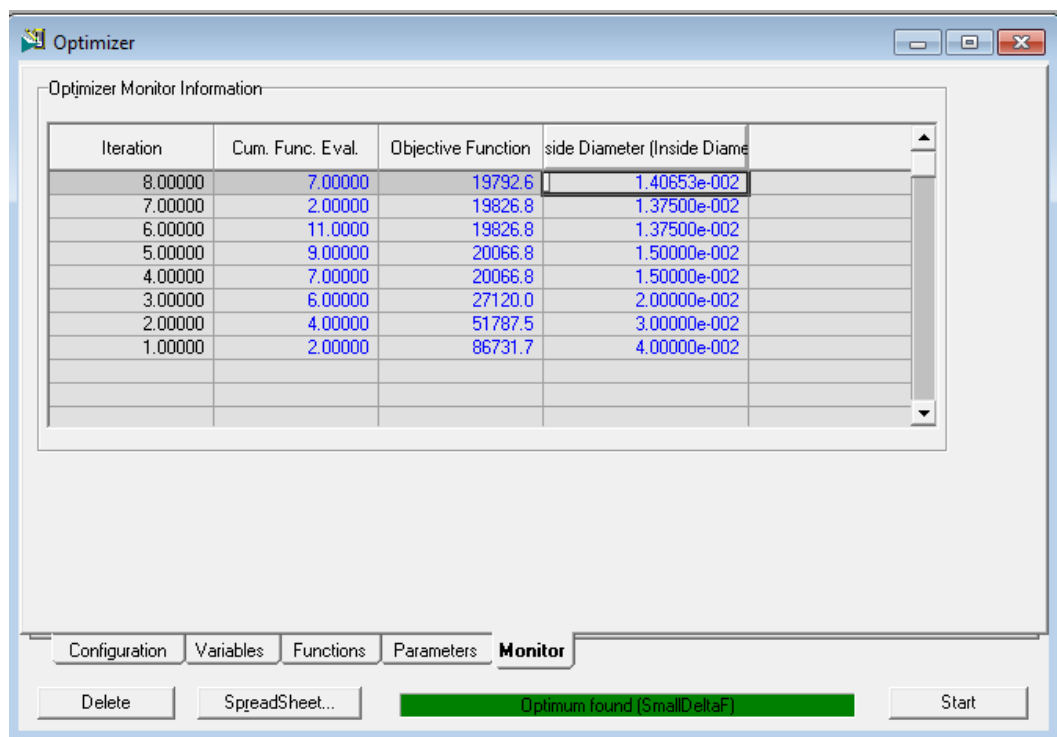
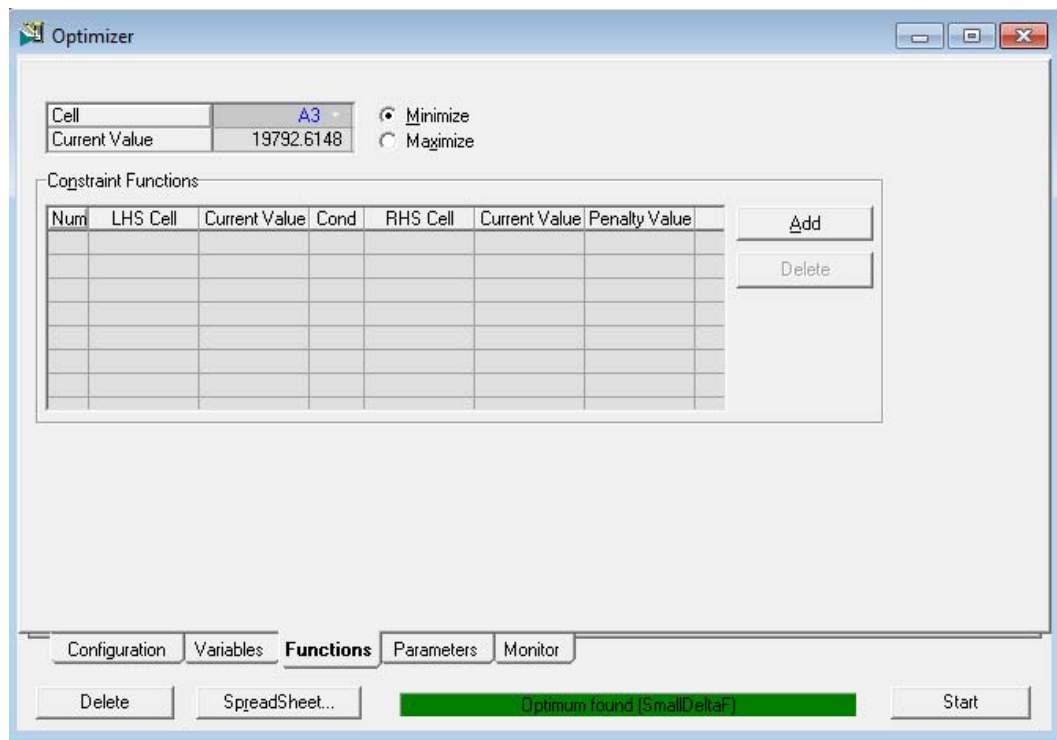
Se busca el diámetro interno de tubería que minimice el costo total en lugar de verlo en las gráficas.





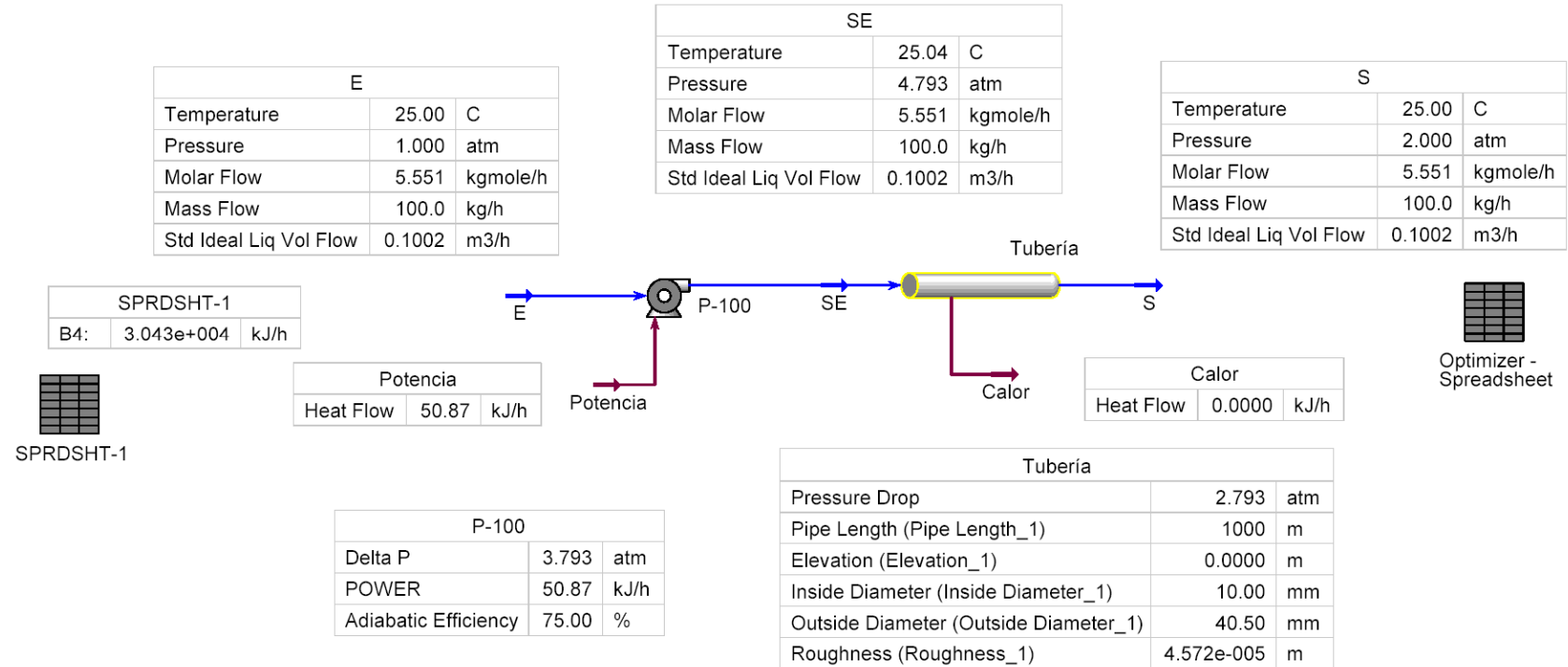
Después de presionar Start y tras varias iteraciones se encuentra el diámetro económico:



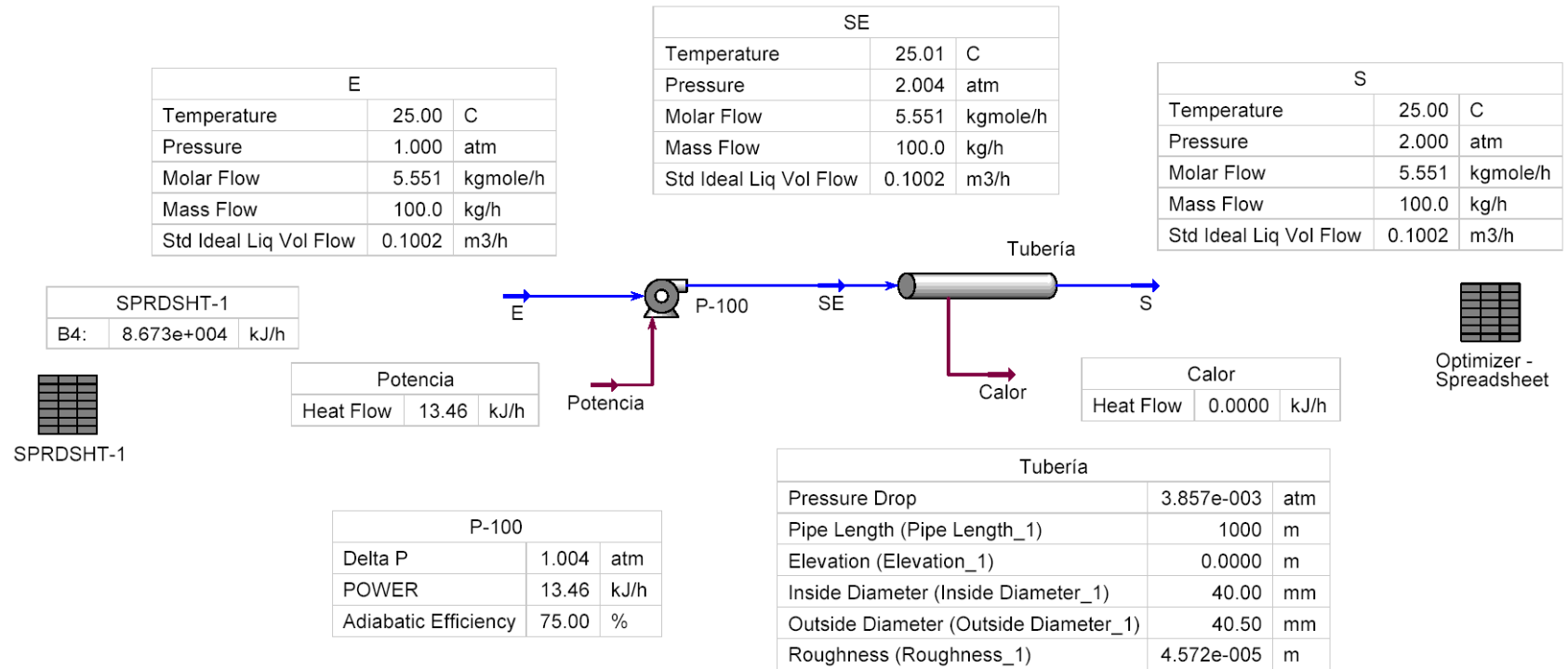


Es decir da 14,07 [mm] lo que corresponde con la curva del costo total mostrada anteriormente. En las siguiente figuras veremos la evolución de los costos para diferentes diámetros incluyendo el óptimo.

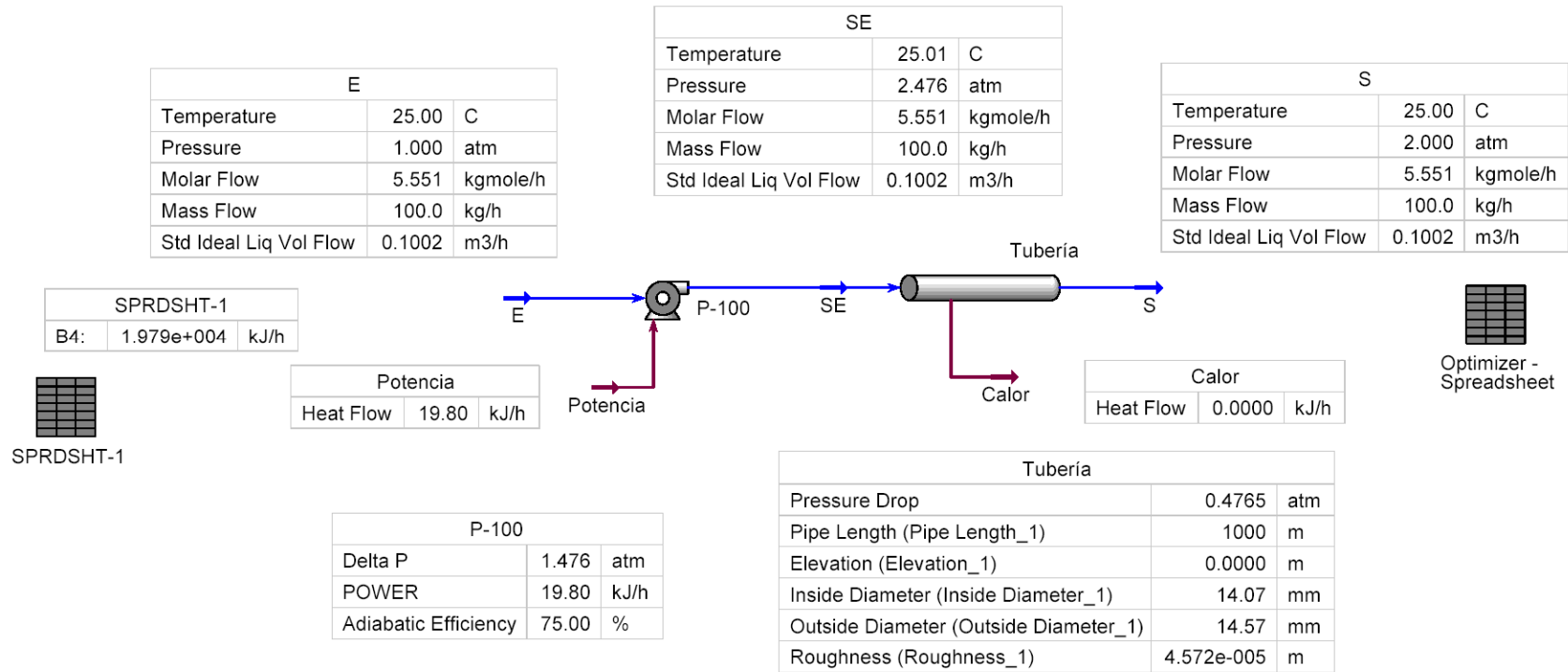
Cota inferior (10 mm), costo 3,043e4



Cota superior (40 mm), costo 8,673e4

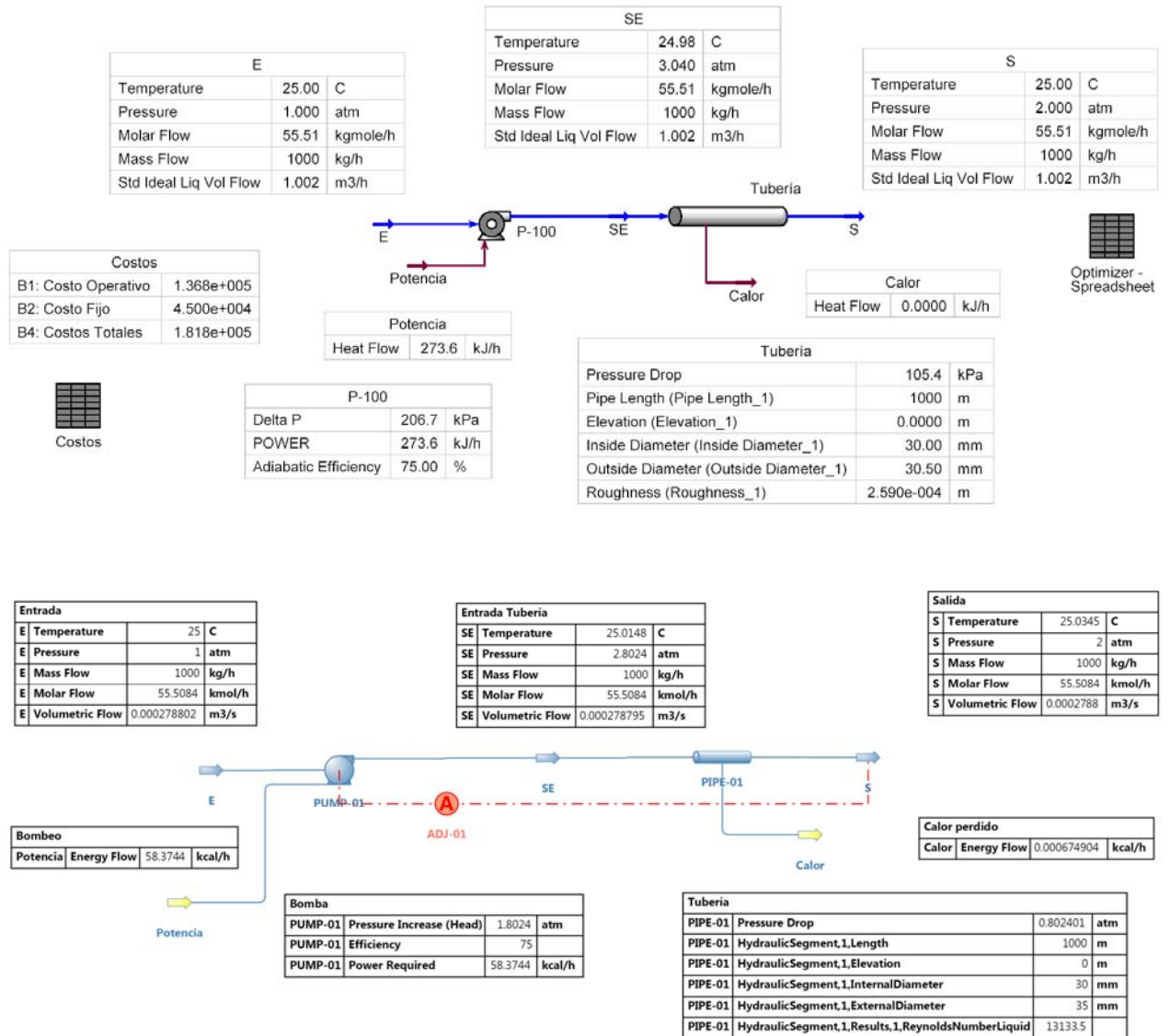


Óptimo (14,07 mm), costo 1,979e4

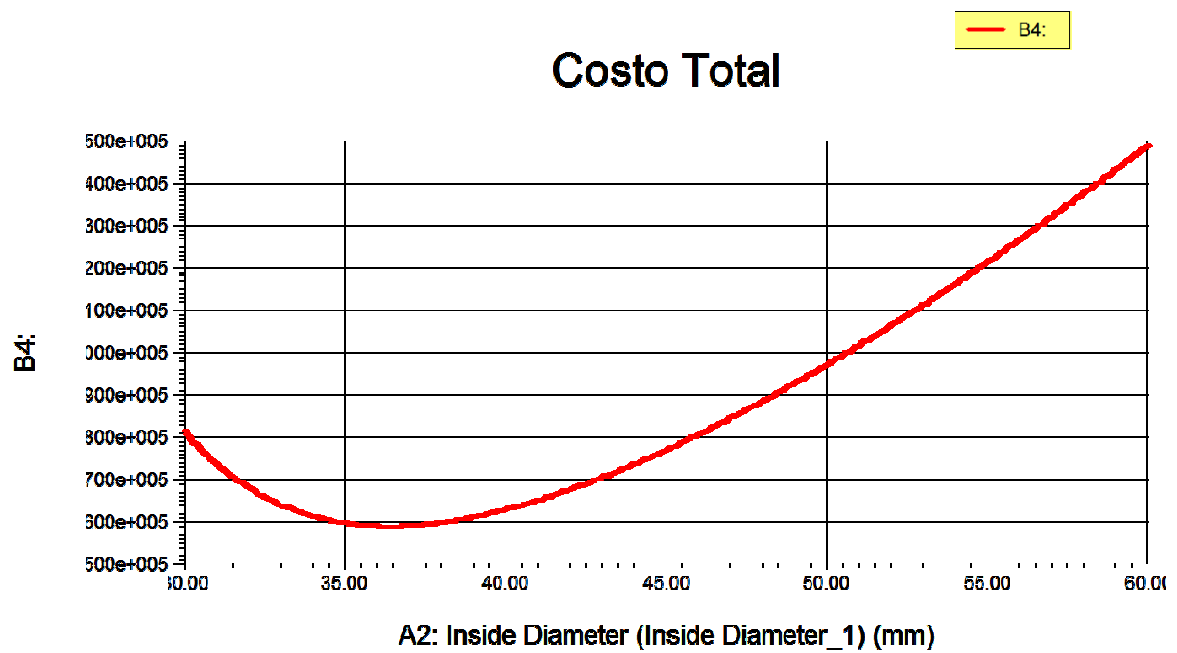
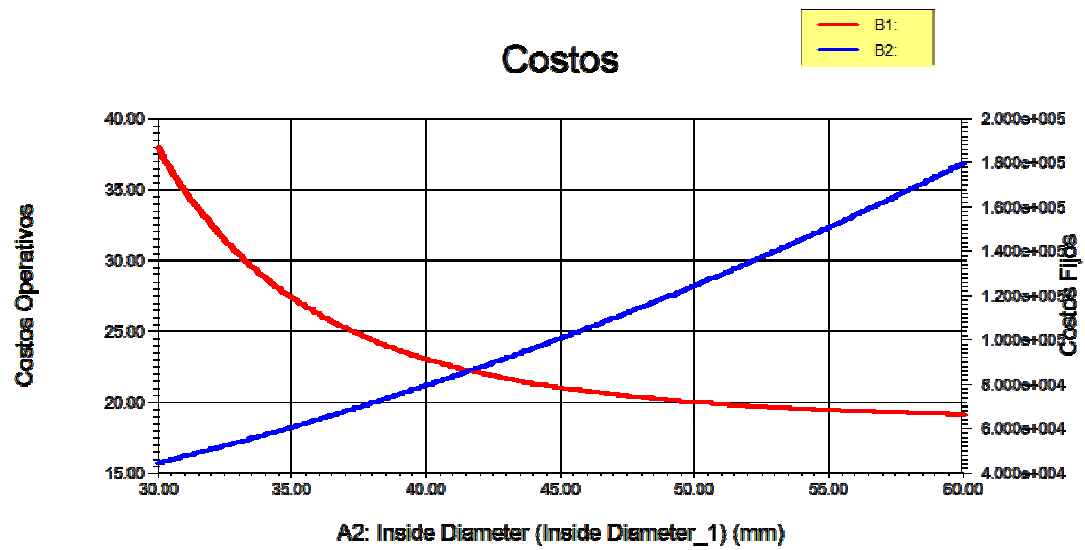


b) Acero al carbono:

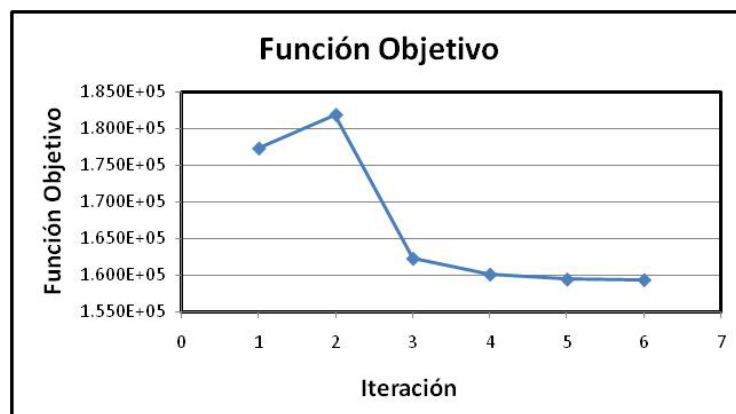
Siendo que el material, acero al carbono repetimos el ejemplo pero con un flujo de 1000 [kg/hr] de agua en las mismas condiciones, excepto en el material de la tubería:

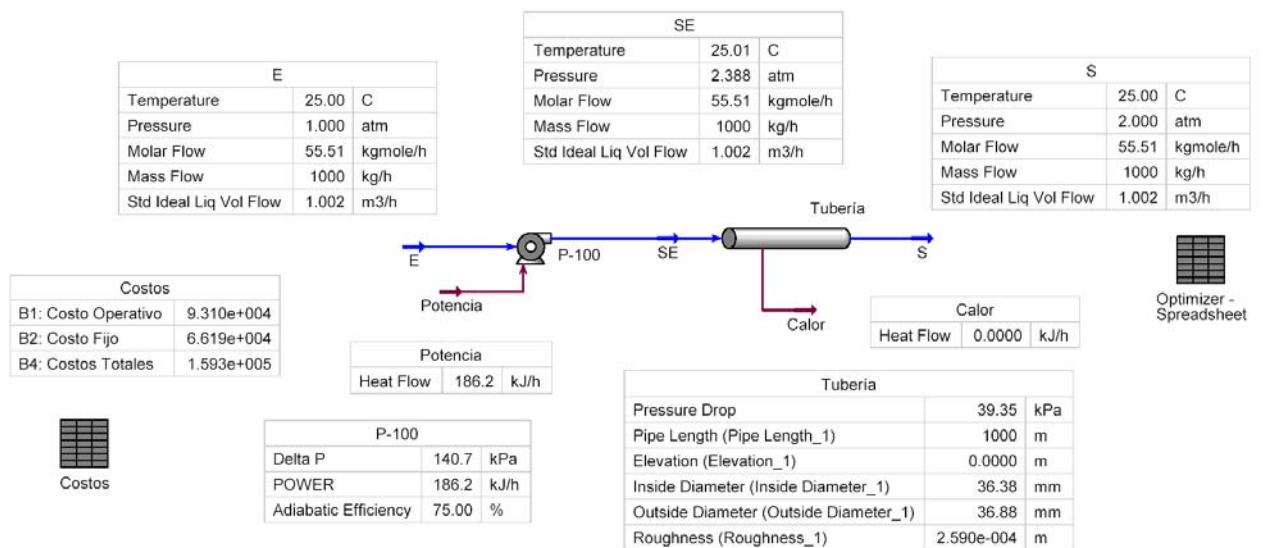
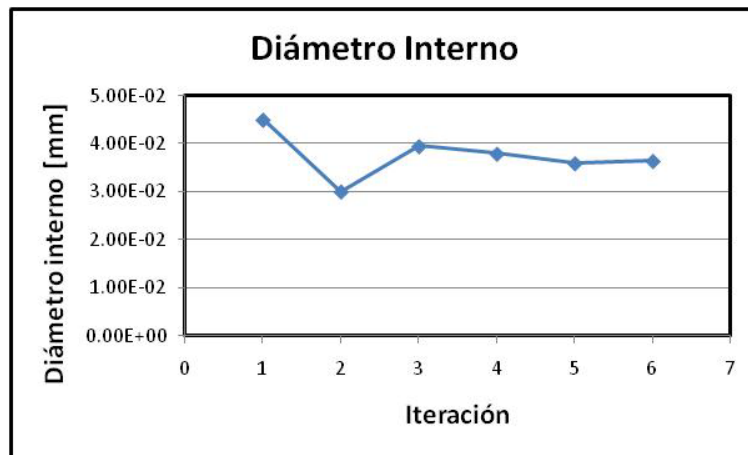


Parametrizando entre 30 y 60 [mm] en Hysys:



Y Optimizando:





Implementación en Excel:

En modelos simplificados de bombas se puede emplear la siguiente ecuación:

$$W = \frac{q}{\eta} \times \Delta P = \frac{F}{\rho \times \eta} \times \Delta P$$

Donde:

W: potencia [W]

q: caudal [m³/s]

ΔP: caída de presión [Pa]

F: flujo másico [kg/s]

η: eficiencia adiabática [adim]

ρ: densidad másica [kg/m³]

$$\Delta P = \frac{f \times \rho \times v^2 \times L}{2 \times D}$$

F: factor de fricción [adim]

$$v: \text{velocidad del fluido [m/s]} \quad v = \frac{q}{A_o} = \frac{F}{\rho \times A_o} = \frac{4 \times F}{\rho \times \pi \times D^2}$$

L: longitud de tubería [m]

D: diámetro interno de la tubería [m]

Cuando el régimen es laminar: $Re < 2000$

$$f = \frac{64}{Re}$$

Para régimen turbulento: $Re > 2000$

$$\sqrt{\frac{1}{f}} = -2 \times \log_{10} \left(\frac{\varepsilon}{3,7 \times D} + \frac{2,51}{Re \times \sqrt{f}} \right) \quad \text{Colebrook:}$$

ε : rugosidad de la pared de la tubería [m]

$$Re = \frac{D \times \rho \times v}{\mu}$$

μ : viscosidad [Nw.s/m²]

Como se aprecia el factor de fricción es una función implícita que debe resolverse en forma iterativa. Una forma eficiente de tomar un valor de arranque es a través de la ecuación de Blasius:

$$f = 0,316 \times Re^{-0,25}$$

$$\text{Costo potencia: } C_{OPERATIVO} = 500 \left[\frac{us\$}{KJ} \right] * POTENCIA \left[\frac{KJ}{h} \right]$$

$$\text{Costo tubería: } C_{FIJO} = 50 \left[\frac{us\$}{mm^2} \right] * (DIÁMETRO INTERIOR TUBERÍA)^2 [mm^2]$$

$$\text{Costo total: } C_{TOTAL} = C_{OPERATIVO} + C_{FIJO}$$

Datos:

Fluido:

$$\rho_{\text{agua}} = 1000 \text{ [kg/m}^3\text{]}$$

$$\mu_{\text{agua}} = 0,89 \text{ [cp]} = 8,900\text{E-}04 \text{ [Nw.s/m}^2\text{]}$$

$$F_{\text{agua}} = 1000 \text{ [kg/h]} = 0,2778 \text{ [kg/s]}$$

$$q_{\text{agua}} = F_{\text{agua}} / \rho_{\text{agua}} = 2,778\text{E-}04 \text{ [m}^3\text{/s]}$$

Tubería:

L= 1000 [m], horizontal

$$\epsilon_{\text{tubería}} = 2,59\text{E-}04 \text{ [m]}$$

Se implementa el modelo en una planilla de cálculo como la sigue (mostrando fórmulas):

Agua				
Ro			1000	[kg/m ³]
mu	0,89	[cp]	=0,001*B3	[N.s/m ²]
F			1000	[kg/hr]
q			=D2/3600/D4	[m ³ /s]
Temp	25	[°C]	=273,15+B6	[°K]
Tubería y bomba				
e			0,000259	[m]
DI	10	[mm]	=B10/1000	[m]
P _{salida}	2	[atm]	=101325*B11	[N/m ²]
L			1000	[m]
ef	75	%	=B13/100	
P _{Entrada}	=B11+D22	[atm]	=D11+B22	[N/m ²]
Resultados provisorios				
A _{tubería}	=PI()*D10^2/4	[m ²]		
v	=D5/B17	[m/s]		
Re	=D10*D2*B18/D3	adim		
f _{Blasius}	=0,316*B19^(-0,25)			
f	0,0223811645275941	Func(f)	=1/RCUAD(B21)+2*LOG10(D9/(3,7*D10)+2,51/(B19*RCUAD(B21)))	
DP	=B21*D2*D12*B18^2/(2*D10)	[N/m ²]=[Pa]	=0,000009869233*B22	[atm]
Pot	=D5*B22/D13	[j/s]	=B23*3600/1000	[kJ/hr]
Resultados finales				
C _{Op}	=500*D23			
F _{fijo}	=50*B10^2			
C _{total}	=B26+B27			

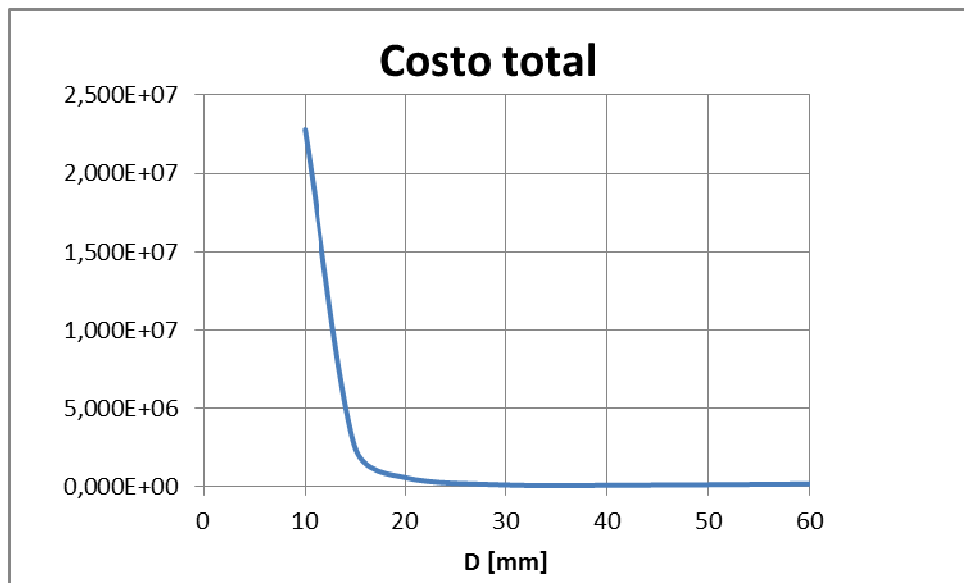
Y mostrando contenidos:

Agua				
Ro			1000	[kg/m ³]
mu	0,89	[cp]	8,900E-04	[N.s/m ²]
F			1000	[kg/hr]
q			2,778E-04	[m ³ /s]
Temp	25	[°C]	298,15	[°K]
Tubería y bomba				
e			2,59E-04	[m]
DI	10,00	[mm]	0,01	[m]
P _{salida}	2	[atm]	202650	[N/m ²]
L			1000	[m]
ef	75	%	0,75	
PEntrada	140,15	[atm]	1,4201E+07	[N/m ²]
Resultados provisorios				
A _{tubería}	7,854E-05	[m ²]		
v	3,537	[m/s]		
Re	3,974E+04	adim		
f _{Blasius}	2,238E-02			
f	2,238E-02	Func(f)	2,43	
DP	1,3998E+07	[N/m ²]=[Pa]	138,15	[atm]
Pot	5184,47	[j/s]	18664,08	[kJ/hr]
Resultados finales				
C _{OP}	9,332E+06			
F _{fijo}	5,000E+03			
C _{total}	9,337E+06			

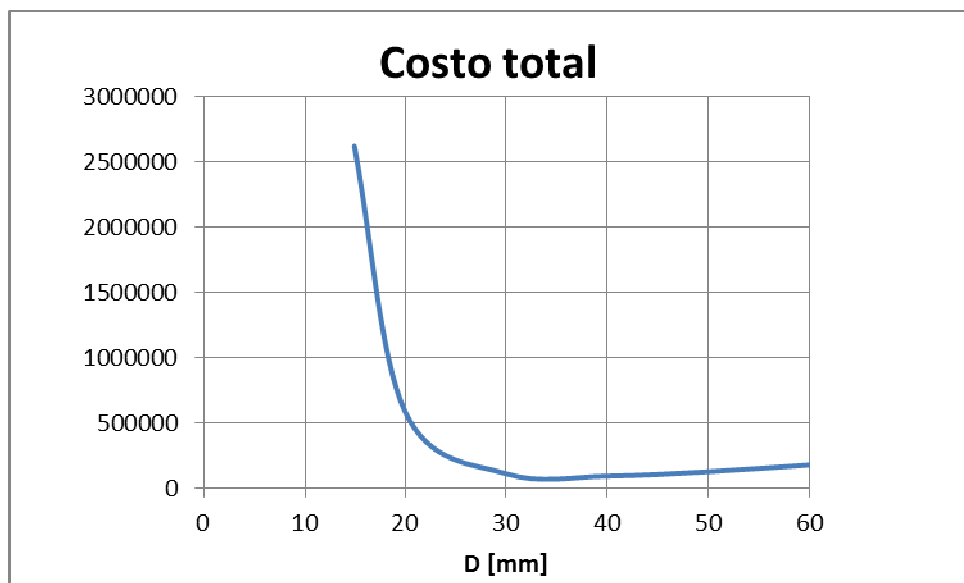
Para un diámetro 10 [mm] da un Re de 3.974e4 lo que la ubica en el régimen turbulento. Se aprecia, además, que la ecuación implícita de Cole Broke aplicada a f calculada por Blasius da 2,43 en lugar de 0. Para encontrar el real f debemos ajustarla mediante búsqueda de objetivos haciendo que Func(f)=0. De este modo queda:

Agua			
Ro			1000 [kg/m ³]
mu	0,89 [cp]		8,900E-04 [N.s/m ²]
F			1000 [kg/hr]
q			2,778E-04 [m ³ /s]
Temp	25 [°C]		298,15 [°K]
Tubería y bomba			
e			2,59E-04 [m]
DI	10,00 [mm]		0,01 [m]
P _{salida}	2 [atm]		202650 [N/m ²]
L			1000 [m]
ef	75 %		0,75
P _{Entrada}	339,43 [atm]		3,4393E+07 [N/m ²]
Resultados provisorios			
A _{tubería}	7,854E-05 [m ²]		
v	3,537 [m/s]		
Re	3,974E+04 adim		
f _{Blasius}	2,238E-02		
f	5,467E-02 Func(f)	0,00	
DP	3,4190E+07 [N/m ²]=[Pa]		337,43 [atm]
Pot	12663,13 [j/s]		45587,28 [kJ/hr]
Resultados finales			
C _{OP}	2,279E+07		
F _{fijo}	5,000E+03		
C _{total}	2,280E+07		

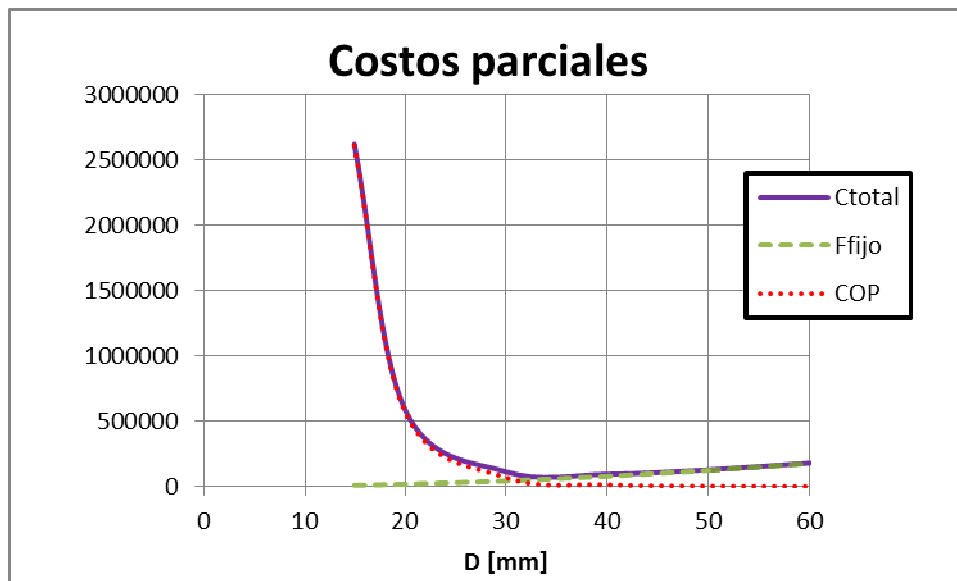
Con lo cual el problema queda resuelto para D=10 [mm]. Si modificamos D a 20, f debe reajustarse para hallar la nueva solución. De ese modo podemos confeccionar una tabla que ilustre los costos parciales y total en función del diámetro interno:



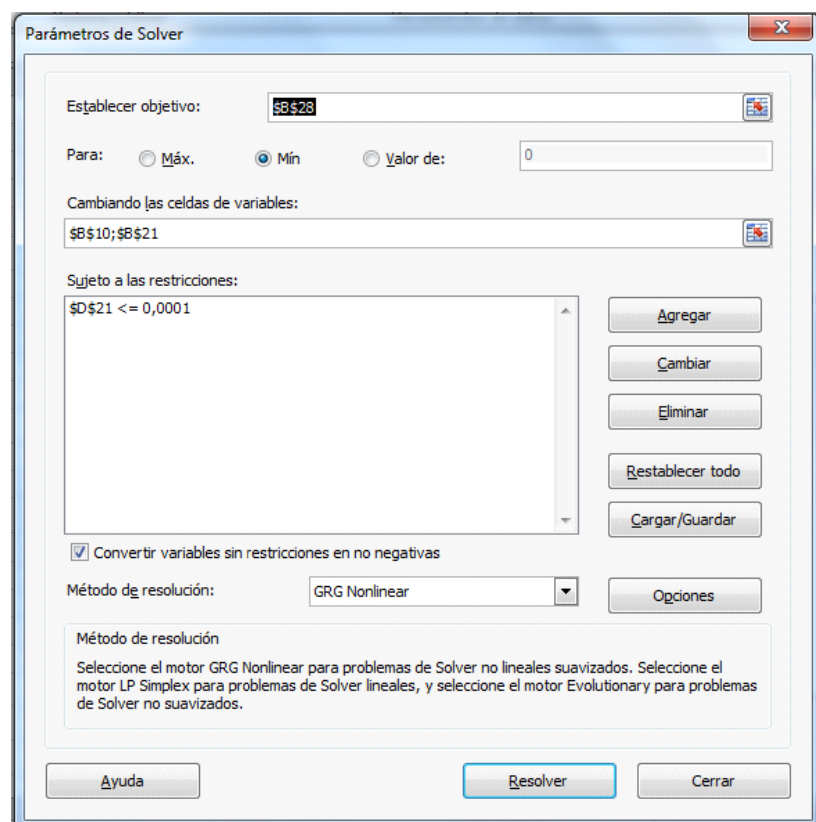
Como se ve el D=10 deforma demasiado la curva, si graficamos desde 15 [mm]:



Ahora se aprecia que entre 30 y 40 hay un mínimo. Si se grafican por separados los costos parciales:

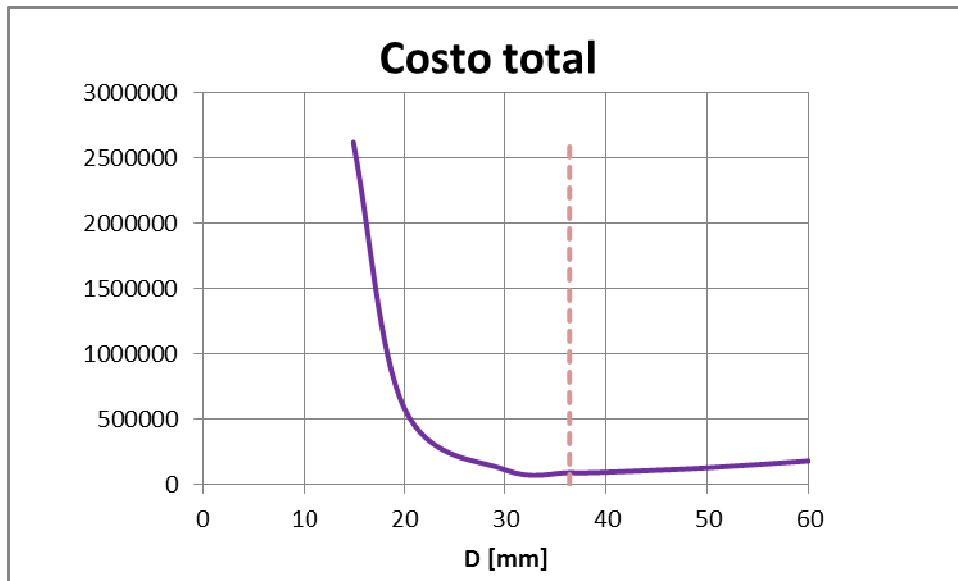


El costo total se pega a los operativos a diámetros pequeños y a los fijos a diámetros mayores. Para encontrar el diámetro económico debemos modificar simultáneamente el diámetro (variable de optimización) y f (variable implícita) haciendo que $Func(f)$ sea casi cero y minimizando el costo total. Esto es:



Agua			
Ro			1000 [kg/m3]
mu	0,89 [cp]		8,900E-04 [N.s/m2]
F			1000 [kg/hr]
q			2,778E-04 [m3/s]
Temp	25 [°C]		298,15 [°K]
Tubería y bomba			
e			2,59E-04 [m]
DI	36,36 [mm]		0,0363568 [m]
P _{salida}	2 [atm]		202650 [N/m2]
L			1000 [m]
ef	75 %		0,75
P _{Entrada}	2,39 [atm]		2,4167E+05 [N/m2]
Resultados provisionarios			
A _{tubería}	1,038E-03 [m ²]		
v	0,268 [m/s]		
Re	1,093E+04 adim		
f _{Blasius}	3,091E-02		
f	3,963E-02	Func(f)	0,00
DP	3,9019E+04 [N/m2]=[Pa]		0,39 [atm]
Pot	14,45 [j/s]		52,03 [kJ/hr]
Resultados finales			
C _{OP}	2,601E+04		
F _{fijo}	6,609E+04		
C _{total}	9,210E+04		

Valor que se aproxima mucho al obtenido con Hysys®. La línea de trazos de la figura inferior ubica dicho diámetro económico.



Implementación en GAMS.

* DSOySP

* Diámetro económico de tubería

PARAMETERS

Ro /1000/
mu /8.9e-4/
e /2.59e-4/
F /1000/
L /1000/
pi /3.1415926536/
PS /202650/
PE /101325/
ef /0.75/

VARIABLES

f_{temp}, C_{Total};

POSITIVE VARIABLES

q, A, v, Re, fr, eD, DP, PES, Pot, CO, CF, DPB
DI;

EQUATIONS

R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R9, R10, R11, R12, R13, R14;

R1.. $q = E \cdot F / Ro / 3600;$
R2.. $A = E \cdot \pi \cdot DI^2 / 4;$
R3.. $v \cdot A = E \cdot q;$
R4.. $Re = E \cdot DI \cdot Ro \cdot v / \mu;$
R5.. $fr \cdot f_{temp}^2 = E \cdot 1;$
R7.. $f_{temp} = E \cdot -2 \cdot \log_{10}(eD / 3.7 + 2.51 / Re \cdot f_{temp});$
R6.. $eD = E \cdot e / DI;$
R8.. $DP = E \cdot fr \cdot L \cdot v^2 \cdot Ro / 2 / DI;$

```

R9..    PES =E= PS+DP;
R10..   Pot =E= q*DPB/ef;
R11..   CO =E= 500*Pot*3600/1000;
R12..   CF =E= 50*(DI*1000)**2;
R13..   CTotal =E= CO+CF;
R14..   DPB =e= PES-PE;
v.l=1;
A.l=1;
fr.l=0.10;
ftemp.l=4;
Re.l=1000;
DI.l=0.01;

options savepoint=2
MODEL BM /ALL/;
SOLVE BM USING NLP MINIMIZING CTotal;

```

Lo que da:

Variable	Valor	Unidad
A	1.038E-03	[m ²]
CF	6.609E+04	[u\$s/año]
CO	9.356E+04	[u\$s/año]
CTotal	1.597E+05	[u\$s/año]
DI	3.636E-02	[m]
DP	3.902E+04	[Pa]
DPB	1.403E+05	[Pa]
eD	7.124E-03	[adim]
fr	3.963E-02	[adim]
ftemp	5.023E+00	
PES	2.417E+05	[Pa]
Pot	5.198E+01	
q	2.778E-04	[m ³ /s]
Re	1.093E+04	[adim]
v	2.676E-01	[m/s]

EMSO

Aplicamos el mismo ejemplo al simulador EMSO. El código resultante en modo simulación paramétrica es:

```

## Diametro economico de tuberia*##

using "types";

FlowSheet DiaEcon

PARAMETERS
    PP as Plugin(Brief="FQ",
    Type="PP",

```

```

Components=["water"],
LiquidModel="IdealLiquid",
VapourModel="Ideal" );
L as Real;
FM as Real;
e as Real;
PS as Real;
ef as Real;

```

VARIABLES

```

F as Real;
M as molweight;
eD as Real;
DI as Real;
Re as Real;
pi as Real;
v as Real;
TE as Real;
PE as Real;
x as Real;
Ro as Real;
mu as Real;
q as Real;
f as Real;
ftemp as Real;
PSE as Real;
DP as Real;
Pot as Real;
COp as Real;
CF as Real;
CTotal as Real;
HE as enth_mol;
SE as entr_mol;

```

EQUATIONS

```

M=PP.MolecularWeight;
F=FM/M/1000;
DI=time;
eD=e/DI;
pi=2*asin(1);
x=1;
TE=298*'K';
PE=PSE+DP;
q=FM/(3600*Ro);
Ro=PP.LiquidDensity(TE,PE,x);
mu=PP.LiquidViscosity(TE,PE,x);
q=v*pi*DI^2/4;
Re=DI*Ro*v/mu;
ftemp^2*f=1;
ftemp=-2*log(eD/3.7+2.51/Re*ftemp);
DP=f*L*v^2*Ro/2/DI;
PSE=PS+DP;
Pot=q*(PSE-PE)/ef;
COp=500*Pot*3600/1000;
CF=50*(DI*1000)^2;
CTotal = COp+CF;
HE=PP.VapourEnthalpy(TE,PE,x);

```

```
SE=PP.VapourEntropy(TE,PE,x);
```

SET

```
L =1000*'m';  
FM=1000;  
PS=2*'atm';  
e=2.590e-4;  
ef=0.75;
```

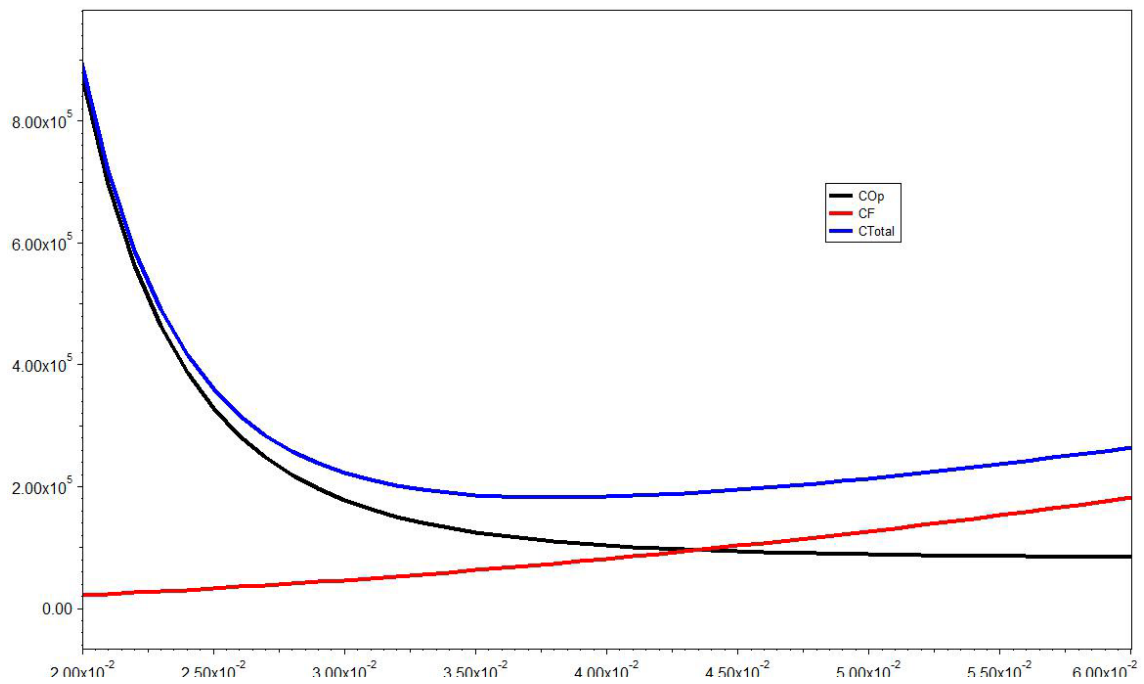
INITIAL

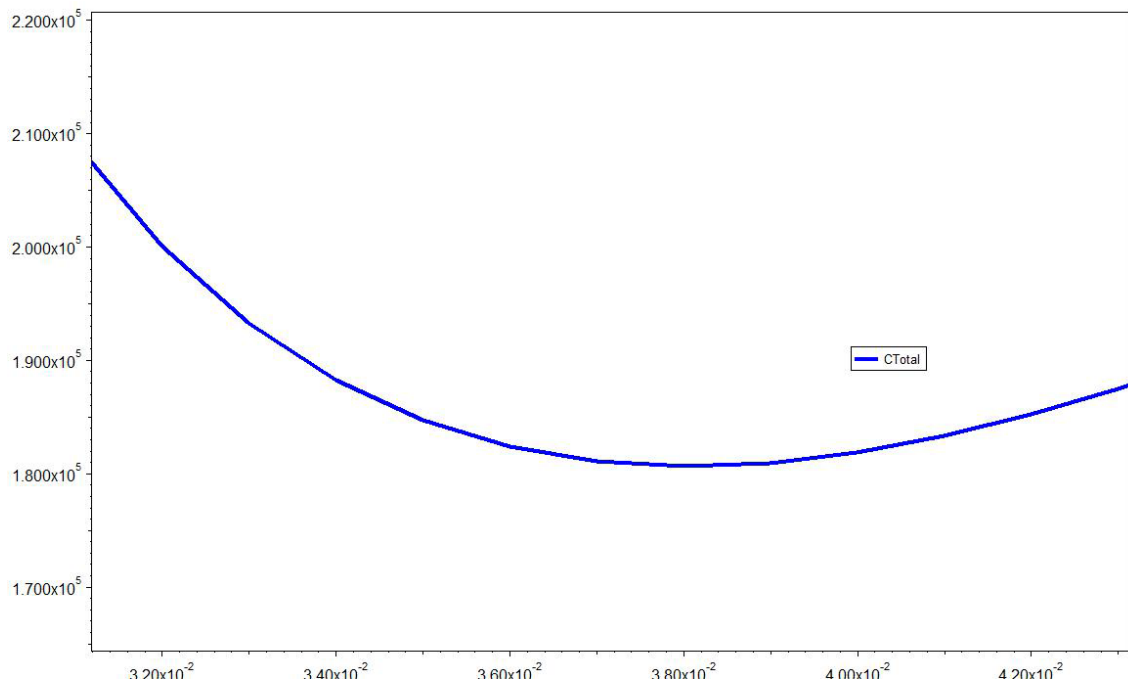
GUESS

```
Re=1000;  
DI=0.06;
```

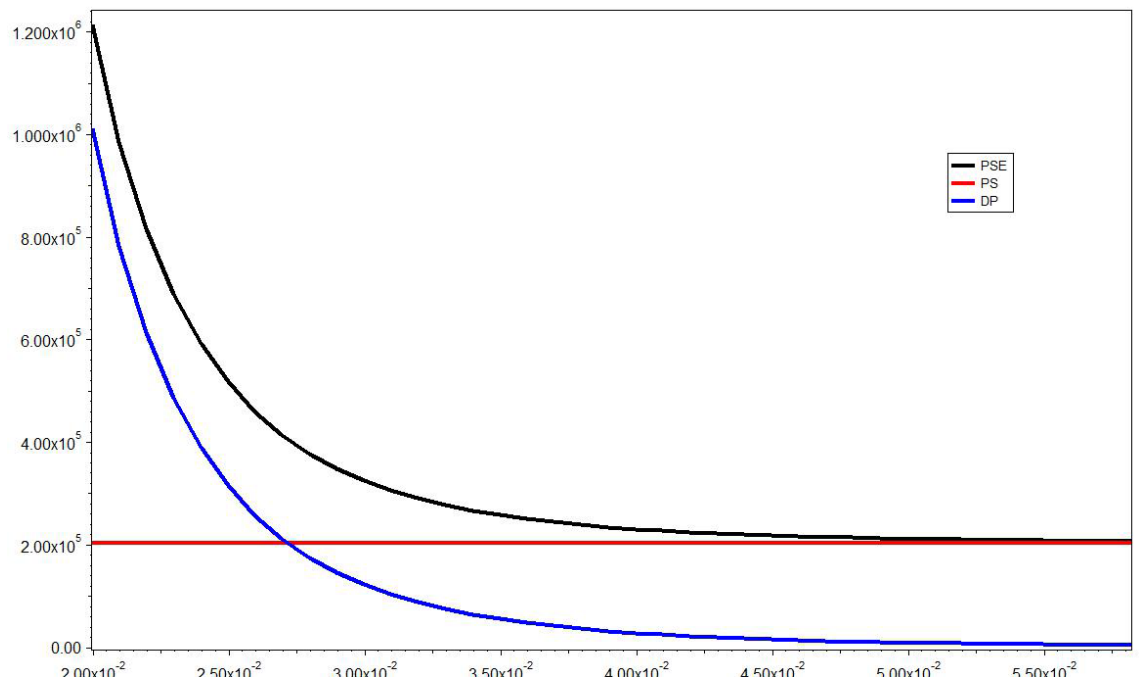
OPTIONS

```
TimeStart=0.02;  
TimeEnd=0.06;  
TimeStep=0.001;  
TimeUnit='m';  
DAESolver(File="dassl");  
Dynamic=true;  
End
```





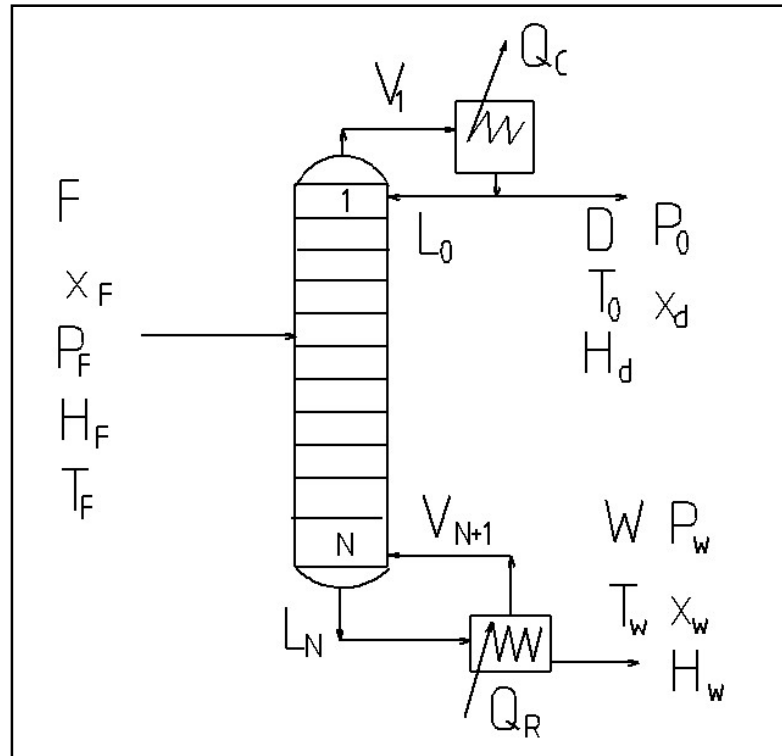
Vemos que el mínimo es de 38 [mm] aproximadamente. Las presiones antes y después de la tubería:



Ejemplo 2: Relación de reflujo óptima de una columna de destilación:

El reflujo en una columna de destilación es un parámetro importante tanto en etapa de diseño (condiciona su tamaño) como en operación (controla el grado de separación de los componentes,

Sea una mezcla binaria y la columna ilustrada en la figura siguiente:



Ejemplo:

Sea una columna que separa benceno de tolueno, alimentada con una mezcla equimolecular, 100 [Kmol/hr] como líquido saturado.

Adopte como especificación que debe recuperar el benceno por tope, en la corriente de salida con una concentración de al menos $x=0.98$ y en fondo de $x=0.06$. Tensión superficial ≈ 20 dinas/cm.

Adopte el siguiente esquema de cálculo.

- 1) Adopte una presión de trabajo de 1 [atm].
- 2) Suponga disponer de servicio de agua de enfriamiento a una temperatura de 20 [°C]. La misma sale a 70 [°C]. Suponga, además, disponer de servicio de vapor de calefacción de 2 [Kg/cm²] de presión manométrica.
- 3) El coeficiente U del condensador es de 500 [kCal/hr m² °K] mientras que para el reboiler es 500 [kCal/hr m² °K].
- 4) Calcule el número mínimo de etapas por Fenske y la mínima relación de reflujo por Underwood.

- 5) Mediante la ecuación de Gilliland calcular el número de etapas correspondientes a distintos valores de relación de reflujo.
- 6) Utilice la ecuación de Gilliland para verificar los heurísticos que dicen que los valores óptimos son aproximados una relación de reflujo, $R=1.45 R_{\min}$ o un número de etapas igual al doble del mínimo.
- 7) Desarrolle sus conclusiones.
- 8) Determine mediante simulaciones, el mejor plato de alimentación.

USO DEL MODELO RIGUROSO Y EL UTILITARIO DE HYSYS.

- 1) Desarrolle la función objetivo (costo de la columna).
- 2) Sobre esta base, y tomando como punto inicial el obtenido arriba ya estudiado, utilice el optimizador de Hysys empleando como variables de optimización:
 - 2-a) La relación de reflujo (comparar con el resultado anterior).
 - 2-b) La presión y la relación de reflujo. Discuta este punto.
 - 2-c) El número de etapas. Discuta este punto.
 - 2-d) La temperatura de salida del agua y la presión del vapor de calefacción.

Datos: (tomados de *Principios y cálculos básicos de la ingeniería química de Himmelblau*, David, año 1978)

Modelo

La corriente F completa, x_d , x_w , P_0 y P_w .

$$\begin{aligned}
 \text{Balance de materia global} \quad & F = D + W \quad W = F - D \\
 \text{Balance de masa por componente} \quad & F \times x_F = D \times x_d + W \times x_w \\
 & F \times x_F = D \times x_d + (F - D) \times x_w \\
 & F \times x_F = D \times x_d + F \times x_w - D \times x_w \\
 & F \times (x_F - x_w) = D \times (x_d - x_w)
 \end{aligned}$$

Con lo que los flujos de salida quedan:

$$D = F \times \frac{(x_F - x_w)}{(x_d - x_w)} \quad W = F \times \left[1 - \frac{(x_F - x_w)}{(x_d - x_w)} \right]$$

Determinación del reflujo mínimo, mínimo número de etapas y etapas en función del reflujo.

Se emplean las correlaciones de Fenske-Underwood y Gilliland. Así la de Underwood nos permite calcular la relación de reflujo mínimo. Para ello se define la volatilidad α_i como:

$$\alpha_i = (\alpha_{\text{SUPERIOR}} \times \alpha_{\text{MEDIO}} \times \alpha_{\text{INFERIOR}})^{1/3}$$

Recordemos que la volatilidad relativa es el cociente de la constante de equilibrio de cada componente con respecto a otro tomado como referencia.

$$\sum \frac{\alpha_i \times (x_{i,d})_m}{\alpha_i - \theta} = R_m + 1$$

Que para hallar la R_m se debe resolver la ecuación anterior determinando θ . Los $(x_{i,d})_m$ corresponde a la zona de restricción que se presenta cuando el número de etapas se hace infinito (reflujo mínimo). A los efectos prácticos se toma la composición en el plato de alimentación, esto es, la composición de alimentación misma. Por lo tanto para hallar θ se resuelve la siguiente ecuación:

$$\sum \frac{\alpha_i \times x_{i,F}}{\alpha_i - \theta} = 1 - q$$

Se calcula el θ que satisface dicha ecuación. El factor q indica la condición de la alimentación, cuando ingresa en su punto de burbuja vale 1 y cuando ingresa en su punto de rocío vale 0.

De esta forma podemos calcular la relación de reflujo mínima. Para calcular el número mínimo de etapas se usa la ecuación de Fenske:

$$N_m = \frac{\text{Log} \left[\left(\frac{D \times x_d}{W \times x_w} \right)_i \left(\frac{W \times x_w}{D \times x_d} \right)_r \right]}{\log \alpha_i}$$

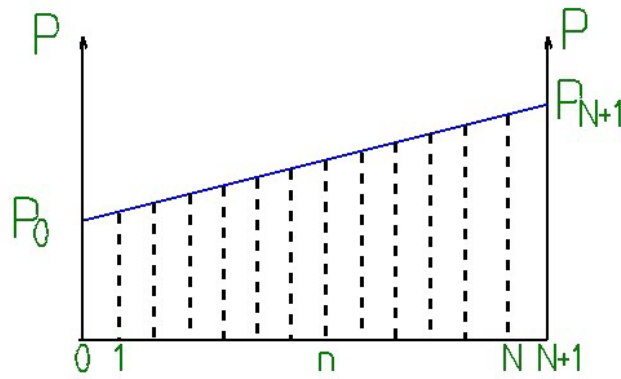
Siendo los i y r los componentes claves. Una vez calculadas tanto la relación de reflujo mínima como el mínimo número de etapas podemos correlacionar el número de etapas que le corresponde a una relación de reflujo dada. Para ello se aplica la correlación de Gilliland:

$$\varphi = \frac{(R - R_m)}{(R + 1)}$$

$$\frac{N - N_m}{N + 1} = 1 - \exp \left[\left(\frac{1 + 54.4 \times \varphi}{11 + 117.2 \times \varphi} \right) \left(\frac{\varphi - 1}{\varphi^{0.5}} \right) \right]$$

Determinación del perfil de presión.

Para ello se asume un perfil lineal como se aprecia en la figura. Sea pues n el número de etapa con 0 para el condensador y $N+1$ para el rehvador a los que les corresponde las presiones P_0 y P_w respectivamente.



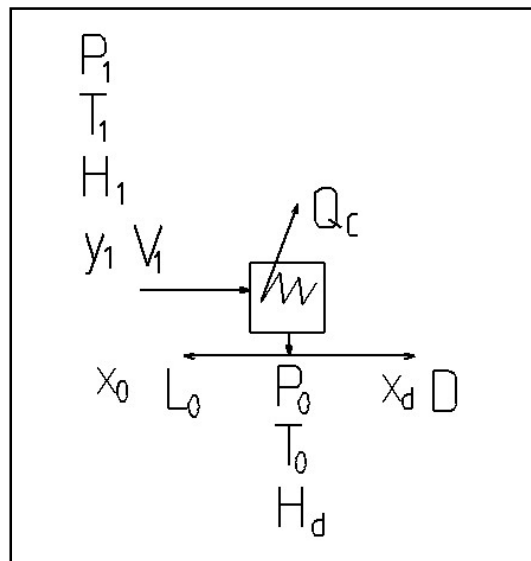
Para la etapa n le corresponde una presión:

$$P_n = \left(\frac{P_{N+1} - P_0}{N+1} \right) \times n + P_0$$

Condensador:

Sea un condensador total. De esto resulta que la composición del vapor que ingresa es igual a la del líquido que lo abandona (destilado y reflujo).

La relación de reflujo R se define como el cociente entre la cantidad de condensado que se refluja con respecto al flujo de destilado que abandona dicha etapa.



Por tratarse de un condensador total $x_d = x_0 = y_1$

Relación de Reflujo $R = \frac{L_0}{D} \quad L_0 = D \times R$

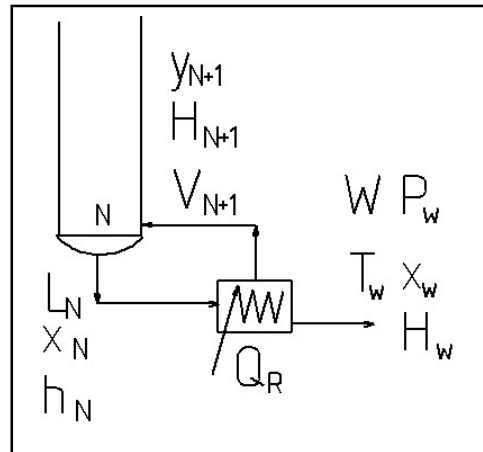
Balancede materia $V_1 = L_0 + D = D \times R + D$
 $V_1 = D \times (R+1)$

Balancede energía $H_1 \times V_1 = h_d \times D \times (R+1) + Q_C$
 $Q_C = H_1 \times V_1 - h_d \times D \times (R+1)$
siendo: h_d la entalpía a x_d en su punto de burbuja (T_0)
 H_1 la entalpía a y_1 en su punto de rocío (T_1)

Planteando el balance de energía en toda la columna podemos calcular el calor aportado al rehervidor una vez calculado el quitado en el condensador:

Balancede energía $H_F \times F + Q_R = h_d \times D + h_w \times W + Q_C$
 $Q_R = h_d \times D + h_w \times W + Q_C - H_F \times F$

Rehervidor:



Balancede materia global $L_N = V_{N+1} + W$

Balancede materia por componente $x_N \times L_N = y_{N+1} \times V_{N+1} + x_w \times W$

Siendo $y_{N+1} = K(P_w, T_w) \times x_w$ la composición del vapor en eq con W
 T_w es el punto de burbuja correspondiente a $[P_w, x_w]$

Balancede energía $h_N \times L_N + Q_R = H_{N+1} \times V_{N+1} + h_w \times W$

La entalpía de la corriente de vapor que abandona el rehervidor será función de la composición de dicha corriente y la temperatura del rehervidor. Por estar en equilibrio ambas corrientes (W y V_{N+1}) están a la misma temperatura (T_w). Como simplificación puede asumirse que dicha entalpía no depende de la presión.

$$H_{N+1} = f(T_w, y_{N+1})$$

La ecuación de balance de energía anterior tiene 2 incógnitas (h_N y V_{N+1}). A continuación se aplica el método de Sorel para encontrar dichas soluciones.

Se inicializa el entalpía del líquido que ingresa igualándola al de salida. Luego se recalcula y compara. Si la diferencia está dentro del margen de error se da por terminado el cálculo de lo contrario se emplea el valor calculado de entalpía para la siguiente iteración.

$$h_N^{\#} = h_W$$

$$h_N^{\#} \times (V_{N+1} + W) + Q_R = H_{N+1} \times V_{N+1} + h_W \times W$$

$$h_N^{\#} \times V_{N+1} + h_N^{\#} \times W + Q_R = H_{N+1} \times V_{N+1} + h_W \times W$$

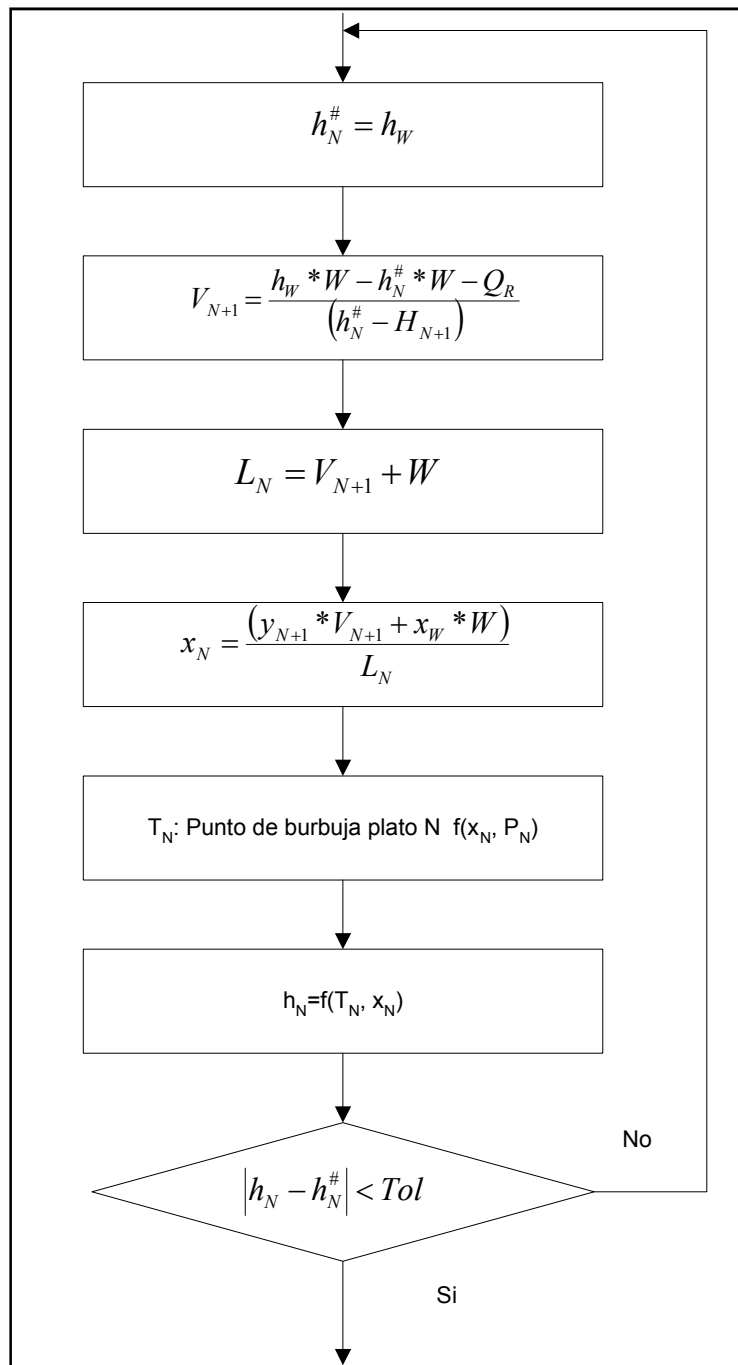
$$V_{N+1} \times (h_N^{\#} - H_{N+1}) = h_W \times W - h_N^{\#} \times W - Q_R$$

$$V_{N+1} = \frac{h_W \times W - h_N^{\#} \times W - Q_R}{(h_N^{\#} - H_{N+1})}$$

$$L_N = V_{N+1} + W$$

$$x_N = \frac{(y_{N+1} \times V_{N+1} + x_W \times W)}{L_N}$$

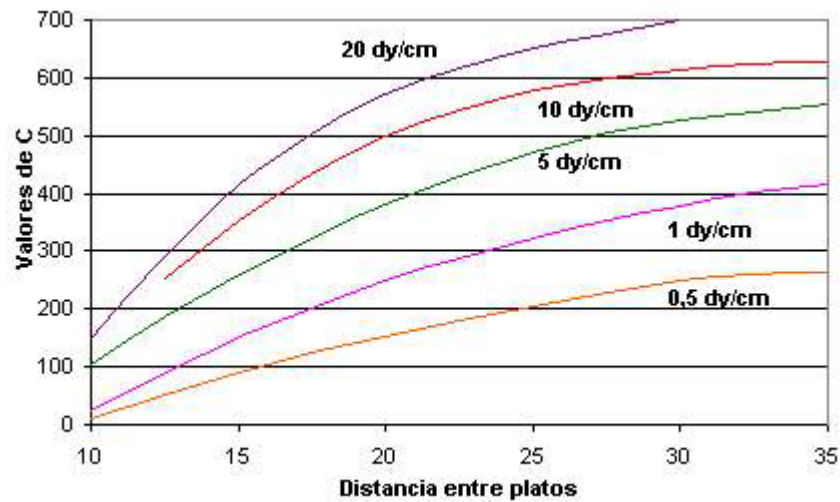
El algoritmo nos queda pues:



Cálculo del diámetro y costo de la columna

Habiendo calculado los flujos de vapor tanto en la parte superior (V_1) como inferior (V_N) podemos estimar las áreas de cada sector pudiendo adoptar la mayor de ellas para el cálculo económico.

En la figura siguiente se aprecia cómo se hace esto.



$$G = 0.305 C \sqrt{\rho_v (\rho_l - \rho_v)}$$

G es la velocidad másica del vapor [Kg/(hr m²)]

Siendo ρ_v y ρ_l las densidades del vapor y del líquido en [Kg/m³].

G se debe estimar para el tope y el fondo de la columna.

Las que correlacionadas, dan :

Para tensión superficial de 0.5 dinas/cm.:

$$C(0,5) = -0.0007 x^4 + 0.0615 x^3 - 2.0833 x^2 + 44.649 x - 280.58$$

$$R^2 = 0.9999$$

Para tensión superficial de 1 dinas/cm.:

$$C(1,0) = -0.0002 x^4 + 0.0195 x^3 - 1.2173 x^2 + 47.724 x - 347.8$$

$$R^2 = 0.9999$$

Para tensión superficial de 5 dinas/cm.:

$$C(5,0) = 0.0004 x^4 - 0.0324 x^3 + 0.391 x^2 + 33.125 x - 235.27$$

$$R^2 = 0.9999$$

Para tensión superficial de 10 dinas/cm.:

$$C(10) = 0.0001 x^4 + 0.0127 x^3 - 2.3578 x^2 + 96.577 x - 614.88$$

$$R^2 = 1$$

Para tensión superficial de 20 dinas/cm.:

$$C(20) = 0.0016 x^4 - 0.081 x^3 - 0.6835 x^2 + 94.737 x - 664.71$$

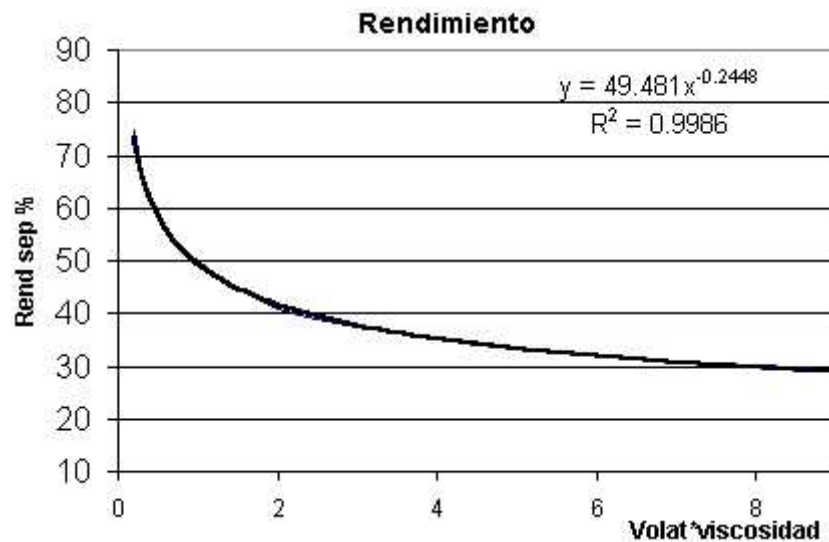
$$R^2 = 0.9999$$

Para ello se aplica a ambos flujos de vapores:

Parte superior: $A_1 = \frac{V_1}{G} \rightarrow D_1 = \sqrt{\frac{4 \times A_1}{\pi}}$

Parte inferior: $A_N = \frac{V_N}{G} \rightarrow D_N = \sqrt{\frac{4 \times A_N}{\pi}}$

Por último se adopta a D como al mayor de ambos diámetros. N es el número de etapas teóricas que resulta de la relación de reflujo R. El número real de platos debe corregirse en virtud del rendimiento global de la columna. Esto se obtiene de:



El número de etapas reales será: $N_R = \frac{N \times 100}{rend\%}$

Finalmente, teniendo el diámetro de la columna y el número de etapas podemos calcular el costo de la columna. En la tabla se aprecia el costo en forma tabular. Debajo de la tabla se presenta en forma de ecuación correlacionada, más apropiada de aplicar a un sistema informático.

Columnas de destilación con campanas de burbujeo	
Diámetro, en pulgadas	Costo en \$/plato
60	1200
70	1500
80	1845
90	2250
100	2700

$$Ct(\$ / plato) = 1.77759 \times D(pulg.)^{1.58805}$$

Cálculo del tamaño y costo del condensador:

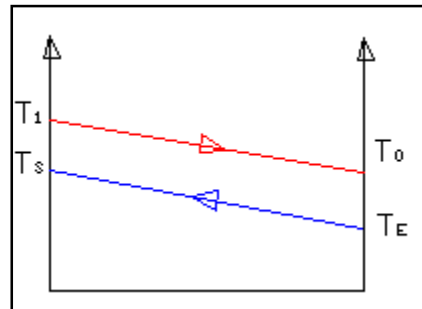
El parámetro que caracteriza al tamaño de un intercambiador es, entre otros, su área de transferencia que puede calcularse mediante:

$$Q_C = U_C \times A_C \times \Delta T_{Ln,C}$$

Siendo

$$\Delta T_{Ln,C} = \frac{(T_1 - T_S) - (T_0 - T_E)}{\ln \frac{(T_1 - T_S)}{(T_0 - T_E)}}$$

Los perfiles de temperatura se toman como muestra la figura siguiente, esto es, considerado en contracorriente:



El cálculo del costo implica saber el área de transferencia. La temperatura de salida del agua de enfriamiento (T_S) debe adoptarse. Esta variable también puede ser de optimización ya que a altos valores de T_S se consume menos agua pero al disminuir la fuerza impulsora aumenta el área necesaria y por lo tanto el costo fijo. Tomando el coeficiente global U_C como dato:

$$A_C = \frac{Q_C}{U_C \times \Delta T_{Ln,C}}$$

En la tabla siguiente se aprecia la funcionalidad del costo del condensador con respecto al área d transferencia. Debajo de la tabla la ecuación que correlaciona dichos valores:

Condensador-intercambiador de calor del tipo carcasa y tubos	
Area de la superficie de transferencia, (pies ²)	Costo \$
800	9750
1000	11250
1200	12600
1400	13800
1600	14850

$$cpc = 167,31158 * [A_{COND} (ft^2)]^{0,6088}$$

$$\text{Costo anual del condensador} = cpc \times [A_{total}] \times [1 + 0,60] \times [0,15]$$

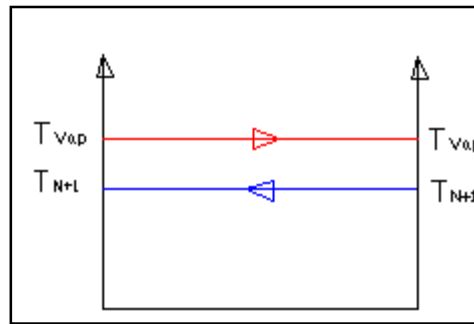
De la tabla se extrae el costo del condensador, y dividiéndolo por el área se obtiene el costo por pie cuadrado (cpc),

Cálculo del tamaño y costo del rehervidor:

Por un razonamiento análogo se calcula el costo del rehervidor. De contarse con varios servicios de vapor, la temperatura del rehervidor puede ser un criterio termodinámico. No obstante, si todos ellos fueran posibles puede verse que a mayor presión aumenta la temperatura de saturación y por lo tanto la fuerza impulsora lo que reduce área y costo pero debe recordarse que el vapor a mayor presión contiene menos calor latente por lo que se consumiría más vapor. Se asume que el vapor no se subenfía.

Por tratarse de perfiles planos no es necesario emplear la temperatura media logarítmica.

$$Q_R = U_R \times A_R \times (T_{Vap} - T_{N+1})$$



$$A_R = \frac{Q_R}{U_R \times (T_{Vap} - T_{N+1})}$$

Rehervidor-intercambiador de calor del tipo carcasa y tubos	
Area de la superficie de transferencia, (pies ²)	Costo \$
1000	17250
1400	21150
1800	24600
2200	27000
2600	30300

$$cpua = 313,10299 \times [A_{Reb} (ft^2)]^{0,58095}$$

$$\text{Costo anual del rehervidor} = cpua \times [A_{total}] \times [1 + 0,60] \times [0,15]$$

Cálculo del agua de enfriamiento:

El calor extraído en el condensador (Q_C) es a través del agua de enfriamiento cuyo salto de temperatura es desde T_E a T_S , por lo tanto, el caudal necesario será:

$$Q_C = m_A \times Cp_A \times (T_S - T_E)$$

$$m_A = \frac{Q_C}{Cp_A \times ((T_S - T_E))}$$

El Cp puede asumirse constante o deberá tomarse un valor medio lo que implicaría la necesidad de iterar. Siendo Op_{horas} las horas de operación anuales dato: 8500 hr/año. El costo queda pues:

$$\text{Costo anual del agua de refrigeración} = \frac{q \times 0,054 \times Op_{horas}}{Cp \times ((T_S - T_E)) \times 10000}$$

Siendo q la carga térmica del condensador, Δt el cambio de temperatura del agua de refrigeración, $Cp = 1,0 \text{ Btu}/(\text{libra})(^\circ\text{F})$:

Cálculo del vapor de calefacción:

Siendo dato la presión (o variable de optimización) se puede estimar el calor latente de vaporización λ_V :

$$Q_R = m_V \times \lambda_V$$

$$m_V = \frac{Q_R}{\lambda_V}$$

$$\text{Costo anual del vapor} = \frac{Q_r \times 0,75 \times Op_{horas}}{915.5 \times 1000}$$

Costo anual total, variable con la relación de reflujo.

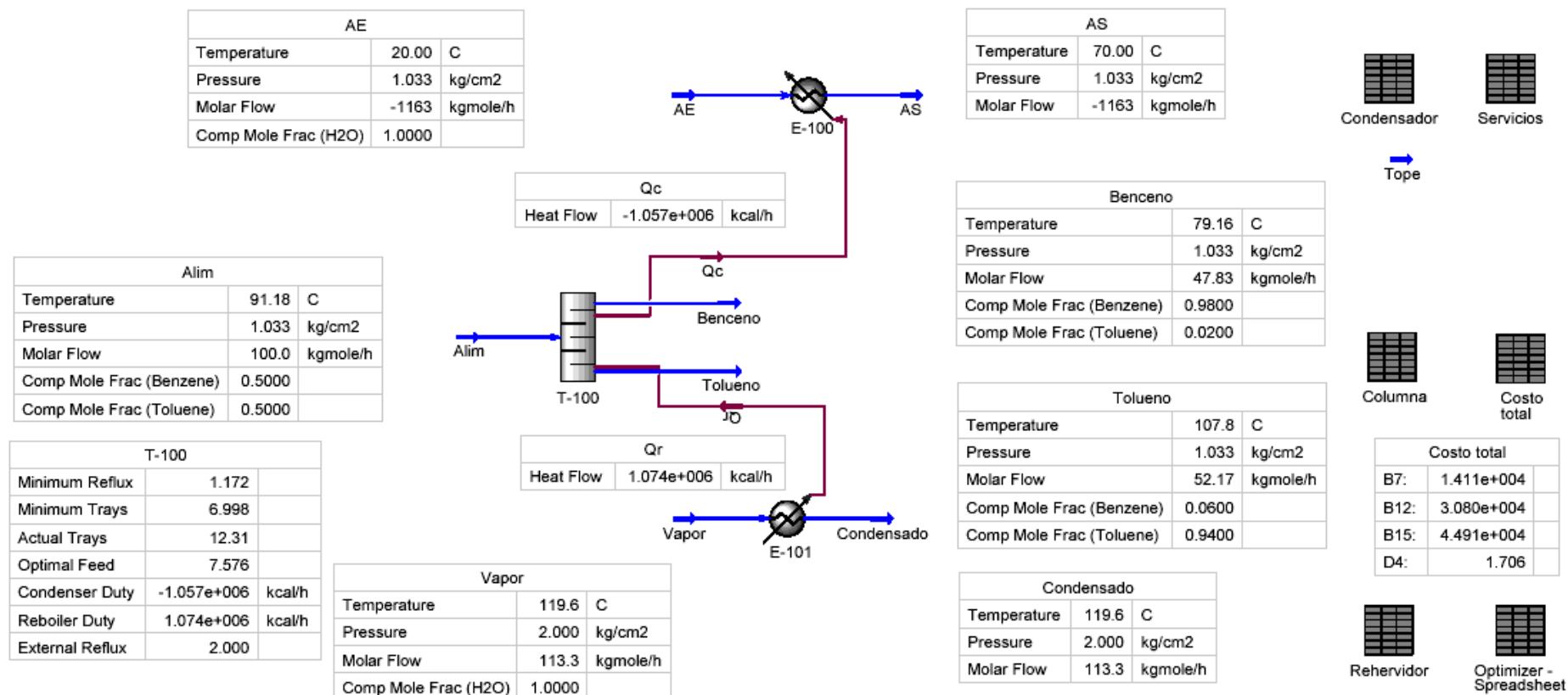
El costo total anual resulta de la suma de todos los factores calculados previamente.

Un método consiste en simular el sistema y para varias relaciones de reflujo se calcula el costo total anual y se escoge como óptimo el que hace mínimo dicho costo. Puede además graficarse dicha función. Otro método es utilizar con la función objetivo y restricciones correspondientes, al utilitario de HYSYS. En las ecuaciones de los costos parciales se incluye amortización y costo de instrumentación

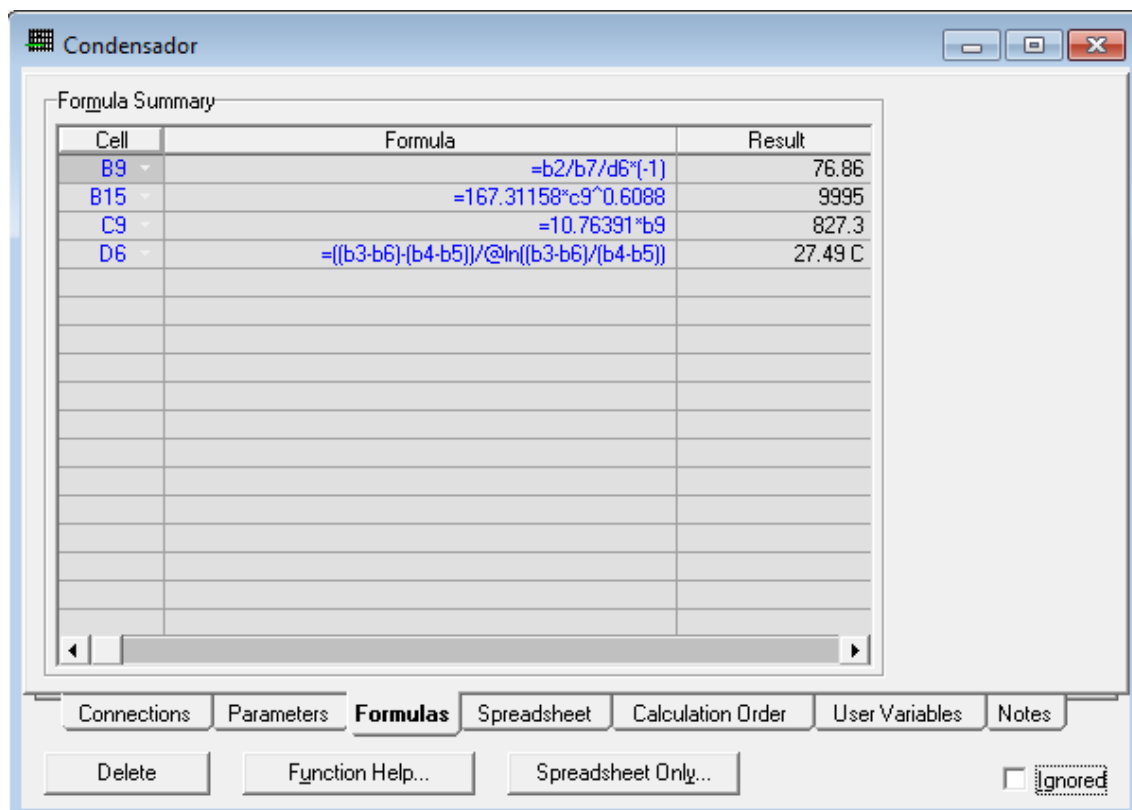
$$C_{Total} = C_{Columna} + C_{Condensador} + C_{Rehervidor} + C_{Agua} + C_{Vapor} = F(R)$$

Esta última es la función a optimizar y denota además su dependencia de R.

Implementación en HYSYS: Relación de reflujo R=2.



Condensador



Condensador

Current Cell: Exportable ☐

A1 Variable: Angles in:

	A	B	C	D
1	Codensador			
2	Qc	-1.057e+006 kcal/h		
3	TTope	79.84 C		
4	TC	79.16 C		
5	Te	20.00 C		DTLn
6	Ts	70.00 C		27.49 C
7	U	500.0		
8		m2	ft2	
9	Area	76.86	827.3	
10				
11				
12				
13				

☐ Ignored

Columna

Columna

Spreadsheet Name:

Imported Variables

Cell	Object	Variable Description
B4	Benceno	Phase Mass Density (Liquid Phase)
B5	Benceno	Phase Mass Density (Vapour Phase)
D2	T-100	External Reflux
E2	Benceno	Mass Flow
B8	Tolueno	Phase Mass Density (Liquid Phase)
B9	Tolueno	Phase Mass Density (Vapour Phase)
B6	T-100	Stripping Vapour Flow
B10	T-100	Reboiler Duty
B11	Tolueno	Mass Heat Of Vaporization
B15	T-100	Actual Trays
C2	T-100	Minimum Reflux

Exported Variables

Cell	Object	Variable Description

Columna

Spreadsheet Name: **Columna**

Imported Variables

Cell	Object	Variable Description
B6	T-100	Stripping Vapour Flow
B10	T-100	Reboiler Duty
B11	Tolueno	Mass Heat Of Vapourization
B15	T-100	Actual Trays
C2	T-100	Minimum Reflux
H15	Tolueno	Comp K Value - Mixed Liquid (Tol
F13	Benceno	Viscosity
G13	Benceno	Comp K Value - Mixed Liquid (Bei
H13	Benceno	Comp K Value - Mixed Liquid (Tol
G15	Tolueno	Comp K Value - Mixed Liquid (Bei

Edit Import...
Add Import...
Delete Import

Exported Variables

Cell	Object	Variable Description

Edit Export...
Add Export...
Delete Export

Connections Parameters Formulas Spreadsheet Calculation Order User Variables Notes

Delete Function Help... Spreadsheet Only...

Columna

Formula Summary

Cell	Formula	Result
B2	=40/2.54	15.75
B3	=0.0016*b2^4-0.081*b2^3-0.6835*b2^2+94.737*b2-664	439.8
B14	=@if(e5>e11,e5,e11)	1.570
B16	=1.77759*c14^1.58805	1242
B20	=c15*b16	2.935e+004
C5	=0.305*b3*@sqrt(b5*(b4-b5))	6277
C6	=e2*(1+d2)	1.125e+004 kg/h
C11	=0.305*b3*@sqrt(b9*(b8-b9))	6369
C12	=b10/b11	1.233e+004
C14	=39.36996*b14	61.82
C15	=f16	23.63
D5	=c6/c5	1.792 kg/h
D9	=c6/b6	78.39
D11	=c12/c11	1.936
E5	=@sqrt(4*d5/pi)	1.510
E11	=@sqrt(4*d11/pi)	1.570
F2	=d2/c2	1.706
F15	=49.481*(f13*h18)^(-0.2448)	52.09
F16	=b15*100/f15	23.63
H14	=g13/h13	2.721
H16	=g15/h15	2.439
H18	=(h14+h16)/2	2.580

Connections Parameters **Formulas** Spreadsheet Calculation Order User Variables Notes

Delete Function Help... Spreadsheet Only...

Columna

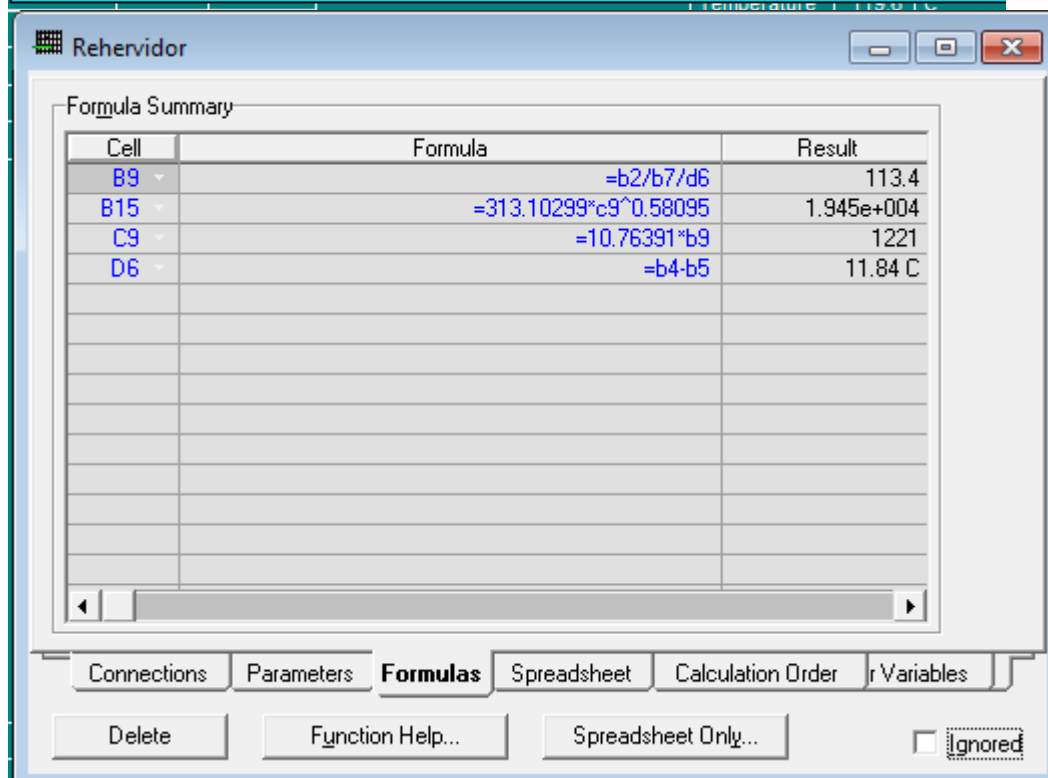
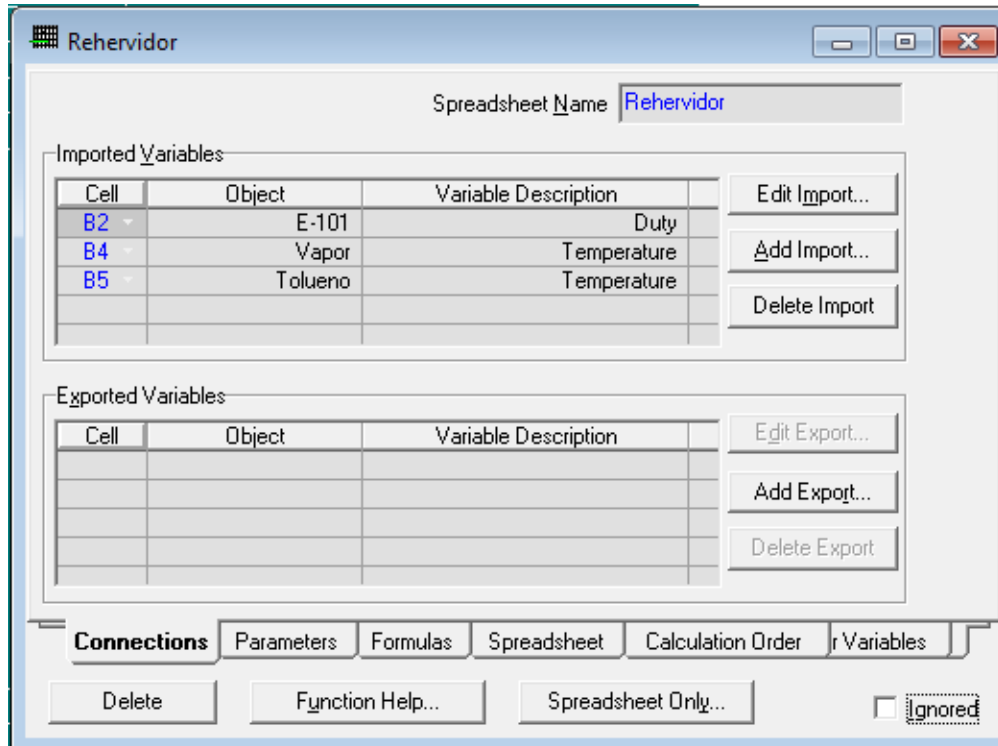
Current Cell: Variable Type: Exportable: ☒
 B20 Variable: Angles in: Rad

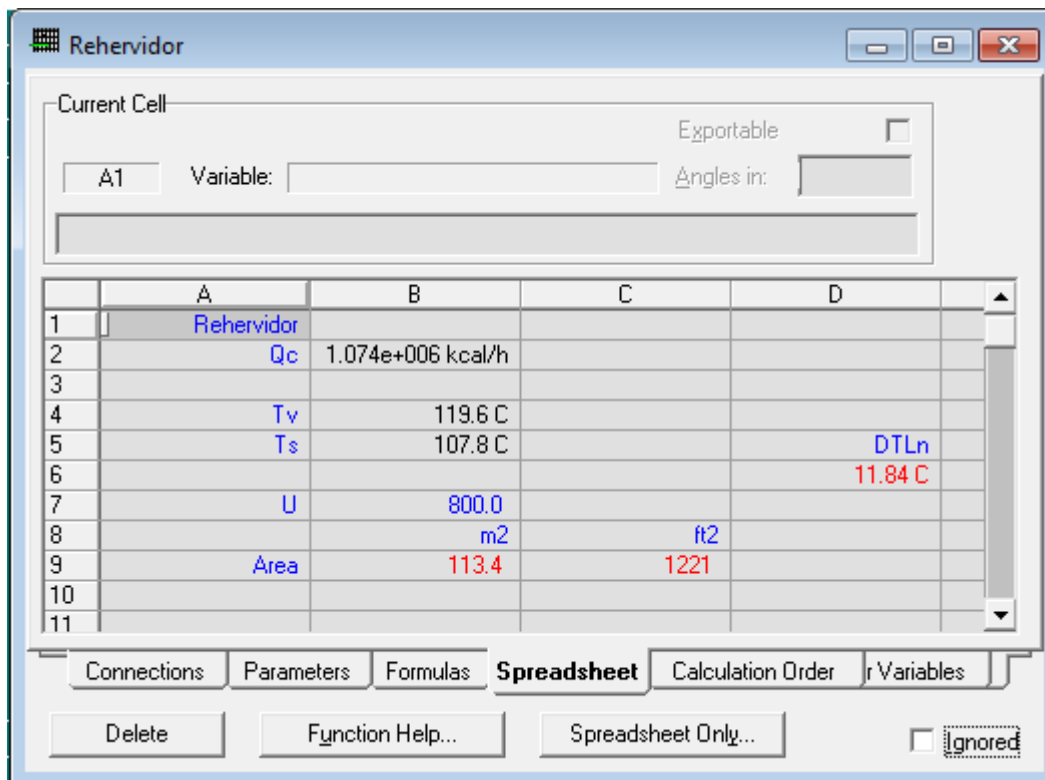
	A	B	C	D	E	F	G	H
1	Tension sup	20.00	Reflujo min	Reflujo actual	Benceno	Relacion optima		
2	Dist entre platos	15.75	1.172	2.000	3749 kg/h	1.706		
3	C	439.8						
4	Ro Liq sup	812.1 kg/m3	G	Area 1	D1			
5	Ro Vap Sup	2.706 kg/m3	6277	1.792 kg/h	1.510			
6	Flujo vapor sup	143.5 kgmole/h	1.125e+004 kg/h	m2				
7								
8	Ro Liq Inf	783.8 kg/m3						
9	Ro Vap inf	2.888 kg/m3		78.39				
10	Reboiler	4.493e+006 kJ/h	G	Area 2	D2			
11	calor latente	364.3 kJ/kg	6369	1.936	1.570			
12	Flujo vapor inf		1.233e+004			viscosidad		
13						0.3142 cP	1.013	0.3722
14	Diametro columna	1.570	61.82				volatilidad tope	2.721
15	Num de etapa	12.31	23.63		Rendimiento	52.09	2.245	0.9205
16	Costo por etapa	1242			N etapas reales	23.63	volatilidad fondo	2.439
17							volatilidad promedic	2.580
18								
19								
20	Costo columna	2.935e+004						

Connections Parameters Formulas **Spreadsheet** Calculation Order User Variables Notes

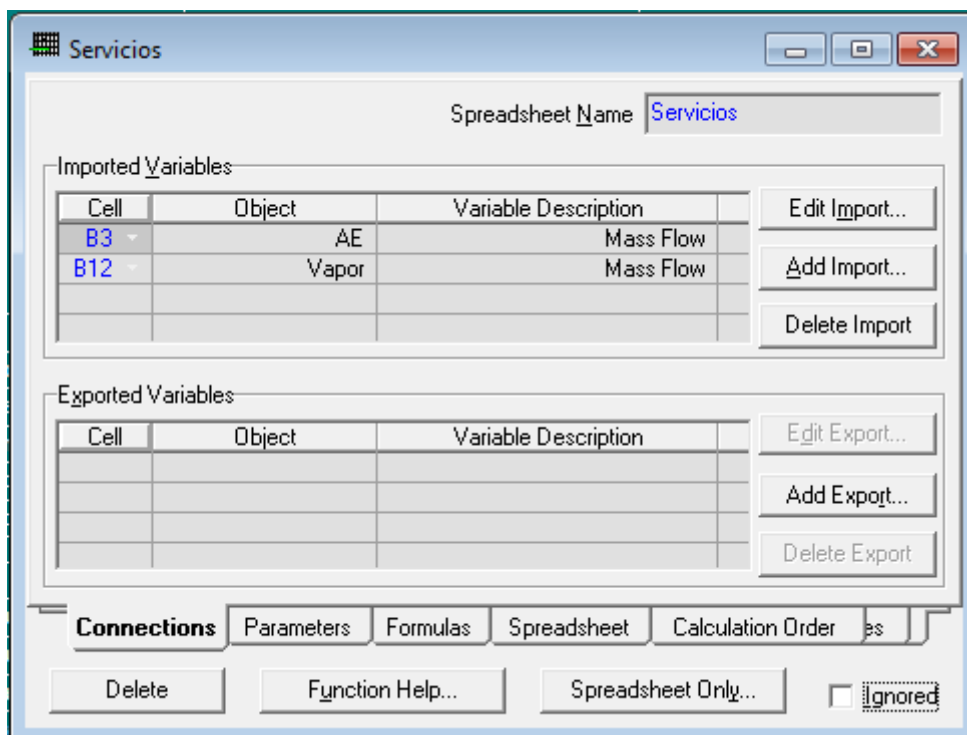
Delete Function Help... Spreadsheet Only... ☐ Ignored

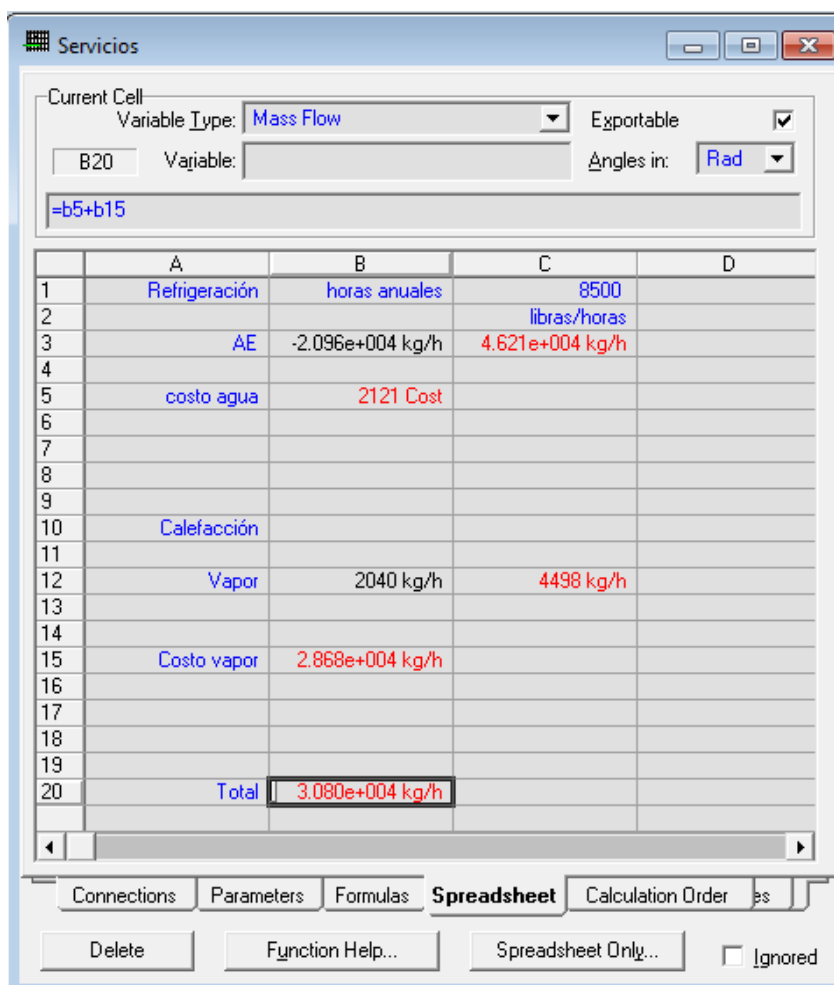
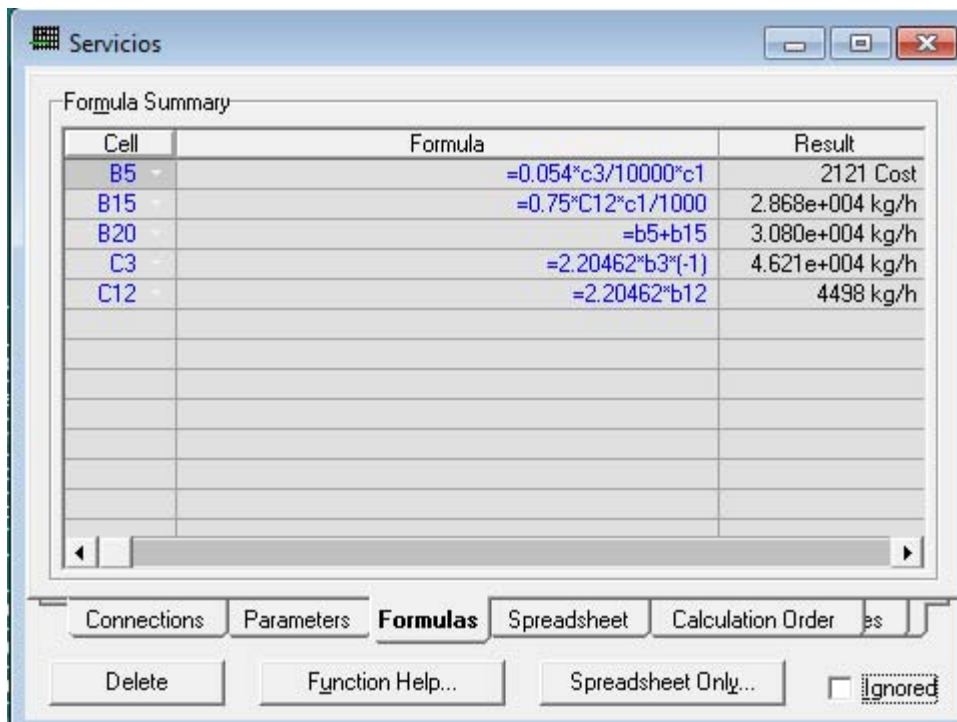
Rehervidor





Servicios auxiliares:





Costo Total

Costo total

Spreadsheet Name: **Costo total**

Imported Variables

Cell	Object	Variable Description
B2	Columna@B20	B20:
B3	Condensador@B15	B15:
B4	Rehervidor@B15	B15:
B10	Servicios@B5	B5:
B11	Servicios@B15	B15:
D2	T-100	External Reflux
D3	T-100	Minimum Reflux

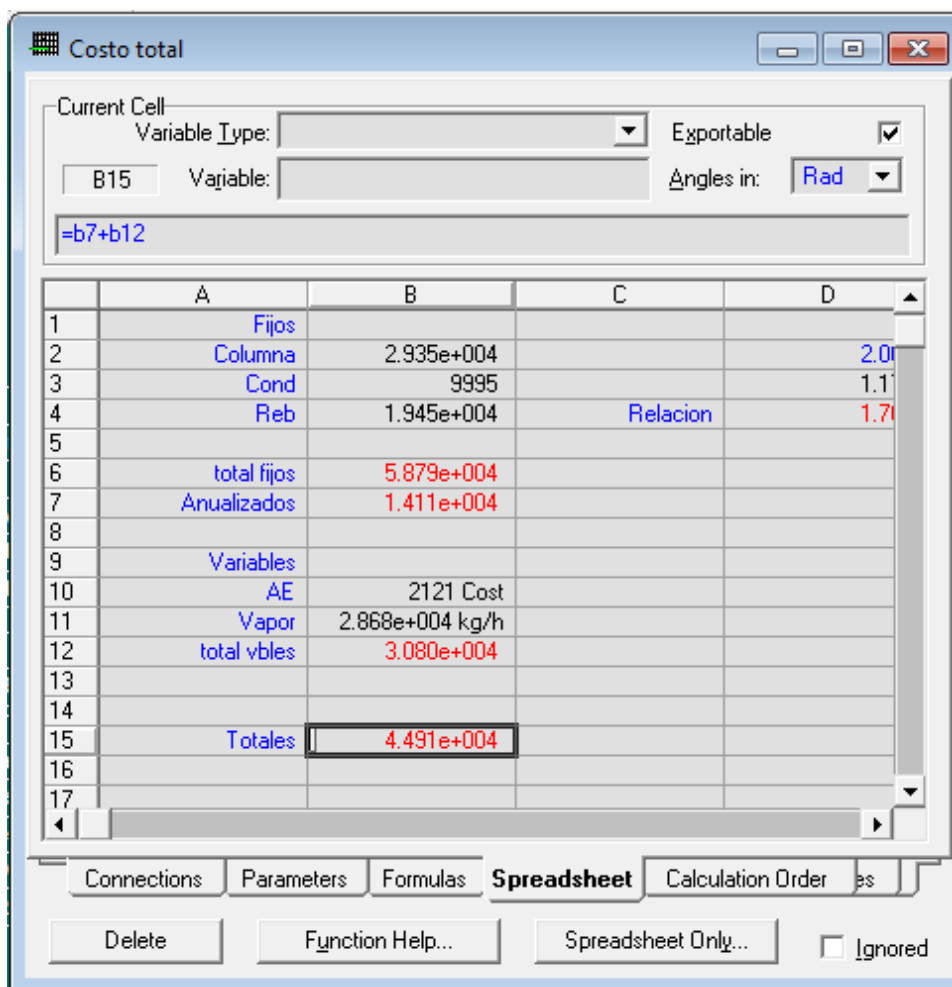
Exported Variables

Cell	Object	Variable Description

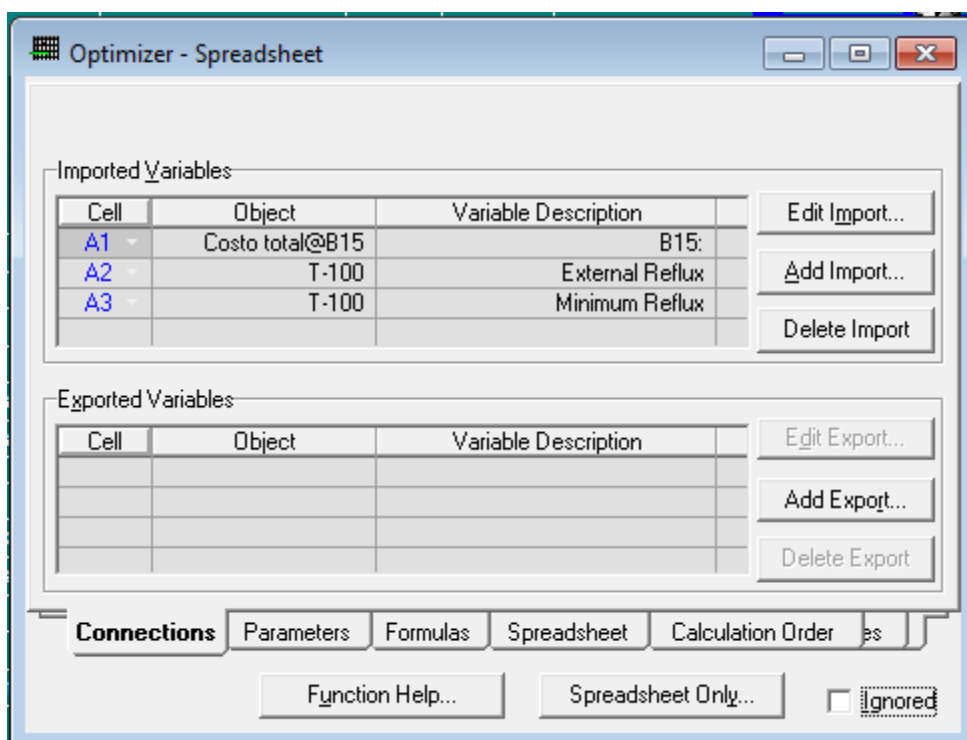
Connections | Parameters | Formulas | **Spreadsheet** | Calculation Order | es

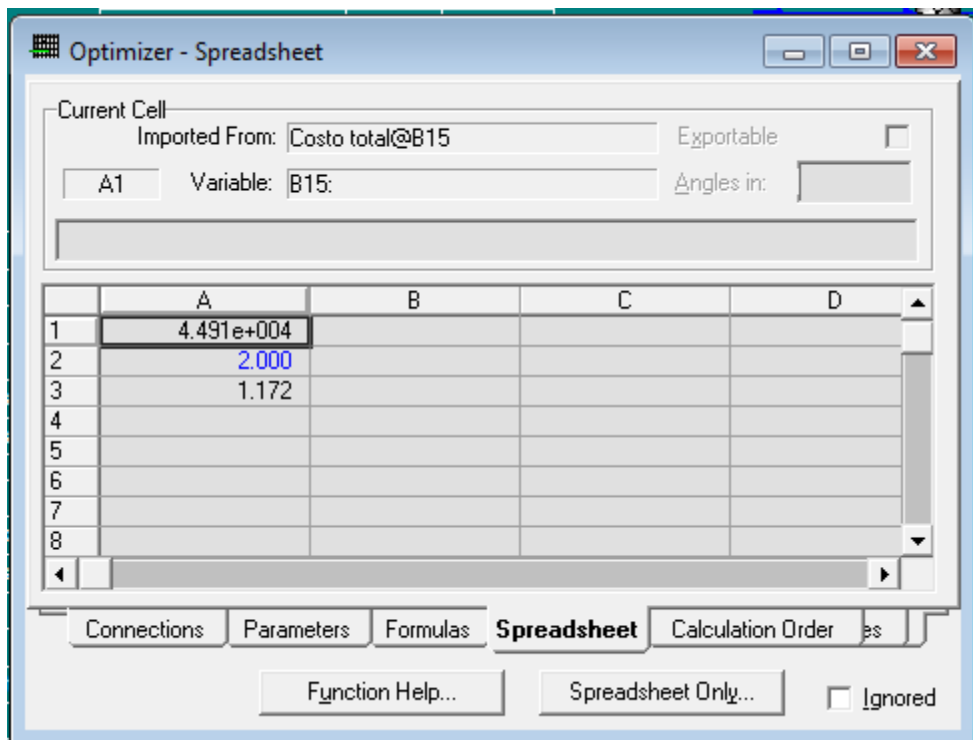
Delete | Function Help... | Spreadsheet Only... | ☐ Ignored

[illegible]

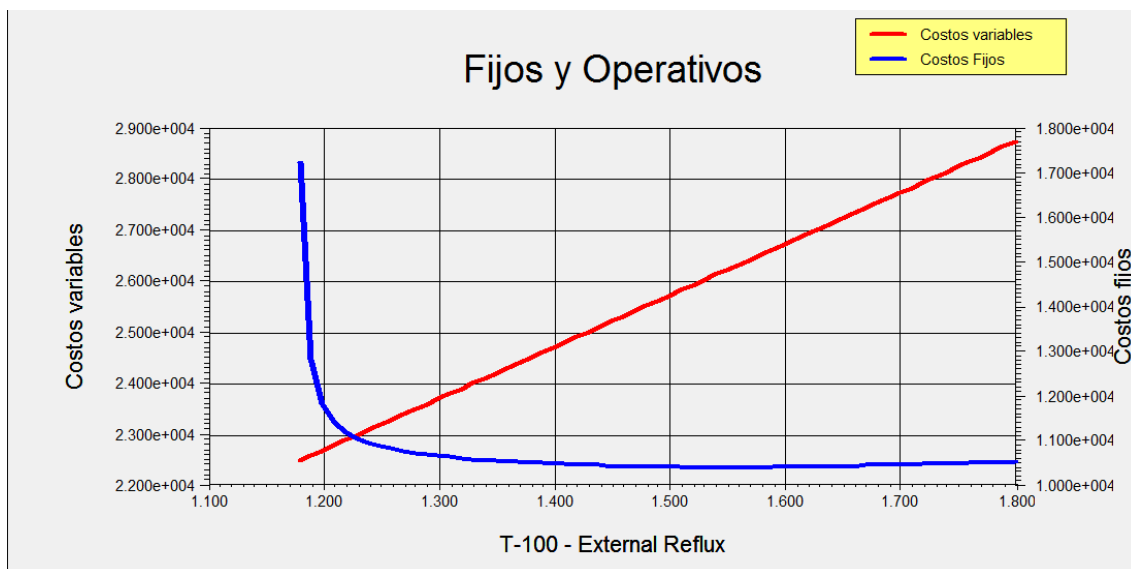


Optimizador





Curvas paramétricas (R de 1,18 a 2,00):



Optimizer

Cell: **A1** ☒ Minimize ☐ Maximize
 Current Value: 38585.9743

Constraint Functions

Num	LHS Cell	Current Value	Cond	RHS Cell	Current Value	Penalty Value
1	A2	1.2626	>	A3	1.1722	10000

Add Delete

Configuration Variables **Functions** Parameters Monitor

Delete SpreadSheet... Optimum found (SameSearchDirection) Start

Optimizer

Optimizer Monitor Information

Iteration	Cum. Func. Eval.	Objective Function	External Reflux	Constraint 1
2.00000	12.0000	38586.7	1.26171	1.99460e-252
1.00000	2.00000	44907.2	2.00000	1.99460e-252

Configuration Variables Functions Parameters **Monitor**

Delete SpreadSheet... Optimum found (SameSearchDirection) Start

$$\frac{\text{Reflujo \acute{o}ptimo}}{\text{Reflujo m\acute{in}imo}} = \frac{1,263}{1,172} = 1,078$$

Relación de reflujo externa óptima 1,263; costo $3,859 \times 10^4$

AE		
Temperature	20.00	C
Pressure	1.033	kg/cm2
Molar Flow	-877.5	kgmole/h
Comp Mole Frac (H2O)	1.0000	

AS		
Temperature	70.00	C
Pressure	1.033	kg/cm2
Molar Flow	-877.5	kgmole/h

Qc		
Heat Flow	-7.968e+005	kcal/h

Benceno		
Temperature	79.16	C
Pressure	1.033	kg/cm2
Molar Flow	47.83	kgmole/h
Comp Mole Frac (Benzene)	0.9800	
Comp Mole Frac (Toluene)	0.0200	

Alim		
Temperature	91.18	C
Pressure	1.033	kg/cm2
Molar Flow	100.0	kgmole/h
Comp Mole Frac (Benzene)	0.5000	
Comp Mole Frac (Toluene)	0.5000	

T-100		
Minimum Reflux	1.172	
Minimum Trays	6.998	
Actual Trays	20.14	
Optimal Feed	12.39	
Condenser Duty	-7.968e+005	kcal/h
Reboiler Duty	8.142e+005	kcal/h
External Reflux	1.263	

Qr		
Heat Flow	8.142e+005	kcal/h

Tolueno		
Temperature	107.8	C
Pressure	1.033	kg/cm2
Molar Flow	52.17	kgmole/h
Comp Mole Frac (Benzene)	0.0600	
Comp Mole Frac (Toluene)	0.9400	

Vapor		
Temperature	119.6	C
Pressure	2.000	kg/cm2
Molar Flow	85.87	kgmole/h
Comp Mole Frac (H2O)	1.0000	

Condensado		
Temperature	119.6	C
Pressure	2.000	kg/cm2
Molar Flow	85.87	kgmole/h

Costo total		
B7:	1.525e+004	
B12:	2.334e+004	
B15:	3.859e+004	
D4:	1.077	

Implementación en planilla de cálculo.

El modelo se implementa como se ilustra en la planilla. Este libro en particular tiene 3 hojas, la 2ª y 3ª corren una relación de reflujo que van desde el valor de la celda (1,1) (10 o 1,68 según hojas 2 y 3) con un decremento cuyo valor está en la celda (1,2) (0,01 o 0,001) hasta 1. Este comando simplemente permite parametrizar el costo total en función de la relación de reflujo actual.

El principal comando de optimización está asociado al botón “OptColumna” de la hoja 1. El método usado es el dicotómico debido a que la curva aumenta abruptamente para valores inferiores al óptimo y el solver falla.

Los otros 2 botones pueden usarse después. “OptCooler” ajusta la temperatura de salida para reducir el costo total. El otro botón, “OptHeater” hace lo propio con la presión del vapor de calefacción. Como ambos usan los calores de ambos equipos y sólo dependen de R es por eso que pueden implementarse después y en forma independiente.

Las temperaturas de condensador, reboiler y alimentación corresponden a sus puntos de burbujas y por eso deben ajustarse antes (búsqueda de objetivos). La de tope es la que corresponde al punto de rocío con la misma composición que el destilado (condensador total). Este último ajuste conviene hacerlo con solver.

La sección gris se encarga de calcular las condiciones del fondo mediante método iterativo.

Las presiones (de G2 a J2) se calculan a partir de las composiciones y de modo iterativo (búsqueda de objetivo o solver) antes de optimizar.

Las celdas optimizables son las violetas.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
1	Balance global	F	D	W			Condensador total	Tope	Alimentación	Reboiler	Medio		
2	Flujo [Kgmol/hr]	100	47,83	52,17		Presión [mmHg]	760,00	760,00	760,00	760,00		Viscosidad	Volatilidad
3	Benceno	0,5	0,98	0,06		Temperatura [°C]	80,50	81,12	92,11	107,87	93,38	0,28365586	2,85881163
4	Tolueno	0,5	0,02	0,94		Benceno (liq)	0,98	0,94	0,5	0,06			
5						Benceno (vap)	0,992	0,970	0,714	0,131			32,2336388
6	Rel. De ref.	2				alfa	2,59686348	2,574	2,467	2,339	2,458		
7		Tope	Fondo			calor	1053851,8			1069021,24			
8	Flujo vapor	143,48	138,64					1,06606E-12					
9	dens. Liq	1039,15	1190,01					Cond de rocío					
10	dens. Vapor	2,6929	2,9096		OptColumna								
11	PM	78,28	90,4347605						Antoine	A	B	C	
12	Costo total	\$ 43.901,48							Benceno	6,905650	1,211,03	220,79	
13		hw	Hn+1						Tolueno	6,954640	1,344,80	219,48	
14		4321,954467	11852,6008										
15													
16													
17	hn(inicial)	Ln	Vn+1	xn	hn nuevo	error	Tn						
18	4321,95447	194,13002	141,95611	0,11214	4190,20214	-0,03048							
19	4190,20214	190,79202	138,61811	0,11180	4191,02363	0,00020							
20	4191,02363	190,81248	138,63856	0,11180	4191,01851	0,00000							
21	4191,01851	190,81235	138,63844	0,11180	4191,01854	0,00000							
22	4191,01854	190,81235	138,63844	0,11180	4191,01854	0,00000							
23	4191,01854	190,81235	138,63844	0,11180	4191,01854	0,00000							
24	4191,01854	190,81235	138,63844	0,11180	4191,01854	0,00000							
25	4191,01854	190,81235	138,63844	0,11180	4191,01854	0,00000							
26	4191,01854	190,81235	138,63844	0,11180	4191,01854	0,00000							
27	4191,01854	190,81235	138,63844	0,11180	4191,01854	0,00000							
28	4191,01854	190,81235	138,63844	0,11180	4191,01854	0,00000							
29	4191,01854	190,81235	138,63844	0,11180	4191,01854	0,00000							
30	4191,01854	190,81235	138,63844	0,11180	4191,01854	0,00000							
31	4191,01854	190,81235	138,63844	0,11180	4191,01854	0,00000	105,64	760,00					

32		Cálculo torre							
33		cm	in			OptCooler		Rehervidor	OptHeater
34	Dist. entre platos	40	15,7480315		Condensador		Vapor		
35	Cte fórmula	439,7626251		T entrada	20		Presión [Kg/cm2]	2	
36	Tope/fondo			Tsalida	70		Temp	119,2885434	
37	G	7085,999329	7882,81674	DT	50	28,74	Cal Lat	526,0160442	
38	Area (m2)	1,585023896	1,59051444	m agua	21077,04		U	800	
39	Diámetro (m)	1,420604381	1,42306275	hs operación	8500		DT	11,41593525	
40	Diam (in)	55,92919449	56,0259805	U	500		A	117,0536199	1259,965165
41	Diam (in)[maximo]	56,02598048		A	73,33732109	789,4029242	m vapor	2032,30	4480,444321
42	costo/plato	1062,579638	1062,57964						
43	costo col	25501,91131		costo agua	Costo Cond	9714,075348	Costo vapor	Costo Reher.	19807,99454
44	costo col anual	6120,458714		2132,83104		2331,378084	28562,88982		4753,91869
45									
46					costo total	\$ 43.901,48			
47									
48	Cálculo etapas								
49	theta	Rm	Nm	fi	ch	N teórico	N real		
50	1,421700743	1,276495872	7,38546436	0,24116804	-0,555650733	13	24		
51	Rendimiento								
52	52,08597801								
53									
54									
55	heuristico	1,566789242							
56									

Presionando el botón OptColumna:

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
1	Balance global	F	D	W			Condensador total	Tope	Alimentación	Reboiler	Medio		
2	Flujo [Kgmol/hr]	100	47,83	52,17		Presión [mmHg]	760,00	760,00	760,00	760,00		Viscosidad	Volatilidad
3	Benceno	0,5	0,98	0,06		Temperatura [°C]	80,50	81,12	92,11	107,87	93,38	0,28365586	2,85881163
4	Tolueno	0,5	0,02	0,94		Benceno (liq)	0,98	0,94	0,5	0,06			
5						Benceno (vap)	0,992	0,970	0,714	0,131			32,2336388
6	Rel. De ref.	1,395643871				alfa	2,59686348	2,574	2,467	2,339	2,458		
7		Tope	Fondo			calor	841551,2015			856720,638			
8	Flujo vapor	114,57	111,10					1,06606E-12					
9	dens. Liq	1039,15	1190,61					Cond de rocío					
10	dens. Vapor	2,6929	2,9111										
11	PM	78,28	90,4807925		OptColumna								
12	Costo total	\$ 38.935,08											
13		hw	Hn+1										
14		4321,954467	11852,6008										
15													
16													
17	hn(inicial)	Ln	Vn+1	xn	hn nuevo	error	Tn						
18	4321,95447	165,93847	113,76456	0,10888	4198,19307	-0,02864							
19	4198,19307	163,25547	111,08156	0,10851	4199,09933	0,00022							
20	4199,09933	163,27480	111,10089	0,10851	4199,09269	0,00000							
21	4199,09269	163,27466	111,10075	0,10851	4199,09274	0,00000							
22	4199,09274	163,27466	111,10075	0,10851	4199,09274	0,00000							
23	4199,09274	163,27466	111,10075	0,10851	4199,09274	0,00000							
24	4199,09274	163,27466	111,10075	0,10851	4199,09274	0,00000							
25	4199,09274	163,27466	111,10075	0,10851	4199,09274	0,00000							
26	4199,09274	163,27466	111,10075	0,10851	4199,09274	0,00000							
27	4199,09274	163,27466	111,10075	0,10851	4199,09274	0,00000							
28	4199,09274	163,27466	111,10075	0,10851	4199,09274	0,00000							
29	4199,09274	163,27466	111,10075	0,10851	4199,09274	0,00000							
30	4199,09274	163,27466	111,10075	0,10851	4199,09274	0,00000							
31	4199,09274	163,27466	111,10075	0,10851	4199,09274	0,00000	105,64	757,00					

La presión del fondo (H31) se reajusta variando la temperatura Tn (G31).

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
1	Balance global	F	D	W			Condensador total	Tope	Alimentación	Reboiler	Medio		
2	Flujo [Kgmol/hr]	100	47,83	52,17		Presión [mmHg]	760,00	760,00	760,00	760,00		Viscosidad	Volatilidad
3	Benceno	0,5	0,98	0,06		Temperatura [°C]	80,50	81,12	92,11	107,87	93,45	0,28346311	2,85670589
4	Tolueno	0,5	0,02	0,94		Benceno (liq)	0,98	0,94	0,5	0,06			
5						Benceno (vap)	0,992	0,970	0,714	0,131			32,2336388
6	Rel. De ref.	1,395643871				alfa	2,59686348	2,574	2,467	2,339	2,458		
7		Tope	Fondo			calor	841551,2015			856720,638			
8	Flujo vapor	114,57	111,10					1,06606E-12					
9	dens. Liq	1039,15	1190,55					Cond de rocío					
10	dens. Vapor	2,6929	2,9101										
11	PM	78,28	90,4807925		OptColumna								
12	Costo total	\$ 38.936,42											
13		hw	Hn+1										
14		4321,954467	11852,6008										
15													
16													
17	hn(inicial)	Ln	Vn+1	xn	hn nuevo	error	Tn						
18	4321,95447	165,93847	113,76456	0,10888	4198,19307	-0,02864							
19	4198,19307	163,25547	111,08156	0,10851	4199,09933	0,00022							
20	4199,09933	163,27480	111,10089	0,10851	4199,09269	0,00000							
21	4199,09269	163,27466	111,10075	0,10851	4199,09274	0,00000							
22	4199,09274	163,27466	111,10075	0,10851	4199,09274	0,00000							
23	4199,09274	163,27466	111,10075	0,10851	4199,09274	0,00000							
24	4199,09274	163,27466	111,10075	0,10851	4199,09274	0,00000							
25	4199,09274	163,27466	111,10075	0,10851	4199,09274	0,00000							
26	4199,09274	163,27466	111,10075	0,10851	4199,09274	0,00000							
27	4199,09274	163,27466	111,10075	0,10851	4199,09274	0,00000							
28	4199,09274	163,27466	111,10075	0,10851	4199,09274	0,00000							
29	4199,09274	163,27466	111,10075	0,10851	4199,09274	0,00000							
30	4199,09274	163,27466	111,10075	0,10851	4199,09274	0,00000							
31	4199,09274	163,27466	111,10075	0,10851	4199,09274	0,00000	105,78	760,00					

32		Cálculo torre							
33		cm	in			OptCooler		Rehervidor	OptHeater
34	Dist. entre platos	40	15,7480315		Condensador		Vapor		
35	Cte fórmula	439,7626251		T entrada	20		Presión [Kg/cm2]	2	
36	Tope/fondo			Tsalida	70		Temp	119,2885434	
37	G	7085,999329	7886,82916	DT	50	28,74	Cal Lat	526,0160442	
38	Area (m2)	1,265717593	1,27459127	m agua	16831,02		U	800	
39	Diámetro (m)	1,269473534	1,27391576	hs operación	8500		DT	11,41593525	
40	Diam (in)	49,97917303	50,1540636	U	500		A	93,8075396	1009,744356
41	Diam (in)[maximo]	50,15406364		A	58,56336792	630,3760922	m vapor	1628,70	3590,657498
42	costo/plato	891,2565671	891,256567						
43	costo col	33867,74955		costo agua	Costo Cond	8470,758853	Costo vapor	Costo Reher.	17417,42094
44	costo col anual	8128,259892		1703,16787		2032,982125	22890,48745		4180,181025
45									
46					costo total	\$ 38.935,08			
47									
48	Cálculo etapas								
49	theta	Rm	Nm	fi	ch	N teórico	N real		
50	1,421700743	1,276495872	7,38546436	0,04973527	-0,938238223	20	38		
51	Rendimiento								
52	52,08597801								
53									
54									
55	heuristico	1,093339901							
56									

Si se presiona OptCooler se ajusta la temperatura de salida del agua de enfriamiento del condensador:

32		Cálculo torre							
33		cm	in			OptCooler		Rehervidor	OptHeater
34	Dist. entre platos	40	15,7480315		Condensador		Vapor		
35	Cte fórmula	439,7626251		T entrada	20		Presión [Kg/cm2]	2	
36	Tope/fondo			Tsalida	67,49923706		Temp	119,2885434	
37	G	7085,999329	7885,19098	DT	47,49923706	31,09	Cal Lat	526,0160442	
38	Area (m2)	1,265717593	1,27485607	m agua	17717,15		U	800	
39	Diámetro (m)	1,269473534	1,27404809	hs operación	8500		DT	11,41593525	
40	Diam (in)	49,97917303	50,1592732	U	500		A	93,8075396	1009,744356
41	Diam (in)[maximo]	50,1592732		A	54,13581781	582,7179429	m vapor	1628,70	3590,657498
42	costo/plato	891,4035867	891,403587						
43	costo col	33873,33629		costo agua	Costo Cond	8074,898442	Costo vapor	Costo Reher.	17417,42094
44	costo col anual	8129,60071		1792,83708		1937,975626	22890,48745		4180,181025
45									
46					costo total	\$ 38.931,08			
47									
48	Cálculo etapas								
49	theta	Rm	Nm	fi	ch	N teórico	N real		
50	1,421700743	1,276495872	7,38546436	0,04973527	-0,938238223	20	38		
51	Rendimiento								
52	52,10404376								
53									
54									
55	heuristico	1,093339901							
56									

Si luego se presiona el botón OptHeater se ajusta la presión del vapor de calefacción:

32		Cálculo torre							
33		cm	in			OptCooler		Rehervidor	OptHeater
34	Dist. entre platos	40	15,7480315		Condensador		Vapor		
35	Cte fórmula	439,7626251		T entrada	20		Presión [Kg/cm2]	4,25	
36	Tope/fondo			Tsalida	67,49923706		Temp	145,268135	
37	G	7085,999329	7885,19098	DT	47,49923706	31,09	Cal Lat	508,1872897	
38	Area (m2)	1,265717593	1,27485607	m agua	17717,15		U	800	
39	Diámetro (m)	1,269473534	1,27404809	hs operación	8500		DT	37,39552686	
40	Diam (in)	49,97917303	50,1592732	U	500		A	28,63713625	308,2501346
41	Diam (in)[maximo]	50,1592732		A	54,13581781	582,7179429	m vapor	1685,84	3716,628676
42	costo/plato	891,4035867	891,403587						
43	costo col	33873,33629		costo agua	Costo Cond	8074,898442	Costo vapor	Costo Reher.	8742,096024
44	costo col anual	8129,60071		1792,83708		1937,975626	23693,55531		2098,103046
45									
46					costo total	\$ 37.652,07			
47									
48	Cálculo etapas								
49	theta	Rm	Nm	fi	ch	N teórico	N real		
50	1,421700743	1,276495872	7,38546436	0,04973527	-0,938238223	20	38		
51	Rendimiento								
52	52,10404376								
53									
54									
55	heuristico	1,093339901							
56									

Implementación en GAMS:

Modo simulación:

La relación de reflujo es un variable fijada. Para la optimización se debe liberar pero me resulta que varias ecuaciones resultan infactibles.

Además, la temperatura media entre tope y fondo, $t_m = (T_1 + T_{NN})/2$ tampoco funciona por lo que la reemplacé por la media entre tope y reboiler que con una pequeña diferencia funciona (ecuación R18).

```
* DSOySP
* relación de reflujo optima
$eolcom #

PARAMETERS
F /100/           # Flujo de alimentación
xF /0.5/          # Fracción de benceno en la alimentación
xD /0.98/         # Fracción de benceno en el destilado
xW /0.06/         # Fracción de benceno en el fondo
PC /760/          # Presión del condensador
PW /760/          # Presión del reboiler
PF /760/          # Presión de la alimentación
P1 /760/          # Presión etapa 1

AntBzA /6.90565/  # Factor Antoine A del benceno
AntBzB /1211.033/ # Factor Antoine B del benceno
AntBzC /220.79/   # Factor Antoine C del benceno
AntTolA /6.95464/ # Factor Antoine A del tolueno
AntTolB /1344.8/  # Factor Antoine B del tolueno
AntTolC /219.482/ # Factor Antoine C del tolueno

DEP /40/          # Distancia entre platos en cm

AE_t /20/         # Temp entrada AE
AS_t /70/         # Temp salida AE
AE_Cp /1/         # CP AE
HOP /8500/        # Horas de operación anuales
UC /500/          # Coef global de trans de calor del condensador
PVC /2/           # Presión vapor de calefacción
UR /800/          # Coef global de transf de calor reboiler

POSITIVE VARIABLES
R
;

VARIABLES
D                # Flujo de destilado
W                # Flujo del fondo
tD               # Temp destilado
tW               # Temp fondo
tF               # Temp alimentación
alfaSup, alfaMedio, alfaInf, alfa # alfa superior, medio, superior y promedio
Nm, theta, Rm, phi # Nume minino de etapas, Vble aux, Relac de reflujo mínimo o vble
aux
```


ch, N, NT # Vble aux, Numero de etapas terórico y valor entero de N
 t1, tm # Temperatura etapa 1 y temperatura promedio tope-fondo
 V1, M1, RoL1, RoV1 # Flujo de vapor tope, peso molecular
 Qc, Qr # Calor de cond y reboiler
 xN # Fracción de benceno reboiler vapor
 hw, HN_1 # entalpía salida reb y fondo(N+1)
 xNN, LN, hNN, VN_1 # fracción benceno fondo, flujo liquido fondo (N), entalpía y flujo de vapor
 MN # peso molecular liquido fondo
 tNN, RoLN, RoVN # temperatura, densidad liquido y vapor del fondo
 mu, volat # viscosidad y volatilidad a temperatura media
 rend, NReal # rendimiento y número de etapas reales
 DEPin, CteForm # distancia entre platos en pulgadas, cte de la formula
 GTope, GFondo # gasto vapor tope y fondo
 ATope, AFondo, ACol # área de tope, de fondo y de columna (max)
 DCol, DColin # Diam columna
 CPlato, CostoCol # Costo por plato y de columna
 CostoACol # Costo anual columna
 AE_m, DTLN_C, ACond, CAgua # Flujo de AE, DTLN cond, Area cond y costo de agua
 CostoACond # Costo de condensador
 TVC,CLVC, CostoVC, AReb # Temp vap de calef, costo del mismo y área de reb
 VC_m, CostoAReb # Flujo de vap de calef y costo de reb

CTotal, RelR;

EQUATIONS

R0

R1, R2, R3, R4, R5

R6, R7, R8, R9, R10, R11, R12, R13, R14, R15, R16

R17, R18, R19, R20, R21, R22

R23, R24, R25, R26, R27, R28, R29, R30, R31

R32, R33, R34, R35

R36, R37, R38, R39

R40, R41, R42, R43, R44, R45, R46, R47, R48, R49, R50, R51

R52, R53, R54, R55, R56

R57, R58, R59, R60, R61, R62

R99, R100;

R0.. R =E= 2;

R1.. $F \cdot x_F = E = D \cdot x_D + W \cdot x_W$;

Balance de materia global

R2.. $F = E = D + W$;

Balance de materia por componente

R3.. $PC = E = x_D \cdot 10^{**}(\text{AntBzA} - \text{AntBzB}/(t_D + \text{AntBzC})) + (1 - x_D) \cdot 10^{**}(\text{AntToIA} - \text{AntToIB}/(t_D + \text{AntToIC}))$;

R4.. $PW = E = x_W \cdot 10^{**}(\text{AntBzA} - \text{AntBzB}/(t_W + \text{AntBzC})) + (1 - x_W) \cdot 10^{**}(\text{AntToIA} - \text{AntToIB}/(t_W + \text{AntToIC}))$;

R5.. $PF = E = x_F \cdot 10^{**}(\text{AntBzA} - \text{AntBzB}/(t_F + \text{AntBzC})) + (1 - x_F) \cdot 10^{**}(\text{AntToIA} - \text{AntToIB}/(t_F + \text{AntToIC}))$;

R6.. $\alpha_{\text{Sup}} = E = 10^{**}(\text{AntBzA} - \text{AntBzB}/(t_D + \text{AntBzC}))/10^{**}(\text{AntToIA} - \text{AntToIB}/(t_D + \text{AntToIC}))$;

R7.. $\alpha_{\text{Medio}} = E = 10^{**}(\text{AntBzA} - \text{AntBzB}/(t_F + \text{AntBzC}))/10^{**}(\text{AntToIA} - \text{AntToIB}/(t_F + \text{AntToIC}))$;

R8.. $\alpha_{\text{Inf}} = E = 10^{**}(\text{AntBzA} - \text{AntBzB}/(t_W + \text{AntBzC}))/10^{**}(\text{AntToIA} - \text{AntToIB}/(t_W + \text{AntToIC}))$;

R9.. $\alpha = E = (\alpha_{\text{Sup}} \cdot \alpha_{\text{Medio}} \cdot \alpha_{\text{Inf}})^{**}(1/3)$;

R10.. $N_m \cdot \log(\alpha_{\text{Medio}}) = E = \log(x_D \cdot (1 - x_W)/x_W/(1 - x_D))$;

R11.. $\theta = E = \alpha_{\text{Medio}}/(x_F \cdot (\alpha_{\text{Medio}} - 1) + 1)$;

R12.. $R_m = E = \alpha_{\text{Medio}} \cdot x_D/(\alpha_{\text{Medio}} - \theta) + (1 - x_D)/(1 - \theta) - 1$;

R13.. $\phi = E = (R - R_m)/(R + 1)$;

R14.. $ch \cdot \sqrt{\phi} = E = (1 + 54.4 \cdot \phi) \cdot (\phi - 1) / (11 + 117.2 \cdot \phi);$
 R15.. $N = E = \text{ceil}((1 - \exp(ch) + Nm) / \exp(ch));$
 R16.. $NT = E = \text{ceil}(N);$
 R17.. $1/P1 = E = xD / 10^{**} (AntBzA - AntBzB / (t1 + AntBzC)) + (1 - xD) / 10^{**} (AntTolA - AntTolB / (t1 + AntTolC));$
 R18.. $tm = E = (t1 + tw) / 2;$
 R19.. $V1 = E = D \cdot (R + 1);$
 R20.. $M1 = E = 78 \cdot xd + 92 \cdot (1 - xd);$
 R21.. $RoL1 = E = (1.0162 / (0.2655^{**} (1 + (1 - (t1 + 273.15) / 647.13)^{**} 0.081))) \cdot M1;$
 R22.. $RoV1 = E = (760 \cdot M1) / 62.361 / (t1 + 273.15);$
 R23.. $Qc = E = V1 \cdot (12123.205 - 2060.995 \cdot xd) - (4483.9962 - 2797.6681 \cdot xd + 1652.613 \cdot xd \cdot xd - 606.72932 \cdot xd \cdot xd \cdot xd) \cdot D \cdot (R + 1); \quad \#Q \text{ cond}$
 R24.. $Qr = E = (4483.9962 - 2797.6681 \cdot xd + 1652.613 \cdot xD \cdot xD - 606.72932 \cdot xD \cdot xD \cdot xD) \cdot D + (4483.9962 - 2797.6681 \cdot xW + 1652.613 \cdot xW \cdot xW - 606.72932 \cdot xW \cdot xW \cdot xW) \cdot W + Qc - (4483.9962 - 2797.6681 \cdot xF + 1652.613 \cdot xF \cdot xF - 606.72932 \cdot xF \cdot xF \cdot xF) \cdot F; \quad \# Q \text{ reb}$
 R25.. $xN = E = 10^{**} (AntBzA - AntBzB / (tW + AntBzC)) / PW \cdot xW;$
 R26.. $hw = E = 4483.9962 - 2797.6681 \cdot xW + 1652.613 \cdot xW \cdot xW - 606.72932 \cdot xW \cdot xW \cdot xW;$
 R27.. $HN_1 = E = 12123.205 - 2060.995 \cdot xN;$
 R28.. $LN \cdot (HN_1 - hNN) = E = (QR + W \cdot (HN_1 - hw));$
 R29.. $xNN \cdot LN = E = (xW \cdot W + xN \cdot VN_1);$
 R30.. $VN_1 = E = LN - W;$
 R31.. $hNN = E = 4483.9962 - 2797.6681 \cdot xNN + 1652.613 \cdot xNN \cdot xNN - 606.72932 \cdot xNN \cdot xNN \cdot xNN;$
 R32.. $MN = E = 78 \cdot xNN + 92 \cdot (1 - xNN);$
 R33.. $P1 = E = xNN \cdot 10^{**} (AntBzA - AntBzB / (tNN + AntBzC)) + (1 - xNN) \cdot 10^{**} (AntTolA - AntTolB / (tNN + AntTolC));$
 R34.. $RoLN = E = (1.0162 / (0.2655^{**} (1 + (1 - (tNN + 273.15) / 647.13)^{**} 0.081))) \cdot MN;$
 R35.. $RoVN = E = (760 \cdot MN) / 62.361 / (tNN + 273.15);$
 R36.. $\mu = E = xF \cdot \text{EXP}(13.6714 + 336.41 / (tm + 273.15) - 2.687 \cdot \log(tm + 273.15)) + (1 - xF) \cdot \text{EXP}(-53.7582 + 3148.6 / (tm + 273.15) + 7.4817 \cdot \log(tm + 273.15) - (5.7091E - 27) \cdot (tm + 273.15)^{**} 10);$
 R37.. $volat = E = (23.6249 + 1.56771 \cdot tm + 0.03805 \cdot tm \cdot tm + 0.000450869 \cdot tm \cdot tm \cdot tm + 0.0000032784889 \cdot tm \cdot tm \cdot tm \cdot tm) / (6.637316 + 0.444834 \cdot tm + 0.0114564 \cdot tm \cdot tm + 0.0001626403 \cdot tm \cdot tm \cdot tm + 0.000002298925 \cdot tm \cdot tm \cdot tm \cdot tm);$
 R38.. $rend \cdot (\mu \cdot volat)^{**} (0.2448) = E = 49.481;$
 R39.. $NReal = E = (NT \cdot 100 / rend);$
 R40.. $DEPin = E = DEP / 2.54;$
 R41.. $CteForm = E = 0.0016 \cdot DEPin \cdot DEPin \cdot DEPin \cdot DEPin - 0.081 \cdot DEPin \cdot DEPin \cdot DEPin - 0.6835 \cdot DEPin \cdot DEPin + 94.737 \cdot DEPin - 664.71;$
 R42.. $GTope = E = 0.305 \cdot CteForm \cdot \sqrt{RoV1 \cdot (RoL1 - RoV1)};$
 R43.. $GFondo = E = 0.305 \cdot CteForm \cdot \sqrt{RoVN \cdot (RoLN - RoVN)};$
 R44.. $ATope \cdot GTope = E = V1 \cdot M1;$
 R45.. $AFondo \cdot (0.305 \cdot CteForm \cdot \sqrt{RoVN \cdot (RoLN - RoVN)}) = E = VN_1 \cdot MN;$
 R46.. $ACol = E = \max(ATope, AFondo);$
 R47.. $DCol = E = \sqrt{ACol \cdot 4 / \pi};$
 R48.. $DColin = E = DCol \cdot 39.37;$
 R49.. $CPlato = E = 1.77759 \cdot (DColin^{**} 1.58805);$
 R50.. $CostoCol = E = CPlato \cdot NReal;$
 R51.. $CostoACol = E = CostoCol \cdot (1 + 0.6) \cdot (0.15);$
 R52.. $Qc = E = AE_m \cdot AE_Cp \cdot (AS_t - AE_t);$
 R53.. $DTLN_C = E = ((td - AE_t) - (t1 - AS_t)) / \log((td - AE_t) / (t1 - AS_t));$

```

R54.. ACond*UC*DTLN_C =E= Qc*10.764;
R55.. CAgua =E= AE_m*0.054*HOP/4535.924;
R56.. CostoACond =E= (167.31158*ACond**0.6088)*(1+0.6)*(0.15);

R57.. TVC =E= 99.5198*(PVC**0.2614) ;
R58.. CLVC =E=-0.68626*TVC+607.879 ;
R59.. CostoVC*CLVC =E= Qr*0.75*HOP/453.592;
R60.. Qr*10.764 =E= UR*AREb*(TVC-tw);
R61.. VC_m *CLVC=E= Qr;
R62.. CostoAREb =E= (313.10299*AREb**0.58095)*(1+0.6)*(0.15);

R99.. CTotal =E= CostoACol+CostoACond+CAgua+CostoAREb+CostoVC;
R100.. RelR*Rm =E= R;

tW.l=100;
tF.l=90;

alfaMedio.l=1;
phi.l=1;
ch.l=-0.1;
rend.l=100;
ATope.l=1;
MN.l=100;

tNN.l=100;
W.l=50;
D.l=50;

CostoACond.l=100;
ACond.l=100;
CostoAREb.l=100;
AREb.l=100;
R.l=2;

MODEL BM /ALL/;
*SOLVE BM USING CNS;
SOLVE BM USING MINLP MINIMIZING CTotal;

```

Después de inicializar de nuevo todas las variables con el resultado anterior y cambiando la R18.. por la que debe ser: R18.."tm =E= (t1+tnn)/2;"

```

* DSPySP
* relación de reflujo optima
$eolcom #

PARAMETERS
F /100/           # Flujo de alimentación
xF /0.5/          # Fracción de benceno en la alimentación
xD /0.98/         # Fracción de benceno en el destilado
xW /0.06/         # Fracción de benceno en el fondo
PC /760/          # Presión del condensador
PW /760/          # Presión del reboiler
PF /760/          # Presión de la alimentación
P1 /760/          # Presión etapa 1

```

AntBzA /6.90565/ # Factor Antoine A del benceno
 AntBzB /1211.033/ # Factor Antoine B del benceno
 AntBzC /220.79/ # Factor Antoine C del benceno
 AntToIA /6.95464/ # Factor Antoine A del tolueno
 AntToIB /1344.8/ # Factor Antoine B del tolueno
 AntToIC /219.482/ # Factor Antoine C del tolueno
 DEP /40/ # Distancia entre platos en cm
 AE_t /20/ # Temp entrada AE
 AS_t /70/ # Temp salida AE
 AE_Cp /1/ # CP AE
 HOP /8500/ # Horas de operación anuales
 UC /500/ # Coef global de trans de calor del condensador
 PVC /2/ # presión del vapor de calefacción
 UR /800/ # Coef global de transf de calor

POSITIVE VARIABLES

R
;

VARIABLES

D # Flujo de destilado
 W # Flujo del fondo
 tD # Temp destilado
 tW # Temp fondo
 tF # Temp alimentación
 alfaSup, alfaMedio, alfaInf, alfa # alfa superior, medio, superior y promedio
 Nm, theta, Rm, phi #Nume minino de etapas, Vble aux, Relac de reflujo
 mínimo o vble aux
 ch, N, NT # Vble aux, Numero de etapas teórico y valor entero de N
 t1, tm # Temperatura etapa 1 y temperatura promedio tope-
 fondo
 V1, M1, RoL1, RoV1 # Flujo de vapor tope, peso molecular
 Qc, Qr # Calor de cond y reboiler
 xN # Fracción de benceno reboiler vapor
 hw, HN_1 # entalpía salida reb y fondo(N+1)
 xNN, LN, hNN, VN_1 # fracción benceno fondo, flujo liquido fondo (N), entalpía y flujo de
 vapor
 MN # peso molecular liquido fondo
 tNN, RoLN, RoVN # temperatura, densidad liquido y vapor del fondo
 mu, volat # viscosidad y volatilidad a temperatura media
 rend, NReal # rendimiento y número de etapas reales
 DEPin, CteForm # distancia entre platos en pulgadas, cte de la formula
 GTope, GFondo # gasto vapor tope y fondo
 ATope, AFondo, ACol # área de tope, de fondo y de columna (max)
 DCol, DColin # Diam columna
 CPlato, CostoCol # Costo por plato y de columna
 CostoACol # Costo anual columna
 AE_m, DTLN_C, ACond, CAgua # Flujo de AE, DTLN cond, Area cond y costo de agua
 CostoACond # Costo de condensador
 TVC, CLVC, CostoVC, AReb # Temp vap de calef, costo del mismo y área de reb
 VC_m, CostoAReb # Flujo de vap de calef y costo de reb

 CTotal, ReIR; # Costo total y R/Rm =razón de las relaciones

EQUATIONS

*R0

R1, R2, R3, R4, R5
 R6, R7, R8, R9, R10, R11, R12, R13, R14, R15, R16
 R17, R18, R19, R20, R21, R22
 R23, R24, R25, R26, R27, R28, R29, R30, R31
 R32, R33, R34, R35
 R36, R37, R38, R39
 R40, R41, R42, R43, R44, R45, R46, R47, R48, R49, R50, R51
 R52, R53, R54, R55, R56
 R57, R58, R59, R60, R61, R62
 R99, R100;
 *R0.. R =E= 2;

R1.. $F \cdot x_F = E = D \cdot x_D + W \cdot x_W$; # Balance de materia global
 R2.. $F = E = D + W$; # Balance de materia por componente
 R3.. $PC = E = x_D \cdot 10^{**}(\text{AntBzA} - \text{AntBzB} / (t_D + \text{AntBzC})) + (1 - x_D) \cdot 10^{**}(\text{AntTolA} - \text{AntTolB} / (t_D + \text{AntTolC}))$;
 R4.. $PW = E = x_W \cdot 10^{**}(\text{AntBzA} - \text{AntBzB} / (t_W + \text{AntBzC})) + (1 - x_W) \cdot 10^{**}(\text{AntTolA} - \text{AntTolB} / (t_W + \text{AntTolC}))$;
 R5.. $PF = E = x_F \cdot 10^{**}(\text{AntBzA} - \text{AntBzB} / (t_F + \text{AntBzC})) + (1 - x_F) \cdot 10^{**}(\text{AntTolA} - \text{AntTolB} / (t_F + \text{AntTolC}))$;
 R6.. $\alpha_{\text{Sup}} = E = 10^{**}(\text{AntBzA} - \text{AntBzB} / (t_D + \text{AntBzC})) / 10^{**}(\text{AntTolA} - \text{AntTolB} / (t_D + \text{AntTolC}))$;
 R7.. $\alpha_{\text{Medio}} = E = 10^{**}(\text{AntBzA} - \text{AntBzB} / (t_F + \text{AntBzC})) / 10^{**}(\text{AntTolA} - \text{AntTolB} / (t_F + \text{AntTolC}))$;
 R8.. $\alpha_{\text{Inf}} = E = 10^{**}(\text{AntBzA} - \text{AntBzB} / (t_W + \text{AntBzC})) / 10^{**}(\text{AntTolA} - \text{AntTolB} / (t_W + \text{AntTolC}))$;
 R9.. $\alpha = E = (\alpha_{\text{Sup}} \cdot \alpha_{\text{Medio}} \cdot \alpha_{\text{Inf}})^{**}(1/3)$;
 R10.. $Nm \cdot \log(\alpha_{\text{Medio}}) = E = \log(x_D \cdot (1 - x_W) / x_W / (1 - x_D))$;
 R11.. $\theta = E = \alpha_{\text{Medio}} / (x_F \cdot (\alpha_{\text{Medio}} - 1) + 1)$;
 R12.. $R_m = E = \alpha_{\text{Medio}} \cdot x_D / (\alpha_{\text{Medio}} - \theta) + (1 - x_D) / (1 - \theta) - 1$;
 R13.. $\phi = E = (R - R_m) / (R + 1)$;
 R14.. $\text{ch} \cdot \sqrt{\phi} = E = (1 + 54.4 \cdot \phi) \cdot (\phi - 1) / (11 + 117.2 \cdot \phi)$;
 R15.. $N = E = \text{ceil}((1 - \exp(\text{ch}) + Nm) / \exp(\text{ch}))$;
 R16.. $NT = E = \text{ceil}(N)$;
 R17.. $1/P1 = E = x_D / 10^{**}(\text{AntBzA} - \text{AntBzB} / (t_1 + \text{AntBzC})) + (1 - x_D) / 10^{**}(\text{AntTolA} - \text{AntTolB} / (t_1 + \text{AntTolC}))$;
 R18.. $t_m = E = (t_1 + t_{nn}) / 2$;
 *R18.. $t_m = E = (t_1 + t_w) / 2$;
 R19.. $V1 = E = D \cdot (R + 1)$;
 R20.. $M1 = E = 78 \cdot x_d + 92 \cdot (1 - x_d)$;
 R21.. $RoL1 = E = (1.0162 / (0.2655^{**}(1 + (1 - (t_1 + 273.15) / 647.13)^{**}0.081)))) \cdot M1$;
 R22.. $RoV1 = E = (760 \cdot M1) / 62.361 / (t_1 + 273.15)$;
 R23.. $Qc = E = V1 \cdot (12123.205 - 2060.995 \cdot x_d) - (4483.9962 - 2797.6681 \cdot x_d + 1652.613 \cdot x_d \cdot x_d - 606.72932 \cdot x_d \cdot x_d \cdot x_d) \cdot D \cdot (R + 1)$; #Q cond
 R24.. $Qr = E = (4483.9962 - 2797.6681 \cdot x_d + 1652.613 \cdot x_D \cdot x_D - 606.72932 \cdot x_D \cdot x_D \cdot x_D) \cdot D + (4483.9962 - 2797.6681 \cdot x_W + 1652.613 \cdot x_W \cdot x_W - 606.72932 \cdot x_W \cdot x_W \cdot x_W) \cdot W + Qc - (4483.9962 - 2797.6681 \cdot x_F + 1652.613 \cdot x_F \cdot x_F - 606.72932 \cdot x_F \cdot x_F \cdot x_F) \cdot F$; # Q reb
 R25.. $x_N = E = 10^{**}(\text{AntBzA} - \text{AntBzB} / (t_W + \text{AntBzC})) / PW \cdot x_W$;
 R26.. $h_w = E = 4483.9962 - 2797.6681 \cdot x_W + 1652.613 \cdot x_W \cdot x_W - 606.72932 \cdot x_W \cdot x_W \cdot x_W$;
 R27.. $HN_1 = E = 12123.205 - 2060.995 \cdot x_N$;
 R28.. $LN \cdot (HN_1 - h_{NN}) = E = (QR + W \cdot (HN_1 - h_w))$;
 R29.. $x_{NN} \cdot LN = E = (x_W \cdot W + x_N \cdot V_N_1)$;
 R30.. $V_N_1 = E = LN - W$;
 R31.. $h_{NN} = E = 4483.9962 - 2797.6681 \cdot x_{NN} + 1652.613 \cdot x_{NN} \cdot x_{NN} - 606.72932 \cdot x_{NN} \cdot x_{NN} \cdot x_{NN}$;

```

R32.. MN =E= 78*xNN+92*(1-xNN);
R33.. tNN =E= 110.47229-45.24168*xNN+20.28327*xNN*xNN-5.2747025*xNN*xNN*xNN;
R34.. RoLN =E= (1.0162/(0.2655**((1+(1-(tNN+273.15)/647.13)**0.081))))*MN;
R35.. RoVN =E= (760*MN)/62.361/(tNN+273.15);
R36.. mu =E= xF*EXP(13.6714+336.41/(tm+273.15)-2.687*log(tm+273.15))+(1-xF)*EXP(-
53.7582+3148.6/(tm+273.15)+7.4817*log(tm+273.15)-(5.7091E-27)*(tm+273.15)**10);
R37.. volat =E=
(23.6249+1.56771*tm+0.03805*tm*tm+0.000450869*tm*tm*tm+0.0000032784889*tm*tm*tm*tm)/
(6.637316+0.444834*tm+0.0114564*tm*tm+0.0001626403*tm*tm*tm+0.000002298925*tm*tm*tm*
tm);
R38.. rend*(mu*volat)**(0.2448) =E= 49.481;
R39.. NReal =E= (NT*100/rend);
R40.. DEPin =E= DEP/2.54;
R41.. CteForm =E= 0.0016*DEPin*DEPin*DEPin*DEPin-0.081*DEPin*DEPin*DEPin-
0.6835*DEPin*DEPin+94.737*DEPin-664.71;

R42.. GTope =E= 0.305*CteForm*sqrt(RoV1*(RoL1-RoV1));
R43.. GFondo =E= 0.305*CteForm*sqrt(RoVN*(RoLN-RoVN));
R44.. ATope*GTope =E= V1*M1;
R45.. AFondo*(0.305*CteForm*sqrt(RoVN*(RoLN-RoVN)))=E= VN_1*MN;
R46.. ACol =E= max(ATope, AFondo);
R47.. DCol =E= sqrt(ACol*4/pi);
R48.. DColin =E= DCol*39.37;
R49.. CPlato =E= 1.77759*(DColin**1.58805);
R50.. CostoCol =E= CPlato*NReal;
R51.. CostoACol =E= CostoCol*(1+0.6)*(0.15);
R52.. Qc =E= AE_m*AE_Cp*(AS_t-AE_t);
R53.. DTLN_C =E= ((td-AE_t)-(t1-AS_t))/log((td-AE_t)/(t1-AS_t));
R54.. ACond*UC*DTLN_C =E= Qc*10.764;
R55.. CAgua =E= AE_m*0.054*HOP/4535.924;
R56.. CostoACond =E= (167.31158*ACond**0.6088)*(1+0.6)*(0.15);
R57.. TVC =E= 99.5198*(PVC**0.2614) ;
R58.. CLVC =E=-0.68626*TVC+607.879 ;
R59.. CostoVC*CLVC =E= Qr*0.75*HOP/453.592;
R60.. Qr*10.764 =E= UR*AReb*(TVC-tw);
R61.. VC_m*CLVC=E= Qr;
R62.. CostoAReb =E= (313.10299*AReb**0.58095)*(1+0.6)*(0.15);
R99.. CTotal =E= CostoACol+CostoACond+CAgua+CostoAReb+CostoVC;
R100.. RelR*Rm =E= R;

R.l= 1.337;
D.l= 47.826;
W.l= 52.174;
tD.l= 80.502;
tW.l= 107.873;
tF.l= 92.112;
alfaSup.l= 2.597;
alfaMedio.l= 2.492;
alfaInf.l= 2.368;
alfa.l= 2.484;
Nm.l= 7.276;
theta.l= 1.427;
Rm.l= 1.247;
phi.l= 0.038;
ch.l= -0.978;
N.l= 21;
NT.l= 21;

```

```

t1.l= 81.12;
tm.l= 94.497;
V1.l= 111.753;
M1.l= 78.28;
RoL1.l= 1039.146;
RoV1.l= 2.693;
Qc.l= 820830;
Qr.l= 836000;
xN.l= 0.131;
hw.l= 4321.954;
HN_1.l= 11852.601;
xNN.l= 0.108;
LN.l= 160.587;
hNN.l= 4200.031;
VN_1.l= 108.413;
MN.l= 90.486;
tNN.l= 105.811;
RoLN.l= 1190.606;
RoVN.l= 2.91;
mu.l= 0.281;
volat.l= 2.446;
rend.l= 54.258;
NReal.l= 38.704;
DEPin.l= 15.748;
CteForm.l= 439.763;
GTope.l= 7085.999;
GFondo.l= 7885.242;
ATope.l= 1.235;
AFondo.l= 1.244;
ACol.l= 1.244;
DCol.l= 1.259;
DColin.l= 49.55;
CPlato.l= 874.272;
CostoCol.l= 33837.613;
CostoACol.l= 8121.027;
AE_m.l= 16416.56;
DTLN_C.l= 29.153;
ACond.l= 606.144;
CAgua.l= 1661.227;
CostoACond.l= 1985.04;
TVC.l= 119.289;
CLVC.l= 526.016;
CostoVC.l= 22336.789;
AREb.l= 985.319;
VC_m.l= 1589.3;
CostoAREb.l= 4121.137;
CTotal.l= 38225.22;
ReIR.l= 1.072;

```

```

MODEL BM /ALL/;
SOLVE BM USING MINLP MINIMIZING CTotal;

```

Comparación de resultados entre excel y gams

VAR	GAMS		Excel
	Inicial	EC 18 nueva	PLANILLA
R	1.337	1.313	1.396
D	47.826	47.826	47.826
W	52.174	52.174	52.174
tD	80.502	80.502	
tW	107.873	107.873	107.9
tF	92.112	92.112	92.2
alfaSup	2.597	2.597	2.570
alfaMedio	2.492	2.492	2.467
alfaInf	2.368	2.368	2.339
alfa	2.484	2.484	2.457
Nm	7.276	7.276	7.391
theta	1.427	1.427	1.421
Rm	1.247	1.247	1.278
phi	0.038	0.029	0.049
ch	-0.978	-1.022	-0.940
N	21	22	20
NT	21	22	37
t1	81.12	81.12	81.5
tm	94.497	93.469	93.666
V1	111.753	110.636	114.575
M1	78.28	78.28	78.280
RoL1	1039.146	1039.146	1039.010
RoV1	2.693	2.693	2.690
Qc	8.21E+05	8.13E+05	8.416E+05
Qr	8.36E+05	8.28E+05	8.567E+05

VAR	GAMS		Excel
	Inicial	EC 18 nueva	PLANILLA
xN	0.131	0.131	0.13000
hw	4321.954	4321.954	4321.954
HN_1	11852.601	11852.601	11855.276
xNN	0.108	0.108	0.108
LN	160.587	159.522	163.283
hNN	4200.031	4200.412	4201.264
VN_1	108.413	107.348	111.109
MN	90.486	90.488	90.493
tNN	105.811	105.817	105.831
RoLN	1190.606	1190.632	1190.689
RoVN	2.91	2.91	2.910
mu	0.281	0.283	0.283
volat	2.446	2.455	2.550
rend	54.258	54.075	53.602
NReal	38.704	40.684	37
DEPin	15.748	15.748	15.748
CteForm	439.763	439.763	439.763
GTope	7085.999	7085.999	7081.752
GFondo	7885.242	7885.356	7885.609
ATope	1.235	1.222	1.266
AFondo	1.244	1.232	1.275
ACol	1.244	1.232	
DCol	1.259	1.252	1.274
DColin	49.55	49.306	50.163
CPlato	874.272	867.455	891.518
CostoCol	33837.613	35291.75	32986.1542
CostoACol	8121.03	8470.02	7916.677

VAR	GAMS		Excel
	Inicial	EC 18 nueva	PLANILLA
AE_m	16416.56	16252.42	16831.20
DTLN_C	29.153	29.153	29.341
ACond	606.144	600.083	617.467
CAgua	1661.227	1644.618	1703.186
CostoACond	1985.04	1972.933	2007.535
TVC	119.289	119.289	119.289
CLVC	526.016	526.016	526.016
CostoVC	22336.789	22117.513	22890.724
AReb	985.319	975.647	1012.183
VC_m	1589.3	1573.698	
CostoAReb	4121.137	4097.585	4186.044
CTotal	38225.22	38302.67	\$ 38 704.17
RelR	1.072	1.053	1.092

* Integración IV

* relación de reflujo optima

\$eolcom #

PARAMETERS

F /100/	# Flujo de alimentación
xF /0.5/	# Fracción de benceno en la alimentación
xD /0.98/	# Fracción de benceno en el destilado
xW /0.06/	# Fracción de benceno en el fondo
PC /760/	# Presión del condensador
PW /760/	# Presión del reboiler
PF /760/	# Presión de la alimentación
P1 /760/	# Presión etapa 1
AntBzA /6.90565/	# Factor Antoine A del benceno
AntBzB /1211.033/	# Factor Antoine B del benceno
AntBzC /220.79/	# Factor Antoine C del benceno
AntTolA /6.95464/	# Factor Antoine A del tolueno
AntTolB /1344.8/	# Factor Antoine B del tolueno
AntTolC /219.482/	# Factor Antoine C del tolueno
DEP /40/	# Distancia entre platos en cm
AE_t /20/	# Temp entrada AE
AS_t /70/	# Temp salida AE
AE_Cp /1/	# CP AE
HOP /8500/	# Horas de operación anuales

UC /500/ # Coef global de trans de calor del condensador
PVC /2/ # presión del vapor de calefacción
UR /800/ # Coef global de transf de calor

POSITIVE VARIABLES

R;

VARIABLES

D # Flujo de destilado
W # Flujo del fondo
tD # Temp destilado
tW # Temp fondo
tF # Temp alimentación
alfaSup, alfaMedio, alfaInf, alfa # alfa superior, medio, superior y promedio
Nm, theta, Rm ,phi # Num minino de etapas, Vble aux, Relac de reflujo mínimo o vble aux
ch, N, NT # Vble aux, Numero de etapas teórico y valor entero de N
t1, tm # Temperatura etapa 1 y temperatura promedio tope-fondo
V1, M1, RoL1, RoV1 # Flujo de vapor tope, peso molecular
Qc, Qr # Calor de cond y reboiler
xN # Fracción de benceno reboiler vapor
hw, HN_1 # entalpía salida reb y fondo(N+1)
xNN, LN, hNN, VN_1 # fracción benceno fondo, flujo liquido fondo (N), entalpía y flujo de vapor
MN # peso molecular liquido fondo
tNN, RoLN, RoVN # temperatura, densidad liquido y vapor del fondo
mu, volat # viscosidad y volatilidad a temperatura media
rend, NReal # rendimiento y número de etapas reales
DEPin, CteForm # distancia entre platos en pulgadas, cte de la formula
GTope, GFondo # gasto vapor tope y fondo
ATope, AFondo, ACol # área de tope, de fondo y de columna (max)
DCol, DColin # Diam columna
CPlato, CostoCol # Costo por plato y de columna
CostoACol # Costo anual columna
AE_m, DTLN_C, ACond, CAgua # Flujo de AE, DTLN cond, Area cond y costo de agua
CostoACond # Costo de condensador
TVC,CLVC, CostoVC, AReb # Temp vap de calef, costo del mismo y área de reb
VC_m, CostoAReb # Flujo de vap de calef y costo de reb
CTotal, RelR; # Costo total y R/Rm =razón de las relaciones

EQUATIONS

*R0

R1, R2, R3, R4, R5
R6, R7, R8, R9, R10, R11, R12, R13, R14, R15, R16
R17, R18, R19, R20, R21, R22
R23, R24, R25, R26, R27, R28, R29, R30, R31
R32, R33, R34, R35
R36, R37, R38, R39
R40, R41, R42, R43, R44, R45, R46, R47, R48, R49, R50, R51
R52, R53, R54, R55, R56
R57, R58, R59, R60, R61, R62
R99, R100;

*R0.. R =E= 2;

R1.. $F \cdot x_F = E = D \cdot x_D + W \cdot x_W$; # Balance de materia global
R2.. $F = E = D + W$; # Balance de materia por componente
R3.. $PC = E = x_D \cdot 10^{**}(\text{AntBzA} - \text{AntBzB} / (t_D + \text{AntBzC})) + (1 - x_D) \cdot 10^{**}(\text{AntTolA} - \text{AntTolB} / (t_D + \text{AntTolC}));$
R4.. $PW = E = x_W \cdot 10^{**}(\text{AntBzA} - \text{AntBzB} / (t_W + \text{AntBzC})) + (1 - x_W) \cdot 10^{**}(\text{AntTolA} - \text{AntTolB} / (t_W + \text{AntTolC}));$

```

R5.. PF =E= xF*10**((AntBzA-AntBzB/(tF+AntBzC))+(1-xF)*10**((AntTolA-AntTolB/(tF+AntTolC)));
R6.. alfaSup =E= 10**((AntBzA-AntBzB/(tD+AntBzC))/10**((AntTolA-AntTolB/(tD+AntTolC)));
R7.. alfaMedio =E= 10**((AntBzA-AntBzB/(tF+AntBzC))/10**((AntTolA-AntTolB/(tF+AntTolC)));
R8.. alfaInf =E= 10**((AntBzA-AntBzB/(tW+AntBzC))/10**((AntTolA-AntTolB/(tW+AntTolC)));
R9.. alfa =E= (alfaSup*alfaMedio*alfaInf)**(1/3);
R10.. Nm*log(alfaMedio) =E= log(xD*(1-xW)/xW/(1-xD));
R11.. theta =E= alfaMedio/(xF*(alfaMedio-1)+1);
R12.. Rm =E= alfaMedio*xD/(alfaMedio-theta)+(1-xD)/(1-theta)-1;
R13.. phi =E= (R-Rm)/(R+1);
R14.. ch*sqrt(phi) =E= (1+54.4*phi)*(phi-1)/(11+117.2*phi);
R15.. N =E= ceil((1-exp(ch)+Nm)/exp(ch));
R16.. NT =E= ceil(N);
R17.. 1/P1 =E= xD/10**((AntBzA-AntBzB/(t1+AntBzC))+(1-xD)/10**((AntTolA-AntTolB/(t1+AntTolC)));
R18.. tm =E= (t1+tnn)/2;
*R18.. tm =E= (t1+tw)/2;
R19.. V1 =E= D*(R+1);
R20.. M1 =E= 78*xd+92*(1-xd);
*R21.. RoL1 =E= (1.0162/(0.2655**((1+(1-(t1+273.15)/647.13)**0.081)))**M1;
R21.. RoL1 =E= xD*(0.3041*0.269**(-1*(1-(t1+273.15)/562)**(2/7))*1000)+(1-xD)*(0.2906*0.265**(-1*(1-(t1+273.15)/593.1)**(2/7))*1000);
R22.. RoV1 =E= (760*M1)/62.361/(t1+273.15);
R23.. Qc =E= V1*(12123.205-2060.995*xd)-(4483.9962-2797.6681*xd+1652.613*xd*xd-606.72932*xd*xd*xd)*D*(R+1); #Q cond
R24.. Qr =E= (4483.9962-2797.6681*xd+1652.613*xD*xD-606.72932*xD*xD*xD)*D+(4483.9962-2797.6681*xW+1652.613*xW*xW-606.72932*xW*xW*xW)*W+Qc-(4483.9962-2797.6681*xF+1652.613*xF*xF-606.72932*xF*xF*xF)*F; # Q reb
R25.. xN =E= 10**((AntBzA-AntBzB/(tW+AntBzC))/PW*xW);
R26.. hw =E= 4483.9962-2797.6681*xW+1652.613*xW*xW-606.72932*xW*xW*xW;
R27.. HN_1 =E= 12123.205-2060.995*xN;
R28.. LN*(HN_1-hNN) =E= (QR+W*(HN_1-hw));
R29.. xNN*LN =E= (xW*W+xN*VN_1);
R30.. VN_1 =E= LN-W;
R31.. hNN =E= 4483.9962-2797.6681*xNN+1652.613*xNN*xNN-606.72932*xNN*xNN*xNN;
R32.. MN =E= 78*xNN+92*(1-xNN);
R33.. tNN =E= 110.47229-45.24168*xNN+20.28327*xNN*xNN-5.2747025*xNN*xNN*xNN;
*R34.. RoLN =E= (1.0162/(0.2655**((1+(1-(tNN+273.15)/647.13)**0.081)))**MN;
R34.. RoLN =E= xNN*(0.3041*0.269**(-1*(1-(tNN+273.15)/562)**(2/7))*1000)+(1-xNN)*(0.2906*0.265**(-1*(1-(tNN+273.15)/593.1)**(2/7))*1000);
R35.. RoVN =E= (760*MN)/62.361/(tNN+273.15);
R36.. mu =E= xF*EXP(13.6714+336.41/(tm+273.15)-2.687*log(tm+273.15))+(1-xF)*EXP(-53.7582+3148.6/(tm+273.15)+7.4817*log(tm+273.15)-(5.7091E-27)*(tm+273.15)**10);
R37.. volat =E= (23.6249+1.56771*tm+0.03805*tm*tm+0.000450869*tm*tm*tm+0.0000032784889*tm*tm*tm*tm)/(6.637316+0.444834*tm+0.0114564*tm*tm+0.0001626403*tm*tm*tm+0.000002298925*tm*tm*tm*tm);
R38.. rend*(mu*volat)**(0.2448) =E= 49.481;
R39.. NReal =E= (NT*100/rend);
R40.. DEPin =E= DEP/2.54;
R41.. CteForm =E= 0.0016*DEPin*DEPin*DEPin*DEPin-0.081*DEPin*DEPin*DEPin-0.6835*DEPin*DEPin+94.737*DEPin-664.71;
R42.. GTope =E= 0.305*CteForm*sqrt(RoV1*(RoL1-RoV1));
R43.. GFondo =E= 0.305*CteForm*sqrt(RoVN*(RoLN-RoVN));
R44.. ATope*GTope =E= V1*M1;
R45.. AFondo*(0.305*CteForm*sqrt(RoVN*(RoLN-RoVN))) =E= VN_1*MN;
R46.. ACol =E= max(ATope, AFondo);
R47.. DCol =E= sqrt(ACol*4/pi);
R48.. DColin =E= DCol*39.37;
R49.. CPlato =E= 1.77759*(DColin**1.58805);

```

```

R50.. CostoCol =E= CPlato*NReal;
R51.. CostoACol =E= CostoCol*(1+0.6)*(0.15);
R52.. Qc =E=AE_m*AE_Cp*(AS_t-AE_t);
R53.. DTLN_C =E= ((td-AE_t)-(t1-AS_t))/log((td-AE_t)/(t1-AS_t));
R54.. ACond*UC*DTLN_C =E= Qc*10.764;
R55.. CAgua =E= AE_m*0.054*HOP/4535.924;
R56.. CostoACond =E= (167.31158*ACond**0.6088)*(1+0.6)*(0.15);
R57.. TVC =E= 99.5198*(PVC**0.2614) ;
R58.. CLVC =E=-0.68626*TVC+607.879 ;
R59.. CostoVC*CLVC =E= Qr*0.75*HOP/453.592;
R60.. Qr*10.764 =E= UR*AReb*(TVC-tw);
R61.. VC_m *CLVC=E= Qr;
R62.. CostoAReb =E= (313.10299*AReb**0.58095)*(1+0.6)*(0.15);
R99.. CTotal =E= CostoACol+CostoACond+CAgua+CostoAReb+CostoVC;
R100.. RelR*Rm =E= R;
R.l= 1.337;
D.l= 47.826;
W.l= 52.174;
tD.l= 80.502;
tW.l= 107.873;
tF.l= 92.112;
alfaSup.l= 2.597;
alfaMedio.l= 2.492;
alfaInf.l= 2.368;
alfa.l= 2.484;
Nm.l= 7.276;
theta.l= 1.427;
Rm.l= 1.247;
phi.l= 0.038;
ch.l= -0.978;
N.l= 21;
NT.l= 21;
t1.l= 81.12;
tm.l= 94.497;
V1.l= 111.753;
M1.l= 78.28;
RoL1.l= 1039.146;
RoV1.l= 2.693;
Qc.l= 820830;
Qr.l= 836000;
xN.l= 0.131;
hw.l= 4321.954;
HN_1.l= 11852.601;
xNN.l= 0.108;
LN.l= 160.587;
hNN.l= 4200.031;
VN_1.l= 108.413;
MN.l= 90.486;
tNN.l= 105.811;
RoLN.l= 1190.606;
RoVN.l= 2.91;
mu.l= 0.281;
volat.l= 2.446;
rend.l= 54.258;
NReal.l= 38.704;
DEPin.l= 15.748;
CteForm.l= 439.763;

```

GTope.l= 7085.999;
 GFondo.l= 7885.242;
 ATope.l= 1.235;
 AFondo.l= 1.244;
 ACol.l= 1.244;
 DCol.l= 1.259;
 DColin.l= 49.55;
 CPlato.l= 874.272;
 CostoCol.l= 33837.613;
 CostoACol.l= 8121.027;
 AE_m.l= 16416.56;
 DTLN_C.l= 29.153;
 ACond.l= 606.144;
 CAgua.l= 1661.227;
 CostoACond.l= 1985.04;
 TVC.l= 119.289;
 CLVC.l= 526.016;
 CostoVC.l= 22336.789;
 AReb.l= 985.319;
 VC_m.l= 1589.3;
 CostoAReb.l= 4121.137;
 CTotal.l= 38225.22;
 RelR.l= 1.072;

MODEL BM /ALL/;

SOLVE BM USING MINLP MINIMIZING CTotal;

VAR	GAMS	Excel
	Inicial	PLANILLA
R	1.313	1.396
D	47.826	47.826
W	52.174	52.174
tD	80.502	
tW	107.873	107.9
tF	92.112	92.2
alfaSup	2.597	2.570
alfaMedio	2.492	2.467
alfaInf	2.368	2.339
alfa	2.484	2.457
Nm	7.276	7.391
theta	1.427	1.421

VAR	GAMS	Excel
	Inicial	PLANILLA
Rm	1.247	1.278
phi	0.029	0.049
ch	-1.022	-0.940
N	22	20
NT	22	20
t1	81.12	81.5
tm	93.469	93.666
V1	110.636	114.575
M1	78.28	78.280
RoL1	816.665	815.941
RoV1	2.693	2.690
Qc	8.13E+05	8.416E+05
Qr	8.28E+05	8.567E+05
xN	0.131	0.13000
hw	4321.954	4321.954
HN_1	11852.601	11855.276
xNN	0.108	0.108
LN	159.522	163.283
hNN	4200.412	4201.264
VN_1	107.348	111.109
MN	90.488	90.493
tNN	105.817	105.831
RoLN	784.63	784.399
RoVN	2.91	2.910
mu	0.283	0.283
volat	2.455	2.550
rend	54.075	53.602

VAR	GAMS	Excel
	Inicial	PLANILLA
NReal	40.684	37
DEPin	15.748	15.748
CteForm	439.763	439.763
GTope	6279.586	6273.445
GFondo	6397.195	6396.301
ATope	1.379	1.430
AFondo	1.518	1.572
ACol	1.518	
DCol	1.39	1.415
DColin	54.742	55.698
CPlato	1024.164	1052.718
CostoCol	41667.345	38950.5527
CostoACol	10000.16	9348.13265
AE_m	16252.423	16831.20
DTLN_C	29.153	29.341
ACond	600.083	617.467
CAgua	1644.618	1703.186
CostoACond	1972.933	2007.535
TVC	119.289	119.289
CLVC	526.016	526.016
CostoVC	22117.513	22890.724
AREb	975.647	1012.183
VC_m	1573.698	
CostoAREb	4097.585	4186.044
CTotal	39832.812	\$ 40 135.62
RelR	1.053	1.092

Simulador EMSO:

EMSO es un simulador orientado a ecuaciones que aunque contiene sus propios módulos permite armar al usuario los suyos. Una ventaja obvia es que se puede acceder a la propia biblioteca de componentes y paquetes fisicoquímicos.

El siguiente código contiene algunos cambios a fin de asegurar la convergencia como el reemplazo de algunas correlaciones potenciales por otras polinómicas como así una raíz cuadrada para el cálculo del número de etapas por otra polinómica que ajusta bien en el rango de interés. Algunas ecuaciones del modelo debieron ser divididas en 2 mediante variables auxiliares. Para un reflujo fijo de 2:

```

## Balance ##
using "types";
FlowSheet BenTol
PARAMETERS
    PP as Plugin(Brief="FQ",
                  Type="PP",
                  Components=["benzene","toluene","water"],
                  LiquidModel="IdealLiquid",
                  VapourModel="Ideal");

    NComp as Integer;
    PF as Real;
    xF(3) as Real;
    FF as Real;
    xW(3) as Real;
    xD(3) as Real;
    DistP as Real;
    Pi as Real;
    q as Real;
    TE as Real;
    TS as Real;
    UC as Real;
    xA(3) as Real;
    PVC as Real;
    UR as Real;
    hOp as Real;
VARIABLES
    hF as Real;
    FD as Real;
    FW as Real;
    TF as Real;
    LO as Real;
    x0(3) as Real;
    R as Real;
    V1 as Real;
    QC as Real;
    T0 as Real;
    TD as Real;
    T1 as Real;
    PS1(3) as Real;
    hD as Real;
    h1 as Real;
    TW as Real;
    hW as Real;
    QR as Real;

```

yN1(3) as Real;
 TN1 as Real;
 hN as Real;
 hN1 as Real;
 LN as Real;
 FVN as Real;
 xN(3) as Real;
 TN as Real;
 Tmedio as Real;
 PSSup(3) as Real;
 AlfaSup as Real;
 PSInf(3) as Real;
 AlfaInf as Real;
 PSAI(3) as Real;
 AlfaAI as Real;
 AlfaMedio as Real;
 RoL0 as Real;
 RoV1 as Real;
 Const as Real;
 GastoSup as Real;
 PM(3) as Real;
 PMSup as Real;
 Diam(2) as Real;
 RoLN as Real;
 RoVN1 as Real;
 GastoInf as Real;
 PMInf as Real;
 DiamCol as Real;
 Theta as Real;
 Rmin as Real;
 NmAux1 as Real;
 NmAux2 as Real;
 Nmin as Real;
 phi as Real;
 chi as Real;
 NTeor as Real;
 visc as Real;
 volt as Real;
 rend as Real;
 NActual as Real;
 CPlato as Real;
 CCol as Real;
 CAnCol as Real;
 dtInC as Real;
 ACond as Real;
 CCond as Real;
 CAnCond as Real;
 mA as Real;
 CAnAE as Real;
 TVC as Real;
 AReb as Real;
 CReb as Real;
 CAnReb as Real;
 CaLat as Real;
 mVC as Real;
 CAnVap as Real;
 CFijoTotal as Real;

```

COPtotal as Real;
CAnTotal as Real;
EQUATIONS
R=2;
PM=1000*PP.MolecularWeight;
# Global
FF=FD+FW;
FF*xF(1)=FD*xD(1)+FW*xW(1);
hF=PP.LiquidEnthalpy(TF,PF,xF);
TF=PP.BubbleT(PF,xF);
# Cond y tope
L0=FD*R;
x0=xD;
V1=FD*(R+1);
TD=PP.BubbleT(PF,xD);
hD=PP.LiquidEnthalpy(TD,PF,xD);
T0=TD;
PS1=PP.VapourPressure(T1);
1/PF=sum(x0/PS1);
h1=PP.VapourEnthalpy(T1,PF,xD);
QC=h1*V1-hD*FD*(R+1);
RoL0=PP.LiquidDensity(TD,PF,xD);
RoV1=PP.VapourDensity(T1,PF,x0);
Const=0.0016*DistP^4-0.081*DistP^3-0.6835*DistP^2+94.737*DistP-664.71;
GastoSup=0.305*Const*sqrt(RoV1*(RoL0-RoV1));
PMSup=sum(xD*PM);
Diam(1)=sqrt(4*V1*PMSup/GastoSup/Pi);
# Reb y fondo
PF=sum(xW*PP.VapourPressure(TW));
hW=PP.LiquidEnthalpy(TW,PF,xW);
QR=hD*FD+hW*FW+QC-hF*FF;
yN1=xW*PP.VapourPressure(TW)/PF;
TN1=TW;
LN=FW+FVN;
LN*xN=FW*xW+FVN*yN1;
hN*LN+QR=hN1*FVN+hW*FW;
hN1=PP.VapourEnthalpy(TN1,PF,yN1);
hN=PP.LiquidEnthalpy(TN,PF,xN);
PF=sum(xN*PP.VapourPressure(TN));
RoLN=PP.LiquidDensity(TN,PF,xN);
RoVN1=PP.VapourDensity(TN1,PF,yN1);
GastoInf=0.305*Const*sqrt(RoVN1*(RoLN-RoVN1));
PMInf=sum(yN1*PM);
Diam(2)=sqrt(4*FVN*PMInf/GastoInf/Pi);
# Col
Tmedio=(T1+TN)/2;
PSSup=PP.VapourPressure(TD);
AlfaSup=PSSup(1)/PSSup(2);
PSInf=PP.VapourPressure(TW);
AlfaInf=PSInf(1)/PSInf(2);
PSAI=PP.VapourPressure(TF);
AlfaAI=PSAI(1)/PSAI(2);
AlfaMedio^3=(AlfaSup*AlfaInf*AlfaAI);
DiamCol=max(Diam);
Theta=AlfaMedio/(xF(1)*(AlfaMedio-1)+1);
Rmin=AlfaMedio*xD(1)/(AlfaMedio-Theta)+xD(2)/(1-Theta)-1;
(NmAux1)=ln(xD(1)*(1-xW(1))/xW(1)/(xD(2)));

```

```

NmAux2=0.03951*AlfaMedio^3-0.3807*AlfaMedio^2+1.553*AlfaMedio-1.204;
Nmin=NmAux1/NmAux2;
phi=(R-Rmin)/(R+1);
chi*sqrt(phi)*(11+117.2*phi)=(1+54.4*phi)*(phi-1);
(NTeor-Nmin)=(1-(0.1515*chi^2+0.7094*chi+0.9365))*(NTeor+1);
visc=PP.LiquidViscosity(TF,PF,xF)*1000;
volt=PSAI(1)/PSAI(2);
rend=49.481*(visc*volt)^(-0.2448);
NActual=NTeor*100/rend;
CPlato=398.57*DiamCol^2-143.42*DiamCol+493.29;
CCol=CPlato*NActual;
CAnCol=CCol*(1+0.6)*(0.15);
dtlnC*ln((TD-TE)/(TO-TS))=((TD-TE)-(TO-TS));
QC=UC*ACond*dtlnC/10.764;
CCond=167.31158*ACond^0.6088;
CAnCond=CCond*(1+0.6)*(0.15);
QC=mA*(PP.LiquidEnthalpy(TS,PF,xA)-PP.LiquidEnthalpy(TE,PF,xA))/PM(3);
CAnAE=mA*0.054/4535.924*hOp;
TVC=PP.BubbleT(PVC,xA);
QR=AReb*UR*(TVC-TW)/10.764;
CReb=-1.004E-03*AReb^2+1.160E+01*AReb+6.749E+03;
CAnReb=CReb*(1+0.6)*(0.15);
Callat=PP.VapourEnthalpy(TVC,PVC,xA)-PP.LiquidEnthalpy(TVC,PVC,xA);
QR*2.20462=mVC*Callat/PM(3);
CAnVap=mVC*0.75/1000*hOp;

CFijoTotal=CAnCol+CAnCond+CAnReb;
COpTotal=CAnAE+CAnVap;
CAnTotal=CFijoTotal+COpTotal;

```

SET

```

xF(1)=0.5;
xF(2)=1-xF(1);
xF(3)=0;
PF=101000;
FF=100;
xD(1)=0.98;
xD(2)=1-xD(1);
xD(3)=0;
xW(1)=0.06;
xW(2)=1-xW(1);
xW(3)=0;
DistP=40/2.54;
Pi=3.1415923536;
q=1;
TE=25+273.15;
TS=70+273.15;
UC=2092;
UR=3347.2;
xA(1)=0;
xA(2)=0;
xA(3)=1;
PVC=2*'atm';
hOp=8500;

```

INITIAL

CAnTotal=10000;

GUESS

TF=300;

```

T1=350;
hD=1000;
TW=350;
TN=380;
LN=200;
hN=1000;
Nmin=30;
NmAux1=20;
chi=2;
phi=0.3;
OPTIONS
TimeStart=1.29;
TimeEnd=2;
TimeStep=0.01;
TimeUnit='s';
DAESolver(File="dassl");
Dynamic=false;
End

```

Resultados:

Variable	Unidad	Valor		Unidad	Valor
NComp		1.0000			
PF	[Pa]	101000.0000		[atm]	1
xF(1)		0.5000			
xF(2)		0.5000			
xF(3)		0.0000			
FF	[kmol/hr]	100.0000			
xW(1)		0.0600			
xW(2)		0.9400			
xW(3)		0.0000			
xD(1)		0.9800			
xD(2)		0.0200			
xD(3)		0.0000			
DistP	[in]	15.7480			
Pi		3.1416			
q		1.0000			
TE	[°K]	298.1500		[°C]	25.0000
TS	[°K]	343.1500		[°C]	70.0000
UC	[kJ/m2 h °K]	2092.0000		[kCal/h m2 °K]	800
xA(1)		0.0000			
xA(2)		0.0000			
xA(3)		1.0000			
PVC	[Pa]	202650.0000		[atm]	2.00643564
UR	[kJ/m2 h °K]	3347.2000		[kCal/h m2 °K]	800
hOp	[hr/año]	8500.0000			
hF	[J/kmol]	-25351.7000			
FD	[kmol/hr]	47.8261			
FW	[kmol/hr]	52.1739			
TF	[°K]	365.1220		[°C]	91.9720
L0	[kmol/hr]	95.6522			
x0(1)		0.9800			

Variable	Unidad	Valor		Unidad	Valor
x0(2)		0.0200			
x0(3)		0.0000			
R		2.0000			
V1	[kmol/hr]	143.4780			
QC	[kJ/hr]	4.413E+06		[kCal/hr]	1.054E+06
T0	[°K]	353.5440		[°C]	80.3940
TD	[°K]	353.5440		[°C]	80.3940
T1	[°K]	354.1610		[°C]	81.0110
PS1(1)	[Pa]	104213.0000		[atm]	1.03181188
PS1(2)	[Pa]	40229.4000		[atm]	0.39831089
PS1(3)	[Pa]	49387.6000		[atm]	0.48898614
hD	[J/kmol]	-25782.1000			
h1	[J/kmol]	4974.5100			
TW	[°K]	380.8120		[°C]	107.6620
hW	[J/kmol]	-23774.0000			
QR	[kJ/hr]	4474640.0000		[kCal/hr]	1.069E+06
yN1(1)		0.1312			
yN1(2)		0.8688			
yN1(3)		0.0000			
TN1	[°K]	380.8120		[°C]	107.6620
hN	[J/kmol]	-24046.3000			
hN1	[J/kmol]	9512.7000			
LN	[kmol/hr]	185.0870			
FVN	[kmol/hr]	132.9130			
xN(1)		0.1111			
xN(2)		0.8889			
xN(3)		0.0000			
TN	[°K]	378.6190		[°C]	105.4690
Tmedio	[°K]	366.3900		[°C]	93.2400
PSSup(1)	[Pa]	102258.0000		[atm]	1.01245545
PSSup(2)	[Pa]	39383.5000		[atm]	0.38993564
PSSup(3)	[Pa]	48175.7000		[atm]	0.47698713
AlfaSup		2.5965			
PSInf(1)	[Pa]	220778.0000		[atm]	2.18592079
PSInf(2)	[Pa]	93354.6000		[atm]	0.92430297
PSInf(3)	[Pa]	132470.0000		[atm]	1.31158416
AlfaInf		2.3649			
PSAI(1)	[Pa]	144121.0000		[atm]	1.42694059
PSAI(2)	[Pa]	57878.8000		[atm]	0.57305743
PSAI(3)	[Pa]	75601.6000		[atm]	0.74853069
AlfaAI		2.4901			
AlfaMedio		2.4820			
RoL0	[kmol/m3]	839.7640			
RoV1	[kmol/m3]	2.6889			
Const		439.7630			
GastoSup		6363.3700			
PM(1)	[kg/kmol]	78.1134			
PM(2)	[kg/kmol]	92.1402			
PM(3)	[kg/kmol]	18.0152			
PMSup	[kg/kmol]	78.3939			
Diam(1)		1.5002			

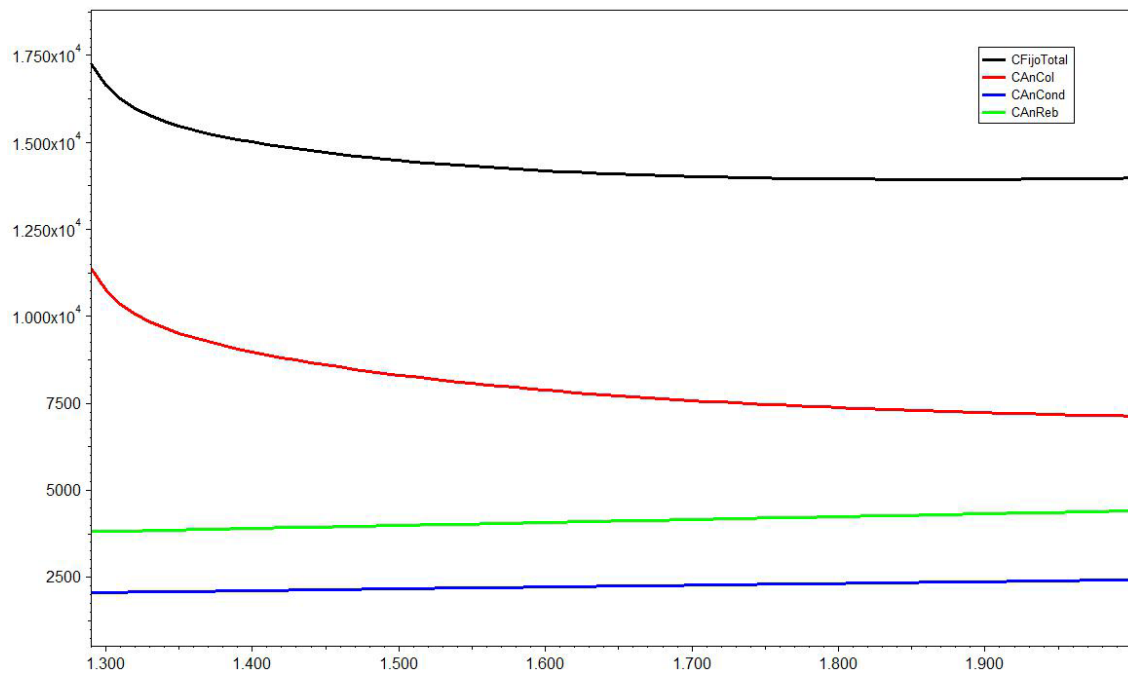
Variable	Unidad	Valor		Unidad	Valor
Diam(2)		1.5459			
RoLN	[kmol/m3]	791.9470			
RoVN1	[kmol/m3]	2.8805			
GastoInf		6394.5500			
PMInf	[kg/kmol]	90.3005			
DiamCol	[m2]	1.5459			
Theta		1.4256			
Rmin		1.2555			
NmAux1		6.6434			
NmAux2		0.9094			
Nmin		7.3051			
phi		0.2482			
chi		-0.5460			
NTeor		12.9732			
visc	[cP]	0.2938			
volt		2.4901			
rend	%	53.4134			
NActual		24.2882			
CPlato	[u\$d]	1224.0700			
CCol	[u\$d]	29730.5000			
CAnCol	[u\$s/año]	7135.3300			
dtInC	[°K]	26.8941			
ACond	[m2]	844.2680			
CCond	[u\$d]	10119.7000			
CAnCond	[u\$s/año]	2428.7300			
mA	[kg/hr]	21708.2000			
CAnAE	[u\$s/año]	2196.7000			
TVC	[°K]	393.7810		[°C]	120.6310
AReb	[m2]	1109.5900			
CReb	[u\$d]	18384.1000			
CAnReb	[u\$s/año]	4412.1900			
CalLat	[kJ/kmol]	41116.7000			
mVC	[kg/hr]	4322.2800			
CAnVap	[u\$s/año]	27554.5000			
CFijoTotal	[u\$s/año]	13976.2000			
COPTotal	[u\$s/año]	29751.2000			
CAnTotal	[u\$s/año]	43727.5000			

Reemplazando:

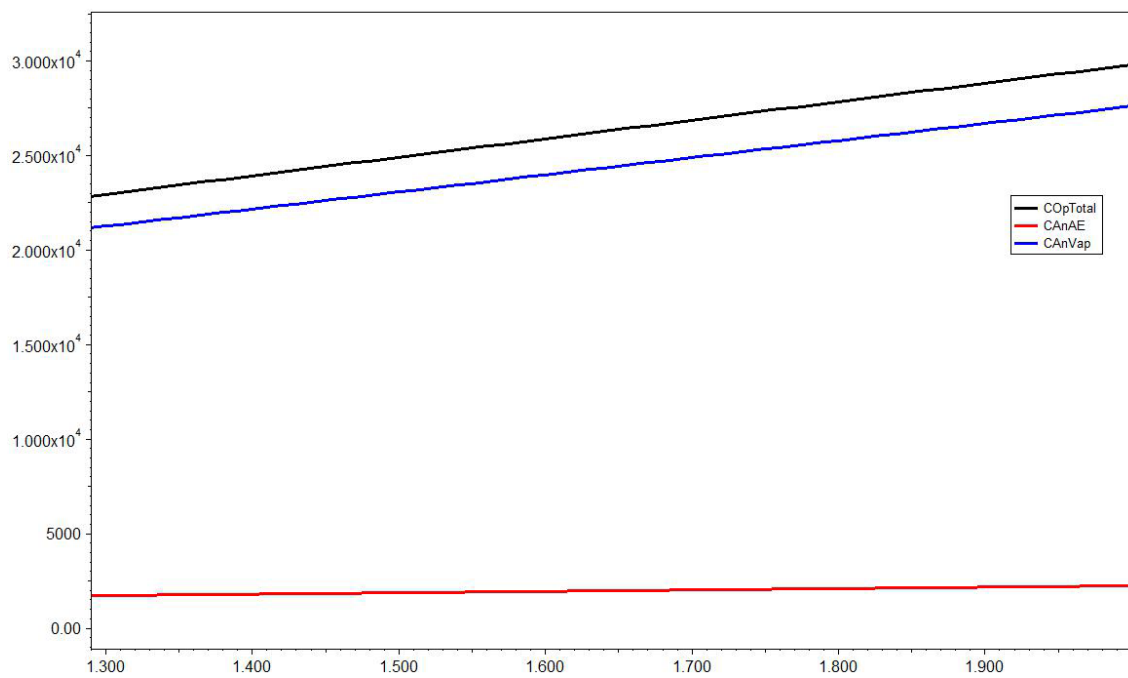
“R=2;” por “R=time;”

y poniendo:

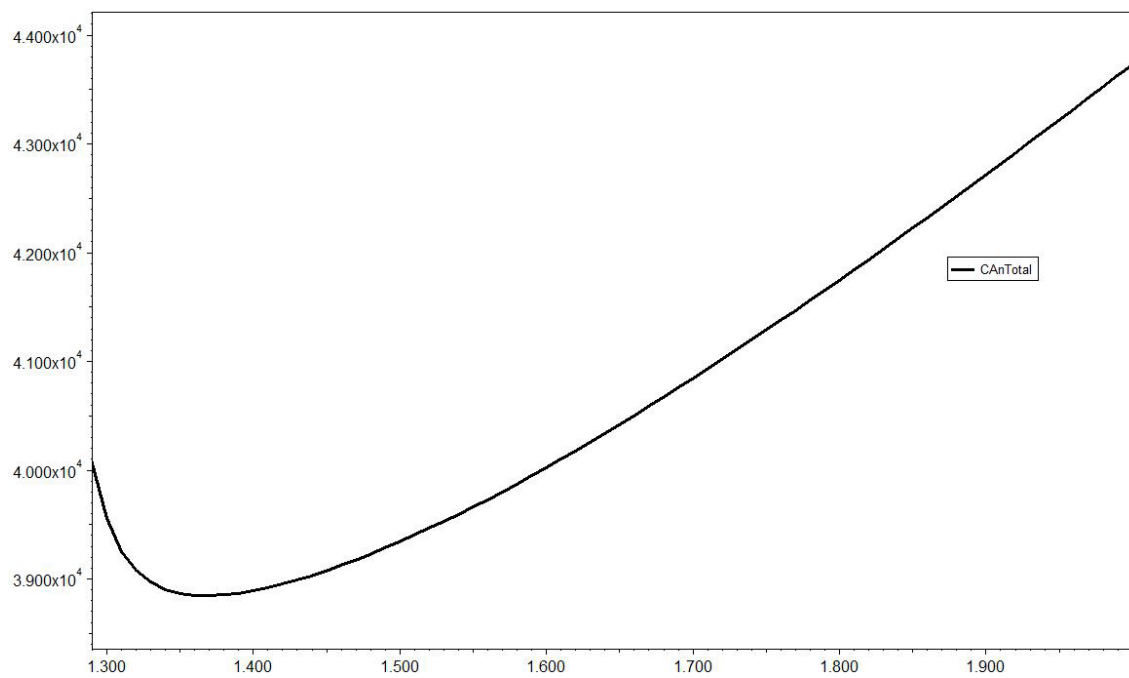
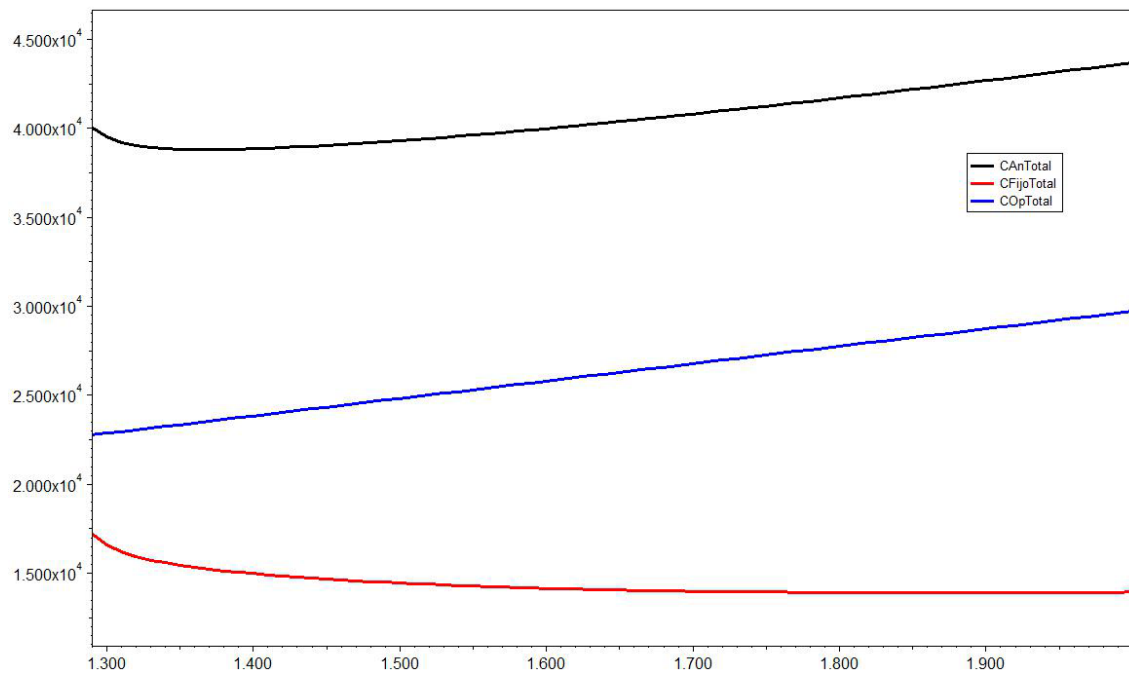
“Dynamic=true;” da;

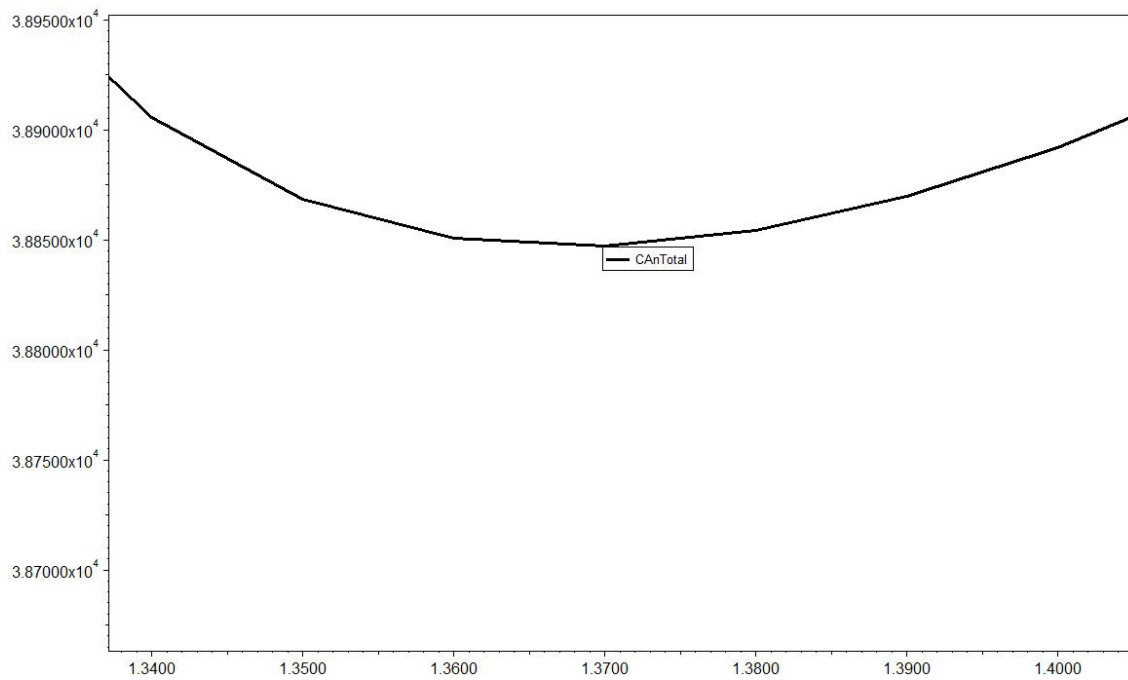


Costos fijos incluyendo columna, condensador y reboiler



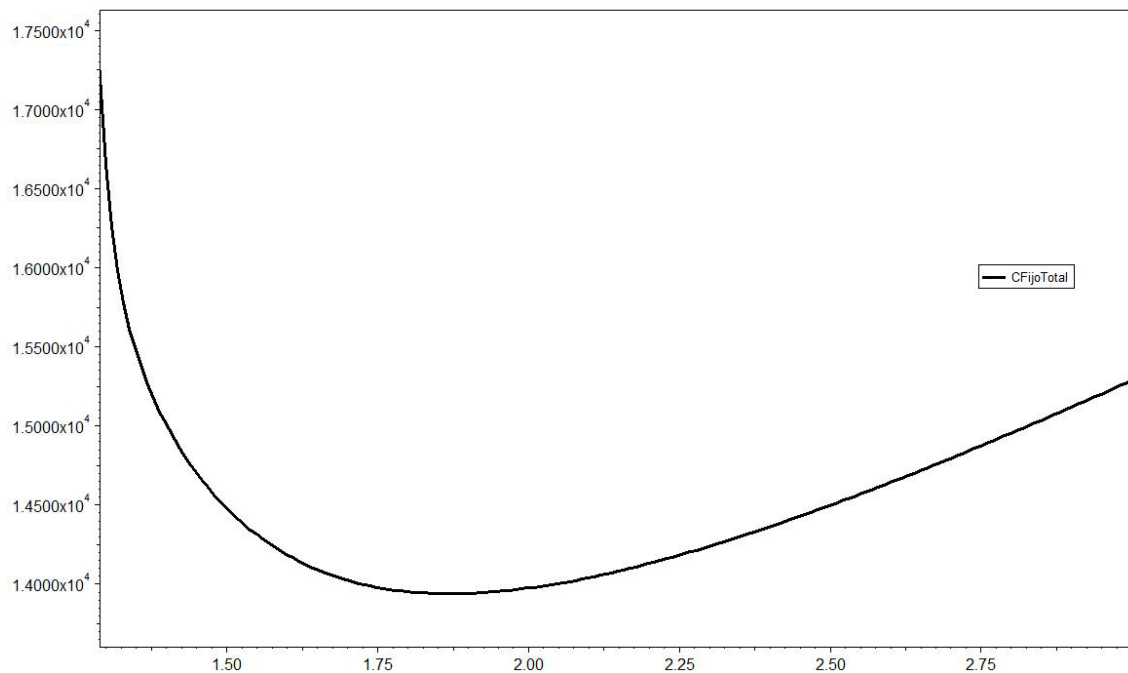
Costos operativos incluyendo agua de enfriamiento y vapor de calefacción



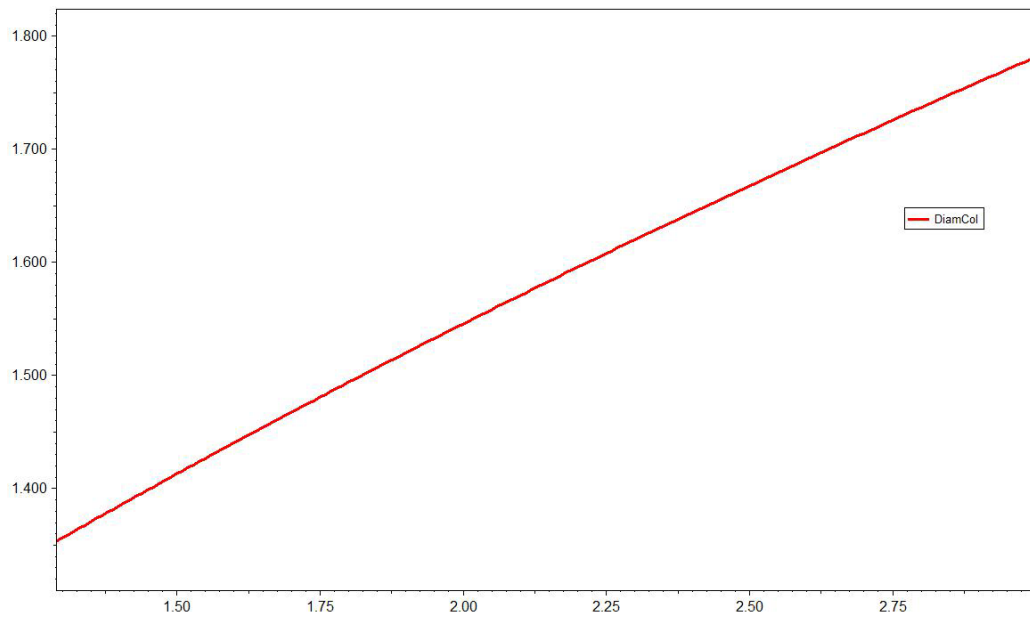


Costo Anual total con zoom en Relación de reflujo óptima ($R_{opt}=1,37=1.09 R_{min}$)

Cabe aclararse que los costos fijos no decaen infinitamente con el reflujo porque aunque el número de etapas necesarias disminuye el tamaño de los mismos (diámetro) se hace significativo. Por otro lado el condensador y el reboiler también aumentan con R.



Costo fijo total para un rango ampliado de R



Diámetro de la columna para el mismo rango de R

ADDENDUM:

Volviendo al primer ejemplo de diámetro económico durante la exploración paramétrica ocurre que hasta cierto valor del diámetro el régimen es turbulento volviéndose luego laminar y siendo que el factor de fricción cambia debido a esta circunstancia y a fin de evitar el ajuste cada vez que se modifica D se introducen los siguientes cambios al modelo en planilla:

Se introduce un bloque implementando el método Newton-Raphson para resolver la ecuación de Colebroke.

	A	B	C	D	E	F	G	H
30								
31			Turbulento	4,690E-02			Laminar	2,217E-02
32	Δx	0,01						
33	x	f(x+ Δx)	f(x)	f'(x)	error %			
34	6,442E-02	-1,11E+00	-7,88E-01	-32,353554				
35	4,005E-02	-1,71E-01	4,36E-01	-60,637086	3,783E+01			
36	4,724E-02	-5,08E-01	-1,90E-02	-48,867978	-1,794E+01			
37	4,685E-02	-4,91E-01	2,98E-03	-49,400722	8,209E-01			
38	4,691E-02	-4,94E-01	-4,47E-04	-49,317309	-1,286E-01			
39	4,690E-02	-4,93E-01	6,77E-05	-49,329856	1,934E-02			
40	4,690E-02	-4,93E-01	-1,02E-05	-49,327956	-2,928E-03			
41	4,690E-02	-4,93E-01	1,55E-06	-49,328244	4,427E-04			

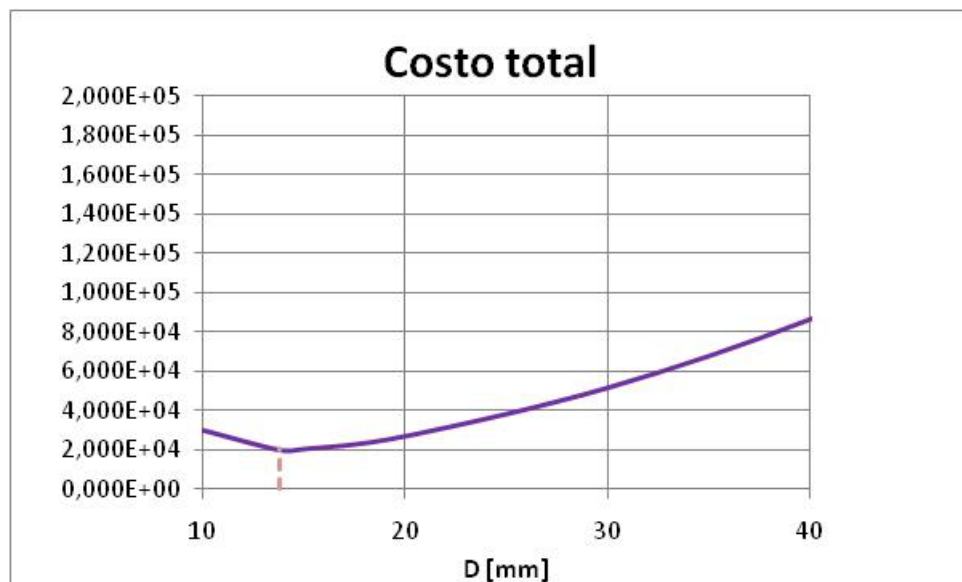
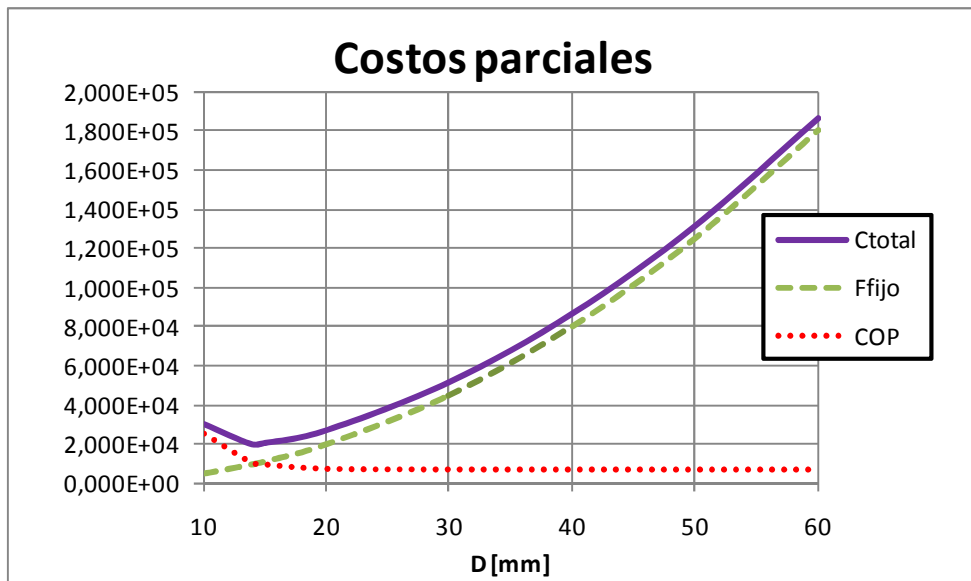
El valor inicial (A34) se toma de la ecuación de Blasius y se va mejorando de iteración independientemente del tipo de régimen del fluido.

	A	B	C	D	E
1	Agua				
2	Ro			1000 [kg/m3]	
3	mu	0,89 [cp]		8,900E-04 [N.s/m2]	
4	F			100 [kg/hr]	
5	q			2,778E-05 [m3/s]	
6	Temp	25 [°C]		298,15 [°K]	
7	P	1 [atm]		101325 [N/m2]	
8					
9	Tubería y bomba				
10	e			4,572E-05 [m]	C
11	DI	13,77 [mm]		0,0137672 [m]	
12	P _{salida}	2 [atm]		202650 [N/m2]	
13	L			1000 [m]	
14	ef	75 %		0,75	
15	P _{Entrada}	2,585 [atm]		2,6197E+05 [N/m2]	
16					
17	Resultados provisionarios				
18	A _{tubería}	1,489E-04 [m ²]			
19	v	0,1866 [m/s]			
20	Re	2,887E+03 adim			
21	f _{Blasius}	4,311E-02			
22	f	4,690E-02	Func(f)	0,00	Turbulento
23	DP	5,9316E+04 [N/m2]=[Pa]		0,585 [atm]	
24	Pot	5,95 [j/s]		21,42 [kJ/hr]	
25					
26	Resultados finales				
27	C _{OP}	1,071E+04			
28	F _{fijo}	9,477E+03			
29	C _{total}	2,019E+04			

Si el régimen es laminar f (celda B22) toma el valor de la celda H31 sino el de la A41. En la celda de fondo amarillo se muestra el error relativo (en caso de flujo turbulento a fin de garantizar que f sea el correcto) y en la de fondo rojo el tipo de régimen de fluido.

Para el 1º ejemplo se obtuvo:

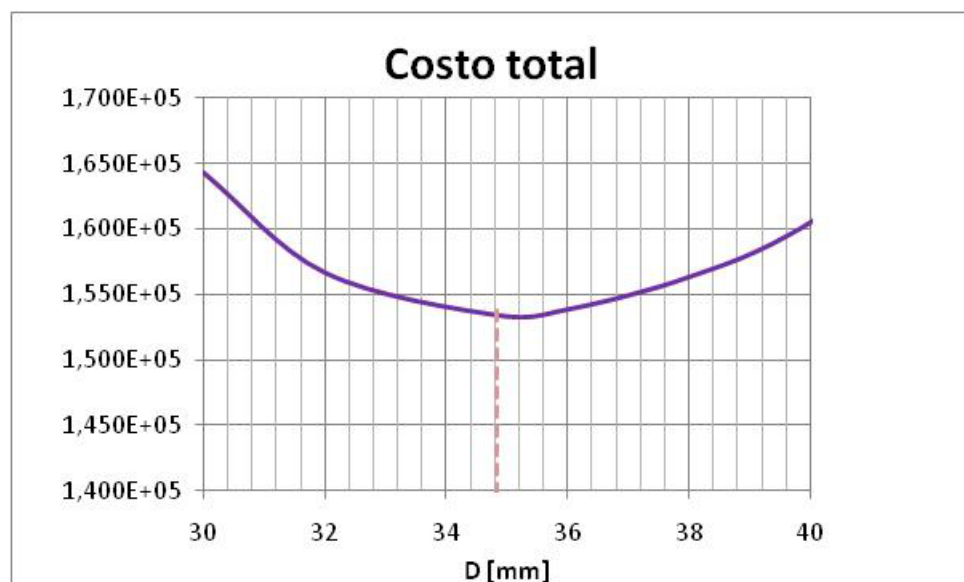
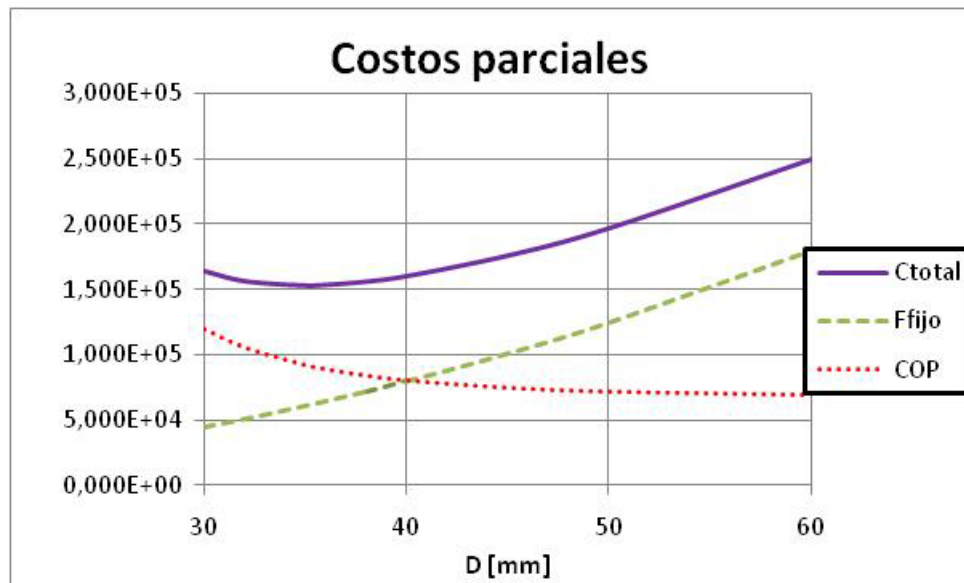
D	C _{OP}	F _{fijo}	C _{total}	Régimen
10	2,526E+04	5,000E+03	3,026E+04	Turbulento
13,77	10709,3739	9476,78163	20186,1556	Turbulento
15	9378,35516	11250	2,063E+04	Turbulento
20	7,175E+03	2,000E+04	2,717E+04	Laminar
30	6,838E+03	4,500E+04	5,184E+04	Laminar
40	6,781E+03	8,000E+04	8,678E+04	Laminar
50	6,766E+03	1,250E+05	1,318E+05	Laminar
60	6,760E+03	1,800E+05	1,868E+05	Laminar

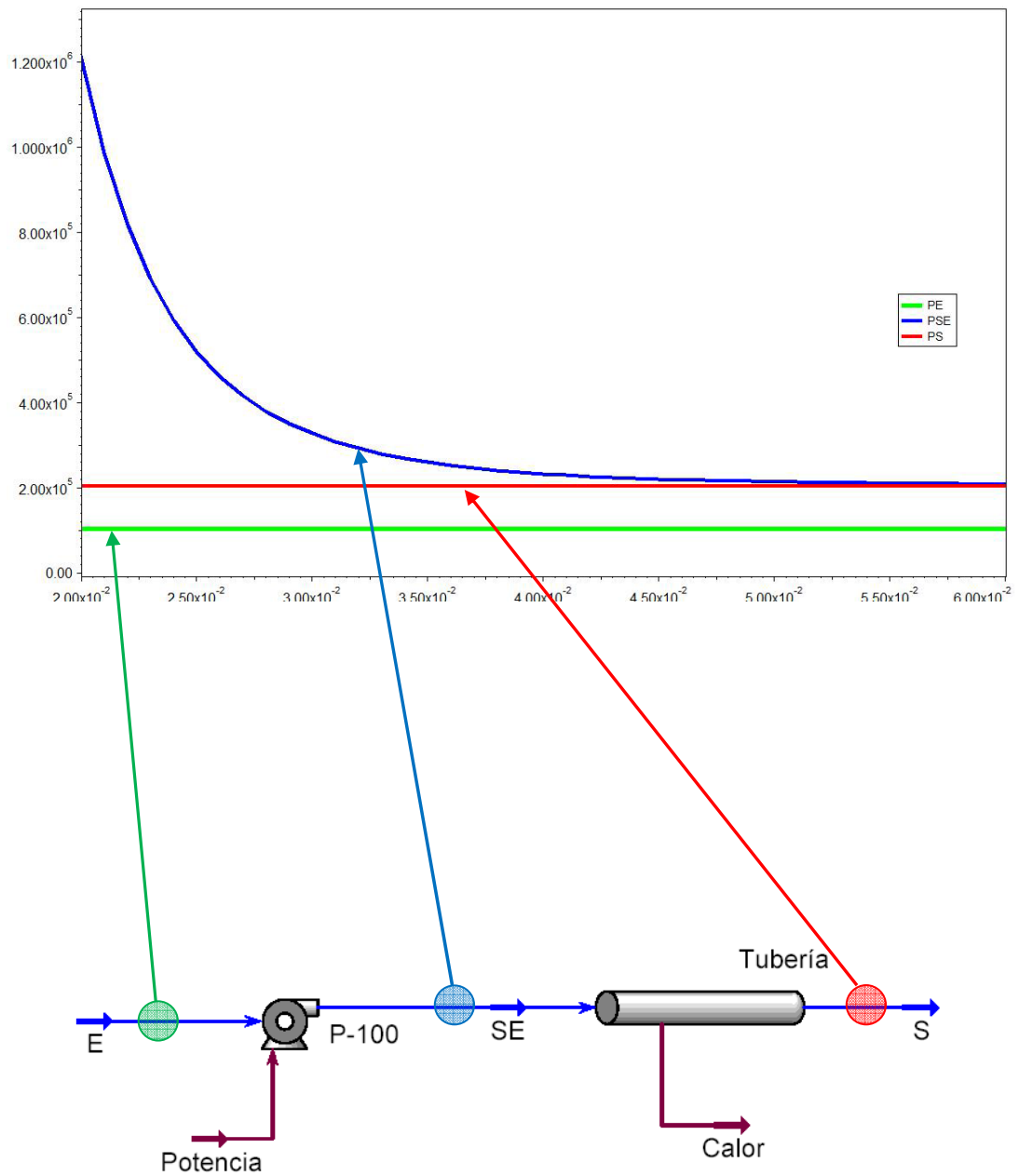


Afortunadamente para el valor económico el régimen no es laminar pero como sabemos a esos valores de Re el régimen es de transición y su comportamiento es impredecible

Para el segundo ejemplo, en cambio:

D	C_{OP}	F_{fijo}	C_{total}	Régimen
30	1,193E+05	4,500E+04	1,643E+05	Turbulento
32	1,055E+05	5,120E+04	1,567E+05	Turbulento
34,83	92795,7962	60647,9725	153443,769	Turbulento
36	8,908E+04	6,480E+04	1,539E+05	Turbulento
38	8,416E+04	7,220E+04	1,564E+05	Turbulento
40	8,055E+04	8,000E+04	1,605E+05	Turbulento
45	7,495E+04	1,013E+05	1,762E+05	Turbulento
50	7,203E+04	1,250E+05	1,970E+05	Turbulento
60	6,943E+04	1,800E+05	2,494E+05	Turbulento





Perfil de presiones en el sistema de tuberías en función de D