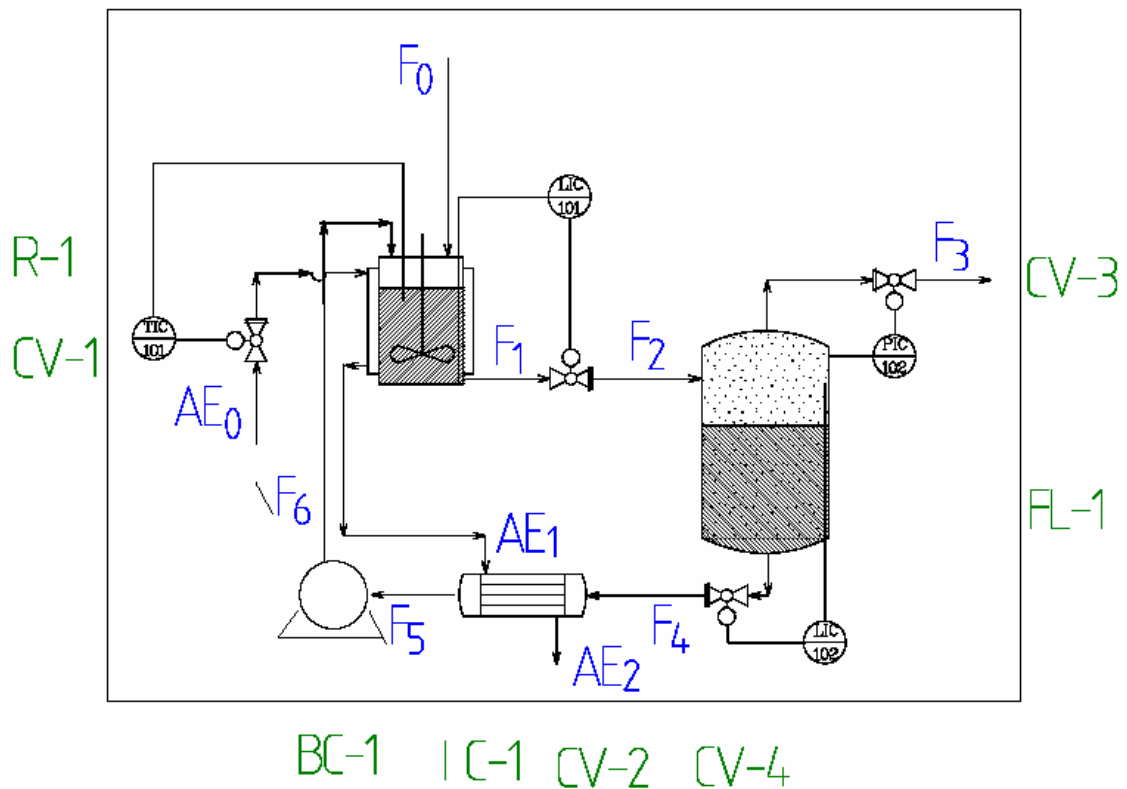


UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA NACIONAL – FACULTAD
REGIONAL ROSARIO

INTEGRACIÓN IV

Ejemplo de Modelado de Equipos de una Planta en Estado Dinámico

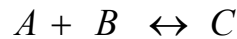
Sea el diagrama de flujo de la figura. Luego de nombrar las variables restantes, se desea plantear un modelo en estado dinámico que lo represente, y proponer una estrategia de resolución.



Hipótesis:

A) Reactor

- Reacción reversible exotérmica.



- La cinética con A como base:

$$-r_A = K_D * C_A * C_B - K_I * C_C$$

- Reactor Mezcla completa. La camisa de refrigeración también se considera mezcla completa.
- Los coeficientes cinéticos son conocidos ya que son función de la temperatura (funcional tipo Arrhenius).
- Hala up de vapor despreciable. Evaporación del líquido despreciable.
- Presión en el cuerpo de vapor del reactor es conocida (P_{R1}^0)
- UA es dato
- Tanque cilíndrico de área AT.
- C =[moles/lit]; ρ : densidad molar
- La densidad del líquido en el reactor se comporta de acuerdo a un estado pseudoestacionario. Esto permite considerarla “independiente del tiempo”, siguiendo la dinámica de las variables diferenciales
- Caída de presión a través de la camisa nula

B) Válvulas de control

Asúmase el flujo a través de las válvulas como:

$$Q = C_v \sqrt{\frac{(P_e - P_s)}{\rho_f}}$$

Siendo P_e la presión de entrada y P_s la de salida, ρ_f la densidad del fluido. La conductividad C_{vi} (con i de 1 a 4) depende de la ley de control:

$$C_{vi} = \alpha_i AC_i$$

Siendo AC_i la acción total de control de la válvula i :

$$AC_i = AP_i + AI_i + AD_i + A_{0i}$$

Siendo AP_i la acción proporcional del controlador i , AI_i la acción integral y AD_i la acción derivativa. A_0 es constante. Todos los parámetros de los controladores son conocidos.

Q es caudal volumétrico.

C) Flash

- No se producen reacciones químicas
- Adiabático
- Opera en equilibrio L-V
- La presión de descarga de la corriente de vapor es conocida y constante
- La densidad del líquido se comporta de acuerdo a un estado pseudoestacionario. Esto permite considerarla “independiente del tiempo”, siguiendo la dinámica de las variables diferenciales

D) Intercambiador de calor

- (UA) conocido y constante
- No se considera cambio de fase ni reacción química en ninguna de sus corrientes
- Asumir estado pseudoestacionario
- Caída de presión nula

Modelado del sistema: Se obtendrán las ecuaciones diferenciales y las ecuaciones algebraicas complementarias. Recordar que luego el sistema debe resolverse en forma simultánea.

Reactor



$$(-r_A) = k_D \times C_A \times C_B - k_I \times C_C$$

Balance de Materia:

$$\frac{dM_{R1}}{dt} = F_0 + F_6 - F_1 - (-r_A) \times V_{R1}$$

$$\rho_{F1} \times \frac{dV_{R1}}{dt} = F_0 + F_6 - F_1 - (-r_A) \times V_{R1}$$

$$\frac{\rho_{F1} \times A_{R1} \times dh_{R1}}{dt} = F_0 + F_6 - F_1 - (-r_A) \times V_{R1}$$

$$\boxed{\frac{dh_{R1}}{dt} = \frac{F_0 + F_6 - F_1 - (-r_A) \times A_{R1} \times h_{R1}}{\rho_{F1} \times A_{R1}}} \quad (I)$$

Balance de Materia por Componentes:

- Componente A:

$$\frac{d(V_{R1} \times C_A^{F1})}{dt} = F_0 \times x_A^{F0} + F_6 \times x_A^{F6} - F_1 \times x_A^{F1} - (-r_A) \times V_{R1}$$

$$A_{R1} \times \frac{d(h_{R1} \times C_A^{F1})}{dt} = F_0 \times x_A^{F0} + F_6 \times x_A^{F6} - F_1 \times x_A^{F1} - (-r_A) \times V_{R1}$$

$$\frac{d(h_{R1} \times C_A^{F1})}{dt} = \frac{F_0 \times x_A^{F0} + F_6 \times x_A^{F6} - F_1 \times x_A^{F1} - (-r_A) \times V_{R1}}{A_{R1}}$$

$$C_A^{F1} \times \frac{dh_{R1}}{dt} + h_{R1} \times \frac{dC_A^{F1}}{dt} = \frac{F_0 \times x_A^{F0} + F_6 \times x_A^{F6} - F_1 \times x_A^{F1} - (-r_A) \times V_{R1}}{A_{R1}}$$

$$h_{R1} \times \frac{dC_A^{F1}}{dt} = \frac{F_0 \times x_A^{F0} + F_6 \times x_A^{F6} - F_1 \times x_A^{F1} - (-r_A) \times V_{R1}}{A_{R1}} - \frac{C_A^{F1} \times dh_{R1}}{dt}$$

$$\frac{dC_A^{F1}}{dt} = \left[\frac{F_0 \times x_A^{F0} + F_6 \times x_A^{F6} - F_1 \times x_A^{F1} - (-r_A) \times V_{R1}}{A_{R1}} - C_A^{F1} \times \left(\frac{F_0 + F_6 - F_1 - (-r_A) \times V_{R1}}{\rho_{F1} \times A_{R1}} \right) \right] / h_{R1}$$

- Para los tres componentes, por semejanza:

$$\frac{dC_A^{F1}}{dt} = \frac{\left[\frac{F_0 \times x_A^{F0} + F_6 \times x_A^{F6} - F_1 \times x_A^{F1} - (-r_A) \times A_{R1} \times h_{R1}}{A_{R1}} - C_A^{F1} \times \left(\frac{F_0 + F_6 - F_1 - (-r_A) \times A_{R1} \times h_{R1}}{\rho_{F1} \times A_{R1}} \right) \right]}{h_{R1}}$$

$$\frac{dC_B^{F1}}{dt} = \frac{\left[\frac{F_0 \times x_B^{F0} + F_6 \times x_B^{F6} - F_1 \times x_B^{F1} - (-r_B) \times A_{R1} \times h_{R1}}{A_{R1}} - C_B^{F1} \times \left(\frac{F_0 + F_6 - F_1 - (-r_B) \times A_{R1} \times h_{R1}}{\rho_{F1} \times A_{R1}} \right) \right]}{h_{R1}}$$

$$\frac{dC_C^{F1}}{dt} = \frac{\left[\frac{F_0 \times x_C^{F0} + F_6 \times x_C^{F6} - F_1 \times x_C^{F1} + (-r_C) \times A_{R1} \times h_{R1}}{A_{R1}} - C_C^{F1} \times \left(\frac{F_0 + F_6 - F_1 - (-r_C) \times A_{R1} \times h_{R1}}{\rho_{F1} \times A_{R1}} \right) \right]}{h_{R1}}$$

(Ecs. II, III y IV)

Nótese que se ha utilizado en el miembro derecho fracciones molares y en el miembro izquierdo concentración molar. Esto es así ya que las corrientes que salen de equipos modelados en equilibrio (separación física, por ejemplo un flash) generalmente son expresadas en estas unidades. Los reactores por el contrario, al utilizar expresiones

cinéticas generalmente se modelan utilizando concentraciones molares. Debe entonces transformarse las unidades cuando se lo requiera, por ejemplo mediante:

$$x_j^{F1} = \frac{C_j^{F1}}{\sum_{i=1}^3 C_i^{F1}} \quad i = A, B \text{ y } C \quad (1-3)$$

Balace de energía:

$$\frac{d(M_{R1} \times H_{F1})}{dt} = F_0 \times H_{F0} + F_6 \times H_{F6} - F_1 \times H_{F1} + (-r_A) \times (-\Delta H_{R1}) \times V_{R1} - Q_{R1}$$

$$\rho_{F1} \times \frac{d(V_{R1} \times H_{F1})}{dt} = F_0 \times H_{F0} + F_6 \times H_{F6} - F_1 \times H_{F1} + (-r_A) \times (-\Delta H_{R1}) \times V_{R1} - Q_{R1}$$

$$\rho_{F1} \times A_{R1} \times \frac{d(h_{R1} \times H_{F1})}{dt} = F_0 \times H_{F0} + F_6 \times H_{F6} - F_1 \times H_{F1} + (-r_A) \times (-\Delta H_{R1}) \times V_{R1} - Q_{R1}$$

$$H_{R1} \times \frac{dh_{R1}}{dt} + h_{R1} \times \frac{dH_{F1}}{dt} = \frac{F_0 \times H_{F0} + F_6 \times H_{F6} - F_1 \times H_{F1} + (-r_A) \times (-\Delta H_{R1}) \times V_{R1} - Q_{R1}}{\rho_{F1} \times A_{R1}}$$

$$h_{R1} \times \frac{dH_{F1}}{dt} = \frac{F_0 \times H_{F0} + F_6 \times H_{F6} - F_1 \times H_{F1} + (-r_A) \times (-\Delta H_{R1}) \times V_{R1} - Q_{R1}}{\rho_{F1} \times A_{R1}} - H_{R1} \times \frac{dh_{R1}}{dt}$$

$\frac{dH_{F1}}{dt} = \frac{\left[\frac{F_0 \times H_{F0} + F_6 \times H_{F6} - F_1 \times H_{F1} + (-r_A) \times (-\Delta H_{R1}) \times A_{R1} \times h_{R1} - Q_{R1}}{\rho_{F1} \times A_{R1}} - H_{R1} \times \left(\frac{F_0 + F_6 - F_1 - (-r_A) \times A_{R1} \times h_{R1}}{\rho_{F1} \times A_{R1}} \right) \right]}{h_{R1}}$
--

(Ec. V)

Camisa:

Considerando el hold up (M_a) y la capacidad calorífica y densidad del agua de enfriamiento constantes:

$$\frac{d(M_a \times H_a)}{dt} = AE_0 \times Cp_a \times (T_{AE0} - T_{AE1}) + Q_{R1}$$

$$M_a \times \frac{d(Cp_a \times T_{AE1})}{dt} = AE_0 \times Cp_a \times (T_{AE0} - T_{AE1}) + Q_{R1}$$

$$M_a \times Cp_a \times \frac{dT_{AE1}}{dt} = AE_0 \times Cp_a \times (T_{AE0} - T_{AE1}) + Q_{R1}$$

$$\frac{dT_{AE1}}{dt} = \frac{AE_0 \times Cp_a \times (T_{AE0} - T_{AE1}) + Q_{R1}}{M_a \times Cp_a} \quad (VII)$$

Expresadas las ecuaciones diferenciales, se agregan las expresiones algebraicas que permiten calcular el miembro derecho de las ecuaciones diferenciales en cada paso de integración.

$$\rho_{F1} = \sum_{j=1}^3 \rho_j^{puro}(T_{F1}) \times x_j^{F1} = \rho_{F1}(T_{F1}, x_A^{F1}, x_B^{F1}, x_C^{F1}) \quad (4)$$

$$(-r_A) = k_D \times C_A^{F1} \times C_B^{F1} - k_I \times C_C^{F1} \quad (5)$$

Flujo molar a través de la válvula de control CV₂:

$$F_1 = \rho_{F1} \times C_{v2} \times \sqrt{\frac{(P_{F1} - P_{F2})}{\rho_{F1}}} \quad (6)$$

$$P_{F1} = P_{R1}^0 + \rho_{F1} \times g \times h_{R1} \quad (7)$$

P_{R1}^0 : presión en el cuerpo de vapor en el reactor (se considera aquí en equilibrio con el líquido)

$$P_{R1}^0 = f(T_{F1}) \quad (\text{p.ej. por Antoine}) \quad (8)$$

$$P_{F2} = P_{FL1}^0 \quad (9)$$

P_{FL1}^0 : presión en el cuerpo de vapor en el flash (P_{eq})

$$C_{v2} = \alpha_2^{AC_2} \quad (10)$$

$$AC_2 = AP_2 + AI_2 + AD_2 + A_{02} \quad (11)$$

A_{02} : Acción del controlador (2) cuando son cero las acciones P, I, D.

$$AP_2 = Kp_2 \times (h_{R1} - SP_{hR1}) \quad (12)$$

$$AI_2 = Ki_2 \times \int_0^t (h_{R1} - SP_{hR1}) dt, \quad \text{derivando queda :}$$

$$\frac{dAI_2}{dt} = Ki_2 \times (h_{R1} - SP_{hR1}) \quad (VI)$$

$$AD_2 = Kd_2 \times \frac{dh_{R1}}{dt} \quad (13)$$

$$H_{F0} = \sum_{i=1}^3 x_i^{F0} \times H_i^{F0}(T_{F0}) \quad (14)$$

$$H_{F1} = \sum_{i=1}^3 x_i^{F1} \times H_i^{F1}(T_{F1}) \quad (15)$$

$$H_{F6} = \sum_{i=1}^3 x_i^{F6} \times H_i^{F6}(T_{F6}) \quad (16)$$

Nótese que se agrega una nueva ecuación diferencial (VI) debido a la acción integral del controlador.

De acuerdo a la hipótesis de mezcla perfecta en la camisa de enfriamiento y en el reactor, el calor intercambiando está dado por:

$$Q_{R1} = (UA)_2 \times (T_{F1} - T_{AE1}) \quad (17)$$

$$AE_0 = \rho_{AE0} \times C_{v1} \times \sqrt{\frac{(P_{AE0} - P_{AE1})}{\rho_{AE0}}} \quad (18)$$

Con P_{AE0} y P_{AE1} conocidas.

$$C_{v1} = \alpha_1^{AC_1} \quad (19)$$

$$AC_1 = AP_1 + AI_1 + AD_1 + A_{01} \quad (20)$$

$$AP_1 = Kp_1 \times (T_{F1} - SP_{TF1}) \quad (21)$$

$$\frac{dAI_1}{dt} = Ki_1 \times (T_{F1} - SP_{TF1}) \quad (VIII)$$

$$AD_1 = Kd_1 \times \frac{dT_{F1}}{dt} \quad (22)$$

Nuevamente se agrega una ecuación diferencial (VIII) debido a la acción integral del controlador.

Nota:

Convención de signos Calor de reacción

Reacciones exotérmicas: $\Delta H < 0 \rightarrow (-\Delta H) > 0$

Reacciones endotérmicas: $\Delta H > 0 \rightarrow (-\Delta H) < 0$

Flash

Balance de Materia:

$$\frac{dM_{FL1}}{dt} = F_2 - F_3 - F_4$$

$$\frac{d(\rho_{F4} \times V_{FL1})}{dt} = F_2 - F_3 - F_4$$

$$\rho_{F4} \times \frac{d(h_{FL1} \times A_{FL1})}{dt} = F_2 - F_3 - F_4$$

$$\rho_{F4} \times A_{FL1} \times \frac{dh_{FL1}}{dt} = F_2 - F_3 - F_4$$

$$\frac{dh_{FL1}}{dt} = \frac{F_2 - F_3 - F_4}{\rho_{F4} \times A_{FL1}}$$

(IX)

Con M_{FL1} : Hold up de líquido en el flash, V_{FL1} : Volúmen de líquido en el flash, h_{FL1} : altura de líquido en el flash

Balance de Materia por Componentes:

- Componente A

$$\frac{d(M_{FL1} \times x_A^{F4})}{dt} = F_2 \times x_A^{F1} - F_4 \times x_A^{F4} - F_3 \times y_A^{F3}$$

$$y_A^{F3} = x_A^{F4} \times K_A^{F4}$$

$$\rho_{F4} \times \frac{d(V_{FL1} \times x_A^{F4})}{dt} = F_2 \times x_A^{F1} - F_4 \times x_A^{F4} - F_3 \times x_A^{F4} \times K_A^{F4}$$

$$\rho_{F4} \times A_{FL1} \times \frac{d(h_{FL1} \times x_A^{F4})}{dt} = F_2 \times x_A^{F1} - x_A^{F4} \times (F_4 + F_3 \times K_A^{F4})$$

$$x_A^{F4} \times \frac{dh_{FL1}}{dt} + h_{FL1} \times \frac{dx_A^{F4}}{dt} = \frac{F_2 \times x_A^{F1} - x_A^{F4} \times (F_4 + F_3 \times K_A^{F4})}{\rho_4 \times A_{FL1}}$$

$$h_{FL1} \times \frac{dx_A^{F4}}{dt} = \frac{F_2 \times x_A^{F1} - x_A^{F4} \times (F_4 + F_3 \times K_A^{F4})}{\rho_{F4} \times A_{FL1}} - x_A^{F4} \times \frac{dh_{FL1}}{dt}$$

$$\frac{dx_A^{F4}}{dt} = \left[\frac{F_2 \times x_A^{F1} - x_A^{F4} \times (F_4 + F_3 \times K_A^{F4})}{\rho_{F4} \times A_{FL1}} - x_A^{F4} \times \frac{dh_{FL1}}{dt} \right] / h_{FL1}$$

$$\frac{dx_A^{F4}}{dt} = \left[\frac{F_2 \times x_A^{F1} - x_A^{F4} \times (F_4 + F_3 \times K_A^{F4})}{\rho_{F4} \times A_{FL1}} - x_A^{F4} \times \left(\frac{F_2 - F_3 - F_4}{\rho_{F4} \times A_{FL1}} \right) \right] / h_{FL1}$$

Para todos los componentes queda:

$\frac{dx_A^{F4}}{dt} = \left[\frac{F_2 \times x_A^{F1} - x_A^{F4} \times (F_4 + F_3 \times K_A^{F4})}{\rho_{F4} \times A_{FL1}} - x_A^{F4} \times \left(\frac{F_2 - F_3 - F_4}{\rho_{F4} \times A_{FL1}} \right) \right] / h_{FL1}$
$\frac{dx_B^{F4}}{dt} = \left[\frac{F_2 \times x_B^{F1} - x_B^{F4} \times (F_4 + F_3 \times K_B^{F4})}{\rho_{F4} \times A_{FL1}} - x_B^{F4} \times \left(\frac{F_2 - F_3 - F_4}{\rho_{F4} \times A_{FL1}} \right) \right] / h_{FL1}$
$\frac{dx_C^{F4}}{dt} = \left[\frac{F_2 \times x_C^{F1} - x_C^{F4} \times (F_4 - F_3 \times k_C^{F4})}{\rho_{F4} \times A_{FL1}} - x_C^{F4} \times \left(\frac{F_2 - F_3 - F_4}{\rho_{F4} \times A_{FL1}} \right) \right] / h_{FL1}$

Ecs. (X, XI y XII)

Balace de energía:

$$\frac{d(H_{F4} \times M_{FL1})}{dt} = F_2 \times H_{F2} - F_3 \times H_{F3} - F_4 \times H_{F4}$$

$$\rho_{F4} \times \frac{d(H_{F4} \times V_{FL1})}{dt} = F_2 \times H_{F2} - F_3 \times H_{F3} - F_4 \times H_{F4}$$

$$\rho_{F4} \times A_{FL1} \times \frac{d(H_{F4} \times h_{FL1})}{dt} = F_2 \times H_{F2} - F_3 \times H_{F3} - F_4 \times H_{F4}$$

$$h_{FL1} \times \frac{dH_{F4}}{dt} + H_{F4} \times \frac{dh_{FL1}}{dt} = \frac{F_2 \times H_{F2} - F_3 \times H_{F3} - F_4 \times H_{F4}}{\rho_{F4} \times A_{FL1}}$$

$$h_{FL1} \times \frac{dH_{F4}}{dt} = \frac{F_2 \times H_{F2} - F_3 \times H_{F3} - F_4 \times H_{F4}}{\rho_{F4} \times A_{FL1}} - \frac{H_{F4} \times dh_{FL1}}{dt}$$

$$\frac{dH_{F4}}{dt} = \left[\frac{F_2 \times H_{F2} - F_3 \times H_{F3} - F_4 \times H_{F4} - H_{F4} \times dh_{FL1}}{\rho_{F4} \times A_{FL1}} \right] / h_{FL1}$$

$$\frac{dH_{F4}}{dt} = \frac{\left[\frac{F_2 \times H_{F2} - F_3 \times H_{F3} - F_4 \times H_{F4} - H_{F4} \times \left(\frac{F_2 - F_3 - F_4}{\rho_{F4} \times A_{FL1}} \right)}{\rho_{F4} \times A_{FL1}} \right]}{h_{FL1}} \quad (\text{XIII})$$

$$F_4 = \rho_{F4} \times C_{v4} \times \sqrt{\frac{(P_{FL1} - P_{F4})}{\rho_{F4}}} \quad (23)$$

$$\rho_{F4} = f(T_{F4}, x_A^{F4}, x_B^{F4}, x_C^{F4}) \quad (24)$$

$$P_{FL1} = P_{FL1}^0 + \rho_{F4} \times g \times h_{FL1} \quad (25)$$

P_{FL1} : Presión en el fondo del flash

$$P_{FL1}^0 = \sum_{i=1}^{NC} x_i^{F4} \times P_{v_i}(T_{F4}) \quad (26)$$

$$P_{v_i} = f(T_{F4}) \quad \text{p. ej. por Antoine} \quad (27)$$

Asumiendo que no hay caída de presión a través de la cañería y el intercambiador de calor:

$$P_{F4} = P_{F5} \quad (28)$$

$$C_{v4} = \alpha_4^{AC4} \quad (29)$$

$$AC_4 = AP_4 + AI_4 + AD_4 + A_{04} \quad (30)$$

$$AP_4 = Kp_4 \times (h_{FL1} - SP_{hFL1}) \quad (31)$$

$$\frac{dAI_4}{dt} = Ki_4 \times (h_{FL1} - SP_{hFL1}) \quad (\text{XIV})$$

$$AD_4 = Kd_4 \times \frac{dh_{FL1}}{dt} \quad (32)$$

$$F_3 = \rho_{F3} \times C_{v3} \times \sqrt{\frac{(P_{FL1}^0 - P_{F3}^S)}{\rho_{F3}}} \quad (33)$$

P_{F3}^S : Presión de contorno o descarga conocida (dato)

$$\rho_{F3} = \frac{P_{FL1}^0}{R \times T_{F4}}$$

$$C_{v3} = \alpha_3^{AC_3} \quad (34)$$

$$AC_3 = AP_3 + AI_3 + AD_3 + A_{03} \quad (35)$$

$$AP_3 = Kp_3 \times (P_{FL1}^0 - SP_{PFL1}) \quad (36)$$

$$\frac{dAI_3}{dt} = Ki_3 \times (P_{FL1}^0 - SP_{PFL1}) \quad (XV)$$

$$AD_3 = Kd_3 \times \frac{dP_{FL1}^0}{dt} \quad (37)$$

$$H_{F3} = \sum_{i=1}^3 y_i^{F3} \times H_i^{F3}(T_{F3}) \quad (38)$$

$$H_{F4} = \sum_{i=1}^3 x_i^{F4} \times H_i^{F4}(T_{F4}) \quad (39)$$

Intercambiador de calor

Se asume de variación instantánea respecto a las variaciones de las variables diferenciales, con lo cual se puede considerar que está en un estado pseudoestacionario, es decir, su dinámica es gobernada por las variables diferenciales.

Además, no se considera cambio de fases ni reacción química en ninguna de sus corrientes.

Balance de Materia:

$$F_5 = F_4 \quad (40)$$

$$\boxed{AE_2 = AE_1} \quad (41)$$

- Por Componentes:

$$x_i^{F5} \times F_5 = x_i^{F4} \times F_4 \quad \text{con } i=1 \text{ a } 3$$

$$\boxed{x_i^{F5} = x_i^{F4}} \quad (42)$$

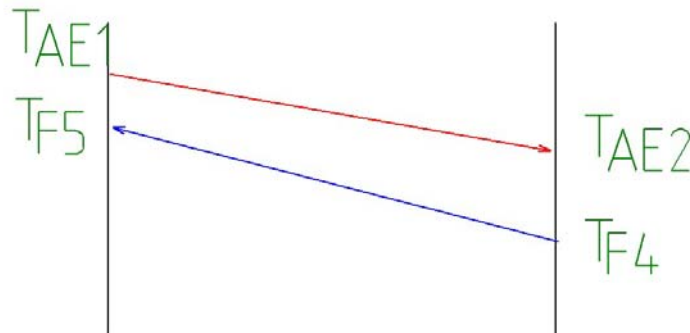
Balance de energía:

$$\boxed{Q_{IC1} = F_4 \times H_{F4} - F_5 \times H_{F5} = F_4 \times (H_{F4} - H_{F5})} \quad (43)$$

$$\boxed{H_{F5} = \sum_{i=1}^3 x_i^{F5} \times H_i^{F5}(T_{F5})} \quad (44)$$

$$Q_{IC1} = AE_1 \times Cp_{AE1} \times (T_{AE2} - T_{AE1}) \quad (45)$$

$$\boxed{T_{AE2} = \frac{Q_{IC1} + AE_1 \times Cp_{AE1} \times T_{AE1}}{AE_1 \times Cp_{AE1}}} \quad (46)$$



$$Q_{IC1} = (UA)_{IC1} \frac{(T_{F5} - T_{AE1}) - (T_{F4} - T_{AE2})}{Ln \frac{(T_{F5} - T_{AE1})}{(T_{F4} - T_{AE2})}} \quad (47)$$

Bomba Centrífuga

Solo incrementa la presión para permitir la recirculación. Como la contrapresión es dato y constante (P_{R1}^0) y asumiendo como dato y constante el incremento de presión de la bomba (ΔP_{BC1}):

$$\boxed{F_6 = F_5} \quad (48)$$

$$\boxed{T_{F6} = T_{F5}} \quad (49)$$

$$\boxed{P_{F6} = P_{R1}^0} \quad (50)$$

$$\boxed{P_{F5} = P_{F4} = P_{R1}^0 - \Delta P_{BC1}} \quad (51)$$

$$\boxed{x_i^{F6} = x_i^{F5}} \quad \text{para } i=1 \text{ a } 3 \quad (52-54)$$

En definitiva, nos queda un sistema de 15 ecuaciones diferenciales ordinarias acopladas a un sistema de 54 ecuaciones algebraicas, no lineales.

Para resolver el problema se necesitan los valores de las condiciones iniciales de las variables diferenciales (o sea al tiempo inicial).

Además, necesitamos un método de resolución de sistemas de ecuaciones diferenciales. En este caso, debido a que las derivadas de las variables diferenciales se encuentran también en el miembro derecho de las ecuaciones que conforman el sistema, se utiliza un método implícito, es decir, iterativo.

Estrategia de resolución del modelo dinámico completo

Recordemos que el sistema de ecuaciones diferenciales implícito (acoplado al sistema de ecuaciones 54 algebraicas) a resolver es:

$$\begin{aligned} \frac{dh_{R1}}{dt} &= \frac{F_0 + F_6 - F_1 - (-r_A) \times A_{R1} \times h_{R1}}{\rho_{F1} \times A_{R1}} = \\ &= f_1 \left(x_i^{F1}, h_{R1}, T_{F1}, C_i^{F1}, \frac{dh_{R1}}{dt}, T_{F4}, x_i^{F4}, h_{FL1}, \frac{dh_{FL1}}{dt} \right) \end{aligned} \quad (I)$$

$$\begin{aligned} \frac{dC_A^{F1}}{dt} &= \frac{F_0 \times x_A^{F0} + F_6 \times x_A^{F6} - F_1 \times x_A^{F1} - (-r_A) \times A_{R1} \times h_{R1}}{A_{R1} \times h_{R1}} - C_A^{F1} \times \left(\frac{F_0 + F_6 - F_1 - (-r_A) \times A_{R1} \times h_{R1}}{\rho_{F1} \times A_{R1} \times h_{R1}} \right) = \\ &= f_2 \left(x_i^{F1}, h_{R1}, T_{F1}, \frac{dh_{R1}}{dt}, T_{F4}, x_i^{F4}, h_{FL1}, \frac{dh_{FL1}}{dt} \right) \end{aligned} \quad (II)$$

$$\begin{aligned} \frac{dC_B^{F1}}{dt} &= \frac{F_0 \times x_B^{F0} + F_6 \times x_B^{F6} - F_1 \times x_B^{F1} - (-r_A) \times A_{R1} \times h_{R1}}{A_{R1} \times h_{R1}} - C_B^{F1} \times \left(\frac{F_0 + F_6 - F_1 - (-r_A) \times A_{R1} \times h_{R1}}{\rho_{F1} \times A_{R1} \times h_{R1}} \right) = \\ &= f_3 \left(x_i^{F1}, h_{R1}, T_{F1}, \frac{dh_{R1}}{dt}, T_{F4}, x_i^{F4}, h_{FL1}, \frac{dh_{FL1}}{dt} \right) \end{aligned} \quad (III)$$

$$\begin{aligned} \frac{dC_C^{F1}}{dt} &= \frac{F_0 \times x_C^{F0} + F_6 \times x_C^{F6} - F_1 \times x_C^{F1} + (-r_A) \times A_{R1} \times h_{R1}}{A_{R1} \times h_{R1}} - C_C^{F1} \times \left(\frac{F_0 + F_6 - F_1 - (-r_A) \times A_{R1} \times h_{R1}}{\rho_{F1} \times A_{R1} \times h_{R1}} \right) = \\ &= f_4 \left(x_i^{F1}, h_{R1}, T_{F1}, \frac{dh_{R1}}{dt}, T_{F4}, x_i^{F4}, h_{FL1}, \frac{dh_{FL1}}{dt} \right) \end{aligned} \quad (IV)$$

$$\begin{aligned} \frac{dH_{F1}}{dt} &= \frac{F_0 \times H_{F0} + F_6 \times H_{F6} - F_1 \times H_{F1} + (-r_A) \times (-\Delta H_{R1}) \times A_{R1} \times h_{R1} - Q_{R1}}{\rho_{F1} \times A_{R1} \times h_{R1}} - H_{R1} \times \left(\frac{F_0 + F_6 - F_1 - (-r_A) \times A_{R1} \times h_{R1}}{\rho_{F1} \times A_{R1} \times h_{R1}} \right) = \\ &= f_5 \left(x_i^{F1}, h_{R1}, T_{F1}, \frac{dh_{R1}}{dt}, T_{F4}, x_i^{F4}, h_{FL1}, \frac{dh_{FL1}}{dt} \right) \end{aligned} \quad (V)$$

$$\frac{dAI_2}{dt} = Ki_2 \times (h_{R1} - SP_{hR1}) = f_6(h_{R1}) \quad (VI)$$

$$\frac{dT_{AE1}}{dt} = \frac{AE_0 \times Cp_a \times (T_{AE0} - T_{AE1}) + Q_{R1}}{M_a \times Cp_a} = f_7 \left(\frac{dT_{F1}}{dt}, T_{AE1}, T_{F1} \right) \quad (VII)$$

$$\frac{dAI_1}{dt} = Ki_1 \times (T_{F1} - SP_{TF1}) = f_8(T_{F1}) \quad (VIII)$$

$$\frac{dh_{FL1}}{dt} = \frac{F_2 - F_3 - F_4}{\rho_{F4} \times A_{FL1}} = f_9 \left(x_i^{F1}, h_{R1}, T_{F1}, \frac{dh_{R1}}{dt}, T_{F4}, x_i^{F4}, h_{FL1}, \frac{dh_{FL1}}{dt}, \frac{dP_{FL}^0}{dt} \right) \quad (IX)$$

$$\begin{aligned} \frac{dx_A^{F4}}{dt} &= \left[\frac{F_2 \times x_A^{F1} - x_A^{F4} \times (F_4 + F_3 \times K_A^{F4})}{\rho_{F4} \times A_{FL1}} - x_A^{F4} \times \left(\frac{F_2 - F_3 - F_4}{\rho_{F4} \times A_{FL1}} \right) \right] / h_{FL1} = \\ &= f_{10} \left(x_i^{F1}, h_{R1}, T_{F1}, \frac{dh_{R1}}{dt}, T_{F4}, x_i^{F4}, h_{FL1}, \frac{dh_{FL1}}{dt}, \frac{dP_{FL}^0}{dt} \right) \end{aligned} \quad (X)$$

$$\frac{dx_B^{F4}}{dt} = \left[\frac{F_2 \times x_B^{F1} - x_B^{F4} \times (F_4 + F_3 \times K_B^{F4})}{\rho_{F4} \times A_{FL1}} - x_B^{F4} \times \left(\frac{F_2 - F_3 - F_4}{\rho_{F4} \times A_{FL1}} \right) \right] / h_{FL1} =$$

$$f_{11} \left(x_i^{F1}, h_{R1}, T_{F1}, \frac{dh_{R1}}{dt}, T_{F4}, x_i^{F4}, h_{FL1}, \frac{dh_{FL1}}{dt}, \frac{dP_{FL}^0}{dt} \right) \quad (XI)$$

$$\frac{dx_C^{F4}}{dt} = \left[\frac{F_2 \times x_C^{F1} - x_C^{F4} \times (F_4 - F_3 \times k_C^{F4})}{\rho_{F4} \times A_{FL1}} - x_C^{F4} \times \left(\frac{F_2 - F_3 - F_4}{\rho_{F4} \times A_{FL1}} \right) \right] / h_{FL1} =$$

$$f_{12} \left(x_i^{F1}, h_{R1}, T_{F1}, \frac{dh_{R1}}{dt}, T_{F4}, x_i^{F4}, h_{FL1}, \frac{dh_{FL1}}{dt}, \frac{dP_{FL}^0}{dt} \right) \quad (XII)$$

$$\frac{dH_{F4}}{dt} = \frac{\left[\frac{F_2 \times H_{F2} - F_3 \times H_{F3} - F_4 \times H_{F4}}{\rho_{F4} \times A_{FL1}} - H_{F4} \times \left(\frac{F_2 - F_3 - F_4}{\rho_{F4} \times A_{FL1}} \right) \right]}{h_{FL1}}$$

$$= f_{13} \left(x_i^{F1}, h_{R1}, T_{F1}, \frac{dh_{R1}}{dt}, T_{F4}, x_i^{F4}, h_{FL1}, \frac{dh_{FL1}}{dt}, \frac{dP_{FL}^0}{dt}, T_{F3} \right) \quad (XIII)$$

$$\frac{dAI_4}{dt} = Ki_4 \times (h_{FL1} - SP_{h_{FL1}}) = f_{14}(h_{FL1}) \quad (XIV)$$

$$\frac{dAI_3}{dt} = Ki_3 \times (P_{FL1}^0 - SP_{P_{FL1}}) = f_{15}(x_i^{F4}, T_{F4}) \quad (XV)$$

Entradas (Datos o parámetros del problema):

$$F_0 \quad T_{F0} \quad P_{F0} \quad x_i^{F0}$$

$$T_{AE0} \quad P_{AE0} \quad P_{AE1} \quad P_{R1}^0 \quad \Delta P_{BC1} \quad P_{F3}^S$$

$$A_{R1} \quad (UA)_{R1} \quad A_{FL1} \quad (UA)_{IC1}$$

15 Condiciones iniciales (a tiempo $t=t_0$):

- $AI_1^0, AI_2^0, AI_3^0, AI_4^0,$
- $h_{R1}, C_i^{F1}, T_{F1}, T_{AE1}, h_{FL1}, x_i^{F4}$ y T_{F4} (para $i=A, B$ y C)

Observación: dado que $H_{F1} = f(T_{F1})$ y $H_{F4} = f(T_{F4})$ asumiendo conocidas dichas funcionalidades, dada una temperatura es posible establecer la entalpía y viceversa. De este modo, si bien las ecuaciones (V) y (XII) están expresadas en la variable entalpía, establecemos como valores para sus condiciones iniciales las temperaturas correspondientes a las corrientes involucradas.

Valores semilla para la primera iteración en $t=t_0$ (Son inicializaciones para el procedimiento iterativo, al utilizar un método implícito de resolución).

$$\left(\frac{dh_{R1}}{dt}\right)^*, \left(\frac{dT_{F1}}{dt}\right)^*, \left(\frac{dh_{FL1}}{dt}\right)^*, \left(\frac{dP_{FL1}^0}{dt}\right)^*$$

Observación: dado que $P_{FL1}^0 = f(T_{F4})$ el valor de la derivada se puede obtener derivando dicha función.

Secuencia de cálculos:

En primer lugar debe demostrarse que pueden resolverse todos los términos del miembro derecho de todas las ecuaciones diferenciales, para asegurar que el método de resolución seleccionado pueda calcular los valores de las variables diferenciales en el tiempo posterior.

Como vimos en los modelos dinámicos para cada equipo, se presentan todas las ecuaciones algebraicas (1 a 54) relacionadas a las ecuaciones diferenciales. En función de los valores de las variables diferenciales (conocidas para todo t), y los datos del problema, se comienza el cálculo proponiendo un orden para su resolución.

En primer lugar se calcula:

$$k_D = A_D \times e^{\left(\frac{-E_D}{R \times T_{F1}}\right)} \quad k_I = A_I \times e^{\left(\frac{-E_I}{R \times T_{F1}}\right)}$$

Resulta necesario calcular las fracciones molares (ecuaciones 1-3), que se obtienen a partir de las concentraciones molares en la corriente F_1 :

$$x_i^{F1} = \frac{C_i^{F1}}{\sum_{i=1}^3 C_i^{F1}} \quad \text{Para } j=1 \text{ a } 3 \text{ (A, B, C)}$$

Luego se resuelven las ecuaciones 4, y 5

$$\rho_{F1} = \sum_{j=1}^3 \rho_j^{puro}(T_{F1}) \times x_j^{F1} \quad (4)$$

$$(-r_A) = k_D \times C_A^{F1} \times C_B^{F1} - k_I \times C_C^{F1} \quad (5)$$

Para resolver la ec. (6),

$$F_1 = \rho_{F1} \times C_{v2} \times \sqrt{\frac{(P_{F1} - P_{F2})}{\rho_{F1}}}$$

se necesitan conocer las presiones P_{F1} y P_{F2} y la acción de control de la válvula de control 2 (CV-2).

$$P_{F1} = P_{R1}^0 + \rho_{F1} \times g \times h_{R1} \quad (7)$$

En este caso P_{R1}^0 es dato, pero si no lo fuera, asumiendo equilibrio L-V, se calcula según:

$$P_{R1}^0 = f(T_{F1}) \quad (\text{p.ej. por Antoine}) \quad (8)$$

Dado que $P_{F2} = P_{FL1}^0$ (ec. (9)), se resuelve la ecuación (26), (nótese la hipótesis de mezcla perfecta).

$$P_{FL1}^0 = \sum_{i=1}^{NC} x_i^{F4} \times P_{Vi}(T_{F4}) \quad (26)$$

Para hallar la acción de control de la válvula de control 2 (CV-2), se resuelven las ecuaciones 12, 13.

$$AP_2 = Kp_2 \times (h_{R1} - SP_{hR1}) \quad (12)$$

$$AD_2 = Kd_2 \times \left(\frac{dh_{R1}}{dt} \right)^* \quad (13)$$

Recuerde que el símbolo * indica valores “de iteración” para las derivadas.

La acción integral a tiempo cero se conoce, dado que es una condición inicial del problema a resolver, por lo que es este valor el que se utiliza a tiempo $t = t_0$. Para todo instante posterior se obtiene al resolver la ecuación diferencial correspondiente.

Ahora se está en condiciones de resolver las ecuaciones 11 y luego la 10.

$$AC_2 = AP_2 + AI_2 + AD_2 + A_{02} \quad (11)$$

$$C_{v2} = \alpha_2^{AC_2} \quad (10)$$

Posteriormente, se resuelve la ecuación (6):

$$F_1 = \rho_{F1} \times C_{v2} \times \sqrt{\frac{(P_{F1} - P_{F2})}{\rho_{F1}}} \quad (6)$$

Luego se resuelven la (14), (15) y (17):

$$H_{F0} = \sum_{i=1}^3 x_i^{F0} \times H_i^{F0}(T_{F0}) \quad (14)$$

$$H_{F1} = \sum_{i=1}^3 x_i^{F1} \times H_i^{F1}(T_{F1}) \quad (15)$$

$$Q_{R1} = (UA)_{R1} \times (T_{F1} - T_{AE1}) \quad (17)$$

Dado que $F_6 = F_5 = F_4$, y este flujo molar viene dado por la ecuación (23), se requiere previamente calcular la acción de control de la válvula 4. Para ello se resuelven las ecuaciones (31), (32), (30), y (29).

$$AP_4 = Kp_4 \times (h_{FL1} - SP_{hFL1}) \quad (31)$$

$$AD_4 = Kd_4 \times \left(\frac{dh_{FL1}}{dt} \right)^* \quad (32)$$

$$AC_4 = AP_4 + AI_4 + AD_4 + A_{04} \quad (30)$$

$$C_{v4} = \alpha_4^{AC_4} \quad (29)$$

A partir de la ecuación (24) se obtiene la densidad del líquido en F4:

$$\rho_{F4} = \sum_{j=1}^3 \rho_j^{puro}(T_{F4}) \times x_j^{F4} \quad (24)$$

Y resolviendo (27), (26), (25), y (51) ya se está en condiciones de obtener F4, a partir de la (23). Nótese que se considera nula la caída de presión a través de las cañerías.

$$Pv_i = f(T_{F4}) \quad (27)$$

$$P_{FL1}^0 = \sum_{i=1}^{NC} x_i^{F4} \times Pv_i(T_{F4}) \quad (26)$$

$$P_{FL1} = P_{FL1}^0 + \rho_{F4} \times g \times h_{FL1} \quad (25)$$

$$P_{F5} = P_{F4} = P_{R1}^0 - \Delta P_{BC1} \quad (51)$$

$$F_4 = \rho_{F4} \times C_{v4} \times \sqrt{\frac{(P_{FL1} - P_{F4})}{\rho_{F4}}} \quad (23)$$

Para resolver el miembro derecho de la ecuación (VII), es necesario conocer A_{E0} , el cual es función de la acción de control de válvula 1. Entonces, el orden de resolución esta dado por:

$$AP_1 = Kp_1 \times (T_{F1} - SP_{TF1}) \quad (21)$$

$$AD_1 = Kd_1 \times \left(\frac{dT_{F1}}{dt} \right)^* \quad (22)$$

$$AC_1 = AP_1 + AI_1 + AD_1 + A_{01} \quad (20)$$

$$C_{v1} = \alpha_1^{AC_1} \quad (19)$$

$$AE_0 = \rho_{AE0} \times C_{v1} \times \sqrt{\frac{(P_{AE0} - P_{AE1})}{\rho_{AE0}}} \quad (18)$$

Con P_{AE0} y P_{AE1} conocidas.

Para resolver F_3 se necesita calcular, además de la acción de control de la válvula 3, la densidad de F_3 :

$$\rho_{F3} = \frac{P_{FL1}^0}{R \times T_{F4}}$$

$$T_{F3} = T_{F4}$$

$$AP_3 = Kp_3 \times (P_{FL1}^0 - SP_{hFL1}) \quad (36)$$

$$AD_3 = Kd_3 \times \left(\frac{dP_{FL1}^0}{dt} \right)^* \quad (37)$$

Recordar que la expresión de la derivada se puede obtener a partir de derivar la ecuación de Antoine, convirtiéndose en una derivada de la temperatura.

$$AC_3 = AP_3 + AI_3 + AD_3 + A_{03} \quad (35)$$

$$C_{v3} = \alpha_3^{AC_3} \quad (34)$$

$$F_3 = \rho_{F3} \times C_{v3} \times \sqrt{\frac{(P_{FL1}^0 - P_{F3}^S)}{\rho_{F3}}} \quad (33)$$

Con las constantes de equilibrio (según mezcla ideal)

$$k_j^{F4} = \frac{P_{Vj}(T_{F4})}{P_{FL1}^0}$$

se calculan las composiciones en la corriente F_3

$$x_j^{F3} = k_j^{F4} \times x_j^{F4} \quad \text{Para } j=1 \text{ a } 3$$

y luego las entalpías de las corrientes de vapor y líquido (38) y (39)

$$H_{F3} = \sum_{i=1}^3 x_i^{F3} \times H_i^{F3}(T_{F3}) \quad (38)$$

$$H_{F4} = \sum_{i=1}^3 x_i^{F4} \times H_i^{F4}(T_{F4}) \quad (39)$$

De las ecuaciones (40), (41), y (42) se establece que:

$$F_5 = F_4 \quad (40)$$

$$AE_2 = AE_1 \quad (41)$$

$$x_i^{F5} = x_i^{F4} \quad (42)$$

El intercambiador de calor involucra un sistema de ecuaciones algebraicas no lineales (en las variables TF5 y TAE2) dado por las ecuaciones (43), (44), (45), (46) y (47):

$$Q_{IC1} = F_4 \times H_{F4} - F_5 \times H_{F5} = F_4 \times (H_{F4} - H_{F5}) \quad (43)$$

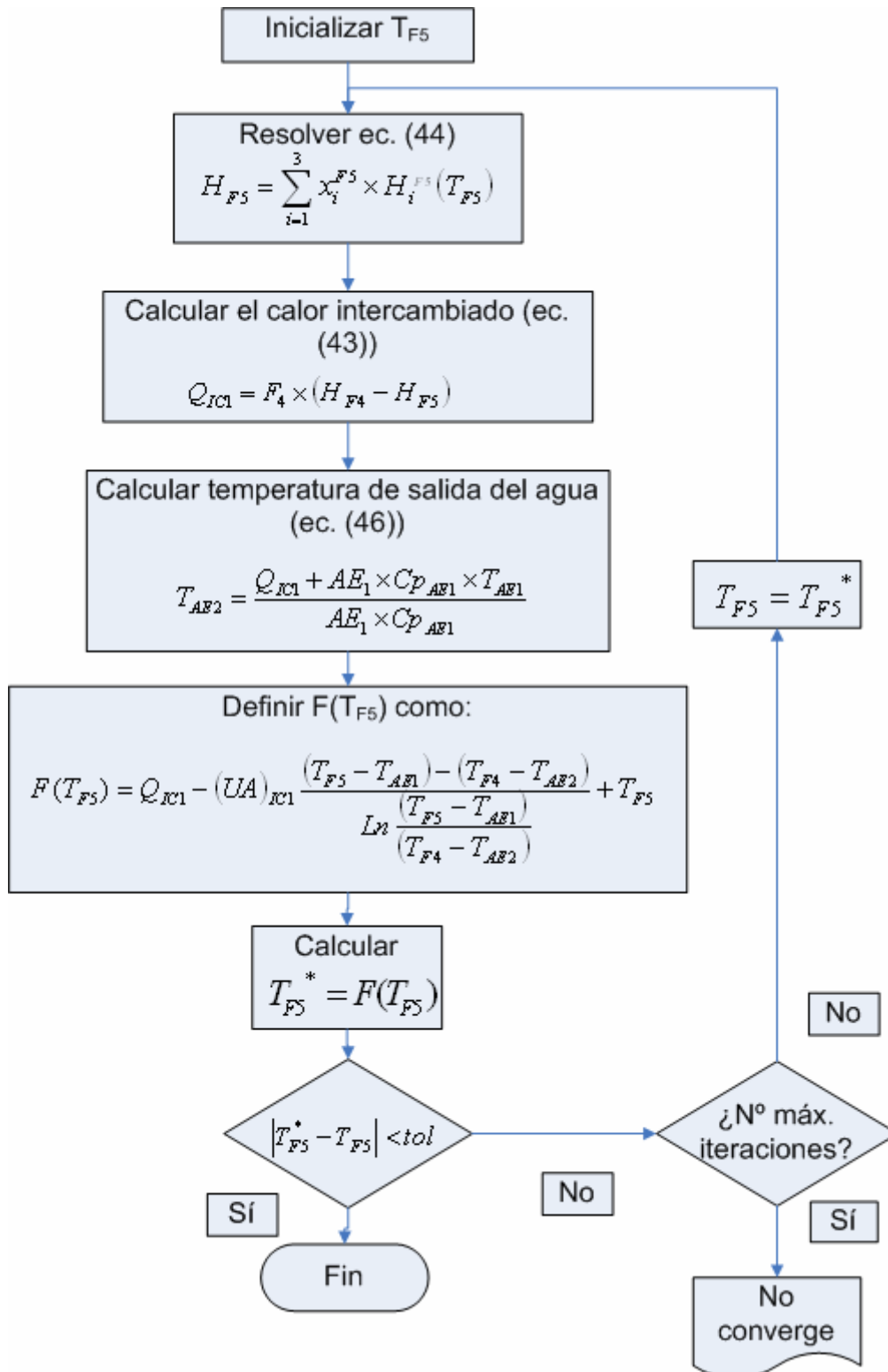
$$H_{F5} = \sum_{i=1}^3 x_i^{F5} \times H_i^{F5}(T_{F5}) \quad (44)$$

$$Q_{IC1} = AE_1 \times Cp_{AE1} \times (T_{AE2} - T_{AE1}) \quad (45)$$

$$T_{AE2} = \frac{Q_{IC1} + AE_1 \times Cp_{AE1} \times T_{AE1}}{AE_1 \times Cp_{AE1}} \quad (46)$$

$$Q_{IC1} - (UA)_{IC1} \frac{(T_{F5} - T_{AE1}) - (T_{F4} - T_{AE2})}{Ln \frac{(T_{F5} - T_{AE1})}{(T_{F4} - T_{AE2})}} = 0 \quad (47)$$

Por lo tanto, se debe emplear algún método iterativo apropiado, ya sea por sustitución directa o Newton-Raphson. El siguiente diagrama de flujo muestra el procedimiento utilizando el método de sustitución directa.



Finalmente, se resuelven las ecuaciones algebraicas relacionadas con la bomba centrífuga (Ecs. 48 a 54):

$$F_6 = F_5$$

$$T_{F6} = T_{F5}$$

$$P_{F6} = P_{R1}^0$$

$$P_{F5} = P_{F4} = P_{R1}^0 - \Delta P_{BC1}$$

$$x_i^{F6} = x_i^{F5}$$

Resueltas todas ecuaciones algebraicas relacionadas al sistema de ecuaciones diferenciales, y dado que las variables diferenciales implícitas para tiempo cero fueron inicializados con valores semillas (para instantes posteriores se utilizan como inicializaciones los valores calculados en el tiempo anterior), los miembros derechos quedan totalmente definidos, y pueden calcularse.

Dado que las derivadas

$$\left(\frac{dh_{R1}}{dt}\right)^*, \left(\frac{dT_{F1}}{dt}\right)^*, \left(\frac{dh_{FL1}}{dt}\right)^*, \left(\frac{dP_{FL1}^0}{dt}\right)^*$$

fueron valores supuestos, se itera por sustitución directa hasta que se verifique algún criterio de error. Esto es, se debe calcular la norma del vector

$$\|\bar{u}\| = \sqrt{\left(\frac{dh_{R1}}{dt} - \left(\frac{dh_{R1}}{dt}\right)^*\right)^2 + \left(\frac{dT_{F1}}{dt} - \left(\frac{dT_{F1}}{dt}\right)^*\right)^2 + \left(\frac{dh_{FL1}}{dt} - \left(\frac{dh_{FL1}}{dt}\right)^*\right)^2 + \left(\frac{dP_{FL1}}{dt} - \left(\frac{dP_{FL1}}{dt}\right)^*\right)^2}, \quad y$$

definir un valor de tolerancia o error (por ejemplo 10^{-06}). Si no se cumple seguimos con las iteraciones tomando ahora como nuevo valor de las derivadas, los calculados al resolver los miembros derechos.

Si se cumple, tomamos los valores calculados de los miembros derechos para calcular el próximo punto.

De éste modo, aplicando por ejemplo, el método de Euler a las ecuaciones diferenciales, se pueden resolver las mismas para un instante posterior, según:

$$h_{R1}^{(i+1)} = h_{R1}^{(i)} + \Delta t \times f_1 \left(x_i^{F1}, h_{R1}, T_{F1}, C_i^{F1}, \frac{dh_{R1}}{dt}, T_{F4}, x_i^{F4}, \frac{dh_{FL1}}{dt}, h_{FL1} \right)^{(i)} \quad (I'')$$

$$C_A^{F1(i+1)} = C_A^{F1(i)} + \Delta t \times f_2 \left(x_i^{F1}, h_{R1}, T_{F1}, \frac{dh_{R1}}{dt}, T_{F4}, x_i^{F4}, \frac{dh_{FL1}}{dt}, h_{FL1} \right)^{(i)} \quad (II'')$$

$$C_B^{F1(i+1)} = C_B^{F1(i)} + \Delta t \times f_3 \left(x_i^{F1}, h_{R1}, T_{F1}, \frac{dh_{R1}}{dt}, T_{F4}, x_i^{F4}, \frac{dh_{FL1}}{dt}, h_{FL1} \right)^{(i)} \quad (III'')$$

$$C_C^{F1(i+1)} = C_C^{F1(i)} + \Delta t \times f_4 \left(x_i^{F1}, h_{R1}, T_{F1}, \frac{dh_{R1}}{dt}, T_{F4}, x_i^{F4}, \frac{dh_{FL1}}{dt}, h_{FL1} \right)^{(i)} \quad (IV'')$$

$$H_{F1}^{(i+1)} = H_{F1}^{(i)} + \Delta t \times f_5 \left(x_i^{F1}, h_{R1}, T_{F1}, \frac{dh_{R1}}{dt}, T_{F4}, x_i^{F4}, h_{FL1}, \frac{dh_{FL1}}{dt} \right)^{(i)} \quad (V'')$$

$$AI_2^{i+1} = AI_2^i + \Delta t \times Ki_2 \times (h_{R1} - SP_{h_{R1}})^i \quad (VI'')$$

$$T_{AE1}^{(i+1)} = T_{AE1}^{(i)} + \Delta t \times f_7 \left(\frac{dT_{F1}}{dt}, T_{AE1}, T_{F1} \right)^{(i)} \quad (VII'')$$

$$AI_1^{i+1} = AI_1^i + \Delta t \times Ki_1 \times (T_{F1} - SP_{TF1})^{(i)} \quad (VIII'')$$

$$h_{FL1}^{(i+1)} = h_{FL1}^{(i)} + \Delta t \times f_9 \left(x_i^{F1}, h_{R1}, T_{F1}, \frac{dh_{R1}}{dt}, T_{F4}, x_i^{F4}, h_{FL1}, \frac{dh_{FL1}}{dt}, \frac{dP_{FL}^0}{dt} \right)^{(i)} \quad (IX'')$$

$$x_A^{F4(i+1)} = x_A^{F4(i)} + \Delta t \times f_{10} \left(x_i^{F1}, h_{R1}, T_{F1}, \frac{dh_{R1}}{dt}, T_{F4}, x_i^{F4}, h_{FL1}, \frac{dh_{FL1}}{dt}, \frac{dP_{FL}^0}{dt} \right)^{(i)} \quad (X'')$$

$$x_B^{F4(i+1)} = x_B^{F4(i)} + \Delta t \times f_{11} \left(x_i^{F1}, h_{R1}, T_{F1}, \frac{dh_{R1}}{dt}, T_{F4}, x_i^{F4}, h_{FL1}, \frac{dh_{FL1}}{dt}, \frac{dP_{FL}^0}{dt} \right)^{(i)} \quad (XI'')$$

$$x_C^{F4(i+1)} = x_C^{F4(i)} + \Delta t \times f_{12} \left(x_i^{F1}, h_{R1}, T_{F1}, \frac{dh_{R1}}{dt}, T_{F4}, x_i^{F4}, h_{FL1}, \frac{dh_{FL1}}{dt}, \frac{dP_{FL}^0}{dt} \right)^{(i)} \quad (XII'')$$

$$H_{F4}^{(i+1)} = H_{F4}^{(i)} + \Delta t \times f_{13} \left(x_i^{F1}, h_{R1}, T_{F1}, \frac{dh_{R1}}{dt}, T_{F4}, x_i^{F4}, h_{FL1}, \frac{dh_{FL1}}{dt}, \frac{dP_{FL}^0}{dt}, T_{F3} \right)^{(i)} \quad (XIII'')$$

$$AI_4^{i+1} = AI_4^i + \Delta t \times Ki_4 \times (h_{FL1} - SP_{h_{FL1}})^{(i)} \quad (XIV'')$$

$$AI_3^{i+1} = AI_3^i + \Delta t \times Ki_3 \times (P_{FL1}^0 - SP_{h_{FL1}})^{(i)} \quad (XV'')$$

Esto se realiza hasta completar el intervalo de integración, desde t_0 a t_f .

Otra forma es iterar directamente sobre los valores de las variables en el punto $i+1$, lo cual resulta equivalente, ya que deben convergerse dichos valores al igual que con las derivadas.