

Método *flash* etapa por etapa para el cálculo de columnas de absorción¹

Step-by-Step Flash Method for Calculating Absorption Columns²

Método *flash* etapa por etapa para o cálculo de colunas de absorção³

César Sánchez-Correa⁴
Jaime Arturo-Calvache⁵
Esteban Álvarez-Aguilar⁶

¹ Fecha de recepción: 16 de junio de 2010. Fecha de aceptación: 6 de septiembre de 2010. Este artículo se deriva de un proyecto de investigación denominado *Desarrollo de un algoritmo para la simulación de una columna de absorción para hidrocarburos de C3 a C6 procedentes del gas natural por el modelo de etapas de equilibrio*, con número de registro AB1, desarrollado por la Fundación Universidad de América, Bogotá, Colombia.

² Submitted on June 16, 2010. Accepted on September 6, 2010. This article is the result of the research project *Developing an Algorithm for Simulating an Absorption Column for Hydrocarbons (C3-C6) obtained from Natural Gas through the Equilibrium Stage Model*, registration number AB1, developed by the Fundación Universidad de América, Bogotá, Colombia.

³ Data de recepção: 16 de junho de 2010. Data de aceitação: 6 de setembro de 2010. Este artigo deriva de um projeto de pesquisa denominado *Desenvolvimento de um algoritmo para a simulação de uma coluna de absorção para hidrocarbonetos de C3 a C6 procedentes de gás natural pelo modelo de etapas de equilíbrio*, con número de registro AB1, desenvolvido pela Fundação Universidade da América, Bogotá, Colômbia

⁴ Ingeniero químico, Universidad Nacional, sede Manizales, Colombia. Docente e investigador, Fundación Universidad de América, Bogotá, Colombia. Correo electrónico: cesar.sanchez@profesores.uamerica.edu.co.

⁵ Ingeniero químico, Universidad Nacional de Colombia, sede Manizales, Colombia. Especialista en Docencia Universitaria, Universidad Militar Nueva Granada, Bogotá, Colombia. Magíster en Ingeniería Química, Universidad Nacional de Colombia, sede Bogotá. Docente de tiempo completo, Fundación Universidad de América, Bogotá, Colombia. Correo electrónico: jaimedarturo@profesores.uamerica.edu.co.

⁶ Ingeniero Químico, Fundación Universidad de América, Bogotá, Colombia. Miembro del Grupo de Investigación en Procesos de Separación no Convencionales, Bogotá, Colombia. Correo electrónico: permanganatodek@yahoo.com.

Resumen

En este artículo se presenta una estrategia de cálculo etapa por etapa para resolver el modelo de equilibrio aplicado a una columna de absorción. El algoritmo manipula las ecuaciones de la columna agrupándolas en conjuntos correspondientes a cada etapa. Cada grupo es tratado por separado mediante un cálculo de *flash*. Se trata de una generalización del algoritmo para cascadas de extracción que ahora cubre dos casos más: (a) con recirculación entre las etapas y (b) la posibilidad de varias alimentaciones. Se presentan tres casos de estudio con el relieve puesto en una configuración específica: (a) columna con rehervidor parcial y flujo de calor especificado, (b) columna con varias alimentaciones y (c) columna con recirculación entre las etapas.

Palabras clave

Columnas de absorción, algoritmos, Flash (programa para computador).

Abstract

This work presents a step-by-step calculation strategy to solve the equilibrium model applied to an absorption column. The algorithm used manipulates the equations of the column by grouping them into sets for each stage. Each group is treated separately through a flash calculation. This is a generalization of the algorithm for extraction cascades, which now covers two more cases: a) recirculation between stages and, b) the possibility of several feeding modes. Three case studies with specific settings are presented: a) A column with a partial reboiler and specified heat flow; b) a column with several feeding modes; and c) a column with recirculation between stages.

Key words

Absorption column, algorithms, Flash (computer file).

Resumo

Em este artigo se apresenta uma estratégia de cálculo etapa por etapa para resolver o modelo de equilíbrio aplicado a uma coluna de absorção. O algoritmo manipula as equações da coluna agrupando-as em conjuntos correspondentes a cada etapa. Cada grupo é tratado separadamente mediante um cálculo de *flash*. Trata-se de uma generalização do algoritmo para cascadas de extração que agora cobre dois casos mais: (a) com recirculação entre as etapas e (b) a possibilidade de várias alimentações. Apresentam-se três casos de estudo com o relevo posto em uma configuração específica: (a) coluna com fervedor parcial e fluxo de calor especificado, (b) coluna com várias alimentações e (c) coluna com recirculação entre as etapas

Palavras chave

Colunas de absorção, algoritmos, Flash (programa para computador).

Introducción

Los equipos para los procesos de separación que tienen sus principios en el equilibrio termodinámico entre fases fluidas, como la destilación, la absorción y la extracción en fase líquida, son modelados típicamente como un arreglo de etapas en contracorriente (Henley y Seader, 2006). Para describir una etapa de separación se dispone básicamente de dos modelos generales (Taylor y Krishna, 1993): (a) la etapa teórica de equilibrio y (b) modelos de no equilibrio, donde el más conocido es el de doble película. En el diseño en detalle (determinación del tamaño de los equipos) se emplean los modelos de no equilibrio y la aproximación preliminar se realiza con la etapa teórica de equilibrio. Esto último incluye resolver los siguientes problemas típicos: (a) determinar la máxima separación para un número de etapas especificado, (b) establecer el mínimo número de etapas necesario para lograr cierto grado de separación y (c) buscar las etapas de alimentación.

En acuerdo con el tratamiento dado al conjunto de ecuaciones de balance de masa, relaciones de equilibrio de fases, suma de composiciones y entalpía (MESH o *mass equilibrium sum enthalpy*), los algoritmos existentes para la solución se dividen en algunos grupos principales:

- Los que manipulan las ecuaciones secuencialmente o por subconjuntos, como en los métodos de (Wang y Henke, 1966) y Theta (Holland, 1981), la suma de los flujos (Burningham y Otto, 1967) y etapa por etapa, como en (Sánchez, Arturo y Cárdenas, 2009).
- Los que manipulan todas las ecuaciones simultáneamente, como el método de Newton-Raphson (Naphtali y Sandholm, 1971).
- Las estrategias *inside-outside*, propuestas originalmente por (Boston y Sullivan, 1974).
- Los métodos de continuación (Vickery y Taylor, 1986; Lin, Seader y Wayburn, 1987; Seydel y Hlavacek, 1987).

En las estrategias etapa por etapa, las ecuaciones son agrupadas en subconjuntos correspondientes con el MESH de cada etapa. La solución de una columna se lleva a cabo de forma secuencial, resolviendo un subconjunto a la vez, iniciando en un extremo (en la base o en la cima) y pasando parte del resultado a la siguiente etapa, hasta llegar al otro extremo. Esta forma de ver el problema tiene algunas ventajas: (a) la solución de cada etapa particular puede ser tratada con los conceptos de la termodinámica respecto del *flash* isotérmico y el *flash* adiabático (Henley y Seader, 2006); (b) la facilidad en la implementación computacional, principalmente porque no es necesario un tratamiento matricial con grandes matrices (Kincaid y Cheney, 2002), y (c) el tema de la asignación de estimados, que incluso en los simuladores comerciales sigue vigente y puede ser facilitado con la teoría del equilibrio de fases, que determina la posibilidad de la separación en cada etapa particular.

En este trabajo se presenta una estrategia de cálculo etapa por etapa para resolver el modelo de equilibrio aplicado a columnas de absorción. Es una ampliación del algoritmo para cascadas de extracción dado por (Sánchez, Arturo y Cárdenas, 2009) que ahora cubre dos casos más: (a) con recirculación entre las etapas que difícilmente puede ser tratado con un método de manipulación secuencial y (b) la posibilidad de varias alimentaciones. Hasta el presente, los autores no tienen noticia en la literatura abierta acerca de la demostración de estas ideas para simular procesos de absorción. El algoritmo trata con el caso básico de evaluación y sus variantes, el cual se da cuando el número de etapas es conocido y se quiere conocer el grado de separación y el comportamiento de los variables a lo largo de la columna.

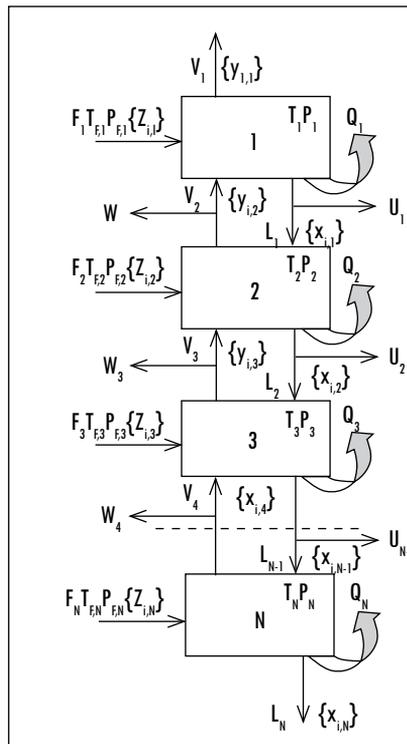
Se presentan tres ejemplos de aplicación con distintos grados de dificultad para ilustrar la implementación del algoritmo en el cálculo de columnas de absorción. Los casos de estudio hacen hincapié en alguna configuración específica:

- Columna con rehervidor parcial y flujo de calor especificado. Los resultados se contrastan con los obtenidos en el simulador comercial Aspen Plus (2006).
- Columna con varias alimentaciones. La situación puede ser manejada fácilmente con algoritmos de manipulación secuencial. Se ilustra porque muestra la posibilidad del método etapa por etapa para cubrir los casos convencionales en la simulación de columnas de absorción,
- Columna con recirculación entre las etapas. Es el caso de estudio más relevante por dos razones: no puede ser resuelto con otro algoritmo de manipulación secuencial y permite alterar de manera importante la distribución de productos en un absorbedor o en un desorbedor.

1. Metodología

El arreglo en contracorriente de N etapas ideales de separación, como se ilustra en la Figura 1, conforma el modelo de equilibrio para una columna de absorción. Las variables involucradas se consideran en la Tabla 1. Contando las ecuaciones MESH de cada etapa (c balances de materia, c relaciones de equilibrio de fases, tres sumas y un balance de energía), se observa un total de $2N(c + 2)$ ecuaciones para toda la columna, que configuran un problema con un número de grados de libertad igual a $N(c + 6)$.

Figura 1. Esquema por etapas de la columna de absorción



Fuente: presentación propia de los autores.

En los casos de interés práctico más comunes (Henley y Seader, 2006), las siguientes especificaciones resultan ser la base de los diferentes casos de estudio:

- Las especificaciones asociadas con cada una de las corrientes de alimentación: temperatura (1), presión (1), flujo (1), composición ($c - 1$). Para un total de $N(c + 2)$ variables en la columna asociadas con la alimentación.

- La presión en cada una de las etapas: N variables.
- Los flujos laterales de gas y líquido: $2N$ variables.
- El flujo de calor desde la etapa 2 hasta la $N - 1$: $N - 2$ variables.

Después de asignar este grupo de especificaciones básicas, los grados de libertad se reducen a dos. La forma de asignar estas dos variables restantes origina diferentes problemas de evaluación y distintos algoritmos de solución (Tabla 1).

Tabla 1. Conteo de las variables involucradas en el modelo de la columna de absorción

	x, y, z	T	P	F	Total variables de corriente
Alimentos	Nc	N	N	N	$N(c + 3)$
Vapores	Nc	N	N	N	$N(c + 3)$
Líquidos	Nc	**	***	N	$N(c + 1)$
V. lateral	*	*	*	N	N
L. lateral	*	*	*	N	N
Total variables de corriente	$3Nc$	$2N$	$2N$	$5N$	$N(3c + 9)$
F. calor					N
Equipo					$N(3c + 10)$

* Se considera que una corriente lateral tiene las mismas variables intensivas (presión, temperatura y composición) de la corriente que la origina.

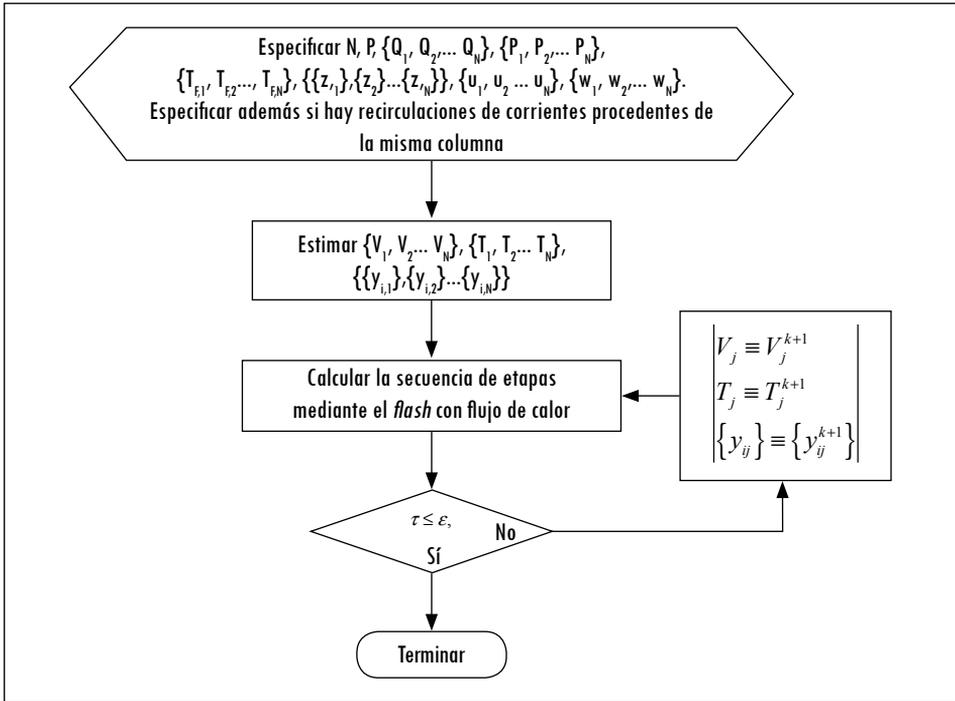
** Se considera equilibrio térmico entre los efluentes de las etapas.

*** Se considera equilibrio mecánico entre los efluentes de las etapas.

Fuente: presentación propia de los autores.

En este trabajo se propone un método de solución con dos características: (a) cada etapa ideal de separación es tratada con un cálculo de *flash* con transferencia de calor y (b) una iteración del algoritmo consiste en una secuencia de cálculos de *flash* a lo largo de la columna. Este mismo enfoque fue empleado por (Sánchez, Arturo y Cárdenas, 2009) para calcular cascadas de extracción en fase líquida. En la Figura 2 se presenta el algoritmo propuesto para tratar el caso básico correspondiente con las especificaciones de (Burningham y Otto, 1967). Las variables de iteración son: (a) los flujos totales de las corrientes gaseosas, (b) las fracciones molares de las corrientes gaseosas y (c) la temperatura de las etapas.

Figura 2. Algoritmo de cálculo de método *flash* etapa a etapa



Fuente: presentación propia de los autores.

Dado un conjunto de valores de prueba para las variables de iteración es posible realizar una secuencia de cálculos de *flash* con transferencia de calor etapa por etapa, iniciando en la primera, pasando parte del resultado a la segunda, y continuando de esa manera hasta la última. Al finalizar este proceso se obtiene un nuevo conjunto de valores para las variables de iteración. El criterio de parada del algoritmo es la invariancia de estas variables, medida a través de la siguiente función:

$$\tau = \sum_{m=1}^{m=N} \|V_m - V_m^{k+1}\| + \sum_{m=1}^{m=N} \|T_m - T_m^{k+1}\| + \sum_{m=1}^{m=N} \|\{y_{i,m}\} - \{y_{i,m}^{k+1}\}\| \quad (1)$$

En la literatura conocida por los autores no se tiene noticia de la aplicación de estas ideas para el cálculo de columnas de absorción. Aunque los textos clásicos sobre el tema proponen entender una columna como un arreglo en contracorriente de etapas ideales de separación, ninguno concreta esta apreciación a través de un algoritmo de cálculo que se fundamente en este principio.

En Sánchez, Arturo y Cárdenas (2009) no se considera la posibilidad de manejar diferentes conjuntos de especificaciones. Sin embargo, el método etapa por etapa puede cubrir diferentes casos de simulación, a través de la variación del tipo de *flash*. Por ejemplo, para tratar las especificaciones de (Wang y Henke, 1966), el diagrama en la Figura 2 puede modificarse calculando la primera y la última etapa mediante un *flash* de fracción vaporizada. La especificación de la pureza de un componente en la cima o en el fondo puede resolverse con un *flash* de pureza. Una misma estructura de cálculo permite resolver diferentes casos que de otra manera requerirían un algoritmo específico cada uno.

Por otra parte, los métodos de cálculo de los diferentes tipos de *flash* se encuentran bastante bien consolidados en la literatura (Bausa y Marquardt, 2000; Steyer, Flockerzi y Sundmacher, 2005; (Henley y Seader, 2006; (Jalali, Seader y Khalegi, 2008) y permiten emplear este conocimiento directamente en la solución de columnas de absorción. Por ello se emplean ideas y conceptos bien conocidos articulados con un propósito no convencional.

2. Resultados y discusión

En los dos primeros ejemplos se emplea la formulación simétrica del equilibrio de fases:

$$y_i \hat{\phi}_i^V P = x_i \hat{\phi}_i^L P \quad (2)$$

Los coeficientes de fugacidad y la entalpía de las dos fases se calculan con la ecuación de (Peng y Robinson, 1976). Se emplean las reglas de mezclado de Van der Waals (O'Connell, Poiling y Prausnitz, 2001) y se toman los parámetros binarios de interacción como iguales a cero. En el último ejemplo se emplea la formulación gamma-phi del equilibrio de fases:

$$y_i \hat{\phi}_i^V P = x_i \gamma_i f_i^{SP} \quad (3)$$

Los coeficientes de fugacidad y la entalpía del vapor se calculan con la ecuación de Peng-Robinson (1976). La fase líquida se modela a partir de los coeficientes de actividad y la entalpía se obtiene a partir de la entalpía en exceso.

El modelo de actividad es el Universal Functional Activity Coefficient (Unifac) Dortmund (Gmehling, Li y Schiller, 1993). Los parámetros de interacción del metano se tomaron de (Ahlers y Gmehling, 2002) y (Boukouvalas et al., 1996). Las ecuaciones de la presión de vapor se tomaron de (O'Connell, Poiling

y Prausnitz, 2001) y (Poling, Prausnitz y Reid, 1987). Las ecuaciones para los volúmenes molares de los líquidos puros aplicados al factor de Pointyng corresponden al modelo de (Chang y Zhao, 1990) y a la ecuación modificada de Rackett dada por (Yamada y Gunn, 1973). Los volúmenes de referencia se tomaron de (Green, Maloney y Perry, 1999). En la estimación de las variables de iteración encontramos convenientes las siguientes heurísticas:

- La estimación de los flujos molares de gas se hace a través de la hipótesis del *constant molar overflow* (CMO), empleada en el método de Maccabe y Thiele (Treybal, 1970).
- Las temperaturas se estiman en un perfil lineal entre las temperaturas de la alimentación más baja de gas y más alta de solvente en la columna de absorción.
- Las fracciones molares en la fase gaseosa se toman iguales a las del gas alimentado inmediatamente debajo de la etapa en consideración.

Para calcular la primera secuencia etapa por etapa también es necesario estimar las variables de las corrientes líquidas:

- Los flujos de líquido se calculan empleando el balance de materia en una sección de la columna. Para esto se elige como volumen de control la sección que inicia en la etapa 1 y termina en la etapa j , de la cual se obtiene la siguiente relación:

$$L_j = \sum_{m=1}^{m=j} (F_m - W_m - U_m) + V_{j+1} - V_1 \quad (4)$$

- Las fracciones molares del líquido se obtienen a partir de las relaciones de equilibrio de fases.

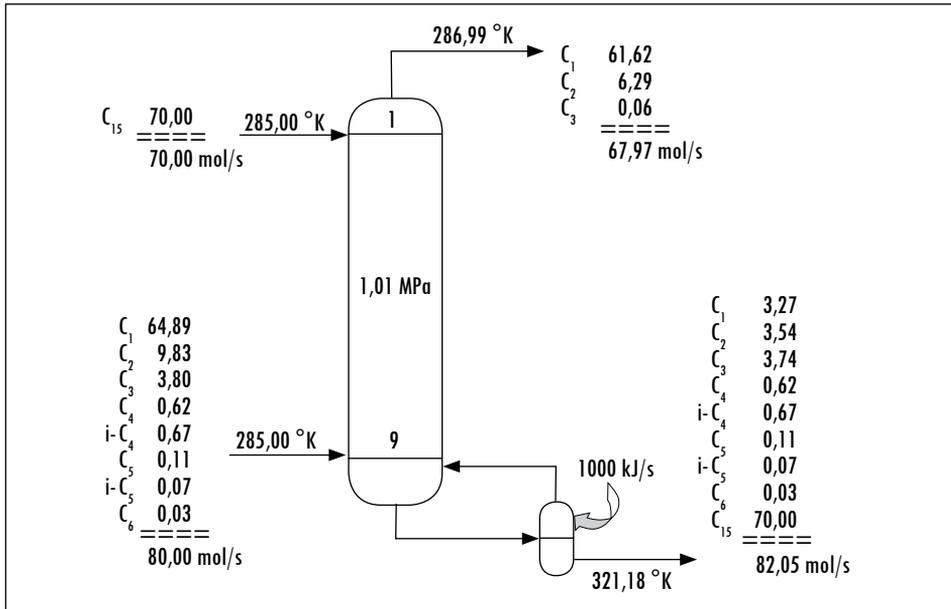
Finalmente se halla conveniente establecer el criterio de convergencia para valores inferiores a $\varepsilon = 1 \times 10^{-3}$. Los siguientes ejemplos son efectuados en un computador de procesador AMD Sempron SI-42 y memoria RAM de 2 GB y 800 MHz, tomando un total de iteraciones de 220, 162 y 316 para los ejemplos 1, 2 y 3, respectivamente.

2.1 Ejemplo 1: columna con rehervidor

Se trata de simular la configuración ilustrada en la Figura 3. El empleo de un rehervidor en una columna de absorción tiene el propósito de mejorar la separación de los componentes volátiles (la transferencia de masa desde la fase líquida hacia la fase gaseosa) en la sección inferior de la columna. Su uso es usual en

las columnas de desorción, que tienen el propósito de recuperar un solvente. El caso presentado en la Figura 3 es una variación del tema de la recuperación de condensados de las corrientes de gas natural, empleando como solvente penta-decano, tema tratado por Álvarez (2010).

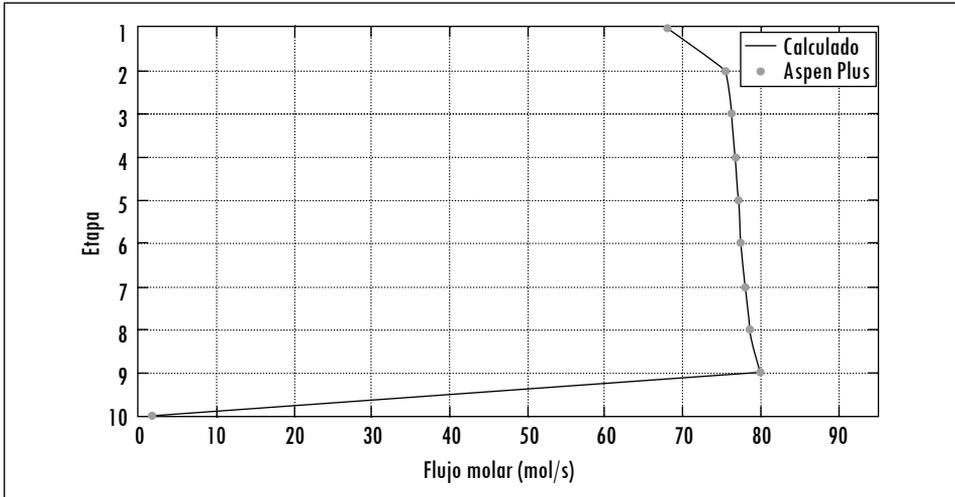
Figura 3. Configuración de la columna con rehervidor y resultados globales asociados con el ejemplo 1



Fuente: presentación propia de los autores.

Con el propósito de tener un punto de comparación en relación con el modelo termodinámico, el caso también se resolvió en el simulador comercial Aspen Plus (2006) y se encontró un buen acuerdo entre los resultados, según puede observarse en las figuras 4 y 5.

Figura 4. Variación del flujo de gas a lo largo de la columna de la Figura 3

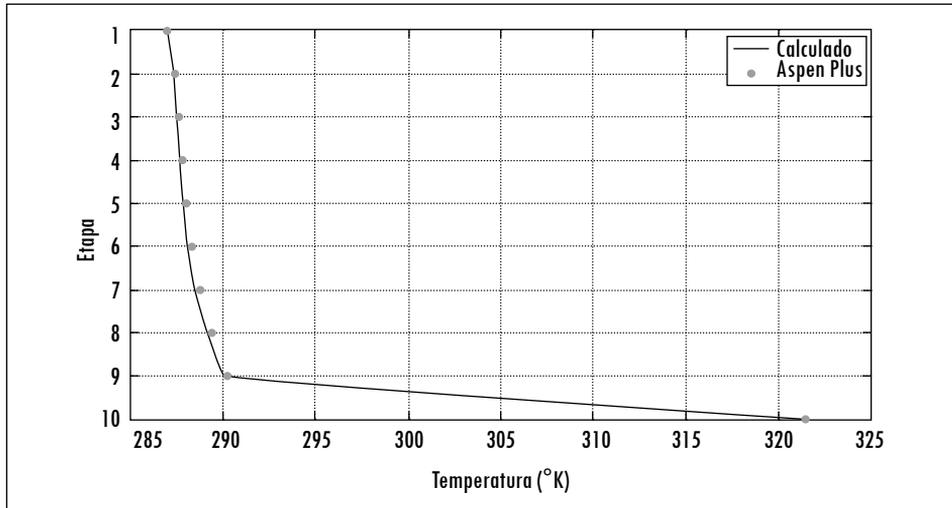


Fuente: presentación propia de los autores.

En la Figura 4 se muestra el perfil del flujo de vapor y se contrasta con el resultado en el simulador. Se halló un acuerdo notable al no poder distinguir las curvas ilustradas. Se aprecia un descenso súbito en el flujo gaseoso de la última etapa. Esto se origina porque el flujo de vapor que ingresa a la etapa 9 sólo proviene del material volatilizado en el rehervidor.

En la Figura 5 se comparan los resultados del perfil de temperatura con los obtenidos en el simulador. Se observa un buen acuerdo entre estos. La variación aguda de temperatura entre la etapa 9 y el rehervidor es una situación natural originada por la transferencia de calor.

Figura 5. Perfil de temperatura correspondiente a la columna de la Figura 3

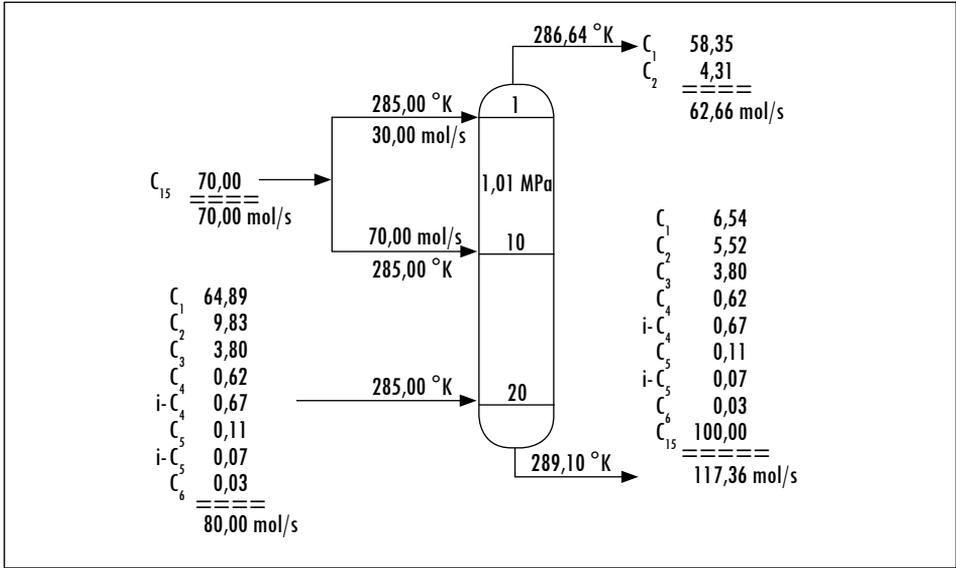


Fuente: presentación propia de los autores.

2.2 Ejemplo 2: columna con dos alimentos

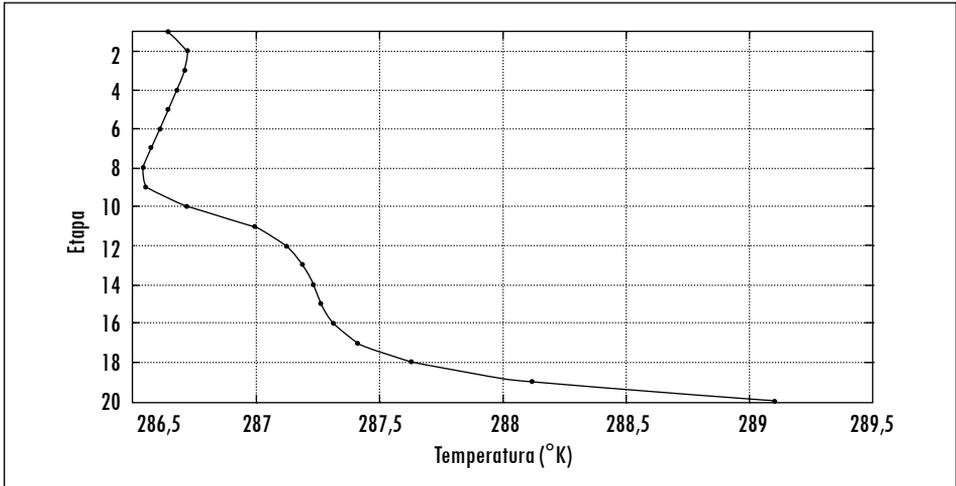
La búsqueda de la configuración más acertada de un proceso de separación con solventes, como la absorción, la extracción y algunas variantes de la destilación, requiere la localización de la etapa de alimentación del agente material de separación e investigar la posibilidad de dividirlo y alimentarlo en diferentes secciones de la columna. El segundo caso de estudio se encuentra relacionado con estas ideas. La columna se ilustra en la Figura 6. El flujo de solvente (pentadecano) se divide en dos corrientes: una se alimenta en la etapa 1 y la otra en la 10. Las tres corrientes de alimentación a la columna se encuentran a la misma temperatura y todas las etapas son adiabáticas. Por esta razón, los únicos efectos térmicos se encuentran asociados con los procesos de mezclado. Tratándose de una mezcla de hidrocarburos esta variación es pequeña (en el caso actual, aproximadamente 3 °C (Figura 7).

Figura 6. Configuración de la columna con rehervidor y resultados globales asociados con el ejemplo 2



Fuente: presentación propia de los autores.

Figura 7. Perfil de temperatura correspondiente a la columna de la Figura 10

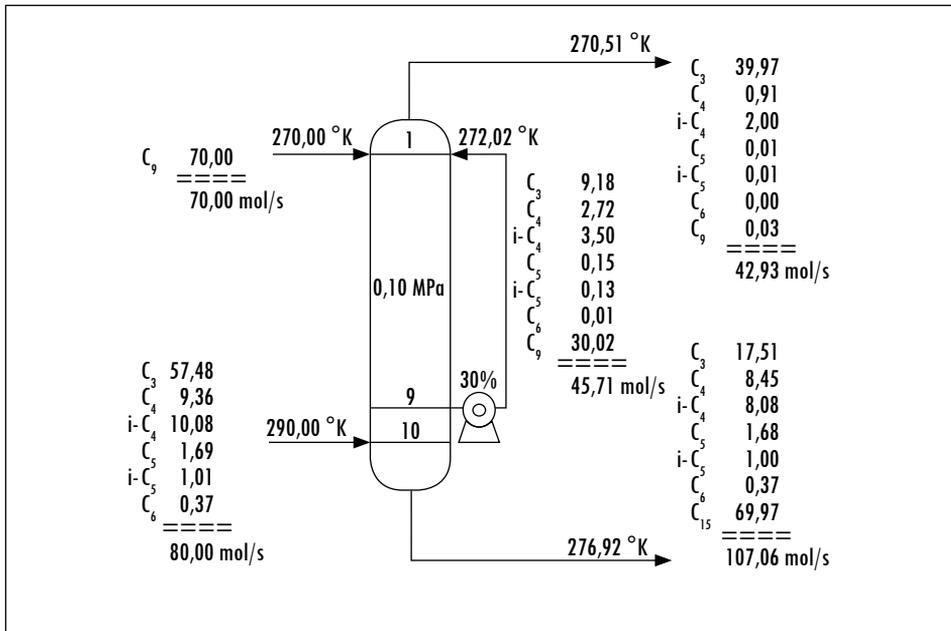


Fuente: presentación propia de los autores.

2.3 Ejemplo 3: columna con recirculación entre las etapas

Se trata de una columna de absorción de 10 etapas con recirculación de un efluente lateral, donde se extrae el 30% del líquido de salida de la etapa 9 y se recircula a la etapa 1 (Figura 8). Este tipo de configuración puede utilizarse para alterar las condiciones en una sección específica de la columna, especialmente la cantidad de solvente disponible y la distribución de la temperatura. Los resultados en la Tabla 2 sustentan esta idea. El ejemplo es relevante, porque la situación propuesta en la Figura 8 no puede ser manejada con métodos de manipulación secuencial y deberá ser tratada con algoritmos de manipulación simultánea.

Figura 8. Configuración de la columna con rehervidor y resultados globales asociados con el ejemplo 3



Fuente: presentación propia de los autores.

Tabla 2. Resultados del flujo molar por componente en la fase gaseosa y temperatura

Etapa	Temperatura (°K)	Flujo molar en la fase gaseosa (mol/s)						
		C3	C4	iC4	C5	iC5	C6	C9
1	270,51	39,97	0,91	2,00	0,01	0,01	0,00	0,03
2	270,51	64,29	1,47	3,34	0,02	0,02	0,00	0,04
3	270,50	64,27	1,49	3,51	0,02	0,02	0,00	0,04
4	270,50	64,24	1,52	3,77	0,02	0,02	0,00	0,04
5	270,49	64,20	1,59	4,16	0,02	0,02	0,00	0,04
6	270,49	64,13	1,75	4,73	0,02	0,02	0,00	0,04
7	270,53	64,02	2,10	5,57	0,02	0,02	0,00	0,04
8	270,80	63,80	2,85	6,78	0,02	0,03	0,00	0,05
9	272,02	63,22	4,41	8,44	0,06	0,07	0,00	0,05
10	276,92	61,39	7,27	10,18	0,37	0,30	0,02	0,08

Fuente: presentación propia de los autores.

3. Conclusiones

Se propuso y aplicó un algoritmo secuencial etapa por etapa para la solución del MESH en una columna de absorción. La estrategia puede cubrir los casos básicos de los métodos clásicos como Wang y Henke, Theta, suma de los flujos y casos más elaborados, como la recirculación de material entre las etapas.

Los cálculos de los diferentes tipos de *flash* son el elemento estructural básico del algoritmo. Esto tiene ventajas: (a) circunscribe el problema en el campo de la termodinámica, (b) no es necesario manipular todas las ecuaciones de la columna al tiempo, (c) hay fácil implementación computacional como consecuencia de manipular las ecuaciones por grupos y (d) la solución del problema del *flash* isotérmico es objeto de gran interés en la literatura y existen estrategias robustas en este sentido.

Es posible cubrir diferentes especificaciones cambiando el tipo de *flash* en la primera y en la última etapa. Por ejemplo, las especificaciones de Wang y Henke se tratan con un *flash* de fracción vaporizada y las del método de la suma de flujos con un *flash* no isotérmico. Esta facilidad para cubrir diferentes especificaciones ofrece perspectivas en la simulación de columnas de destilación.

4. Nomenclatura

c = número de componentes.

F = flujo de alimentación (mol/s).

f_i^{SP} = fugacidad de sustancia pura (Pa).

L = flujo de líquido (mol/s).

N = número de etapas.

P = presión (Pa).

P_F = presión de alimentación (Pa).

Q = flujo de calor (J/s).

T = temperatura (°K).

T_F = temperatura de alimentación (°K).

U = flujo lateral de líquido extraído.

V = flujo de gas (mol/s).

W = flujo lateral de gas extraído.

x_i = fracción molar en la fase líquida.

y_i = fracción molar en la fase gaseosa.

z_i = fracción molar de alimentación.

Letras griegas

γ_i = coeficiente de actividad.

$\hat{\phi}_i$ = coeficiente de fugacidad de mezcla.

ϕ_i^{Sat} = coeficiente de fugacidad de saturación.

Referencias

- AHLERS, J. y GMEHLING, J. Development of a universal group contribution equation of state 2: Prediction of vapor-liquid equilibria for asymmetric systems [documento en línea]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2002, vol. 41, núm. 14, pp. 3489-3498 [consulta: 10-07-2009].
- ÁLVAREZ AGUILAR, E. *Desarrollo de un algoritmo para la simulación de una columna de absorción para hidrocarburos de C3 a C6 procedentes del gas natural por el modelo de etapas de equilibrio*. Bogotá: Universidad de América, Facultad de Ingenierías, 2010.
- ASPEN TECHNOLOGY. Aspen Plus [software de simulación]. Cambridge: AspenTech, 2006 [consulta: 17-12-2009].
- BAUSA, J. y MARQUARDT, W. Quick and reliable phase stability test in VLE flash calculations by homotopy continuation. *Computers and Chemical Engineering*, 2000, vol. 24, núm. 11, pp. 2447-2456.

- BOSTON, J. F. y SULLIVAN, S. L. JR. A new class of solution methods for multicomponent, multistage separation processes [documento en línea]. *AICbE Journal*. 1974, vol. 52, núm. 1, pp. 52-63 [consulta: 15-5-2010].
- BOUKOUVALAS, C. J. et al. The performance of Eos/GE models in the prediction of vapor-liquid equilibria in asymmetric systems [documento en línea]. *Fluid Phase Equilibria*. 1996, vol. 116, núms. 1-2, pp. 480-487 [consulta: 10-07-2009].
- BURNINGHAM, D. W. y OTTO, F. D. Which computer design for absorbers? *Hydrocarbon Processing*. 1967, vol. 46, núm. 10, pp. 163-170.
- CHANG, C.-H. y ZHAO, X. A new generalized equation for predicting volumes of compressed liquids [documento en línea]. *Fluid Phase Equilibria*. 1990, vol. 58, núm. 3, pp. 231-238 [consulta: 10-07-2009].
- GMEHLING, J.; LI, J. y SCHILLER, M. A modified UNIFAC model 2: Present parameter matrix and results for different thermodynamic properties [documento en línea]. *I&EC Research*. 1993, vol. 32, núm. 1, pp. 178-193 [consulta: 27-03-2009].
- GREEN, D. W.; MALONEY, J. O. y PERRY, R. H. *Perry's chemical engineers handbook*. 7th ed. New York: McGraw Hill, 1999.
- HENLEY, E. J. y SEADER, J. D. *Separation process principles*. 2nd ed. New York: John Wiley & Sons, 2006.
- HOLLAND, C. D. *Fundamentals of multicomponent distillation*. New York: McGraw Hill, 1981.
- JALALI, F.; SEADER, J. D. y KHALEGI, S. Global solution approaches in equilibrium and stability analysis using homotopy continuation in the complex domain. *Computers and Chemical Engineering*. 2008, vol. 32, núm. 10, pp. 2333-2345.
- KINCAID, D. y CHENEY, W. *Numerical analysis, mathematics of scientific computing*. 3rd ed. s. l.: American Mathematical Society, 2002.
- LIN, W. J.; SEADER, J. D. y WAYBURN, T. L. Computing multiple solutions to systems of interlinked separation columns [documento en línea]. *AICbE Journal*. 1987, vol. 33, núm. 6, pp. 886-897 [consulta: 01-11-2010].
- NAPHTALI, L. M. y SANDHOLM, D. P. Multicomponent separation calculations by linearization [documento en línea]. *AICbE Journal*. 1971, vol. 17, núm. 1, pp. 148-153 [consulta: 15-5-2010].
- O'CONNELL, J. P.; POILING, B. E. y PRAUSNITZ, J. M. *The properties of gases and liquids*. 5th ed. New York: McGraw Hill, 2001.
- PENG, D.-Y. y ROBINSON, D. B. A new two-constant equation of state [documento en línea]. *Industrial and Engineering Chemical Fundamentals*. 1976, vol. 15, núm. 1, pp. 59-64 [consulta: 15-5-2010].
- POLING, B. E.; PRAUSNITZ, J. P. y REID, R. C. *The properties of gases and liquids*. 4th ed. New York: McGraw Hill, 1987.

- SÁNCHEZ, C. A.; ARTURO, J. E. y CÁRDENAS, A. C. Algoritmo etapa a etapa para la simulación de cascadas de extracción en fase líquida aplicando el modelo de equilibrio [documento en línea]. *Revista EIA*. 2009, vol. 12, pp. 39-58 [consulta: 15-05-2010].
- SEYDEL, R. y HLAVACEK, V. Role of continuation in engineering analysis [documento en línea]. *Chemical Engineering Science*. 1987, vol. 42, núm. 6, pp. 1281-1295 [consulta: 27-03-2009].
- STEYER, F.; FLOCKERZI, D. y SUNDMACHER, K. Equilibrium and rate-based approaches to liquid-liquid phase splitting calculations. *Computers and Chemical Engineering*. 2005, vol. 30, pp. 277-284.
- TAYLOR, R. y KRISHNA, R. *Multicomponent mass transfer*. New York: John Wiley & Sons, 1993.
- TREYBAL, R. E. *Operaciones de transferencia de masa*. 2nd ed. New York: McGraw Hill, 1970.
- VICKERY, D. J. y TAYLOR, R. Path-following approaches to the solution of multicomponent, multistage separation process problems [documento en línea]. *AIChE Journal*. 1986, vol. 32, núm. 4, pp. 547-556 [consulta: 27-03-2009].
- WANG, J. C. y HENKE, G. E. Tridiagonal matrix for distillation. *Hydrocarbon Processing*. 1966, vol. 45, núm. 8, pp. 155-163.
- YAMADA, T. y GUNN, R. D. Saturated liquid molar volumes, Rackett equation [documento en línea]. *Journal of Chemical and Engineering Data*. 1973, vol. 18, núm. 2, pp. 234-236 [consulta: 27-03-2009].