

# Manual de referencia

para los códigos de Matlab™  
utilizados en la Tesis doctoral

«Simulación numérica y optimización de los  
parámetros de funcionamiento de un SMB»

---

Joaquin M. Menacho Solà-Morales

Dirigido por:

Dr. Julià Sempere Cebrián  
Dr. Xavier Tomàs Morer

IQS School of Engineering  
Univ. Ramon Llull  
Barcelona, 2012

## Contenido

1. Simulación de una columna.....	3
1.1. Método de las líneas:.....	4
1.2. Método de colocación ortogonal sobre elementos finitos:.....	5
1.3. Método de diferencias finitas con cambio de coordenadas:.....	7
2. Hodógrafo.....	9
2.1. Hodógrafo de isoterma Langmuir competitiva.....	9
2.2. Hodógrafo de isoterma Langmuir generalizada.....	10
2.3. Hodógrafo de isoterma cualquiera conocida.....	10
3. Análisis de onda estacionaria.....	11
3.1. Para isoterma cualquiera conocida.....	11
3.2. Para isoterma bi-Langmuir.....	12
4. Simulación de un SMB.....	13
4.1. Para isoterma Langmuir.....	13
4.2. Para isoterma bi-Langmuir.....	14
5. Optimización.....	16
5.1. Para isoterma Langmuir.....	16
5.2. Para isoterma bi-Langmuir.....	18

## 1. Simulación de una columna

Los códigos de Matlab™ generados para la simulación de una columna cromatográfica han sido programados en forma de función que puede llamarse desde la ventana de comandos. Para una determinada simulación, hay que suministrar una serie de datos y parámetros al código, y además adaptar las funciones auxiliares en función del tipo de isoterma de adsorción utilizada y la forma del pulso inyectado. El estado inicial de la columna se supone siempre con concentración nula tanto en la fase estacionaria como en la fase móvil.

En los siguientes apartados se describen los códigos para simular mediante el método de las líneas (MOL), mediante colocación ortogonal de polinomios en elementos finitos (EF) y mediante diferencias finitas con cambio de coordenadas. Para cada código, se indican los datos, parámetros y funciones a suministrar y/o adaptar.

- a) Datos: Los datos pasados a cada función se deben dar cada vez que se ejecuta. Son los parámetros asociados a la isoterma de adsorción, el intervalo de tiempo a simular y la partición de la dimensión espacial y temporal.
- b) Parámetros a suministrar en el código: Son valores asociados a la columna y a la simulación (longitud, caudal, porosidad, tiempo de inyección, etc.) que deben reescribirse en el código para cada caso.
- c) Funciones auxiliares a adaptar: son funciones definidas al final del código, que son llamadas por éste. Las dos funciones suministran información sobre la isoterma de adsorción y sobre el pulso de entrada en la columna.
  - i. Isoterma de adsorción: la función da el valor de la carga en la fase estacionaria en función de las concentraciones en la fase móvil. Para adaptar el código a la isoterma de que se trate en cada caso, deben reescribirse las líneas correspondientes a la expresión matemática de la isoterma.
  - ii. Pulso de entrada en la columna: es la concentración en la fase móvil en la entrada de la columna en función del tiempo, de la duración total del pulso y de las concentraciones máximas inyectadas. Debe reescribirse para cada caso formando el perfil del pulso que se desee.

Es importante tener en cuenta la coherencia de las unidades utilizadas para los diversos datos y parámetros suministrados.

### 1.1. Método de las líneas:

- a) Código: mol\_6010 (isot,N,tf,nt).
- b) Objeto. Simulación de una columna cromatográfica para una mezcla binaria, conocidas las condiciones de operación y la isoterma de equilibrio. Modelo con transporte de materia.
- c) Método. Discretización de la dimensión espacial con diferencias finitas, y resolución del sistema de ODE respecto al tiempo mediante el solver de Matlab™ “ode113”.
- d) Datos:
  - i. isot: matriz que contiene los valores de los parámetros de la isoterma, que se pasan a la función auxiliar “weq”.
  - ii. N: número de divisiones en la discretización del eje espacial (por defecto, 20).
  - iii. tf: intervalo de tiempo a simular (por defecto, 5).
  - iv. nt: nº de intervalos de tiempo en los que se obtiene la solución (por defecto, 100).
- e) Parámetros a suministrar en el código.
  - i. epsilon: porosidad
  - ii. K1, K2: coeficientes de transferencia de materia, para las dos sustancias de la mezcla
  - iii. L: longitud de la columna
  - iv. Vol: volumen de la columna
  - v. Caudal: caudal de fase móvil
  - vi. Cmax1, Cmax2: valores máximos de las sustancias 1 y 2 en la inyección
  - vii. tp: tiempo de duración del pulso
  - viii. retardo: tiempo que transcurre hasta el inicio del pulso
- f) Funciones auxiliares a adaptar.
  - i. weq(i,c1,c2): función que calcula la carga de equilibrio, según la isoterma. Las variables c1 y c2 indican las concentraciones en la fase móvil, i=1 ó 2 indica si se calcula la carga en la fase estacionaria de la sustancia 1 ó 2. Las expresiones de la carga

deben adaptarse según la isoterma de trabajo (Langmuir, bi-Langmuir, Freundlich, etc.)

- ii.  $C_{inlet}(t)$ : función que calcula la concentración en la entrada de la columna en función del tiempo. Es el pulso de entrada, que se inicia en el tiempo = "retardo" y dura "tp".
- g) Output.
- i. Gráfico de la concentración en fase móvil de la sustancia 1 y 2.
  - ii. Gráfico de la concentración en fase estacionaria de la sustancia 1 y 2.
  - iii. Gráfico de la concentración en fase móvil de la suma de las sustancias 1 y 2.
  - iv. Gráfico de las curvas de concentración de las sustancias 1, 2 y suma de 1 y 2, a la salida de la columna.
  - v. Ficheros con las curvas de concentración de las sustancias 1 y 2 a la salida de la columna. Dos matrices nombradas "ruptura1" y "ruptura2" con 2 columnas y nt filas: en la primera columna valores de tiempo, y en la segunda valores de concentración.
- h) Otros códigos emparentados.
- i. `mol_mono_6_bilangmuir(M,N,tf,nt)`: solamente una sustancia, con isoterma bilangmuir.
  - ii. `mol_mono_6_langmuir(M,N,tf,nt)`: solamente una sustancia, con isoterma langmuir.

## 1.2. Método de colocación ortogonal sobre elementos finitos:

- a) Código: `ortogonal_2040(isot,N,tf,nt)`.
- b) Objeto. Simulación de una columna cromatográfica para una mezcla binaria, conocidas las condiciones de operación y la isoterma de equilibrio. Modelo con difusión axial y transporte de materia.
- c) Método. División del eje espacial en elementos finitos cuadráticos. Los elementos utilizados han sido polinomios de Lagrange de hasta grado 2, formulados en el intervalo  $[-1,1]$ , y con puntos de colocación en -1, 0 y 1. Se ha forzado continuidad ente elementos contiguos, y residuo nulo en los puntos de colocación. El sistema de ODE respecto del tiempo resultante se integra utilizando el `solver` de Matlab™ "ode113".
- d) Datos.
  - i. `isot`: matriz conteniendo los valores de los parámetros de la isoterma de equilibrio.

- ii. N: nº de elementos en el eje espacial (por defecto, 20).
  - iii. tf: intervalo de tiempo a simular (por defecto, 100).
  - iv. nt: nº de intervalos de tiempo en los que se obtiene la solución por defecto, 100).
- e) Parámetros a suministrar en el código.
- i. epsilon: porosidad
  - ii. K1, K2: coeficientes de transferencia de materia, para las dos sustancias de la mezcla
  - iii. Dap1, Dap2: coeficientes de difusión axial en la fase móvil, para las dos sustancias
  - iv. L: longitud de la columna
  - v. Vol: volumen de la columna
  - vi. Caudal: caudal de fase móvil
  - vii. Cmax1, Cmax2: valores máximos de las sustancias 1 y 2 en la inyección
  - viii. tp: tiempo de duración del pulso
  - ix. retardo: tiempo que transcurre hasta el inicio del pulso
- f) Funciones auxiliares a adaptar.
- i.  $q_{eq}(i,c1,c2)$ : función que calcula la carga de equilibrio, según la isoterma. Las variables  $c1$  y  $c2$  indican las concentraciones en la fase móvil,  $i=1$  ó  $2$  indica si se calcula la carga en la fase estacionaria de la sustancia 1 ó 2. Las expresiones de la carga deben adaptarse según la isoterma de trabajo (Langmuir, bi-Langmuir, Freundlich, etc.)
  - ii.  $C_{inlet}(t)$ : función que calcula la concentración en la entrada de la columna en función del tiempo. Es el pulso de entrada, que se inicia en el tiempo = "retardo" y dura "tp".
- g) Output.
- i. Gráfico de la concentración en fase móvil de la sustancia 1 y 2.
  - ii. Gráfico de la concentración en fase estacionaria de la sustancia 1 y 2.
  - iii. Gráfico de la concentración en fase móvil de la suma de las sustancias 1 y 2.

- iv. Gráfico de las curvas de concentración de las sustancias 1, 2 y suma de 1 y 2, a la salida de la columna.
- v. Ficheros con las curvas de concentración de las sustancias 1 y 2 a la salida de la columna. Dos matrices nombradas "ruptura1" y "ruptura2" con 2 columnas y nt filas: en la primera columna valores de tiempo, y en la segunda valores de concentración.

### 1.3. Método de diferencias finitas con cambio de coordenadas:

- a) Código: `caract_1000_tm` (M,tf,esc) y `caract_1000_tdm` (M,tf,esc).
- b) Objeto. Simulación de una columna cromatográfica para una mezcla binaria, conocidas las condiciones de operación y la isoterma de equilibrio. Modelo sólo con transporte de materia (TM) o con transporte de materia y difusión axial (TDM).
- c) Método. Diferencias finitas explícitas sobre coordenadas lagrangianas.
- d) Datos.
  - i. M: matriz conteniendo los valores de los parámetros de la isoterma de equilibrio.
  - ii. tf: intervalo de tiempo a simular (por defecto, 100).
  - iii. esc: factor de escala para controlar la estabilidad (por defecto, 1). Debe reducirse su valor para mejorar la estabilidad numérica. El eje temporal se discretiza inicialmente en  $nt = 200$  intervalos. Si el valor  $\Delta t$  resulta superior al valor esc dividido por el valor máximo de los coeficientes de transferencia de materia, se aumenta el número de intervalos. El programa calculará con un valor que en general será mayor a los 200 intervalos, pero devolverá el resultado interpolado en esos  $nt = 200$  intervalos de tiempo.
- e) Parámetros a suministrar en el código.
  - i. epsilon: porosidad
  - ii. K1, K2: coeficientes de transferencia de materia, para las dos sustancias de la mezcla
  - iii. Dap1, Dap2: coeficientes de difusión axial en la fase móvil, para las dos sustancias (sólo en `caract_1000_tdm`).
  - iv. L: longitud de la columna
  - v. d: diámetro interior de la columna
  - vi. Caudal: caudal de fase móvil

- vii.  $C_{max1}$ ,  $C_{max2}$ : valores máximos de las sustancias 1 y 2 en la inyección
  - viii.  $t_p$ : tiempo de duración del pulso
  - ix. retardo: tiempo que transcurre hasta el inicio del pulso
- f) Funciones auxiliares a adaptar.
- i.  $q_{eq}(x_1, x_2)$ : función que calcula las cargas de equilibrio de las sustancias 1 y 2, según la isoterma. Las variables  $x_1$  y  $x_2$  indican las concentraciones en la fase móvil. Las expresiones de la carga deben adaptarse según la isoterma de trabajo (Langmuir, bi-Langmuir, Freundlich, etc.)
  - ii.  $c_{in}(t)$ : función que calcula la concentración en la entrada de la columna en función del tiempo. Es el pulso de entrada, que se inicia en el tiempo = "retardo" y dura " $t_p$ ".
- g) Output.
- i. Gráfico de la concentración en fase móvil de la sustancia 1 y 2.
  - ii. Gráfico de la concentración en fase estacionaria de la sustancia 1 y 2.
  - iii. Gráfico de la concentración en fase móvil de la suma de las sustancias 1 y 2.
  - iv. Gráfico de las curvas de concentración de las sustancias 1, 2 y suma de 1 y 2, a la salida de la columna.
  - v. Ficheros con las curvas de concentración de las sustancias 1 y 2 a la salida de la columna. Dos matrices nombradas "ruptura1" y "ruptura2" con 2 columnas y  $n_t$  filas: en la primera columna valores de tiempo, y en la segunda valores de concentración. Dos vectores "x" y "tm" con los valores de los nodos de los ejes espacio y tiempo, y dos matrices "solc1" y "solc2" con los valores de la concentración de las sustancias 1 y 2 en la fase móvil, para los nodos dados en los vectores anteriores.
- h) Otros códigos emparentados.
- i. `caract_bilangmuir_2_KK(M,tf,esc)`: mezcla binaria, isoterma bi-Langmuir, dos constantes de transporte de material distintas (para adsorción y desorción); modelo con transporte de materia y sin difusión (TM).
  - ii. `caract_bin_5000_tdm(M,tf,esc)`: para mezcla binaria, integrando la difusión con un esquema de Crank-Nicholson mediante *splitting*.

- iii. `columna_001_tdm(caudal,Cinlet,Cinicial,Qinicial,M,tf,esc)`: código auxiliar utilizado para la simulación de un sistema SMB por los códigos `smb_101` y `smb_1000`. Mezcla binaria, isoterma Langmuir, modelo con transporte de materia y difusión axial. Da el resultado sobre una malla de 200 x 200 en el plano espacio-tiempo.
- iv. `columna_0012_tdm(Qin,Cin,Ccol,Wcol,isot,ts,esc)`: igual que el anterior, pero utilizado por `smb_1012`.
- v. `columna_001_tdm_bilangmuir(caudal, Cinlet, Cinicial, Qinicial, M, tf, esc)`: igual que el anterior, pero utilizado por `smb_101_bilangmuir`.
- vi. `columna_001_tdm_g(caudal,Cinlet,Cinicial,Qinicial,M,tf,esc)`: utilizado como auxiliar por el código `smb_1000_bilangmuir` (ver más abajo, apartado 5.2).

## 2. Hodógrafo.

Los códigos siguientes dibujan el hodógrafo correspondiente a la inyección de una mezcla binaria de una cierta composición, dada por las concentraciones en fase móvil inyectadas. A partir de los datos suministrados acerca de la isoterma de adsorción, se dibuja el hodógrafo y se calculan las concentraciones intermedias de cada una de las sustancias.

### 2.1. Hodógrafo de isoterma Langmuir competitiva.

- a) Código: `hodograph_4(isot,cinlet1,cinlet2,u,epsilon)`.
- b) Objeto. Dibuja el hodógrafo de una mezcla binaria con isoterma Langmuir competitiva.
- c) Método: analítico.
- d) Datos.
  - i. `isot`: matriz conteniendo los valores de los parámetros de la isoterma de adsorción.
  - ii. `cinlet1`, `cinlet2`: concentraciones en la fase móvil de las dos sustancias inyectadas.
  - iii. `u`: velocidad de la fase móvil.
  - iv. `epsilon`: porosidad.
- e) Output.

- i. Gráfico del hodógrafo.
- ii. Concentración y velocidad de avance de los frentes intermedios de adsorción y desorción.

## 2.2. Hodógrafo de isoterma Langmuir generalizada.

- a) Código: hodograph hodograph\_lang\_gen\_01(isot,c).
- b) Objeto. Dibuja el hodógrafo de una mezcla binaria con isoterma Langmuir generalizada (en la que una o ambas sustancias pueden ser anti-Langmuir).
- c) Método: analítico.
- d) Datos.
  - i. isot: matriz conteniendo los valores de los parámetros de la isoterma de adsorción.
  - ii. c: vector conteniendo las concentraciones en la fase móvil de las dos sustancias inyectadas.
- e) Output.
  - i. Gráfico del hodógrafo.
  - ii. Concentración de los frentes intermedios de adsorción y desorción.

## 2.3. Hodógrafo de isoterma cualquiera conocida.

- a) Código: hodograph\_every\_1000(cmax).
- b) Objeto. Dibuja el hodógrafo de una mezcla binaria con isoterma Langmuir competitiva, a partir de las concentraciones inyectadas, y conociendo jacobiana de la isoterma de adsorción.
- c) Método: integración numérica de las curvas de composición.
- d) Datos: c: vector conteniendo las concentraciones en la fase móvil de las sustancias inyectadas.
- e) Funciones auxiliares a adaptar: la función isoterma(c1,c2) devuelve el valor de la jacobiana de la isoterma de equilibrio correspondiente a los valores c1 y c2 de concentración en la fase móvil. Debe reescribirse la expresión de esta función para cada isoterma que se desee estudiar.
- f) Output.
  - i. Gráfico del hodógrafo.

- ii. Concentración y velocidad de avance de los frentes intermedios de adsorción y desorción.

### **3. Análisis de onda estacionaria**

Los códigos de este apartado realizan el análisis de onda estacionaria (*standing wave analysis*), bajo condiciones ideales, dadas las características de las columnas y la composición de la mezcla binaria a separar.

#### **3.1. Para isoterma cualquiera conocida.**

- a) `standing_wave_1000(c0,isot)`.
- b) Objeto. Dibuja el hodógrafo de una mezcla binaria con isoterma Langmuir competitiva.
- c) Método: integración numérica de las curvas de composición.
- d) Datos.
  - i. `isot`: matriz conteniendo los valores de los parámetros de la isoterma de adsorción.
  - ii. `c0`: vector conteniendo las concentraciones en la fase móvil de las dos sustancias inyectadas.
- e) Output.
  - i. Gráfico del hodógrafo.
  - ii. Concentración y velocidad de avance de los frentes intermedios de adsorción y desorción.
- f) Parámetros a suministrar en el código.
  - i. `Qfeed`: caudal de alimentación de la mezcla.
  - ii. `epsilon`: porosidad de la columna.
  - iii. `d`: diámetro interior de la columna.
  - iv. `L`: longitud del relleno de la columna.
- g) Funciones auxiliares a adaptar: Deben reescribirse para cada isoterma que se desee estudiar.
  - i. `isoterma(c1,c2)`: devuelve el valor de la carga en la fase estacionaria para una composición determinada en la fase móvil (líneas 190-191).

- ii. `jacob(c1,c2)`: devuelve los valores de la jacobiana de la isoterma de equilibrio correspondiente a los valores  $c_1$  y  $c_2$  de concentración en la fase móvil (líneas 157-160).
- h) Output.
  - i. Devuelve los valores del coeficiente de velocidad de cada frente (véanse los coeficientes  $\delta$  del apartado 2.4.1 de la Tesis). Estos coeficientes ( $\phi A \dots D$ ) corresponden a los cuatro frentes, y deben ordenarse de menor a mayor.
  - ii. Gráfico del hodógrafo, con las concentraciones de cada frente de adsorción y desorción.

### 3.2. Para isoterma bi-Langmuir

- a) `standing_wave_1000_bilangmuir(cin,isot)`.
- b) Objeto. Realiza el análisis de onda estacionaria para una mezcla binaria con isoterma bi-Langmuir competitiva y calcula los caudales y tiempo de conmutación o *switch* para un SMB equivalente. También puede ser utilizada con una isoterma Langmuir, dando valor nulo a los coeficientes correspondientes.
- c) Método: integración numérica de las curvas de composición. Se calculan los caudales en cada zona del TMB equivalente y el tiempo de *switch*, y se recalculan las concentraciones en la zona de inyección. Este proceso se repite iterativamente hasta que las concentraciones en la zona de inyección sufren una variación inferior a la tolerancia marcada, o bien hasta alcanzar el número máximo de iteraciones (por defecto, 500).
- d) Datos.
  - i. `isot`: matriz conteniendo los valores de los parámetros de la isoterma de adsorción de tipo bi-Langmuir.
  - ii. `cin`: vector conteniendo las concentraciones en la fase móvil de las dos sustancias inyectadas.
- e) Parámetros a suministrar en el código.
  - i. `Qfeed`: caudal de alimentación de la mezcla.
  - ii. `epsilon`: porosidad de la columna.
  - iii. `d`: diámetro interior de la columna.
  - iv. `L`: longitud del relleno de la columna.
  - v. `tolerancia`: diferencia admisible entre las concentraciones en el punto de inyección para dos iteraciones consecutivas.

- vi. Número máximo de iteraciones (por defecto, 500), puede modificarse en la línea 29 del código.
- f) Output.
  - i. Da los caudales en las cuatro zonas del TMB equivalente y el tiempo de *switch* del SMB.

#### 4. Simulación de un SMB

Los códigos de este apartado proporcionan la simulación de un sistema SMB, conocidos los parámetros de funcionamiento.

##### 4.1. Para isoterma Langmuir

- a) Código: smb\_101(Qfeed, Qraffinate, Qdesorbent, Qextract, Qresidual, Cfeed, isot, ts, niteraciones).
- b) Objeto. Realiza la simulación de un número de ciclos de un SMB conocidos los caudales, el tiempo de conmutación y los parámetros de la isoterma Langmuir. Puede simular cualquier configuración SMB de 4 zonas, dando los valores apropiados al vector "posiciones" (ver más abajo).
- c) Método: realiza la simulación directa del SMB, columna a columna, mediante el código auxiliar columna\_001\_tdm (ver más arriba, apartado 1.3.h).
- d) Datos.
  - i. Qfeed, Qraffinate, Qdesorbent, Qextract: caudales en los cuatro puertos del SMB (dados positivos).
  - ii. Qresidual: caudal en la zona II del SMB, entre el refinado y la entrada de desorbente.
  - iii. Cfeed: vector con las concentraciones de las dos sustancias a separar en el puerto de alimentación.
  - iv. isot: parámetros de la isoterma de adsorción, tipo Langmuir.
  - v. ts: tiempo de conmutación o *switch* del SMB.
  - vi. niteraciones: número de ciclos a simular.
- e) Parámetros a suministrar en el código.

- i. esc: coeficiente de control de la inestabilidad numérica (0.8 por defecto). Para mejorar la estabilidad, debe reducirse.
  - ii. posiciones: vector fila de caracteres, uno por columna, que indica la configuración de las zonas del SMB. Los caracteres son “F”, “R”, “D”, “E” para las primeras columnas tras los puertos de alimentación, refinado, desorbente y extracto, respectivamente; y “0” para el resto de columnas.
  - iii. L: longitud de la columna.
- f) Parámetros a suministrar en el código auxiliar columna\_001\_tdm.
- i. K1, K2: coeficientes de transferencia de materia.
  - ii. epsilon: porosidad.
  - iii. L: longitud de la columna.
  - iv. d: diámetro interior de la columna.
  - v. Dap1, Dap2: coeficientes de difusión axial.
- g) Output.
- i. Gráfico con el perfil de concentraciones en la fase móvil a lo largo de las columnas, a final de ciclo.
  - ii. Gráfico con las concentraciones en la fase móvil en los puertos de refinado y extracto, a lo largo del tiempo.
  - iii. Purezas de la sustancia 1 en los puertos de extracto y refinado en la última iteración.
- h) Otros códigos emparentados.
- i. smb\_1012(Qfeed, Qraffinate, Qdessorbent, Qextract, Qresidual, Cfeed, isot, ts, niteraciones): es un código igual que smb\_101, pero da el perfil de concentraciones a lo largo de las columnas para el inicio, mitad y fin del último ciclo simulado. Utiliza el código auxiliar columna\_0012\_tdm.
  - ii. smb\_1000(x, Qfeed, Cfeed, isot, posiciones, niteraciones): simula un SMB pero devuelve el resultado al código optimizar\_001, del cual es auxiliar. Utiliza como código auxiliar columna\_001\_tdm (ver más arriba, apartado 1.3.h).

#### 4.2. Para isoterma bi-Langmuir

- a) Código: smb\_101\_bilangmuir(Qfeed, Qraffinate, Qdessorbent, Qextract, Qresidual, Cfeed, isot, ts, niteraciones).

- b) Objeto: realiza la simulación de un número de ciclos de un SMB conocidos los caudales, el tiempo de conmutación y los parámetros de la isoterma bi-Langmuir. Puede simular cualquier configuración SMB de 4 zonas, dando los valores apropiados al vector "posiciones" (ver más abajo).
- c) Método: realiza la simulación directa del SMB, columna a columna, mediante el código auxiliar `columna_001_tdm_bilangmuir` (ver más arriba, apartado 1.3.h).
- d) Datos.
  - i.  $Q_{feed}$ ,  $Q_{raffinate}$ ,  $Q_{desorbent}$ ,  $Q_{extract}$ : caudales en los cuatro puertos del SMB (datos positivos).
  - ii.  $Q_{residual}$ : caudal en la zona II del SMB, entre el refinado y la entrada de desorbente.
  - iii.  $C_{feed}$ : vector con las concentraciones de las dos sustancias a separar en el puerto de alimentación.
  - iv.  $isot$ : parámetros de la isoterma de adsorción, tipo bi-Langmuir.
  - v.  $ts$ : tiempo de conmutación o *switch* del SMB.
  - vi.  $niteraciones$ : número de ciclos a simular.
- e) Parámetros a suministrar en el código.
  - i.  $esc$ : coeficiente de control de la inestabilidad numérica (0.8 por defecto). Para mejorar la estabilidad, debe reducirse.
  - ii.  $posiciones$ : vector fila de caracteres, uno por columna, que indica la configuración de las zonas del SMB. Los caracteres son "F", "R", "D", "E" para las primeras columnas tras los puertos de alimentación, refinado, desorbente y extracto, respectivamente; y "0" para el resto de columnas.
  - iii.  $L$ : longitud de la columna.
- f) Parámetros a suministrar en el código auxiliar `columna_001_tdm_bilangmuir`.
  - i.  $K_1$ ,  $K_2$ : coeficientes de transferencia de materia.
  - ii.  $\epsilon$ : porosidad.
  - iii.  $L$ : longitud de la columna.
  - iv.  $d$ : diámetro interior de la columna.
  - v.  $Dap_1$ ,  $Dap_2$ : coeficientes de difusión axial.

- g) Output.
  - i. Gráfico con el perfil de concentraciones en la fase móvil a lo largo de las columnas, a final de ciclo.
  - ii. Gráfico con las concentraciones en la fase móvil en los puertos de refinado y extracto, a lo largo del tiempo.
  - iii. Purezas de la sustancia 1 en los puertos de extracto y refinado en la última iteración.
- h) Otros códigos emparentados.
  - i. `smb_1000_bilangmuir(x,Qfeed,Cfeed,isot,posiciones,niteraciones)`: utilizado como auxiliar por `simplex_002_bilangmuir` (ver apartado 5.2).

## 5. Optimización

Estos códigos optimizan los parámetros de funcionamiento de un SMB. Se parte de una configuración dada (nº de columnas por zona), y de un caudal y composición de alimentación dados.

### 5.1. Para isoterma Langmuir

- a) Código: `optimizar_002(Qraffinate0, Qdessorbent0, Qextract0, Qresidual0, ts, Qfeed, Cfeed, isot, niteraciones)`.
- b) Objeto: realiza la optimización de los parámetros de funcionamiento de un SMB conocidas las características del sistema (número y dimensiones de la columna, isoterma Langmuir, porosidad), el caudal de alimentación y la composición de alimentación. El objetivo es la minimización del consumo de desorbente.
- c) Método: realiza la simulación directa del SMB, columna a columna, mediante el código auxiliar `smb_1000` (ver más arriba, apartado 4.1.h). Optimización mediante simplex modificado (ver código auxiliar `simplex_002`, en el apartado f).
- d) Datos.
  - i. `Qraffinate0, Qdessorbent0, Qextract0`: valores iniciales de los caudales en los cuatro puertos del SMB (datos positivos).
  - ii. `Qresidual0`: valor inicial del caudal en la zona II del SMB, entre el refinado y la entrada de desorbente.

- iii. Qfeed: caudal de alimentación.
  - iv. Cfeed: vector con las concentraciones de las dos sustancias a separar en el puerto de alimentación.
  - v. isot: parámetros de la isoterma de adsorción, tipo bi-Langmuir.
  - vi. ts: valor inicial del tiempo de conmutación o *switch* del SMB.
  - vii. niteraciones: número de ciclos a simular.
- e) Parámetros a suministrar en el código.
- i. esc: coeficiente de control de la inestabilidad numérica (0.8 por defecto). Para mejorar la estabilidad, debe reducirse.
  - ii. posiciones: vector fila de caracteres, uno por columna, que indica la configuración de las zonas del SMB. Los caracteres son "F", "R", "D", "E" para las primeras columnas tras los puertos de alimentación, refinado, desorbente y extracto, respectivamente; y "0" para el resto de columnas.
  - iii. L: longitud de la columna.
- f) Códigos auxiliares.
- i. simplex\_002(x0, Qfeed, Cfeed, isot, posiciones, niteraciones). Código de optimización mediante simplex modificado. Puede modificarse la tolerancia en el valor de la función objetivo ( $1e-8$ , por defecto). El valor del vector "posiciones" debe ser adaptado en cada caso en el código, como un vector fila de caracteres, uno por columna, que indica la configuración de las zonas del SMB. Los caracteres son "F", "R", "D", "E" para las primeras columnas tras los puertos de alimentación, refinado, desorbente y extracto, respectivamente; y "0" para el resto de columnas.
  - ii. smb\_1000(x, Qfeed, Cfeed, isot, posiciones, niteraciones): simula el SMB para cada evaluación de la función objetivo llevada a cabo por simplex\_002. Utiliza el código columna\_001\_tdm para la simulación de las columnas. Ambos códigos deben ser adaptados con los parámetros del sistema (ver más arriba, apartados 1.3 y 4.1).
- g) Output.
- i. Valor de los caudales en cada puerto del SMB.
  - ii. Valor de los caudales en cada zona del SMB.
  - iii. Valor mínimo logrado para la función objetivo.
  - iv. Tiempo de conmutación o *switch*.

## 5.2. Para isoterma bi-Langmuir

- a) Código: `optimizar_002_g(Qraffinate0, Qdessorbent0, Qextract0, Qresidual0, ts, Qfeed, Cfeed, isot, niteraciones)`
- b) Objeto: realiza la optimización de los parámetros de funcionamiento de un SMB conocidas las características del sistema (número y dimensiones de la columna, isoterma bi-Langmuir, porosidad), el caudal de alimentación y la composición de alimentación. El objetivo es la minimización del consumo de desorbente.
- c) Método: realiza la simulación directa del SMB, columna a columna, mediante el código auxiliar `smb_1000_bilangmuir` (ver más arriba, apartado 4.2.h). Optimización mediante simplex modificado (ver código auxiliar `simplex_002_bilangmuir`, en el apartado f).
- d) Datos.
  - i. `Qraffinate0, Qdessorbent0, Qextract0`: valores iniciales de los caudales en los cuatro puertos del SMB (datos positivos).
  - ii. `Qresidual0`: valor inicial del caudal en la zona II del SMB, entre el refinado y la entrada de desorbente.
  - iii. `Qfeed`: caudal de alimentación.
  - iv. `Cfeed`: vector con las concentraciones de las dos sustancias a separar en el puerto de alimentación.
  - v. `isot`: parámetros de la isoterma de adsorción, tipo bi-Langmuir.
  - vi. `ts`: valor inicial del tiempo de conmutación o *switch* del SMB.
  - vii. `niteraciones`: número de ciclos a simular.
- e) Parámetros a suministrar en el código.
  - i. `esc`: coeficiente de control de la inestabilidad numérica (0.8 por defecto). Para mejorar la estabilidad, debe reducirse.
  - ii. `posiciones`: vector fila de caracteres, uno por columna, que indica la configuración de las zonas del SMB. Los caracteres son "F", "R", "D", "E" para las primeras columnas tras los puertos de alimentación, refinado, desorbente y extracto, respectivamente; y "0" para el resto de columnas.
  - iii. `L`: longitud de la columna.
- f) Códigos auxiliares.
  - i. `simplex_002_bilangmuir(x0, Qfeed, Cfeed, isot, posiciones, niteraciones)`. Código de optimización mediante simplex modificado.

Puede modificarse la tolerancia en el valor de la función objetivo (1, por defecto). El valor del vector "posiciones" debe ser adaptado en cada caso en el código, como un vector fila de caracteres, uno por columna, que indica la configuración de las zonas del SMB. Los caracteres son "F", "R", "D", "E" para las primeras columnas tras los puertos de alimentación, refinado, desorbente y extracto, respectivamente; y "0" para el resto de columnas.

- ii. `smb_1000_bilangmuir(x,Qfeed,Cfeed,isot,posiciones,niteraciones)`: simula el SMB para cada evaluación de la función objetivo llevada a cabo por `simplex_002`. Utiliza el código `columna_001_tdm_g` para la simulación de las columnas. Ambos códigos deben ser adaptados con los parámetros del sistema (ver más arriba, apartados 1.3 y 4.2).

g) Output.

- i. Valor de los caudales en cada puerto del SMB.
- ii. Valor de los caudales en cada zona del SMB.
- iii. Valor mínimo logrado para la función objetivo.
- iv. Tiempo de conmutación o *switch*.

\* \* \*