

TESIS CON FALLA DE ORIGEN

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE QUIMICA

**CONSTRUCCION DE UN SIMULADOR
SIMULTANEO MODULAR
A PARTIR DE UN SIMULADOR
SECUENCIAL MODULAR**

TESIS MANCOMUNADA

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE

INGENIERO QUIMICO

PRESENTAN:

JUANA CECILIA GUADARRAMA ACOSTA

ANDRES MORONES LARA

México D.F.



1987.

EXAMENES PROFESIONALES
FACULTAD DE QUIMICA



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

CONSTRUCCION DE UN SIMULADOR SIMULTANEO MODULAR A PARTIR DE UN SIMULADOR SECUENCIAL MODULAR

OBJETIVO

RESUMEN

INTRODUCCION

I. GENERALIDADES

- 1.1 Simulación de procesos
- 1.2 Técnicas empleadas en simulación de procesos
 - 1.2.1 Simulación secuencial modular
 - 1.2.2 Simulación basada en ecuaciones
 - 1.2.3 Simulación simultánea modular
- 1.3 Optimización de procesos

II. CONSTRUCCION DEL SIMULADOR

- 2.1 Programa original
 - 2.1.1 Estructura inicial del simulador
 - 2.1.2 Métodos de convergencia lineal
- 2.2 Construcción del simulador simultáneo modular
 - 2.2.1 Subrutinas modificadas
 - 2.2.2 Nuevas subrutinas

III. MANUAL DE USUARIO

- 3.1 Datos generales
- 3.2 Datos de las corrientes
- 3.3 Datos de los equipos
 - 3.3.1 Generales
 - 3.3.2 Específicos

- 3.4 Simulación controlada
- 3.5 Propiedades termodinámicas
- 3.6 Secuencia y ciclos

IV. APLICACION DE SIMULADOR

- 4.1 Modalidades del programa
 - 4.1.1 Procesos de simulación simple
 - 4.1.2 Procesos con corrientes de recirculación
 - 4.1.3 Procesos con especificaciones de diseño
 - 4.1.4 Procesos con corrientes de recirculación y especificaciones de diseño
- 4.2 Planteamiento de los problemas
 - 4.2.1 Problema I-Aplicación de la opción SIMULA
 - 4.2.2 Problema II-Aplicación de la opción SIMCON
 - 4.2.3 Problema III-Aplicación de la opción SIMREC
 - 4.2.4 Problema IV-Aplicación de la opción SIMSIM

V. CONCLUSIONES

APENDICE

OBJETIVO

Se llevó a cabo esta tesis con la finalidad de proporcionar a los estudiantes de la Facultad de Química una herramienta adecuada para resolver problemas de simulación de procesos químicos en estado estacionario.

Además se presenta una breve semblanza de las técnicas más empleadas actualmente en el campo de la simulación y optimización de procesos, buscando con ello que los lectores de este trabajo se interesen en el desarrollo de un simulador que sea comercialmente competitivo, y con esto, ayudar al crecimiento de la Industria Nacional.

RESUMEN

Dentro del campo de la simulación de procesos químicos en estado estacionario, existen tres tipos de problemas que pueden presentarse: la simulación simple del proceso, en donde, dados los parámetros de los equipos y las condiciones de las alimentaciones, se calculan las características de todas las corrientes del sistema; la simulación controlada, en la que se buscan las condiciones de operación del sistema que permitan cumplir con algunas restricciones en los parámetros de los equipos o corrientes; y los problemas de optimización, consistentes en maximizar o minimizar alguna función objetivo, sujeta o no a restricciones, que conduzcan a las condiciones de operación y/o diseño que hagan más rentable el proceso bajo estudio.

En la actualidad, gran parte de los simuladores comerciales de procesos se basan en la técnica secuencial modular, sin embargo se han mostrado ineficientes en el estudio de problemas complejos, al consumir un excesivo tiempo de cómputo.

Por lo anterior, se han desarrollado otros tipos de simuladores: los simultáneos o basados en ecuaciones y los simultáneos modulares.

Los simuladores simultáneos son aquellos en los que todas las ecuaciones necesarias para describir el proceso se resuelven al mismo tiempo, presentándose la necesidad de disponer de un método muy poderoso para la solución de grandes sistemas de ecuaciones.

En los simuladores simultáneos modulares se realiza el

misao tiempo la convergencia de las variables de corte, las restricciones impuestas al proceso y/o la función objetivo, lográndose un importante ahorro en el tiempo de proceso. Este tipo de simuladores puede construirse en forma relativamente fácil a partir de los simuladores secuenciales modulares convencionales.

Dentro del presente trabajo se realizaron las modificaciones necesarias a un simulador secuencial modular existente para que éste pueda funcionar como simultáneo modular, denominando al nuevo programa, SIMULADOR.

SIMULADOR esta formado por un programa principal y cuatro conjuntos de subrutinas: el paquete termodinámico, los módulos de los equipos, los métodos de solución general y las subrutinas auxiliares.

Originalmente el programa contaba solamente con métodos de solución lineales (Sustituciones Sucesivas, Negstein Acotado, Negstein Modificado, Relajación Acotado y Relajación Modificado), y para introducir la nueva filosofía, además de modificar algunas de las subrutinas existentes, se implantó un método de solución multivariable a nivel proceso (Método de Broyden); con ello no solo se logró resolver procesos con corrientes de recirculación en menor tiempo, sino que también se pueden ahora atacar problemas de simulación controlada.

La información que SIMULADOR requiere para resolver un problema particular deberá ser suministrada conforme al manual de usuario que se incluye en este trabajo.

Considerando las recomendaciones señaladas en la literatura, y de acuerdo a la experiencia adquirida durante

el desarrollo de la tesis, se utilizó el nuevo programa sobre tres procesos con el fin de mostrar su uso y potencialidad.

Los resultados del estudio permitieron concluir que la técnica simultánea modular efectivamente reduce el tiempo de cómputo en los problemas de simulación controlada, y las ventajas de esta filosofía con respecto a la secuencial modular son más notables a medida que los sistemas bajo estudio crecen en complejidad.

INTRODUCCION

Actualmente se vive una época de crisis en la que el uso eficiente de los recursos económicos y energéticos es de primordial importancia, de aquí la necesidad de desarrollar programas soporte que permitan atacar la gran variedad de problemas que presenta la industria en general, buscando que sean eficientes, es decir, que consuman un tiempo de computo aceptable y que además sean fácilmente utilizados por personas que no tengan un conocimiento muy profundo de las técnicas computacionales involucradas en ellos.

En el caso de la Industria Química, estos programas soporte son los simuladores de procesos. El uso de un simulador puede hacer la diferencia entre un proceso que opere y un proceso que opere óptimamente.

Como se sabe, la mayoría de las industrias a nivel nacional operan con procesos obsoletos, desarrollados empíricamente sin perseguir el máximo aprovechamiento de los recursos; esto se debe a que las herramientas disponibles hasta ahora para la simulación y optimización de procesos químicos no han dado la suficiente confianza para ser utilizados, pues con problemas de relativa complejidad se consumen grandes cantidades de tiempo y dinero.

Ahora que México ha aceptado el reto de pertenecer al GATT, la Industria Nacional debe buscar, más que nunca, eliminar cuellos de botella e ineficiencias para poder competir en el mercado internacional. De ello se desprende la conveniencia de impulsar la investigación en este campo.

El presente trabajo busca establecer las bases para el

desarrollo de un simulador que supere cuando menos en algunas de sus limitaciones a los simuladores secuenciales, que son los comercialmente más empleados hoy en día.

Una breve descripción de los temas tratados en el mismo es la siguiente:

En el Capítulo I se tratan los diferentes problemas que pueden presentarse en la simulación de procesos, y se hace una descripción de la filosofía en que se basan las técnicas más empleadas para resolverlos, enfatizando sus ventajas y limitaciones. En este mismo capítulo se da una breve reseña del desarrollo del campo de la optimización de procesos.

En el Capítulo II se describe la estructura y funciones del simulador modular secuencial del que se partió, así como las modificaciones realizadas y las nuevas subrutinas implantadas en el simulador simultáneo modular actual.

En el Capítulo III se elaboró el manual de usuario que permite utilizar el programa en cualquiera de sus modalidades.

En el Capítulo IV se presentan los problemas con los cuales se analizó el comportamiento del programa y ejemplifican su uso.

En el Capítulo V se concluye acerca de los resultados obtenidos en el Capítulo IV; y finalmente en el apéndice se muestran algunos conceptos y aclaraciones que se consideraron un poco fuera del objetivo del trabajo pero que pueden ser útiles para una mayor comprensión del mismo.

CAPITULO I

GENERALIDADES

1.1 SIMULACION DE PROCESOS

La simulación de procesos es la actividad mediante la cual se busca representar el comportamiento de un proceso utilizando modelos matemáticos adecuados, bajo ciertas condiciones y alcances definidos previamente. En ella se identifican dos ramificaciones importantes: la simulación en estado estacionario y la simulación dinámica. La simulación en estado estacionario trata el comportamiento de un proceso a régimen permanente, en tanto que la simulación dinámica está enfocada principalmente al comportamiento de un proceso en el arranque, pero o condiciones de emergencia.

Dentro del campo de la simulación de procesos químicos en estado estacionario, existen básicamente cuatro tipos de problemas que pueden estudiarse: la simulación simple, la simulación de procesos con corrientes de recirculación, la simulación controlada y los problemas de optimización.

La simulación simple es el problema más elemental. Consiste en la obtención de las características de todas las corrientes del proceso, dada la información completa de las corrientes de alimentación y los parámetros necesarios de los equipos, por ejemplo, la presión a la que opera un recipiente en el cual se lleve a cabo una separación adiabática, la presión de descarga de una bomba, el número de platos de una torre de destilación, etc.; a esta información

de los equipos se les denomina especificaciones simples.

Cuando en el proceso se tiene algún ciclo formado por la presencia de corrientes de recirculación, el sistema no puede ser resuelto con una simulación simple, sino que debe hacerse en forma iterativa, suponiendo las características de una o más corrientes del ciclo (denominadas corrientes de corte). Una vez calculados todos los equipos comprendidos en el ciclo se tienen nuevos valores de las corrientes de corte, y el problema iterativo es resuelto cuando los valores generados y los supuestos son los mismos o muy cercanos.

Para la estimación de los nuevos valores del sistema iterativo se emplean métodos de solución de ecuaciones no acelerados (Sustitución Directa), de aceleración lineal (como el Método de Wegstein), o de aceleración multivariable (como el Método de Broyden).

Los problemas de simulación controlada del proceso, llamados también problemas de diseño, implican la búsqueda de las condiciones de operación (variables libres) que permitan satisfacer algunas restricciones en los parámetros de los equipos o las características deseadas en las corrientes de salida de ellos. A estas restricciones se les suele llamar especificaciones de diseño o parámetros de control, siendo algunos ejemplos de ellas el área efectiva de transferencia en un intercambiador de calor, el porcentaje de recuperación de un componente en alguna de las corrientes de salida de una columna de destilación, etc..

El cuarto problema que debe resolver un simulador es la

optimización del proceso, que consiste en establecer una función objetivo de algunas variables del sistema cuya maximización o minimización haga al proceso más rentable.

1.2 TÉCNICAS EMPLEADAS EN SIMULACION DE PROCESOS

El problema de la simulación de procesos radica esencialmente en la solución de un gran sistema de ecuaciones no lineales con las que se puede describir aproximadamente un proceso. En el sistema de ecuaciones se pueden distinguir de acuerdo a su función, cinco tipos de ecuaciones:

- i) Ecuaciones modelo, que incluyen los modelos de las operaciones unitarias y de propiedades termodinámicas.
- ii) Ecuaciones de conexión, que indican la forma en la que los equipos son conectados dentro del diagrama de flujo.
- iii) Especificaciones simples de los equipos.
- iv) Especificaciones de diseño del proceso.
- v) Función objetivo.

Las diferentes técnicas empleadas en la simulación de procesos difieren básicamente en la forma como resuelven este conjunto de ecuaciones, siendo las más conocidas actualmente: la simulación secuencial modular, la simulación simultánea modular y la simulación basada en ecuaciones.

1.2.1 Simulación secuencial modular

Este tipo de simuladores maneja las ecuaciones modelo como una "biblioteca" de módulos o subrutinas (procedimientos), en los que se ejecutan los cálculos correspondientes a una operación unitaria o a la estimación de un conjunto de propiedades. Las subrutinas de las operaciones unitarias están orientadas hacia la simulación, esto es, dados los valores para las variables que describen las corrientes de entrada, y los parámetros del equipo, las ecuaciones modelo son resueltas para las variables que definen las corrientes de salida.

Las ecuaciones de conexión se manejan implícitamente ya que el programa principal transfiere los valores de salida de cada módulo como entrada del siguiente, de acuerdo a la secuencia de solución de equipos que se le haya indicado al simulador en el archivo de entrada de datos.

Cuando se utiliza un simulador secuencial modular en la simulación de un proceso que tenga corrientes de recirculación, para iniciar los cálculos dentro del ciclo identificado se suponen las características de las corrientes de corte, y los módulos son entonces llamados en la secuencia indicada por las ecuaciones conectoras hasta que nuevos valores son generados para las corrientes seleccionadas; repitiéndose este procedimiento hasta lograr la convergencia del ciclo.

Una simulación con corrientes de recirculación implica la existencia de dos niveles de cálculo: el nivel modular,

en el cual se desarrollan los cálculos dentro de cada subrutina, y el nivel proceso en el que se hacen converger los valores de las corrientes seleccionadas. A diferencia de éstos, cuando se resuelve una simulación simple sólo se realizan cálculos a nivel modular.

En el caso de la simulación controlada, las variables de diseño no se manejan a nivel modular ya que no pueden ser alimentadas directamente a los módulos, ni tampoco a nivel proceso pues no tienen la forma $x=f(x)$, sino que generalmente se tienen como $x=\text{constante}$. Esto obliga a establecer un circuito externo a los otros dos niveles en el que se realicen simulaciones iterativas de todo el proceso hasta cumplir con la ecuación de diseño.

Los problemas de optimización requieren todavía de un nivel superior de cálculo en el que se encuentre la convergencia de la(s) función(es) objetivo que hayan sido introducidas.

Con el siguiente ejemplo se intenta aclarar la forma en que un simulador secuencial modular podría resolver cualquiera de los problemas anteriores.

La figura (1.1) muestra el diagrama de flujo de un sistema formado por cuatro unidades modulares. Dicho proceso puede ser descrito con cuatro ecuaciones modelo que representen las operaciones unitarias y las propiedades termodinámicas de las corrientes que entran a ellos

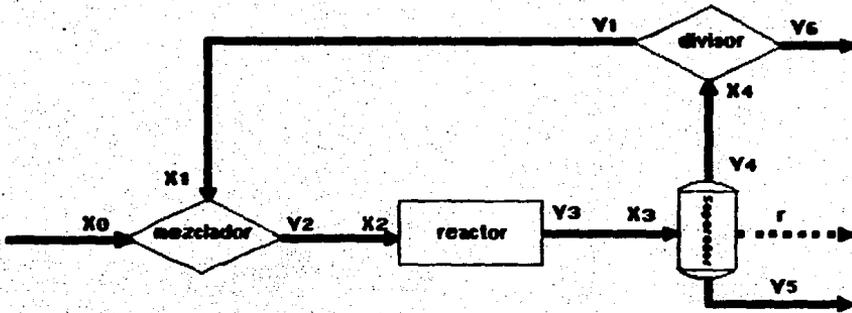


FIGURA 1.1 PROCESO PARA EJEMPLIFICAR LAS TECNICAS DE SIMULACION

$$y = g(x_2, x_0, x_1)$$

$$y = g(x_3)$$

$$y = g(x_4)$$

$$y = g(x_1)$$

(1.1)

cuatro ecuaciones conectoras,

$$x_2 = y_2$$

$$x_3 = y_3$$

$$x_4 = y_4$$

$$x_1 = y_1$$

(1.2)

una especificación de diseño

$$r(x_3) = R_3$$

(1.3)

y una función objetivo

$$B(x)_1 \quad (1.4)$$

en donde (r) representa una variable de salida del separador cuyo valor se especifica como (R) . Las $(y)_1$ son las variables de salida de cada equipo y las $(x)_1$ son las variables de entrada a ellos.

En un problema de simulación simple del proceso no existirían la ecuación $x = y$, ni las ecuaciones (1.3) y (1.4) por lo que sólo habría que resolver cada uno de los equipos de acuerdo a la secuencia del sistema.

Si el problema incluye corrientes de recirculación, las ecuaciones que se eliminan son ahora la (1.3) y (1.4), siendo necesario resolver el ciclo iterativo formado por las ecuaciones (1.2).

En el ejemplo de la figura (1.1), la selección de una sola corriente de corte es suficiente, quedando por determinar cuáles de las variables de la misma (temperatura, presión, flujo solar) se fijarán como variables de convergencia. Suponiendo en este caso que se escoja a la corriente 1 como corriente de corte, las variables que se podrían utilizar como variables de corte serían únicamente la temperatura, el flujo total de vapor o las composiciones en esta fase. El flujo total de líquido o sus composiciones no se podrían emplear para la corriente 1 debido a que ésta tiene las mismas características que la corriente 4 que sale del separador (en este caso la corriente 4 es vapor). La presión tampoco serviría como variable de convergencia al permanecer

este parámetro constante durante la solución.

Con los datos supuestos de las variables de corte se resuelven todos los equipos en la secuencia: mezclador, reactor, separador y divisor; generándose así los nuevos valores para las variables. Este ciclo se repite hasta que la prueba de convergencia para cada variable seleccionada sea satisfecha, es decir:

$$|x_1 - F(x_1)| \leq \xi \quad (1.5)$$

siendo x_1 el valor estimado de la variable para resolver el ciclo y $F(x_1)$ su valor calculado al finalizar la última simulación, ξ es la tolerancia máxima permitida y debe ser un número lo suficientemente pequeño que asegure un error despreciable en los resultados de la simulación. La ecuación (1.5) es una versión rearrreglada de las ecuaciones (1.2), si se hace $F(x_1) = y_1$.

Al introducir la ecuación (1.3) al sistema de ecuaciones no lineales a resolver, se habla de un problema de simulación controlada del proceso. Esto implica que una vez satisfecha la ecuación (1.5) se tiene que cumplir con la ecuación (1.6) en un circuito iterativo superior

$$|r(x_3) - R| \leq \delta \quad (1.6)$$

en donde δ , que es la diferencia máxima permitida entre el parámetro de control especificado y el calculado, generalmente es mayor que ξ , ya que no tiene sentido pedir una mayor exactitud en los cálculos del nivel

superior si en los interiores se permitió una mayor tolerancia.

Si además se deseara optimizar este proceso, buscando por ejemplo los flujos mínimos de la corriente de recirculación que cumplan con la ecuación de diseño especificada, habría que minimizar la ecuación (1.4) después de hacer converger los dos niveles de cálculo anteriores.

Como ya se había mencionado, los simuladores secuenciales modulares son los más utilizados en la industria. Las características que los han hecho populares son:

1. A nivel modular pueden utilizarse diversos algoritmos especializados en la solución de las ecuaciones modelo dentro de cada subrutina, por lo que los cálculos a este nivel pueden ser muy eficientes y confiables.
2. A nivel proceso puede utilizarse cualquier método de convergencia.
3. En los simuladores secuenciales modulares la información se maneja en una forma altamente estructurada y muy similar al flujo de materiales en el proceso, lo que permite entenderlos más fácilmente por el ingeniero, y rastrearlos en caso de fallas en la solución de algún problema.

Sin embargo, la simulación secuencial modular presenta dos grandes desventajas en cuanto a su eficiencia:

1. En los problemas de simulación de procesos se pueden

encontrar un gran número de circuitos de iteración anidados (debido al cálculo de propiedades termodinámicas, a los modelos de las operaciones unitarias o a las corrientes de recirculación), que están íntimamente relacionados, pero que debido a la estructura de esta clase de simuladores se tienen que ir resolviendo uno a uno de acuerdo a la topología que presenta el sistema. Esto provoca la repetición innecesaria de muchos cálculos y con ello la pérdida de eficiencia en el tiempo de cómputo.

2. Si a los circuitos anteriores se añade la problemática que representa el realizar las simulaciones iterativas de todo el proceso, para cumplir con los circuitos externos de control de las especificaciones de diseño y/o función(es) objetivo, se encuentra a la técnica secuencial definitivamente poco eficiente.

1.2.2 Simulación basada en ecuaciones

La técnica de simulación basada en ecuaciones consiste en resolver las ecuaciones con las que se describe un proceso, incluyendo ecuaciones modelo, de conexión, especificaciones de diseño y funciones objetivo, simultáneamente; aunque pueden encontrarse algunas variaciones como las propuestas por Stadtherr y Hilton (12), quienes plantean la posibilidad de manejar las ecuaciones modelo para la obtención de propiedades termodinámicas en subrutinas externas.

En el ejemplo mostrado por la figura (1.1), el utilizar la filosofía basada en ecuaciones consistiría en resolver al mismo tiempo las ecuaciones (1.1), (1.2), (1.3) y/o (1.4) dependiendo del tipo de problema.

El resolver simultáneamente la mayor parte de las ecuaciones, reduce los niveles de cálculo a uno solo, con lo que las especificaciones de diseño y/o las funciones objetivo consideradas ya no representan una carga extra importante al consumo de tiempo de cómputo. Es por ello que esta técnica tiene un gran potencial en la solución de los problemas de simulación controlada y optimización.

Hoy en día existen cinco desarrollos comerciales de este tipo de simulador (1): SPEEDUP (Perkins y Sargent en 1982), ASCEND II (Locke y Westerberg en 1982), QUASILIN (Gorczyński y Col. en 1979), FLOWSIM (Schacham y Col. en 1982), y SEQUEL (Stadtherr y Hilton en 1982).

En comparación con la simulación secuencial modular, la técnica basada en ecuaciones es más rápida y flexible, lo cual se hace más notorio en procesos cada vez más complejos. Sin embargo, esta técnica no se ha considerado lo suficientemente confiable debido en parte a que se requiere suministrar buenos estimados iniciales para alcanzar la convergencia, y además, todavía no se dispone de métodos de solución generales capaces de desplazar a los de propósitos particulares utilizados a nivel modular en un simulador secuencial modular.

Otros inconvenientes de menor importancia son: la necesidad de una gran capacidad de memoria (por el tamaño de

las matrices construidas), la complejidad de las subrutinas de solución de ecuaciones y la alta probabilidad de introducir especificaciones inconsistentes, siendo difícil la búsqueda de errores.

No obstante, algunos de los simuladores de este tipo ya incluyen subrutinas de inicialización automática y actualmente se siguen desarrollando técnicas numéricas de propósitos generales más poderosas para hacer de esta técnica en un futuro próximo la herramienta más eficiente en simulación de procesos.

1.2.3 Simulación simultánea modular

La filosofía simultánea modular puede pensarse como el producto de la combinación de las mejores características tanto de los simuladores secuenciales modulares como de los basados en ecuaciones.

Aunque algunas veces este enfoque ha sido considerado como un concepto diferente de convergencia en un simulador secuencial modular, la mayoría de los especialistas en este campo lo identifican como una técnica diferente.

Bajo la técnica simultánea modular, se manejan dos niveles únicos de cómputo: el nivel modular que utiliza los métodos de solución de propósitos particulares para obtener las condiciones de cada uno de los equipos, y el nivel proceso que resuelve con un método de propósitos generales las ecuaciones de convergencia de las variables de corte, las de las especificaciones de diseño y/o las funciones objetivo.

Retomando el problema de la figura (1.1); en caso de

resolver una simulación simple, las ecuaciones (1.1) y (1.2) serían resueltas exclusivamente en el primer nivel (sin considerar la ecuación $x_1 = y_1$); en tanto que si se tratase de cualquiera de los otros problemas, las ecuaciones que involucrarían serían resueltas en el segundo nivel.

En este método se identifican como principales ventajas las siguientes:

1. Cuenta con dos únicos niveles de cómputo en los que se absorben todos los ciclos iterativos que pudiera presentar cualquier problema de simulación, lo que reduce considerablemente el tiempo de cómputo en los problemas de simulación controlada y optimización.
2. La gran cantidad de paquetería a nivel modular que existe puede ser aprovechada, por lo que no se requiere una inversión inicial en este concepto, e inclusive los simuladores secuenciales modulares utilizados actualmente pueden ser reestructurados para funcionar bajo la filosofía simultánea modular.
3. El Jacobiano aproximado a nivel proceso que requiere la aplicación de la técnica simultánea modular es mucho más pequeño que el que se construye en la simulación basada en ecuaciones, por lo que la capacidad de memoria requerida es menor.

Sin embargo esta técnica, como las descritas anteriormente, presenta algunas desventajas como son:

1. Al igual que en la simulación basada en ecuaciones, la simulación simultánea modular requiere de un método poderoso de solución de ecuaciones no lineales.

2. Los métodos de solución generales que comúnmente emplean son alguna variación del método de Newton-Raphson para los cuales son necesarios buenos procedimientos de inicialización de variables.
3. A pesar de presentar una rapidez de convergencia mayor que el secuencial modular, estos simuladores pueden consumir más tiempo de proceso por iteración, debido a la construcción del Jacobiano.

Estas desventajas, se vuelven menos trascendentes a medida que la complejidad del sistema es mayor.

De acuerdo a las características descritas para cada técnica de simulación, se puede concluir que los simuladores secuenciales modulares son obsoletos para las necesidades actuales de ahorro de dinero y energía; los simuladores basados en ecuaciones serán posiblemente utilizados en el futuro ya que todavía no se cuenta con métodos de solución de ecuaciones lo suficientemente poderosos como para resolver cualquier sistema; y finalmente, los simuladores simultáneos modulares resultan ser hoy en día la técnica más atractiva y práctica puesto que eliminan muchas de las limitaciones de los secuenciales modulares, además de que pueden ser contruidos con una pequeña inversión de tiempo y dinero a partir de éstos.

1.3 OPTIMIZACION DE PROCESOS

Antes de proceder a describir los cambios que involucró el implementar un simulador simultáneo modular a partir de uno

secuencial, se mostrará en seguida una breve descripción del desarrollo del campo de la optimización de procesos, con el objeto de orientar un trabajo posterior que incluya en el nuevo simulador la posibilidad de resolver este tipo de problemas.

La simulación de procesos es en la actualidad usada por la industria con relativa frecuencia, en tanto que la optimización de procesos pocas veces se utiliza. Las razones de ello han sido discutidas por Westerberg (14) y Blau (4), resumiéndose en lo siguiente:

- El principal problema se presenta con el uso un simulador secuencial modular típico, pues la optimización de procesos con ellos puede resultar computacionalmente cara y consumir mucho tiempo real.
- Es difícil en optimización de procesos seleccionar una sola función objetivo a maximizar o minimizar ya que generalmente existen varias funciones objetivo que compiten entre sí, y dado que la optimización de un proceso para una sola función objetivo es cara, puede haber serias limitaciones en considerar otras funciones objetivo que permitan representar adecuadamente el problema que se quiere resolver.
- Otro inconveniente se presenta en el manejo de las herramientas disponibles para optimización por el ingeniero promedio, debido a que requieren de algunos conocimientos especializados acerca de su funcionamiento.
- Finalmente, está el problema de la falta de apoyo de los empresarios hacia el desarrollo de las técnicas de

optimización, pues prefieren utilizar un diseño que ha sido probado prácticamente, aún cuando no sea el óptimo, en lugar de invertir tiempo y dinero en su optimización.

De lo anterior se aprecia la importancia de desarrollar una estrategia de optimización de procesos que elimine en el mayor grado posible estas limitaciones, y que sea tanto confiable como fácil de entender y utilizar.

Jirapongphan elaboró una lista exhaustiva del trabajo que ha sido realizado hasta 1980 en optimización de procesos (9). Básicamente los primeros intentos para aplicar técnicas de optimización caen dentro de dos categorías.

En la primera de ellas, los procesos químicos son representados por modelos simplistas que permiten reducir el tiempo de cómputo; sin embargo, con simplificaciones tan drásticas no puede esperarse que los resultados sean muy representativos del problema real.

En la segunda categoría, un ciclo de optimización se implementa en los simuladores secuenciales modulares para considerar los grados de libertad aumentados y las especificaciones de diseño. Durante la evaluación de la función objetivo en el ciclo de optimización, el simulador secuencial modular debe resolver el problema entero varias veces, siendo los modelos empleados en esta categoría más realistas, aunque ello involucra, como ya se mencionó anteriormente, mayores tiempos de cómputo.

Para dar una idea de esto, una simulación de procesos típica consume uno o más minutos de tiempo de procesamiento, cuando esto se multiplica por los varios cientos de simulaciones que se requieren para un estudio de optimización promedio, se aprecia lo prohibitivo que puede llegar a ser el utilizar estos simuladores.

En la actualidad, el interés por la optimización de procesos ha ido creciendo, estimulado por los avances en algoritmos de programación no lineal, en particular por el algoritmo de programación cuadrática sucesiva (SQP) desarrollado por Wilson en 1963, mejorado por Han de 1976 a 1977 y posteriormente mejorado por Powell en 1978 que ha demostrado ser muy efectivo.

Este algoritmo denominado como el "SQP de Han-Powell" ha sido extendido para resolver problemas de programación no lineal en simuladores simultáneos modulares (2) y (3), y en simuladores basados en ecuaciones (1) y (10), mostrando una gran efectividad.

CAPITULO II

CONSTRUCCION DEL SIMULADOR

2.1 PROGRAMA ORIGINAL

Del trabajo desarrollado por Chapela, Lozada y Medina (5), se obtuvo el programa base para realizar el trabajo experimental de esta tesis. Este simulador, el cual es del tipo secuencial modular, no es capaz de resolver problemas de simulación controlada en forma eficiente, además de que consume mucho tiempo en la solución de procesos con varias recirculaciones. Las modificaciones hechas en este simulador están orientadas a eliminar estos problemas.

El nuevo simulador, al que se denominó SIMULADOR, fue construido después de realizar un estudio comparativo entre las diferentes filosofías dentro de la simulación (ver Capítulo I), encontrándose que la orientación simultánea modular era la más práctica y útil.

A continuación se hará una breve descripción de la estructura del simulador original, así como de los cambios que se hicieron al programa para construir a SIMULADOR.

2.1.1 Estructura inicial del simulador

El programa de simulación del que se partió para construir a SIMULADOR estaba formado por un programa principal y una serie de subrutinas o módulos (ver figura 2.1), los cuales pueden agruparse en cinco conjuntos:

a) Paquete termodinámico: comprende a los módulos encargados

de calcular las propiedades de cada fluido existente en el proceso.

- b) Equipos: agrupa a las subrutinas que contienen a las ecuaciones que describen a cada uno de los equipos y a sus métodos particulares de solución.
- c) Sistemas de solución general: comprende a las subrutinas encargadas de resolver sistemas de ecuaciones a nivel proceso.
- d) Auxiliares: agrupa a los módulos encargados de leer y construir los archivos de información de los compuestos químicos, corrientes y equipos del proceso, así como los módulos de impresión de resultados.
- e) Programa principal: coordina el llamado de las subrutinas necesarias para resolver el problema en estudio.

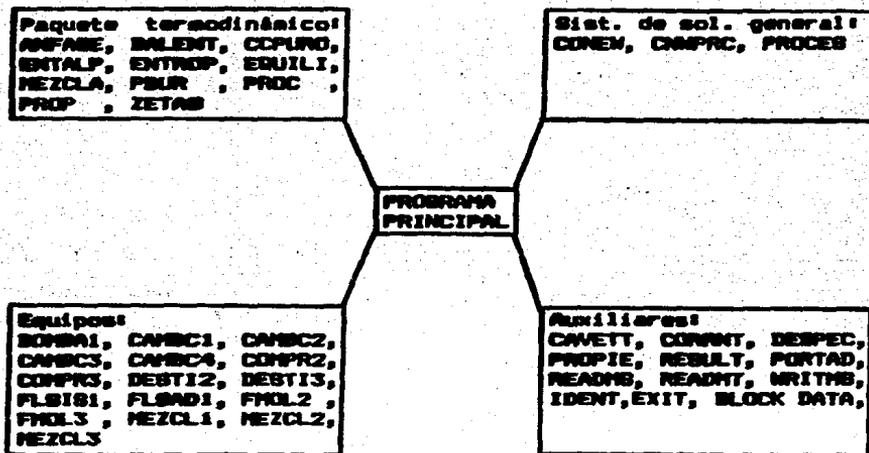


FIGURA 2.1 ESTRUCTURA INICIAL DEL SIMULADOR

El funcionamiento de la mayoría de las subrutinas se conservó en el nuevo programa, por lo que la descripción que se hace de ellas a continuación aplicará también para SIMULADOR, y sólo en aquellos módulos en los que se hicieron cambios serán nuevamente descritos más adelante.

Estado termodinámico

ANFABE

Calcula el estado físico y composición en cada fase de la corriente en estudio, resolviendo el problema de vaporización isotérmica.

BALENT

Calcula el estado físico, composición en cada fase y temperatura de la corriente en estudio, resolviendo el problema de vaporización adiabática.

ENTROP

Calcula el estado físico, composición en cada fase, temperatura, entalpia y entropía total del fluido bajo estudio, mediante el problema de vaporización isentrópica.

PBUR

Calcula la temperatura de burbuja del fluido en estudio.

PROC

Calcula la temperatura de rocío de un fluido.

ENTALP

Aplica las ecuaciones de estado termodinámicas implantadas en el simulador para la obtención de la entalpía del fluido considerado.

EQUILI

Calcula las constantes de equilibrio líquido-vapor no ideales, como el cociente de fugacidades de líquido y vapor.

PROP

Evalúa la entropía y la entalpía de una fase dada la temperatura, presión, composición y la fase de que se trata.

ZETAG

Calcula los valores de los factores de compresibilidad del líquido y vapor.

MEZCLA

Obtiene los coeficientes de mezcla de la ecuación de estado.

CCPURO

En esta subrutina se obtienen las constantes características para las ecuaciones de estado de cada componente químico.

Equinos

CANBC1

Cálculo de un cambiador de calor entre dos corrientes de proceso, con varias opciones de cálculo.

CAMBC2

Cálculo del calentamiento o enfriamiento de una corriente de proceso, generando la curva Q vs. T correspondiente.

CAMBC3

Cálculo de un cambiador de calor entre una corriente de proceso y una corriente de servicio cuya temperatura se considera constante, siendo el producto del coeficiente global por el área de transferencia de calor conocido.

CAMBC4

Cambiador de calor entre dos corrientes de proceso siendo el producto del coeficiente global por el área de transferencia de calor conocido.

DESTIL2

Resuelve torres de destilación que no tengan compuestos cuyos puntos de ebullición sean muy diferentes.

DESTIL3

Resuelve absorbedores y torres de destilación con compuestos cuyos puntos de ebullición son muy diferentes.

COMPR2

Resuelve compresores o expansores adiabáticos en forma rigurosa.

COMPR3

Resuelve compresores o expansores adiabáticos en forma aproximada.

BOMBA1

Realiza la simulación de una bomba.

FLSIS1

Resuelve el problema de vaporización isotérmica de una corriente.

FLSAD1

Resuelve el mezclado adiabático de varias corrientes de proceso, o simula una válvula de expansión cuando se especifica una sola corriente de entrada.

MEZCL1

Mezcla de varias corrientes de proceso para formar una sola corriente, que puede ser mezcla líquido-vapor, líquido o vapor.

MEZCL2

Divide proporcionalmente una corriente en varias.

MEZCL3

Separa una corriente en dos, una con la parte líquida y otra con la parte vapor.

Auxiliares

BLOCK DATA

Contiene el nombre de todos los módulos de equipos que integran al simulador, así como los nombres de las subrutinas que el usuario puede utilizar en caso de que desee crear un nuevo módulo de equipo.

CAVETT

Permite la generación de propiedades de los pseudocomponentes utilizando el procedimiento de Cavett.

CORRNT

Realiza la lectura de los datos sobre las características de las corrientes que forman el proceso para construir el archivo 58 (CORRIENTES), y la matriz de las corrientes de corte.

DESPEC

Realiza la lectura de datos acerca de las características de los equipos que forman el proceso para construir el archivo 59 (EQUIPOS).

EXIT

Finaliza la ejecución del programa.

IDENT

Ordena la ejecución de la subrutina correspondiente al equipo en turno.

PORTAD

Imprime la portada de resultados de la simulación.

PROPIE

Lee los índices que identifican a los componentes químicos que intervienen en el proceso para: (a) efectuar la lectura de sus propiedades del archivo de datos PROPIEIDADES, (b) pedir la generación aproximada de algunas de ellas en caso de tratarse de un pseudocomponente o, (c) leer las propiedades

suministradas externamente por el usuario.

READMS

Lee la información característica de cada corriente del archivo CORRIENTES, o los parámetros de cada equipo del archivo EQUIPOS.

READMT

Lee las propiedades de los compuestos químicos almacenados en el archivo 52 (PROPIEDADES), el cual es un banco de datos de propiedades de componentes puros.

RESULT

Imprime los resultados finales sobre las características de todas las corrientes del proceso.

WRITMS

Escribe la información característica de cada corriente en el archivo CORRIENTES una vez que se resuelve cada equipo, o los parámetros de los equipos en EQUIPOS.

Sistemas de solución generales

CONEN

Coordina la solución de circuitos iterativos a nivel proceso mediante métodos de convergencia lineales (ver sección 2.1.2).

CNNPRC

Actualiza todas las características de una corriente después de haberse modificado alguna de sus propiedades durante la

aplicación de un método de aceleración lineal en los circuitos de iteración.

PROCES

Ordena la ejecución de las subrutinas de los equipos que forman los ciclos de iteración y calcula los errores máximos permisibles para cada variable de corte.

En la siguiente sección serán tratadas con mayor detalle las características de este último conjunto de subrutinas por ser la parte del programa original que se modificó en mayor proporción.

2.1.2 Métodos de convergencia lineal

Cuando en un sistema se presenta la necesidad de resolver un circuito iterativo impuesto por la presencia de corrientes de recirculación, se requiere del suministro de estimaciones iniciales de algunas de las variables de proceso pertenecientes a las corrientes de corte.

Con las estimaciones iniciales se obtienen las características del resto de las corrientes del proceso, y también nuevos valores para las variables de corte. El problema es resuelto completamente una vez que los valores calculados y los supuestos son aproximadamente iguales.

Sería impráctico que un usuario, aún siendo una persona con bastante experiencia, proporcione externamente los estimados de las variables para realizar cada nueva iteración; por ello internamente se establecen los nuevos estimados para evaluar una vez más el circuito a partir de

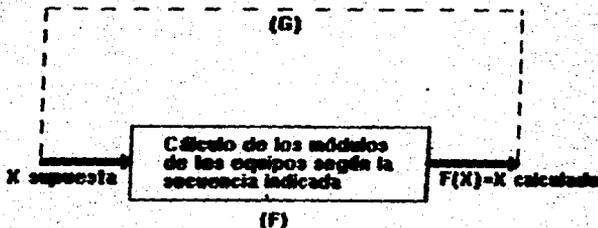
los valores obtenidos previamente, es decir, el nuevo valor de la variable se obtiene como

$$x(k+1) = G(x(k), F(x(k))) \quad (2.1)$$

donde $x(k)$ es el último estimado de la variable de corte, $F(x(k))$ el último valor calculado de x , y G es la función que emplea el método de convergencia para generar el nuevo valor de la variable, $x(k+1)$.

En la figura (2.2) se muestran las partes de las que consta un circuito de convergencia.

METODO DE CONVERGENCIA



X - Variable de corte

FIGURA 2.2 PARTES DE UN CIRCUITO DE CONVERGENCIA

Los métodos de solución a nivel proceso con los que contaba el simulador inicialmente son: Sustituciones Sucesivas, Wegstein Acotado, Wegstein Modificado, Relajación Acotado y Relajación Modificado. Todos ellos son métodos univariabes pues estiman los nuevos valores de las variables seleccionadas como si estas fueran independientes,

despreciando el efecto que ellas puedan tener entre sí.

Sustituciones Sucesivas

El más empleado, pero no necesariamente el más efectivo de estos métodos es el de Sustituciones Sucesivas. La idea básica detrás de esta técnica es utilizar el valor calculado como la nueva estimación de la variable, por lo tanto, la función $G(x(k), F(x(k)))$ en este caso es igual a $F(x(k))$, es decir,

$$x(k+1) = F(x(k)) \quad (2.2)$$

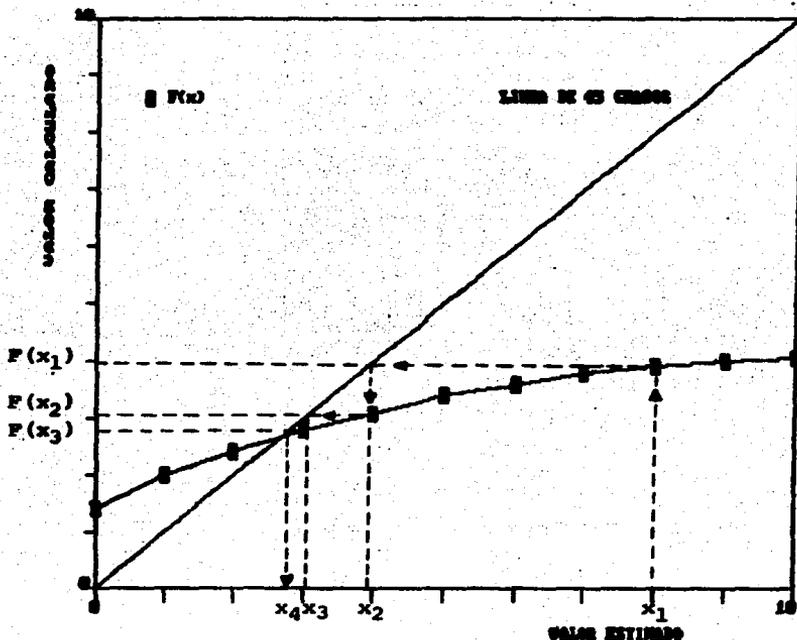


FIGURA 2.3 CONVERGENCIA POR SUSTITUCIONES SUCESIVAS

En la figura (2.3) se indica la forma en que se alcanza la convergencia por este método.

La naturaleza de la función $F(x)$, influye directamente en las propiedades de convergencia del método. Se ha demostrado que es la pendiente de la curva $F(x)$, en la región comprendida entre el estimado inicial $x(0)$ y la solución x^* , la que determina la convergencia del método (13).

Si el valor absoluto de la pendiente de $F(x)$ en esta región, dF/dx , es menor a la unidad, entonces se alcanzará la convergencia, lo contrario sucede si dF/dx es mayor a la unidad (ver figura 2.4).

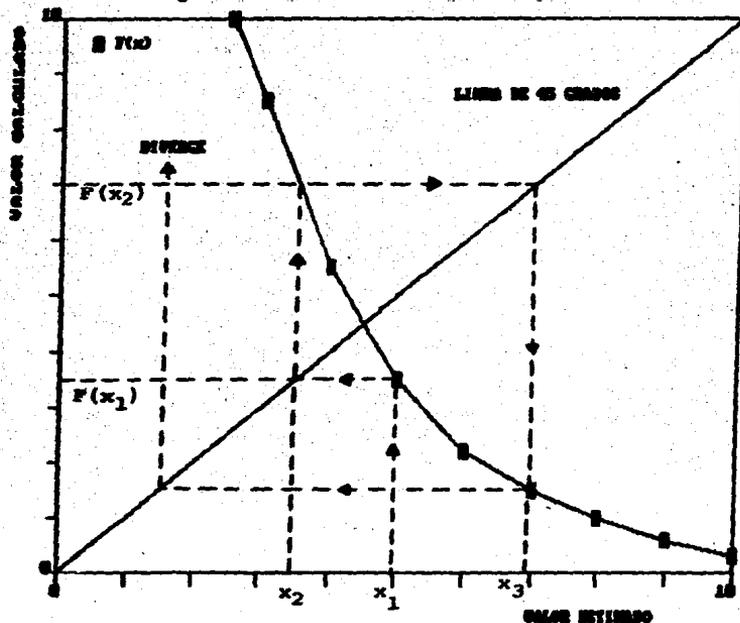


FIGURA 2.4 PROBLEMAS DE CONVERGENCIA EN SUSTITUCIONES SUCCESIVAS

Sin embargo, dado que la forma de la función no se conoce, el método no permite saber si la convergencia será alcanzada o no; por ello se desarrollaron otros métodos que utilizan una aproximación de la pendiente de $F(x)$. De estos métodos, el más utilizado es el Wegstein Acotado.

Wegstein Acotado

El método de Wegstein se basa en el uso de dos puntos (generalmente el resultado de las dos últimas iteraciones), para generar la ecuación de una recta, y predecir el siguiente valor de la variable de corte.

El método requiere de que por lo menos las dos primeras iteraciones sean realizadas por Sustituciones Sucesivas. Tal como está implantado en el simulador, el método descarta la primera iteración, de manera que se realizan tres iteraciones con Sustituciones Sucesivas y la cuarta estimación ya se obtiene por extrapolación lineal. En este caso la función $G(x(k), F(x(k)))$ tiene la forma

$$x(k+1) = F(x(k)) + Q[x(k) - F(x(k))] \quad (2.3)$$

donde

$$Q = \frac{W}{W - 1} \quad (2.4)$$

$$W = \frac{F(x(k)) - F(x(k-1))}{x(k) - x(k-1)} \quad (2.5)$$

es decir, W es la pendiente de la línea que une los puntos correspondientes a las iteraciones k y $k-1$. La deducción de la ecuación (2.3) se encuentra en el apéndice, y en la figura (2.5) puede apreciarse la forma como se alcanza la convergencia por este método.

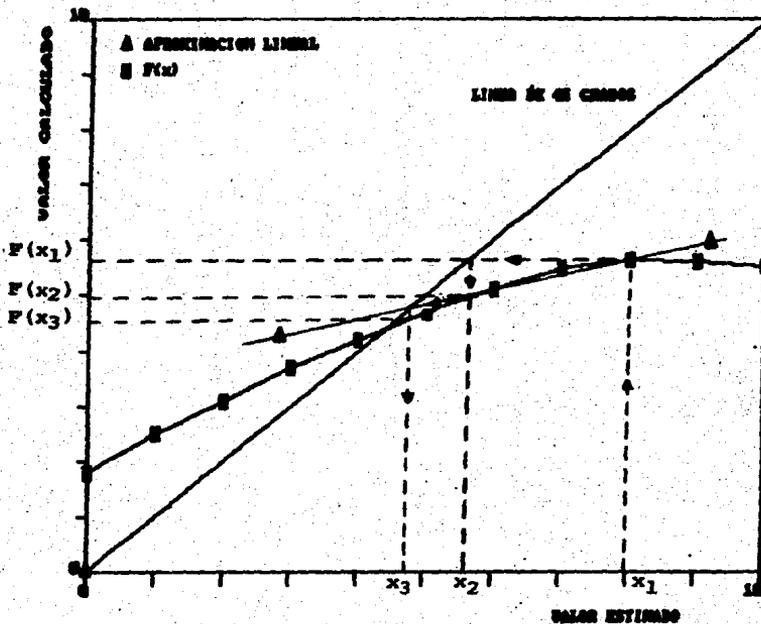


FIGURA 2.5 CONVERGENCIA POR EL METODO DE WEGSTEIN

Analizando las ecuaciones anteriores, se puede deducir que:

- Si $Q < 0$, esto es, si la pendiente se encuentra en el intervalo $0 < W < 1$, se acelera la convergencia.
- Si $Q = 0$, la pendiente será muy cercana a cero y el método de Wegstein arroja los mismos resultados que las Sustituciones Sucesivas.
- Si $0 < Q < 1$, el nuevo valor que se asigna a la variable de corte está entre el valor supuesto y el calculado.

-- Si $Q = 1$, la pendiente toma valores absolutos muy grandes y la convergencia puede retardarse considerablemente pues el valor de la variable de corte, de iteración a iteración, es prácticamente el mismo.

-- Si $Q > 1$, el sistema diverge.

El análisis anterior ha originado que frecuentemente se fijen de antemano límites aceptables para el parámetro Q , dando lugar al método de Wegstein Acotado.

En este método se establecen un límite positivo α y un límite negativo $-\beta$, de tal forma que si se obtiene un valor de Q mayor a α , entonces se utiliza α en lugar del valor obtenido, y si se obtiene un valor de Q menor a $-\beta$ entonces se tome este límite en lugar del valor calculado. Estos límites son seleccionados empíricamente, siendo los fijados en el simulador de 0 y 5 para α y $-\beta$ respectivamente.

Los valores pueden ser modificados y observar lo que ocurre con la convergencia.

Wegstein Modificado

Esta opción permite modificar las cotas de Q a criterio del usuario para buscar una mayor rapidez en la convergencia. Además le permite indicar el número de Sustituciones Sucesivas que desee se lleven a cabo entre cada aceleración de Wegstein. Las modificaciones al método pueden resultar de gran utilidad si el problema bajo estudio presenta un alto grado de oscilación.

Relajación Escalada

Este método, al igual que el de Wegstein, estima el valor de la variable para la siguiente iteración por medio de una extrapolación lineal, es decir, la forma de $G(x(k), F(x(k)))$ sigue siendo la de la ecuación (2.3).

El método de Relajación reduce la aceleración haciendo más pequeña la perturbación de la variable respecto a lo que propone el método de Wegstein. El valor de Q se obtiene como se indica en seguida

$$Q = \begin{cases} \frac{Q_{\min} W}{1 - Q_{\min}(1-W)} & \text{si } W < 1 \\ 0.5 & \text{si } W = 1 \\ \frac{Q_{\max} W}{1 + Q_{\max}(W-1)} & \text{si } W > 1 \end{cases} \quad (2.6)$$

siendo W la pendiente de la línea que une los puntos correspondientes a las iteraciones k y $k-1$ (ecuación 2.5).

El método también está protegido por la imposición de cotas al valor de Q que ayuden a alcanzar una convergencia adecuada, siendo los valores de α y $-\beta$ en este caso de 6 y 5 respectivamente.

Relajación Modificado

Los valores de Q_{\min} y Q_{\max} pueden ser modificados a criterio del usuario, buscando aumentar la rapidez de convergencia en un problema particular. Así mismo, puede indicarse un número determinado de Sustituciones Sucesivas entre las aceleraciones con lo cual pueda lograrse una mayor

estabilidad en la solución del problema.

Generalmente en los casos para los cuales el método de Hegstein es eficiente, es casi seguro que el método de Relajación será más lento pues tendrá que hacer más iteraciones para obtener los mismos resultados.

Criterios de convergencia

El criterio de convergencia a satisfacer en la subrutina CONEV para que el sistema pueda salir del circuito iterativo es independiente del método univariable seleccionado, y éste consiste en lograr que cada variable de corte cumpla con la siguiente desigualdad

$$\left| F(x_1(k)) - x_1(k) \right| < E_1(k) \quad (2.7)$$

en donde $E_1(k)$ es la diferencia máxima permisible entre el valor supuesto de la variable de corte $x_1(k)$ y su valor calculado $F(x_1(k))$ en la k -ésima iteración. Esta diferencia o error máximo permisible varía dependiendo del tipo de variable de corte y se calcula como se indica a continuación:

- Si $x_1(k)$ es la temperatura de la corriente de corte,

$$E_1(k) = \xi 100.0 \quad (2.8)$$

- Si $x_1(k)$ es la carga térmica, flujo de líquido o flujo de vapor de la corriente de corte, entonces

$$E_1(k) = \xi F(x_1(k)) \quad (2.9)$$

siendo ξ un número fraccionario alimentado por el usuario al simulador con el nombre de EKONEW (ver sección 3.1).

Las subrutinas CONEW, CNWPRC y PROCES fueron diseñadas exclusivamente para resolver circuitos de iteración impuestos por las corrientes de recirculación, pero no los formados con las especificaciones de diseño, por lo que no permiten la solución de problemas de simulación controlada.

De igual forma, el programa principal y algunos de los módulos de los equipos carecían de la estructura adecuada para manejar esta clase de problemas. De ello surge la necesidad de readaptar el simulador antes de introducir los cambios de fondo en el funcionamiento del mismo.

2.2 CONSTRUCCION DEL SIMULADOR SIMULTANEO MODULAR

De acuerdo a la filosofía bajo la que operan los simuladores simultáneos modulares en la solución de problemas de simulación controlada, las únicas diferencias que presentan con respecto a los secuenciales modulares estriban básicamente en el manejo de la información de los equipos y en la introducción de una ecuación más por cada especificación de diseño al sistema de ecuaciones a nivel proceso.

Las nuevas funciones provocan en la mayoría de los casos grandes problemas de eficiencia a los métodos de solución univariados, debido a que no se cumple la consideración de nula existencia de interacción entre las variables de corte y las especificaciones de diseño.

Si a este problema se añade la alta dependencia que existe entre las variables de corte cuando se analizan procesos con

múltiples corrientes de recirculación, se hace patente la necesidad que tienen los simuladores simultáneos modulares de contar con un método de solución de ecuaciones multivariable que considere tales interrelaciones.

Actualmente se pueden encontrar muchos métodos de este tipo en la literatura, ejemplos de ellos son: el método de Newton, el método de Broyden, de Brown, Híbrido de Powell, etc.; pero ninguno de ellos puede considerarse como el más rápido o el más confiable, pues cada uno de ellos tiene sus propias limitaciones (alto consumo de tiempo de proceso, requerimiento de muy buenas estimaciones iniciales, escalamiento de las variables, etc.), como lo han demostrado los estudios comparativos de varios investigadores al respecto (11). Por lo tanto, el hablar de seleccionar el "mejor" método para SIMULADOR es muy relativo.

Sin embargo, el método más empleado en este tipo de problemas es el de Broyden (11), del cual se encontró bastante información en la literatura, además de que para utilizarse no se requiere de conocimientos matemáticos muy sofisticados, por lo que para los fines de este trabajo se consideró aceptable. En el apéndice se ha incluido el algoritmo original propuesto por Broyden para resolver sistemas de ecuaciones no lineales.

A continuación se indican las modificaciones realizadas sobre el programa original.

2.2.1 Subrutinas modificadas

Al introducir en el simulador secuencial modular existente la posibilidad de resolver problemas de simulación controlada, se presenta la necesidad de modificar algunas de las subrutinas y el programa principal, de tal forma que puedan manejar la nueva información y a su vez, conserven la opción de funcionar bajo su filosofía original.

Programa Principal

En SIMULADOR se resolverán cuatro tipos de problemas diferentes (ver Capítulo IV), y es en esta parte del programa donde se lee la palabra clave que identificará la modalidad a utilizar en la solución del problema particular.

Una vez introducida esta palabra clave, se realizarán las siguientes actividades:

- A) Lectura de los datos generales del problema requeridos por la modalidad indicada.
- B) Lectura de la información de las corrientes, equipos y componentes químicos del proceso bajo estudio.
- C) Lectura de la secuencia de solución y ciclos de iteración.
- D) Estudio de las corrientes de alimentación para su caracterización.
- E) Inicio del proceso de solución mediante el siguiente algoritmo:
 - (1) Identifica si el equipo en turno pertenece a algún ciclo iterativo, con lo que:
 - Si no pertenece a ninguno, manda resolver el equipo y pasa al punto (2).

- Si pertenece a un ciclo con especificaciones de diseño, identifica a los equipos comprendidos en el ciclo y lo transfiere para su solución al módulo SIMULT. Si encuentra la solución del problema pasa a (2), pero si no es así, finaliza la corrida.
- Si pertenece a un ciclo con corrientes de recirculación y se indicó la opción de utilizar un método univariable, identifica a los equipos comprendidos en el ciclo y lo transfiere al módulo CONEW para su solución. Al finalizar pasa a (2).
- Si pertenece a un ciclo con corrientes de recirculación, y se ha indicado la opción de resolverlo con el método de Broyden, identifica a los equipos comprendidos en el ciclo, manda generar sus valores iniciales a CONEW y lo resuelve en SIMULT. Después de resolverlo pasa al punto (2), pero si los valores iniciales no fueron lo suficientemente buenos, regresa a CONEW a depurarlos.
- Si pertenece a un ciclo con corrientes de recirculación y especificaciones de diseño, identifica a los equipos comprendidos en el ciclo, ordena la generación de los valores iniciales de las variables de corte en CONEW, y lo resuelve en SIMULT. Cuando los valores iniciales de las variables de corte no son lo suficientemente buenos, regresa a CONEW a generar nuevos valores. Una vez resuelto el ciclo pasa al punto (2).

(2) Prueba si con el equipo en turno finaliza la

secuencia de cálculo del proceso. Si esto ocurre, el programa manda imprimir los resultados de todas las corrientes y termina la corrida; en caso contrario regresa al punto (1).

DESPEC

En la subrutina DESPEC se leen los parámetros característicos de los equipos, los cuales son almacenados en el archivo EQUIPOS; aquí se leerá también la información necesaria para resolver los problemas de simulación controlada y serán construidas las matrices de los ciclos de control.

CONEV

Este módulo seguirá resolviendo los circuitos iterativos forrados con corrientes de recirculación, mediante el uso de los métodos de solución univariables; además, cualquiera de estos métodos podrá ser utilizado en la generación de valores iniciales para las variables de corte.

La subrutina podrá recibir los valores de las variables de corte que no hayan servido como estimaciones iniciales para continuar con la aplicación del método univariable tantas veces como sea necesario hasta mejorarlas o resolver el problema aquí mismo.

Puede también entrarse al módulo con el propósito de modificar los valores de las variables de corte con el fin de romper algún ciclo iterativo de la subrutina SIMULT en el que se haya caído.

EQUIPOS

Por último se hicieron modificaciones a algunos módulos de los equipos con el objeto de aumentar el número de parámetros que el usuario pueda utilizar como especificaciones de diseño.

Una vez preparado el terreno en el simulador existente para aceptar la nueva filosofía, se procederá a describir las nuevas subrutinas.

2.2.2 Nuevas subrutinas

Las innovaciones al simulador se concentran en tres subrutinas: la más importante llamada SIMULT, y dos secundarias que le sirven de herramientas, JACOB y ACTUAL.

SIMULT

La subrutina es llamada por el programa principal para resolver tres tipos de problemas: la solución de circuitos de iteración con corrientes de recirculación mediante el uso del método de Broyden, la simulación controlada sin corrientes de recirculación y la simulación controlada con corrientes de recirculación; identificados con las palabras clave o modalidades del simulador, SIMREC, SIMCON y SIMBIM respectivamente.

En todos los casos el método de solución contará con estimados iniciales de los parámetros de iteración, ya sean generados previamente mediante CONEW (variables de corte) o suministrados como datos por el usuario (variables libres).

El módulo requiere de los siguientes datos para realizar

sus funciones: las matrices de información de los ciclos de iteración, la secuencia de cálculo de los equipos comprendidos en los ciclos, el número total de ecuaciones a resolver, el orden de magnitud de la perturbación de las variables, la tolerancia máxima permisible a la norma euclidiana, los archivos de CORRIENTES y EQUIPOS y por supuesto, la palabra clave del tipo de problema.

El módulo finca sus bases en el método de Broyden, aunque adaptado para manejar cualquiera de las modalidades antes mencionadas. A continuación se describe el algoritmo de solución implantado en SIMLADOR:

1) Almacenamiento de los valores iniciales

En la aplicación del método de Broyden va cambiando la información de los archivos CORRIENTES y EQUIPOS, pero como no siempre el programa se dirige a la solución, es necesario contar con matrices de respaldo que regresen a todas las variables de los archivos a sus valores originales antes de la desviación con el objeto de poder corregir la dirección de búsqueda posteriormente.

La misma necesidad de restablecimiento de valores se presenta en la construcción del Jacobiano, durante la evaluación de las funciones con los parámetros perturbados.

El algoritmo principia con el almacenamiento de los parámetros de iteración (variables de corte y/o variables libres), archivo de corrientes y archivo de equipos iniciales en las matrices de respaldo, cambiando estos valores posteriormente en cada nueva iteración.

2) Evaluación de las funciones y norma euclidiana iniciales

Las funciones evaluadas inicialmente para las variables de corte son :

$$f_i^0(0) = x_i^0(0) - x_i^{\text{calc}}(0) \quad (2.10)$$

y para las especificaciones de diseño

$$f_i^0(0) = z_i^0(0) - z_i^{\text{calc}}(0) \quad (2.11)$$

en donde $x_i^0(0)$ es el valor inicial estimado de la i -ésima variable de corte; $x_i^{\text{calc}}(0)$ es el valor calculado de ésta después de haber evaluado todos los equipos comprendidos en el ciclo; $z_i^0(0)$ es el valor de la especificación de diseño que debe ser satisfecha y $z_i^{\text{calc}}(0)$ su valor calculado; $f_i^0(0)$ es la función que cuantifica la diferencia de las variables de corte estimadas o especificaciones de diseño fijadas por el usuario con respecto a sus valores calculados en la primera iteración.

La suma del cuadrado de las funciones de los n parámetros da como resultado la primera norma euclidiana

$$Q^0(0) = \sum_{i=1}^n f_i^0(0)^2 \quad (2.12)$$

Las variables libres de quienes son función las especificaciones de diseño también se representarán como x_i^0 o x_i^{calc} para simplificación de la descripción, y en la evaluación de las funciones esta simbología sólo representará a las variables de corte.

3) Cálculo de las perturbaciones

Las perturbaciones, $\Delta x_i(0)$, de todos los parámetros de

iteración, son calculados mediante las ecuaciones

$$\Delta x_1(0) = \xi \cdot 100.0 \quad (2.13)$$

para la temperatura de una corriente de corte,

$$\Delta x_1(0) = \xi x_1^0(0) \quad (2.14)$$

en el caso de la carga térmica, flujo de líquido o flujo de vapor de las corrientes de corte, o

$$\Delta x_1(0) = \int x_1^0(0) \quad (2.15)$$

si se trata de variables libres.

En estas ecuaciones ξ y \int son las fracciones que le dan el orden de magnitud a las perturbaciones de las variables de corte y variables libres respectivamente. Estos números son suministrados por el usuario bajo los nombres de EKONEW y PEREDP (ver sección 3.1).

4) Obtención de las variables perturbadas.

Con los valores más recientes de X^0 y ΔX , es decir, $X^0(k)$ y $\Delta X(k)$, se realizan los siguientes pasos:

--perturbación de un parámetro

$$x_1^*(k) = x_1^0(k) + \Delta x_1(k) \quad (2.16)$$

--actualización de las demás variables de la corriente a la que pertenece el parámetro.

--construcción en la subrutina JACOB de la columna de derivadas parciales de todas las funciones $f_1(k)$ con respecto al parámetro en turno.

De la misma forma se evalúan después las columnas de la matriz jacobiana para las variables libres, solamente que en

estos casos, si la variable pertenece a una corriente, la actualización se hace en la subrutina ACTUAL, y si pertenece a un equipo no hay actualización.

Más adelante, en la descripción de la subrutina ACTUAL, se hablará de lo que se entiende por actualización de una corriente, y en JACOB se describirá la construcción del Jacobiano $J(k)$.

5) Cálculo de la matriz H

La matriz jacobiana es invertida utilizando la técnica del máximo elemento pivote por columna, y después a cada uno de sus elementos se le cambia el signo.

$$H(k) = - J(k)^{-1} \quad (2.17)$$

6) Direccionamiento de las nuevas estimaciones.

Al llegar a esta etapa de la simulación se cuenta con los siguientes vectores

$$X^0(k) = [x_1^0(k), x_2^0(k), \dots, x_n^0(k)]^T \quad (2.18)$$

$$F^0(k) = [f_1^0(k), f_2^0(k), \dots, f_n^0(k)]^T \quad (2.19)$$

con los cuales se puede calcular las nuevas estimaciones mediante las siguientes ecuaciones y considerando el valor inicial de $s(k)$ igual a 1

$$\Delta X(k) = H(k) F^0(k) \quad (2.20)$$

$$X^1(k) = X^0(k) + s(k) \Delta X(k) \quad (2.21)$$

La actualización de las corrientes a quienes pertenecen los parámetros se lleva a cabo en este momento, al igual que la evaluación de la nueva norma con el fin de comprobar si son mejores los nuevos valores obtenidos

$$f_i(k) = x_i(k) - x_i^{calc}(k) \quad (2.22)$$

$$z_i(k) = z_i - z_i^{calc} \quad (2.23)$$

$$Q_i(k) = \sum_{i=1}^n f_i^2(k) \quad (2.24)$$

si hubieron mejoras, es decir, si se cumple con la relación

$$Q_i(k)^{1/2} < Q_i(k-1)^{1/2} \quad (2.25)$$

se realizan las actividades del paso (7); en caso contrario debe disminuirse el tamaño de los incrementos utilizando las fórmulas

$$\eta = Q_i(k) / Q_i(k-1) \quad (2.26)$$

$$s(k) = \frac{((1 + 6\eta)^{0.5} - 1)}{3\eta} \quad (2.27)$$

y calculando nuevamente los vectores $X_i(k)$, $F_i(k)$ y la norma $Q_i(k)$, se repite la pregunta acerca del cumplimiento de la desigualdad (2.25). En caso de que la respuesta sea afirmativa el programa se dirige a la realización de las actividades de (7), pero si no es así, existen cinco caminos a seguir dependiendo del número de iteración del que se trate, de la modalidad que se este utilizando y de si se cayó en un ciclo iterativo ($Q_i(k) = Q_i(k-1)$):

- a) Cuando $k=0$ y se está en la modalidad SIMREC o SIMSIM, el programa sale de la subrutina y regresa a CONEW para tratar de mejorar las estimaciones iniciales.
- b) Cuando $k=0$ y se trata de una SIMCON, la corrida finaliza con objeto de que el usuario proporcione mejores estimaciones de las variables libres y realice una nueva corrida.
- c) Cuando $k <> 0$ y $Q^1(k) <> Q^1(k-1)$, el programa regresa al paso (4) para calcular un nuevo Jacobiano que mejore la dirección de búsqueda de la solución.
- d) Cuando $k <> 0$, $Q^1(k) = Q^1(k-1)$ y se trata de una SIMREC o SIMSIM, el programa sale de la subrutina y entra a CONEW para realizar algunas estimaciones con el método univariable indicado, que le ayuden a romper el ciclo iterativo.
- e) Cuando $k <> 0$, $Q^1(k) = Q^1(k-1)$ y se está realizando una SIMCON, la corrida finaliza para que el usuario proporcione mejores estimaciones de las variables libres y realice una nueva corrida.

7) Coaprobación de la convergencia

Ahora se prueba si el error de convergencia del sistema iterativo es menor o por lo menos igual al permitido como máximo por el usuario con TOLER (ver sección 3.1).

El cumplimiento de la desigualdad

$$Q^1(k)^{1/2} \leq \text{TOLER} \quad (2.28)$$

dirige el programa a la impresión de resultados en el paso (9), en caso contrario hay que evaluar la matriz $H(k+1)$.

8) Aproximación de la nueva matriz H

La matriz $H(k+1)$ a utilizar en la siguiente iteración se aproxima mediante la aplicación de la fórmula de Householder

$$Y(k) = F^1(k) - F^0(k) \quad (2.29)$$

$$H(k+1) = H(k) - \frac{(H(k)Y(k) + s(k) \Delta X(k)) X(k)^T H(k)}{X(k)^T H(k) Y(k)} \quad (2.30)$$

Se preparan los vectores y la norma euclidiana de la nueva iteración

$$X^0(k+1) = X^1(k) \quad (2.31)$$

$$F^0(k+1) = F^1(k) \quad (2.32)$$

$$Q^0(k+1) = Q^1(k) \quad (2.33)$$

y regresa el programa al paso (6).

9) Impresión de resultados

Si el usuario suministró el dato de $IHP = 0$ en todos los equipos (ver sección 3.3), no debe aparecer todavía ninguna impresión de resultados de los equipos calculados durante las iteraciones ya que sólo hasta que es alcanzada la convergencia, se mandan imprimir los resultados finales para cada equipo involucrado en el circuito iterativo. Finalmente la subrutina regresa al programa principal.

En caso de que después de haber calculado treinta Jacobianos, el método no haya llegado a la solución del sistema iterativo, se mandan imprimir los resultados aproximados de los equipos que se tengan en ese momento.

JACOB

La subrutina sirve para construir la aproximación de la matriz jacobiana que se utiliza en SIMULT.

Entre los datos que llegan al módulo se encuentran el vector de perturbaciones, $\Delta X(k)$; el de parámetros de iteración $X^o(k)$ (conteniendo el elemento perturbado $x^o(k)$); los valores de las especificaciones de diseño, Z ; el vector de funciones de los parámetros antes de que fueran perturbados $F^o(k)$ y las matrices de respaldo.

Con esta información se evalúan los elementos de una columna del Jacobiano $J(k)$ de la siguiente forma:

- 1) Se mandan resolver los equipos comprendidos en el ciclo iterativo usando al parámetro perturbado $x^o(k)$, para conocer cómo influye en los valores calculados de todos los parámetros $X^o(k)$.
- 2) Calcula la columna de derivadas parciales de todas las funciones con respecto al parámetro perturbado mediante la ecuación

$$J(k) = \frac{\begin{matrix} \textcircled{0} \\ (x^o(k) - x^o(k)) - f^o(k) \\ \textcircled{0} \\ i \quad \text{calc} \quad i \quad i \end{matrix}}{\Delta x} \quad (2.34)$$

para las variables de corte y ,

$$J(k) = \frac{\begin{matrix} \textcircled{0} \\ (z^o(k) - z^o(k)) - f^o(k) \\ \textcircled{0} \\ i \quad \text{calc} \quad i \quad i \end{matrix}}{\Delta x} \quad (2.35)$$

para las especificaciones de diseño.

- 3) Restablece los valores originales a las variables modificadas con ayuda de las matrices de respaldo.

ACTUAL

La subrutina esta hecha para actualizar las propiedades de una corriente cuando contenga alguna variable libre y esta haya sido modificada. La actualización cambia de acuerdo al tipo de variable alterada, por lo que el tratamiento a seguir es:

- 1) Si es el flujo de liquido o vapor de alguno de los componentes, se suman los flujos parciales de todos los componentes para obtener el nuevo flujo total de liquido o vapor, y pasa a (4).
- 2) Si es el flujo total de liquido o vapor, se modifican los flujos parciales de los componentes liquidos o gaseosos proporcionalmente a su composición original, y pasa a (4).
- 3) Si es la temperatura, presión o entalpia, pasa directamente a (4)
- 4) Calcula el flujo total de cada componente y el de la corriente total.
- 5) Si la variable es la carga térmica, resuelve un problema de vaporización adiabático en BALENT para evaluar la nueva temperatura y fracciones mol en cada fase; pero si es cualquiera de las otras propiedades, efectúa una vaporización isotérmica en ANFASE para calcular las fracciones mol en cada fase, y con ENTALP calcula las cargas térmicas de cada fase y la total.
- 6) Calcula los flujos parciales de cada componente en las fases
- 7) Almacena la nueva información en el archivo de

CORRIENTES.

Como puede observarse, el funcionamiento de las subrutinas implantadas no es complicado, y por tanto su uso tampoco debe serlo. Esto podrá ser constatado por el lector en el siguiente capítulo, en el que se presenta el manual de usuario de SIMULADOR.

CAPITULO III

MANUAL DE USUARIO

Buscando que el programa tenga una utilidad real, se incluyó el manual de usuario en este capítulo.

El manual describe la información que requiere SIMULADOR para poder solucionar el problema en cuestión, siendo necesario construir un archivo de datos para suministrarla.

Se seguirá utilizando dentro del simulador el sistema de unidades del programa original, es decir el sistema inglés, por estar fuera del objetivo del presente trabajo su transformación al sistema internacional.

Los datos que apliquen al problema particular deberán alimentarse al archivo del usuario en el orden y formatos indicados, teniéndose que respetar el número de variables de cada registro.

La información se puede agrupar en los siguientes conjuntos de datos: generales, de las corrientes, equipos, simulación controlada, propiedades termodinámicas, secuencia y ciclos.

3.1 DATOS GENERALES

Cualquiera que sea el problema a resolver deberá contener la siguiente información general:

REGISTRO	COLUMNA	VARIABLE	SIGNIFICADO	
1	1-6	ITRABA	Título del trabajo.	
	7-12	IFECHA	Fecha de la corrida.	
2	1-6	ISIM	Indica la modalidad a utilizar, con las siguientes posibilidades:	
			=SIMULA	procesos sin ciclos de control ni corrientes de recirculación.
			=SIMREC	procesos sin ciclos de control pero con corrientes de recirculación.
			=SIMCON	procesos con ciclos de control pero sin corrientes de recirculación.
			=SIMSIM	procesos con ciclos de control y corrientes de recirculación.

El siguiente registro aplica cuando ISIM=SIMREC o ISIM=SIMSIM

3	1-6	MCONVI	Método de convergencia seleccionado:
			=SUSTDI Sustituciones sucesivas.
			=WEGSTE Wegstein acotado.
			=WEGS-M Wegstein modificado.
			=RELAJA Relajación acotado.
			=RELA-M Relajación modificado.
			=BROYDE Broyden.

El siguiente registro aplica cuando MCONV1=BROYDE.

4	1-6	MCONV2	Método para inicializar las variables de corte a elegfr: =SUSTDI =WEGSTE =WEGS-M =RELAJA =RELA-M
---	-----	--------	---

El siguiente registro se lee cuando MCONV1=WEGS-M, MCONV1=RELA-M, MCONV2=WEGS-M o MCONV2=RELA-M.

5	Formato Libre	GMAX	Cota máxima para G.
		GMIN	Cota mínima para G.
		ITACEL	Número de sustituciones sucesivas entre cada aceleración.

El siguiente registro deberá introducirse si ISIM=SIMREC y MCONV1=BROYDE, ISIM=SIMCON o ISIM=SIMSIM.

6	Formato Libre	TOLER	Tolerancia en la convergencia (valor recomendado de 1.0 E-03).
---	---------------	-------	--

El siguiente registro se lee cuando ISIM=SIMREC y MCONV1=BROYDE o ISIM=SIMSIM.

7	Formato Libre	NSEC	Número de simulaciones secuenciales para inicializar a las variables de corte utilizando el método MCONV2.
---	---------------	------	--

El siguiente registro debe suministrarse cuando ISIM=SIMREC o ISIM=SIMSIM.

8	Formato Libre	IMPKNW	Imprime el valor de las variables de corte cada IMPKNW iteraciones.
		EKONEW	Si MCONV1 (<) BROYDE, es la tolerancia en la convergencia. Si MCONV1=BROYDE, es el valor de la perturbación en las variables de corte (el valor recomendado en ambos casos es 1.0 E-03).

IMPCOR

Los valores de todas las corrientes se imprimen cada IMPCOR iteraciones.

Para cualquier valor de ISIM debe alimentarse lo siguiente:

9	Formato Libre	IMPDAT	=1 Se imprimen los datos de los equipos. =0 No se imprimen.
10	1-6	IENT	Método que se desea usar para calcular las propiedades termodinámicas: =CHAO =EC.EDO (ver NOTA 1).

Lo siguiente debe introducirse si IENT=EC.EDO

11	Formato Libre	ICVT	=1 Si se proporcionan parámetros de interacción binarios. =0 En caso contrario (ver NOTA 1).
		IES	Especificación de la ecuación de estado que se usa (ver NOTA 1).

NOTA 1

El simulador tiene incorporados varios métodos para el cálculo de entalpías, entropías y equilibrio líquido-vapor, que son:

METODO	IENT	IES
CHAO-SEADER	CHAO	---
SOAVE	EC.EDO	1
SOAVE-API	EC.EDO	2
PENG-ROBINSON	EC.EDO	3
SCHMIDT-WENSEL	EC.EDO	4
PATEL-TEJA	EC.EDO	5

Para mezclas de hidrocarburos el más adecuado es el método de PENG-ROBINSON con ICVT=0. En los otros casos es necesario utilizar ICVT=1 y proporcionar los parámetros de interacción binarios a través del archivo PARBIN con el siguiente

arreglo

```
P(1,2),P(1,3),...,P(1,NCOMP)  
P(2,3),P(2,4),...,P(2,NCOMP)  
:  
:  
P(NCOMP-1,NCOMP)
```

Donde $P(I,J)$ es el parámetro de interacción entre los componentes I y J . Se asume que se cumplen las siguientes relaciones: $P(I,I)=0$, $P(I,J)=P(J,I)$.

3.2 DATOS DE LAS CORRIENTES

La información necesaria de las corrientes del proceso es:

REGISTRO	COLUMNA	VARIABLE	SIGNIFICADO
1	Formato Libre	NC	Número total de corrientes
		NCOMP	Número de componentes.
2	Formato Libre	IG(1)	Número de la corriente como fué designada por el usuario.
		IG(2)	Número del equipo de donde sale (0, si es entrada a la planta).
		IG(3)	Número del equipo al que entra (0, si es salida de la planta).
		IG(4)	Indicador de variables de corte en la corriente: =0 Si no existen variables de corte. =1 Si existen variables de corte.
		IG(5)	Control de lectura de datos para la corriente IG(1). =0 No se leen datos. =1 Si se leen (para todas las corrientes de ali-

mentación y de las que se desee proporcionar estimaciones iniciales).

El siguiente registro se lee sólo si se le asignó a IG(5) el valor de 1.

3	Formato Libre	IG(6)	Temperatura de la corriente (°F).
		IG(7)	Presión de la corriente (psia).
		IG(11)	Flujo molar del componente 1 (lbmol/h).
		IG(12)	Flujo molar del componente 2 (lbmol/h).
		IG(10+NCOMP)	Flujo molar del componente NCOMP (lbmol/h).

El registro (2) debe repetirse tantas veces como corrientes existen en la planta y el (3) sólo cuando sean alimentaciones o se deseen dar estimaciones iniciales.

Los datos que van almacenados en IG(8), IG(9) e IG(10), son: la entalpia de la corriente, el flujo total de líquido y el flujo total de vapor respectivamente, los cuales son calculados internamente dadas presión, temperatura y propiedades termodinámicas de todos los componentes presentes en la corriente.

Las unidades indicadas para la presión y temperatura son las únicas que acepta el programa, pero en cuanto a los flujos molares pueden utilizarse otras unidades siempre y cuando se tome en cuenta que las unidades indicadas en las impresiones para la carga térmica, flujos molares, máscicos y volumétricos estarán incorrectas.

Una vez suministrada toda la información solicitada por los

registros (2) y (3), se definen las variables de corte en las corrientes a las cuales se asignó $IG(4)=1$, para ser usadas en la verificación de la convergencia del sistema iterativo. Las variables que pueden utilizarse son:

- a) Temperatura
- b) Entalpia total de la corriente
- c) Flujo total en la fase líquida
- d) Flujo total en la fase vapor

y la forma de indicar que una variable es de corte o no, es alimentando un registro por cada corriente en la que $IG(4)=1$, conteniendo:

4	Formato Libre	MEST1(I,1)	=0 La temperatura no es variable de corte. =1 La temperatura si es variable de corte.
		MEST1(I,2)	=0 Siempre pues la presión no puede ser variable de corte.
		MEST1(I,3)	=0 La entalpia no es variable de corte. =1 La entalpia si es variable de corte.
		MEST1(I,4)	Idea para el flujo total de líquido.
		MEST1(I,5)	Idea para el flujo total de vapor.

Antes de especificar los valores de la matriz MEST1, debe considerarse lo siguiente:

1. La presión no puede ser utilizada como variable de corte debido a que en la filosofía general del simulador, la presión de todas las corrientes es conocida de antemano.
2. No se pueden tener como variables de iteración simultáneamente a la temperatura y a la entalpia, es decir, si

MEST1(I,1)=1, entonces MEST1(I,3)=0 y viceversa.

Con lo anterior queda completamente definida la información relativa a las corrientes que intervienen en el proceso.

3.3 DATOS DE LOS EQUIPOS

La información necesaria de los equipos del proceso es la siguiente.

3.3.1 Generales

REGISTRO	COLUMNA	VARIABLE	SIGNIFICADO
1	Formato Libre	NE	Número total de equipos.
2	1-2	NDDO	Número o etiqueta del equipo como fue designada por el usuario.
	4-9	NOMEQP	Nombre del equipo según se indica en la siguiente tabla.

TABLA 3.1 NOMBRE DE LOS MODULOS DE LOS EQUIPOS EXISTENTES

! CAMBC1, CAMBC2, CAMBC3 y CAMBC4:	Cambiadores de calor.	!
! DESTI2, DESTI3:	Torres de destilación y absorbedores.	!
! COMPR2, COMPR3:	Compresores y expansores.	!
! BOMBA1:	Bomba.	!
! FLSAD1:	Mezclador adiabático de corrientes.	!
! FLSIS1:	Vaporizador isotérmico.	!
! MEZCL1:	Mezclador de corrientes.	!
! MEZCL2 y MEZCL3:	Separadores de corrientes.	!

3	1-48	TITULO	Título del equipo (puede ser cualquier nombre)
---	------	--------	--

3.3.2 Específicos

4	Formato Libre	Datos específicos de los equipos.
---	---------------	-----------------------------------

A continuación se describen los datos específicos de cada

equipo incluido en el simulador, utilizando en todos los casos Formato libre.

CAMBCI

Cálculo de un cambiador de calor entre dos corrientes de proceso, teniéndose varias opciones dependiendo del valor de IOPC.

Salida: calcula las características de las corrientes de salida y el producto UA.

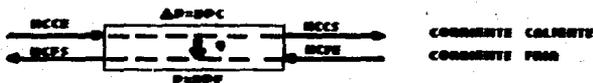


FIGURA 3.1 CAMBIADOR DE CALOR CAMBCI

REGISTRO	VARIABLE	SIGNIFICADO
4	NCCE	Número de la corriente caliente de entrada.
	NCFE	Número de la corriente fría de entrada.
	NCCS	Número de la corriente caliente de salida.
	NCFE	Número de la corriente fría de salida.
	DPC	Caida de presión de la corriente caliente (psia).
	DPF	Caida de presión de la corriente fría (psia).
	TEMP	Temperatura de la corriente de salida ($^{\circ}F$).
	Q	Carga térmica (Btu/h).
	DELT	Acercamiento máximo de temperatura - ($^{\circ}F$).

IOPC

Indicador de opción de cálculo.

- =1 La carga térmica (Q) es dato.
- =2 La temperatura de salida de la corriente caliente es dato (TEMP).
- =3 La corriente caliente sale como líquido saturado.
- =4 La temperatura de salida de la corriente fría es dato (TEMP).
- =5 La corriente fría sale como vapor saturado.
- =6 El acercamiento máximo de temperatura es dato (DELTA).

IMP

Control de impresión de resultados.
=0 Sólo escribe los resultados al final de las iteraciones.
=1 Escribe los resultados en cada iteración.

CAMBC2

Cálculo del calentamiento o enfriamiento de una corriente de proceso, teniendo varias opciones dependiendo del valor de NTEMSA.

Salida: características de la corriente de salida y la carga térmica (curva de enfriamiento o calentamiento)



FIGURA 3.2 CAMBIADOR DE CALOR CAMBC2

REGISTRO	VARIABLE	SIGNIFICADO
4	NCE	Número de la corriente de entrada.
	NCS	Número de la corriente de salida.
	Q	Carga térmica que se le adiciona a la corriente, cuando NTEMSA=0 (Btu/h).
	NTEMSA	Opción de cálculo del cambiador: =0 La corriente de salida se

- calcula con el Q dado.
- =1 Se especifica la temperatura de la corriente de salida en TEMP.
 - =2 La corriente de salida es líquido saturado.
 - =3 La corriente de salida es vapor saturado.

TEMP Temperatura de salida de la corriente cuando NTEMSA=1 (°F).

CPRES Caída de presión de la corriente - (psia).

IMP Control de impresión de resultados del equipo.

 =0 Sólo escribe los resultados al final de las iteraciones.

 =1 Escribe los resultados en cada iteración.

CAMBC3

Cálculo de un cambiador de calor en donde la corriente de proceso intercambia calor con una corriente de servicio cuya temperatura se considera que permanece constante y se tiene como dato el área de transferencia de calor y el coeficiente global de transferencia.

Salida: Carga térmica y las características de la corriente de salida.

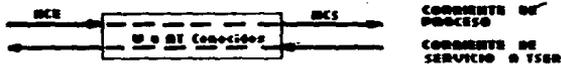


FIGURA 3.3 CAMBIADOR DE CALOR CAMBC3

REGISTRO	VARIABLE	SIGNIFICADO
4	NCE	Número de la corriente de entrada

NCS	Número de la corriente de salida.
TSER	Temperatura de la corriente de servicio ($^{\circ}$ F).
DPC	Caida de presión de la corriente de proceso (psia).
AT	Area de transferencia de calor -- (ft^2).
U	Coficiente global de transferencia de calor ($\text{Btu/h } ^{\circ}\text{F ft}^2$).
IMP	Control de impresión de resultados del equipo.
	=0 Sólo escribe los resultados al final de las iteraciones.
	=1 Escribe los resultados en cada iteración.

CAMBC4

Cálculo de un cambiador de calor en el que están involucradas dos corrientes de proceso. El área de transferencia de calor y el coeficiente global de transferencia son conocidos.

Salida: Valor de la carga térmica y características de las corrientes de salida.

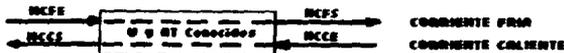


FIGURA 3.4 CAMBIADOR DE CALOR CAMBC4

REGISTRO	VARIABLE	SIGNIFICADO
4	NCFE	Número de la corriente fría de entrada.
	NCCE	Número de la corriente caliente de entrada.

NCCS	Número de la corriente caliente de salida.
NCFS	Número de la corriente fría de salida.
DPC	Caida de presión de la corriente caliente (psia).
DPF	Caida de presión de la corriente fría (psia).
AT	Area de transferencia de calor (ft ²).
U	Coefficiente global de transferencia de calor (Btu/ h °F ft ²).
INC	Incremento de temperatura para encontrar la solución. Si se da INC=0, el programa genera su propio valor.
IMP	Control de impresión de resultados =0 Sólo escribe los resultados al final de las iteraciones. =1 Escribe los resultados en cada iteración.

En caso de que la temperatura de la corriente caliente de entrada sea menor que la de la corriente fría, entonces no se calcula el cambiador y se asigna Q=0.

DESTIL2 Y DESTIL3

Estas subrutinas calculan torres de destilación y absorbedores integrados por platos ideales. En la figura (3.5) se muestra el diagrama general de estos equipos.

El programa acepta la alimentación (F_j), las extracciones vapor (W_j), extracciones líquidas (U_j) y calentamientos externos (Q_j) en cada plato. El plato 1 es el condensador y el último (M) el hervidor.

Los datos que se deben proporcionar son: posición y

características de todas las alimentaciones, número de platos (M), relación de reflujo ($R = L_1 / (V_1 + U_1)$), presión del domo y fondo, número y posición de cada extracción.

Si el condensador es total, se especifica una extracción líquida en el plato 1.

Si el condensador es parcial, se especifica una extracción vapor en el plato 1.

En caso de que la columna no tenga condensador (torre demetanizadora o absorbedor), se especifica una alimentación al plato 2 y se asigna 0 a la relación de reflujo, especificándose una extracción vapor en el plato 1. En este caso el plato 1 (condensador) es ficticio pero debe contabilizarse para determinar M y el vapor que sale del plato 2 será igual al que sale del plato 1 (producto vapor del domo).

Si el hervidor es parcial, se especifica una extracción líquida en el plato M.

Si el hervidor es total se especifica una extracción líquida en el plato M-1, la cual será el producto líquido del fondo.

En caso de que no exista hervidor (absorbedores), se especifica una alimentación al plato (M-1) y una extracción líquida en el mismo plato.

El programa DESTIL2 trabaja con torres de destilación que no tengan compuestos cuyos puntos de ebullición sean muy diferentes.

El programa DESTIL3 trabaja con absorbedores y torres de destilación con compuestos cuyos puntos de ebullición son muy diferentes (por ejemplo torres demetanizadoras).

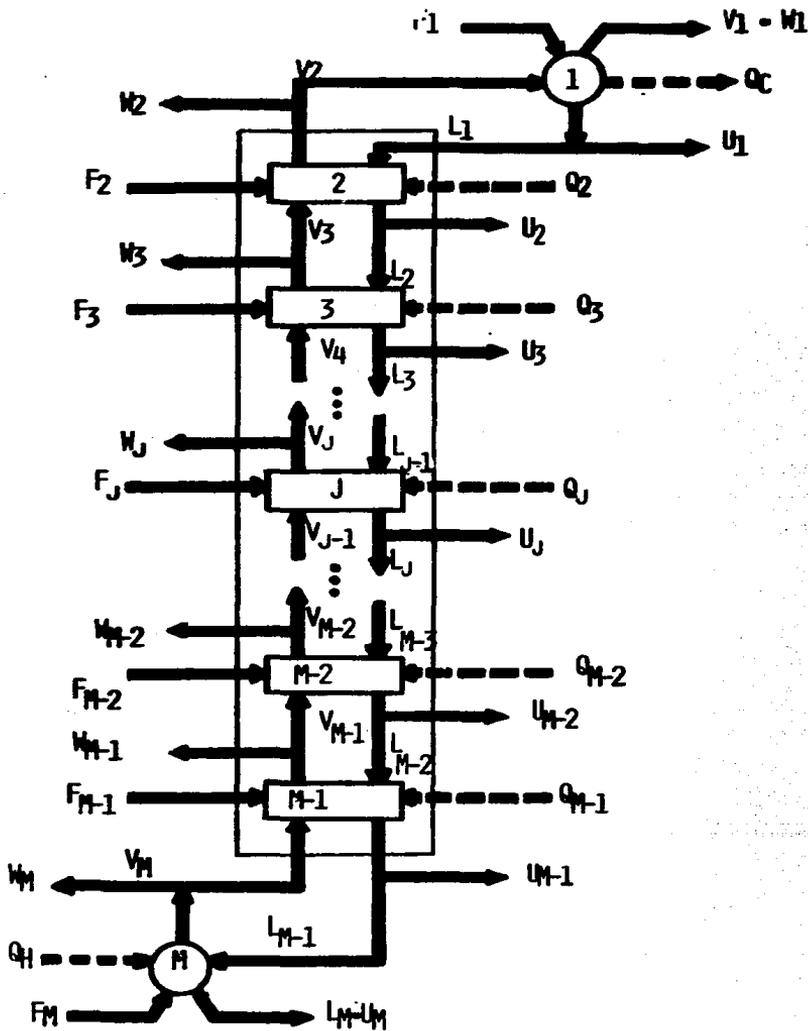


FIGURA 3.5 ESQUEMA GENERAL DE LA TORRE DE DESTILACION Y ABSORBEDOR.

Los programas DESTIL2 y DESTIL3 son complementarios. Normalmente cuando uno trabaja para un problema dado, el otro no trabaja.

Salida: calcula los flujos internos de liquido (L_j) y de vapor (V_j); temperatura de cada plato, composiciones de todas las corrientes liquidas (X_j) y de vapor (Y_j); las cargas térmicas del condensador (Q_c) y del hervidor (Q_h).

REGISTRO	VARIABLE	SIGNIFICADO
4	M	Número de platos.
	NALIN	Número de alimentaciones.
	NEXTL	Número de extracciones liquidas.
	NEXTV	Número de extracciones vapor.
	NQE	Número de platos con calentamiento externo (excepto condensador y hervidor).
5	LALIN(I,1)	Plato donde se introduce la alimentación I.
	LALIN(I,2)	Número de la corriente que corresponde a la alimentación I.
El registro (5) se repite por cada alimentación.		
6	LEXTL(I,1)	Plato donde se saca la extracción líquida I.
	LEXTL(I,2)	Número de la corriente que corresponde a la extracción líquida I.
	LEXTL (I,3)	Especificación del flujo de la extracción líquida I. =0 Si FLUJ está en (lbmol/h). =1 Si FLUJ está dado como fracción de la carga total a la torre.
	LEXTL (I,4)	El valor de FLUJ de acuerdo al número que se asignó para LEXTL (I,3).

El registro (6) se repite para cada extracción líquida.

7 LEXTV(I,J) Idea que LEXTL(I,J), J=1,4 para las extracciones vapor.

El registro (7) se repite por cada extracción vapor.

8 QE(I,1) Plato donde se calienta o enfría.
 QE(I,2) Carga térmica (Btu/h).
 + Para calentamiento.
 - Para enfriamiento.

El registro (8) se repite por cada carga térmica.

9 PDOMO Presión en el domo (psia).
 PFONDO Presión en el fondo (psia).
 REFLUJ Relación de reflujo = $L_1/(U_1+W_1)$.
 DTSUB Subenfriamiento del reflujo (°F).
10 NITER Número máximo de iteraciones.
 PASOT Amortiguamiento para los incrementos de temperatura (entre 0 y 1).
 PASOF Amortiguamiento para los incrementos de flujos totales (entre 0 y 1).
 IMP Control de impresión de resultados
 =0 Sólo escribe los resultados al final de las iteraciones.
 =1 Escribe los resultados en cada iteración.

10 NTEMP Número de parejas (Plato, Temperatura) para formar el perfil inicial de temperatura en la torre (se deben dar por lo menos dos parejas).
 I,T(I) Plato, temperatura en el plato (se proporcionan tantas parejas como NTEMP).

COMPR2 Y COMPR3

Estas subrutinas resuelven compresores o expansores adiabáticos.

Salidas Trabajo de compresión y las características de la corriente de salida.



FIGURA 3.6 EXPANSOR-COMPRESOR COMPR2 Y COMPR3

Si PSAL es mayor que la presión de la corriente de entrada, se trata de un compresor, en caso contrario el equipo es un expansor.

Si se utiliza COMPR2, se calcula primero el trabajo isoentrópico y después le aplica la eficiencia EFIC. Esta subrutina requiere del cálculo de entropías, por lo cual solamente se puede utilizar con la opción de propiedades termodinámicas IENT=EC.EDO. Acepta corrientes de mezcla líquido-vapor tanto a la entrada como a la salida del equipo. Si se utiliza COMPR3, se realiza un cálculo aproximado del equipo sin requerir la evaluación de entropías. Sólo acepta corrientes en fase gaseosa.

REGISTRO	VARIABLE	SIGNIFICADO
4	NCE	Número de la corriente de entrada.
	NCS	Número de la corriente de salida.
	PSAL	Presión de salida (psia).
	EFIC	Eficiencia adiabática (entre 0 y 1).
	IMP	Control de impresión. #0 Sólo escribe los resultados al final de las iteraciones. #1 Escribe los resultados del

equipo en cada iteración.

BOMBA1

Esta subrutina aumenta la presión de una corriente líquida con lo cual se simula una bomba.

Salida : características de la corriente líquida a la nueva presión.



FIGURA 3.7 BOMBA BOMBA1

REGISTRO	VARIABLE	SIGNIFICADO
4	KEB	Número de la corriente de entrada de la bomba.
	KSB	Número de la corriente de salida de la bomba.
	DELPRE	Aumento de presión en la bomba (psia).
	IMP	Control de impresión. =0 Sólo escribe los resultados al final de las iteraciones. =1 Escribe los resultados del equipo en cada iteración.

ELGIS1

Esta subrutina calcula la vaporización isotérmica de una corriente.

Salida: composiciones de las corrientes separadas de líquido y vapor.

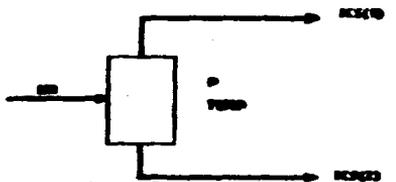


FIGURA 3.8 VAPORIZACION ISOTERMICA FLSISI

REGISTRO	VARIABLE	SIGNIFICADO
4	KR	Número de la corriente de entrada.
	ICS(1)	Número de la corriente para el vapor.
	ICS(2)	Número de la corriente para el líquido.
	P	Presión en el tanque (psia).
	TEMP	Temperatura de las corrientes de salida (°F).
	IMP	Control de impresión. =0 Sólo escribe los resultados al final de las iteraciones. =1 Escribe los resultados del equipo en cada iteración.

ELRAD1

Esta subrutina mezcla adiabáticamente de una a diez corrientes de proceso. Puede simular una válvula de expansión cuando se especifica una sola corriente de entrada. La salida, aunque sea una mezcla líquido-vapor, se asigna a una sola corriente. Si esta mezcla se quiere separar en una corriente de vapor y una de líquido, la salida de esta subrutina debe alimentarse a la subrutina MEZCL3.

Salida: características de la corriente de salida del equipo y carga térmica total del mezclado.

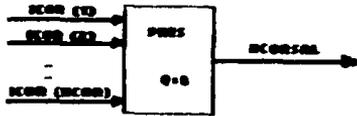


FIGURA 3.9 MEZCLADO ADIABATICO DE CORRIENTES FLSADI

REGISTRO	VARIABLE	SIGNIFICADO
4	NCOR	Número de corrientes que se mezclan (1 a 10).
	NCORSA	Número de la corriente de salida.
	ICOR (1)	Número de la primera corriente que se mezcla.
	.	.
	ICOR(NCOR)	Número de la última corriente que se mezcla.
	PRES	Presión de la corriente de salida (psia).
	IMP	Control de impresión. =0 Sólo escribe los resultados al final de las iteraciones =1 Escribe los resultados del equipo en cada iteración.

MEZCL1

Mezcla de una a diez corrientes de proceso para formar una sola corriente que puede ser una mezcla líquido-vapor, líquido o vapor.

Salida: La entalpía de la corriente de salida es igual a la suma de las entalpías de las corrientes de entrada. Este módulo no calcula la temperatura de la corriente de salida a diferencia de FLSADI que si lo hace.

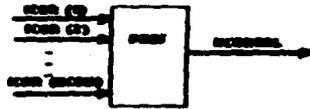


FIGURA 3.10 MEZCLADO DE CORRIENTES MEZCL1

REGISTRO	VARIABLE	SIGNIFICADO
4	NCOR	Número de corrientes que se mezclan (1 a 10).
	NCORSA	Número de la corriente de salida.
	ICOR (1)	Número de la primera corriente que se mezcla.
	⋮	
	ICOR (NCOR)	Número de la última corriente que se mezcla.
	PRES	Presión de la corriente de salida (psia).
	IMP	Control de impresión. =0 Sólo escribe los resultados al final de las iteraciones =1 Escribe los resultados del equipo en cada iteración.

MEZCL2

Esta subrutina sirve para dividir proporcionalmente una corriente en varias.

Salida: características de cada nueva corriente separada.

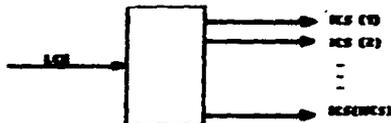


FIGURA 3.11 DIVISOR DE CORRIENTES MEZCL2

REGISTRO	VARIABLE	SIGNIFICADO
4	LCE	Número de la corriente de entrada que se va a dividir.
	LNCS	Número de corrientes en que se divide la corriente LCE.
	ICS(1)	Número de la primera corriente de salida.
	FACS(1)	Fracción de la corriente de entrada que se asigna a ICS(1).
	ICS(LNCS)	Número de la última corriente de salida.
	FACS(LNCS)	Fracción de la corriente de entrada que se asigna a ICS(LNCS).
	IMP	Control de impresión. =0 Sólo escribe los resultados al final de las iteraciones. =1 Escribe los resultados del equipo en cada iteración.

MEZCL3

Esta subrutina separa las partes líquida y vapor de una corriente.

Salida: composición de las corrientes de líquido y vapor separadas.

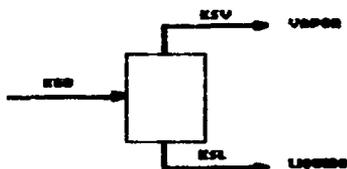


FIGURA 3.12 SEPARADOR LIQUIDO-VAPOR MEZCL3

REGISTRO	VARIABLE	SIGNIFICADO
4	KEB	Número de la corriente de entrada.
	KSV	Número de la corriente de salida

que se asigna a la parte vapor.

KSL Número de la corriente de salida que se asigna a la parte líquida.

IMP Control de impresión.
=0 Sólo escribe los resultados al final de las iteraciones.
=1 Escribe los resultados del equipo en cada iteración.

3.4 SIMULACION CONTROLADA

Cuando **ISIM = SIMCON** o **ISIM = SIMSIM**, deberá ser alimentada la siguiente información utilizando para ello Formato Libre.

REGISTRO	VARIABLE	SIGNIFICADO
1	NESPDI	Número de especificaciones de diseño (es igual al número de variables libres).
	PEREQP	Perturbación de las variables libres. El valor recomendado será aquél que convenga a la variable libre de menor orden de magnitud (ver sección 2.2.2).
2	VESPDI(I) I=1,NESPDI	Valores de las especificaciones de diseño (ver NOTA 2).
3	MESPDI(I,1)	Número del archivo al que pertenece la variable I.
	MESPDI(I,2)	Número del equipo o corriente al que pertenece la variable libre I.
	MESPDI(I,3)	Posición que guarda la variable libre I dentro del vector de información del equipo o corriente (ver NOTA 2).
	MESPDI(I,4)	Máximo número de elementos que se almacenan en el vector de información del equipo o corriente que contiene a la variable libre I (ver NOTA 2).

El registro (3) se repite por cada variable libre que haya (**NESPDI**).

- a) Si la variable libre o la especificación de diseño (uno de los dos o ambos), pertenecen a una corriente:
- El número del archivo al que pertenece la variable libre o especificación de diseño es el 58, este número deberá alimentarse en MESPDI(I,1) o MESPDI(I,5) según sea el caso.
 - La etiqueta de la corriente en MESPDI(I,2) o MESPDI(I,6), deberá estar de acuerdo con lo asignado por el usuario en la sección de información de las corrientes (sección 3.2).
 - La posición que guarda la variable libre o la especificación de diseño dentro del vector de información de la corriente, se alimenta en MESPDI(I,3) o en MESPDI(I,7) según sea el caso. En la tabla (3.2) se indica el número que hay que alimentar de acuerdo al tipo de parámetro o la forma en que se puede calcular. Los puntos referentes a los flujos o fracciones de los componentes, en cualquiera de las dos fases, sólo aplica para las especificaciones de diseño.

TABLA 3.2 POSICIONES DE LAS VARIABLES O ESPECIFICACIONES DENTRO DE LAS CORRIENTES

VARIABLE LIBRE O ESPECIFICACION DE DISEÑO	POSICION
TEMPERATURA	6
PRESION	7
ENTALPIA	8
FLUJO TOTAL DE LIQUIDO	9
FLUJO TOTAL DE VAPOR	10
FLUJO O FRACC. DEL COMP. 1 EN EL LIQUIDO	11
FLUJO O FRACC. DEL COMP. I EN EL LIQUIDO	10 + I
FLUJO O FRACC. DEL COMP. NCOMP EN EL LIQUIDO	10 + NCOMP
FLUJO O FRACC. DEL COMP. 1 EN EL VAPOR	11 + NCOMP
FLUJO O FRACC. DEL COMP. I EN EL VAPOR	10 + 2*I
FLUJO O FRACC. DEL COMP. NCOMP EN EL VAPOR	10 + 2*NCOMP

- El número máximo de elementos en el vector de corrientes es precisamente $10 + 2 \cdot \text{NCOMP}$, alimentándose este valor en `MESPDI(I,4)` o bien en `MESPDI(I,8)`.

- b) Si la variable libre o la especificación de diseño, (uno de los dos o ambos) pertenecen a algún equipo:
 - El número del archivo que contiene la información es el 50, por lo que este número deberá ser alimentado en `MESPDI(I,1)` o `MESPDI(I,5)`.
 - La etiqueta del equipo en `MESPDI(I,2)` o `MESPDI(I,6)` deberá estar de acuerdo con la asignada por el usuario en la sección de información de los equipos (sección 3.3).
 - La posición que guarda la variable libre o especificación de diseño dentro del vector de información del equipo, es particular de cada uno de ellos. En la tabla (3.3) se presenta un condensado de las variables que podrían ser seleccionadas en cada módulo y los datos a alimentar en `MESPDI(I,3)` o `MESPDI(I,7)`.
 - El máximo número de elementos en los vectores de información de cada equipo a ser alimentados en `MESPDI(I,4)` o `MESPDI(I,8)`, pueden obtenerse también de la tabla (3.3) que se incluye a continuación.

TABLA 3.3 INFORMACION A SUMINISTRAR SI LAS VARIABLES O ESPECIFICACIONES PERTENECEN A UN EQUIPO

EQUIPO	VAR. LIBRE/ ESPEC. DE DISEÑO	DESCRIPCION	HESPDI(I,J)	
			J=3 ó 7	J=4 u 8
MEZCL1	PRES	Presión en el mezclador (psia).	11+NCOR	13+NCOR
MEZCL2	FACS(I) I=1,LNCS	Fracción de la corriente de entrada asignada a la i-ésima corriente de salida.	10+LNCS +I	11+ 28 LNCS
MEZCL3	--	--	--	--
FLSAD1	PRES	Presión en el tanque (psia).	11+NCOR	13+NCOR
FLSIS1	P	Presión en el tanque (psia).	12	15
	T	Temperatura en el tanque (°F).	13	15
	CALOR	Carga térmica en el tanque (Btu/h).	15	15
BOMBA1	DELPRE	Aumento de presión en la bomba (psia).	11	13
	P	Presión de descarga (psia).	13	13
CAMBC1	DPC	Caida de presión de la corriente caliente (psia)	13	20
	DPF	Caida de presión de la corriente fría (psia).	14	20
	Q	Carga térmica (Btu/h)	15	20
	TEMP	Temperatura de salida de la corriente caliente o fría (°F).	16	20

	DELTA	Acercamiento máximo de temperatura (°F).	17	20
	UA	Producto del coeficiente global de transferencia de calor por el área del cambiador (Btu/h °F).	20	20
CAMBC2	Q	Carga térmica que el servicio adiciona o elimina de la corriente (Btu/h).	11	15
	TEMP	Temperatura de salida de la corriente de proceso (°F).	13	15
	CPRES	Caída de presión de la corriente (psia).	12	15
CAMBC3	TBER	Temperatura de la corriente de servicio(°F)	11	15
	DPC	Caída de presión de la corriente de proceso (psia).	12	15
	AT	Área total de transferencia de calor (ft ²).	13	15
	U	Coefficiente global de transferencia de calor (Btu/h °F ft ²).	14	15
CAMBC4	DPC	Caída de presión de la corriente caliente (psia)	13	19
	DPF	Caída de presión de la corriente fría (psia).	14	19
	AT	Área de transferencia de calor (ft ²).	15	19
	U	Coefficiente global de transferencia de calor (Btu/h °F ft ²).	16	19

	Q	Carga térmica del cambiador de calor (Btu/h).	19	19
COMPR2 o COMPR3	PSAL	Presión de salida del compresor (psia).	11	14
	EFIC	Eficiencia adiabática ($0 < EFIC < 1$).	12	14
	POTEN	Potencia del compresor (HP).	14	14
DESTI2 o DESTI3	REFLWJ	Relación de reflujo	14	$25+28NALIM$ $+48NEXTL+H$ $+48NEXTV+2$ \$NQE
	QD	Carga térmica del condensador (Btu/h).	15	$25+28NALIM$ $+48NEXTL+H$ $+48NEXTV+2$ \$NQE
	QR	Carga térmica del re-hervidor (Btu/h).	16	"
	LEXTL(I,4) I=1,NEXTL	Flujo de la i-ésima extracción líquida.	$16+28$ NALIM $+48I$	"
	T(I)	Temperatura en el plato I ($^{\circ}F$).	$16+28$ NALIM $+48$ NEXTL $+I$	"
	LEXTV(I,4) I=1,NEXTV	Flujo de la i-ésima extracción de vapor.	$16+28$ NALIM $+48$ NEXTL $+H+48I$	"
	QE(I,2)	Carga térmica agregada en el i-ésimo plato (Btu/h).	$16+28$ NALIM $+48$ NEXTL $+H+48$ NEXTV $+28I$	"

PDOMO	Presión en el domo (psia).	17+28 NALIM +48 NEXTL +M+48 NEXTV +28NQE	"
PFONDO	Presión en el fondo de la torre (psia).	18+28 NALIM +48 NEXTL +M+48 NEXTV +28NQE	"

3.5 PROPIEDADES TERMODINAMICAS

La caracterización de los NCOMP componentes y/o pseudo componentes que intervienen en la simulación (20 compuestos como máximo), se alimentan utilizando en todo momento Formato libre.

REGISTRO	VARIABLE	SIGNIFICADO
1	(IC(I), I=1, NCOMP)	Clave de cada uno de los componentes de acuerdo a la siguiente convención: a) 1-100, las características del componente están incluidas en la base de datos (ver tabla 3.4). b) 101-500, el componente no está incluido en la base de datos. En este caso se deberán suministrar los datos indicados en los registros 2 y 3. c) 501-600, se trata de un pseudocomponente. En este caso se deberán suministrar los datos que se describen en los registros 4 y 5.
2	NOM(I)	Nombre del componente.
3	WM(I)	Peso Molecular
	FA(I)	Factor Acéntrico de Pitzer
	FS(I)	Parámetro de solubilidad.
	VM(I)	Volumen molar líquido (ft ³ /LBMOL a 77 °F).
	TC(I)	Temperatura crítica (°F).
	PC(I)	Presión crítica (psia).
	A(I)	Constantes para calcular entalpía del gas ideal (ver NOTAS 3).
	B(I)	
	C(I)	
	D(I)	
	E(I)	

VMOL(I)

Volúmen molar de líquido (gal
/lbmol a 60 °F).

Los datos en los registros 2 y 3 se suministran tantas veces como valores entre 101 y 500 se hayan dado en la variable IC. Si en IC se indicaron números mayores de 500, se deberán suministrar los siguientes datos para caracterizar al pseudocomponente.

REGISTRO	COLUMNA	VARIABLE	SIGNIFICADO
4	1-10	NOM(I)	Nombre del componente.
5	Formato Libre	PM	Peso molecular.
		PEBC	Punto de ebullición cúbico (°F).
		PEBM	Punto de ebullición molar (°F).
		TB	Temperatura de ebullición normal (°F).
		APIG	Gravedad API.
		UOPK	Factor de caracterización de Watson.

Cuando menos debe proporcionarse el peso molecular, algunos de los puntos de ebullición PEBC, PEBM o TB y APIG o UOPK.

En caso de que algún dato no se proporcione, en el archivo de datos debe incluirse un cero.

La lista de componentes incluidos en el banco de datos se da en la tabla (3.4).

NOTA 3:

Las constantes de entalpia se encuentran definidas en el libro API DATA BOOK, y se usan en la ecuación

$$H = A\%U + B\%U^2 + C\%U^3 + D/U + E$$

donde

$$U = T/100, T \text{ en Grados Rankins.}$$

TABLA 3.4 COMPUESTOS INCLUIDOS EN EL BANCO DE DATOS

11. HIDROGENO	15. MONOXIDO DE CARBONO
12. METANO	16. DIOXIDO DE AZUFRE
13. ETANO	17. ETILENO
14. PROPANO	18. PROPILENO
15. N-BUTANO	19. 1-BUTENO
16. I-BUTANO	20. 2-METIL-PENTANO
17. N-PENTANO	21. N-HEPTANO
18. I-PENTANO	22. N-OCTANO
19. NEOPENTANO	23. N-NONANO
110. N-HEXANO	24. N-DECANO
111. DIOXIDO DE CARBONO	25. N-UNDECANO
112. ACIDO SULFIDRICO	26. N-DODECANO
113. NITROGENO	27. PROPADIENO
114. OXIGENO	28. 1,3 BUTADIENO

3.6 SECUENCIA Y CICLOS

Para cualquiera de las modalidades de SIMULADOR debe alimentarse en el archivo de datos la secuencia de cálculo, los tipos de ciclos que tiene el proceso y los equipos que los forman.

La secuencia de cálculo será el orden con el que el programa debe ir resolviendo los módulos de los equipos. Para ello, el usuario introducirá en la variable ISEC(1,I) las etiquetas de los equipos en el orden de solución deseado.

Los ciclos existentes en el proceso se indicarán al programa etiquetando en la variable ISEC(2,I), a cada conjunto de equipos con un número diferente, el cual deberá respetar la siguiente convención:

- 0 Equipos que no estén comprendidos en un ciclo.
- 1 Equipos comprendidos en ciclos formados sólo por

especificaciones de diseño e ISIM=SIMCON.

- 2 Equipos comprendidos en ciclos formados sólo por especificaciones de diseño e ISIM=SIMSIN.
- 3 Equipos comprendidos en ciclos formados sólo por corrientes de recirculación e ISIM=SIMSIN.
- 4-N Equipos comprendidos en ciclos formados por especificaciones de diseño y corrientes de recirculación; o cuando los equipos estén comprendidos en ciclos formados sólo por corrientes de recirculación e ISIM=SIMREC.

Pueden definirse tantos ciclos como sean necesarios, y no importa si con un mismo número se etiquetan dos o más ciclos diferentes, siempre y cuando se respete la convención anterior y se delimiten bien los equipos que forman cada ciclo.

Cabe recordar que las etiquetas de todos los equipos deben estar incluidas una sola vez en el vector ISEC(1,I), y en ese mismo orden se alimentarán las etiquetas de los ciclos a quienes pertenecen en ISEC(2,I); por lo tanto, el número de elementos en cada uno de los siguientes registros deberá ser igual al número total de equipos (NE), y tendrá que utilizarse en todo momento Formato libre.

REGISTRO	VARIABLE	SIGNIFICADO
1	ISEC(1,I) I=1,NE	Secuencia de cálculo.
2	ISEC(2,I) I=1,NE	Número del ciclo al que pertenece el equipo ISEC(1,I).

CAPITULO IV

APLICACION DE SIMULADOR

4.1 MODALIDADES DEL PROGRAMA

SIMULADOR está orientado a la solución de cuatro tipos de problemas de simulación de procesos químicos en estado estacionario:

- a) Procesos de simulación simple.
- b) Procesos con corrientes de recirculación.
- c) Procesos con especificaciones de diseño.
- d) Procesos con corrientes de recirculación y especificaciones de diseño.

En el presente capítulo se estudiará el funcionamiento del simulador en cada uno de los problemas antes mencionados para probar las modificaciones realizadas, además de mostrar al usuario la forma de utilizar a **SIMULADOR**.

Para ello se seleccionaron tres procesos comúnmente empleados en esta clase de estudios: la sección de separación de etano y gas natural de una planta criogénica, el problema de "los cuatro tanques" de Cavett y una torre de destilación para la separación de hidrocarburos.

4.1.1 Procesos de simulación simple (SIMPLA)

Estos procesos son aquellos en los que no se tienen corrientes de recirculación ni especificaciones de diseño. En la figura (4.1) se muestra esquemáticamente lo que sería el

diagrama de flujo de uno de ellos, representándose a los equipos por medio de círculos y a las corrientes como flechas.

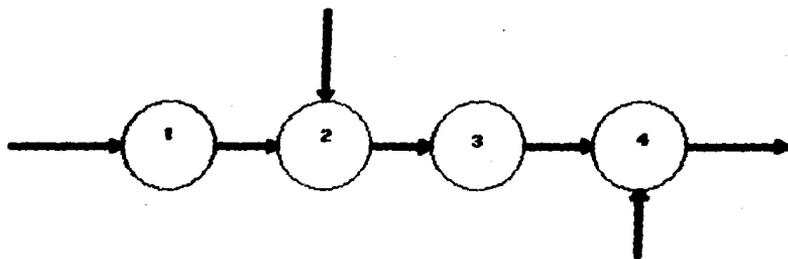


FIGURA 4.1 PROBLEMA DE SIMULACION SIMPLE

En la solución del sistema, sólo es necesario dar las especificaciones completas de las corrientes de alimentación (temperatura, presión, flujo y composición) y las características de operación de los equipos (número de platos en la torre de destilación, incremento de presión en la bomba, área de transferencia de calor del cambiador de calor, etc.), y el simulador calcula las características de las demás corrientes de proceso. Un ejemplo de este tipo de proceso se muestra en el Problema I.

4.1.2 Procesos con corrientes de recirculación (SINPEC)

Se refieren a los sistemas que contienen recirculaciones de materia y/o energía. En ellos se pueden identificar tres tipos de ciclos: (A) simples, (B) anidados y (C) entrelazados (ver figura 4.2).

Desde el punto de vista del usuario, a excepción de las

estimaciones iniciales, las cuales se introducen desde el archivo de datos, las demás resultan transparentes para él, es decir, el programa se encarga de efectuar todas las estimaciones adicionales que requieren. Para hacerlo el simulador cuenta con los métodos de convergencia descritos en el Capítulo II.

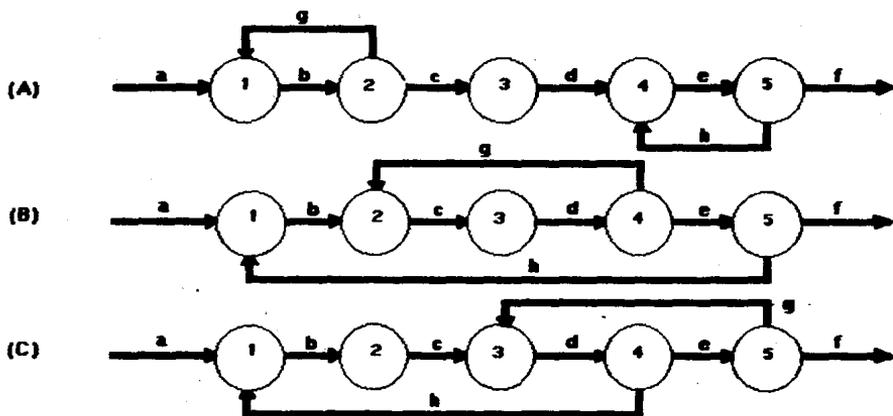


FIGURA 4.2 PROBLEMAS DE SIMULACION CON CORRIENTES DE RECIRCULACION

Es importante definir correctamente los circuitos independientes del proceso, las variables de corte y la secuencia de solución, de tal forma que impliquen el menor número de cálculos para el simulador.

En la elección de los circuitos independientes se recomienda definir a aquellos ciclos que involucren el menor número de equipos comprendidos en los circuitos, por ejemplo, en el esquema (A) de la figura anterior, el plantear un ciclo

desde el equipo 1 hasta el 5 implicaría el cálculo innecesario del equipo 3 cada vez que realice una iteración, esto se evita planteando dos ciclos: el primero con los equipos 1 y 2 y el segundo con los equipos 4 y 5; en el esquema (B), definir dos ciclos 2-3-4 y 1-2-3-4-5 sería inadecuado dado que con la definición del segundo circuito es suficiente; y en el último esquema podrían definirse erróneamente los ciclos 1-2-3-4 y 3-4-5 en lugar de uno sólo: 1-2-3-4-5.

Una vez establecidos los circuitos se deben definir las corrientes de corte, por ejemplo, para (A), identificando los ciclos 1-2 y 4-5, podrían seleccionarse las corrientes (g) o (b) y (e) o (h) respectivamente; para el ciclo 1-2-3-4-5 de (B), las corrientes a elegir serían la corriente (c) o la corriente (d) o las corrientes (h) y (g); y en (C) la corriente (d) o las corrientes (h) y (g).

Dentro de las corrientes de corte deben seleccionarse aquellas variables a las que se les pueda suministrar buenos estimados iniciales, o utilizar sólo las variables que aseguren la convergencia completa del sistema, pues de lo contrario, se consumirá más tiempo de cómputo en la solución del sistema.

De lo anterior se observa que el tiempo de procesamiento, y con ello el costo de una simulación, depende de la experiencia que tenga el usuario en los puntos antes mencionados. Como tal experiencia no es usual, en el Problema III se hará el estudio comparativo entre los métodos de convergencia (Sustituciones Sucesivas, Wegstein Acotado),

Relajación Acotado y Broyden), partiendo en todos los casos con valores de cero en las variables de corte, lo cual permitirá un análisis más objetivo. En el estudio no se incluirán los métodos de Wegstein Modificado y Relajación Modificado debido a que en ellos hay que alimentar parámetros que impedirían compararlos con los otros métodos.

4.1.3 Procesos con especificaciones de diseño (SIDCON)

En esta categoría se encuentran aquellos sistemas cuya solución consiste en encontrar a las variables de operación de equipos o corrientes (variables libres), que satisfagan un parámetro especificado en un equipo o corriente del proceso (especificaciones de diseño), y que no tengan ninguna corriente de recirculación.

Se pueden agrupar en cinco casos :

- a) La variable libre pertenece a la corriente de alimentación y la especificación de diseño a una corriente intermedia o final.
- b) La variable libre pertenece a la corriente de alimentación y la especificación a un equipo.
- c) La variable libre pertenece a un equipo y la especificación a una corriente intermedia o final.
- d) La variable libre pertenece a un equipo y la especificación a otro equipo.
- e) La variable libre y la especificación pertenecen al mismo equipo.

En la figura (4.3) se esquematizan los cinco casos, siendo simbolizados por círculos las variables libres y por cuadros

las especificaciones de diseño.

Estos ejemplos muestran a las variables y especificaciones en equipos contiguos para simplificación de los esquemas, pero ellos pueden estar tan alejados en el diagrama de proceso como se requiera.

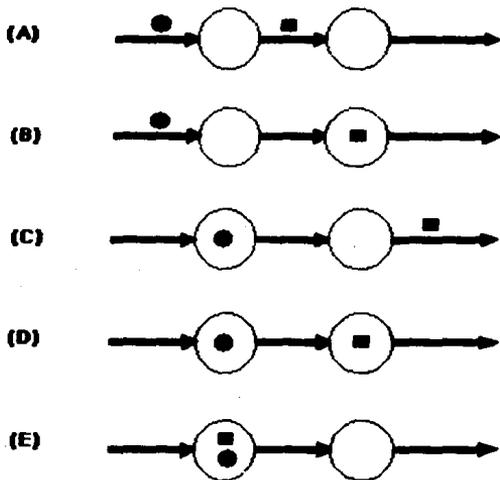


FIGURA 4.3 PROBLEMAS DE SIMULACION CONTROLADA SIN CORRIENTES DE RECIRCULACION

Los equipos y corrientes comprendidos entre aquellos que contengan a las variables libres y especificaciones de diseño, forman los denominados circuitos de control. Estos circuitos se pueden encontrar combinados de la misma forma que los circuitos de las corrientes de recirculación, es decir, en forma simple, anidados o entrelazados (ver figura 4.4).

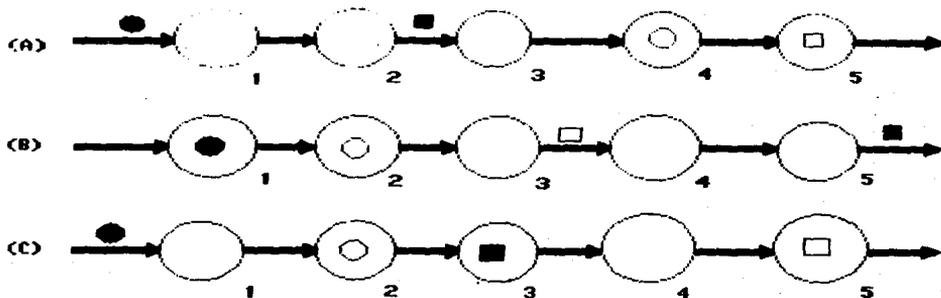


FIGURA 4.4 TIPOS DE CIRCUITOS DE CONTROL

El circuito de solución en estos casos se establece desde el equipo que contenga a la primera variable libre, o que reciba a la corriente de alimentación que contiene a la variable; y como último equipo al que contenga a la última especificación, o del que salga la corriente con la última especificación. En los ejemplos de la figura (4.4), el ciclo sería en todos los casos el 1-2-3-4-5 debido a que: en (A) y (C) la primera variable libre se encuentra en la corriente de alimentación al equipo 1 y la última especificación de diseño está contenida en el equipo 5; y en (B) la primera variable libre está en el equipo 1 y la última especificación en la corriente de salida del equipo 5.

La flexibilidad que se tiene para elegir cualquier característica de una corriente o equipo como variable libre, facilita el caer en planteamientos irreales como serían: utilizar una variable libre de una corriente o equipo que se

encuentre después del que contiene a la especificación en la secuencia de solución, lo que no respeta la funcionalidad entre ellos; elegir como variable libre a alguna de las características de una corriente intermedia, pues esto significaría que está faltando el equipo y/o corriente que produce el cambio; o especificar un parámetro que no pueda alcanzarse en este proceso.

Por lo tanto, es necesario tomar en cuenta las siguientes consideraciones en el planteamiento del problema: seleccionar variables que verdaderamente influyan sobre la especificación de diseño, elegir variables libres que puedan ser modificadas en la realidad para generar resultados prácticos, estudiar la posibilidad de que el valor fijado de la especificación pueda ser obtenido con el proceso y proporcionar las mejores estimaciones iniciales posibles para las variables libres.

Con el Problema II se ejemplifica el uso de la modalidad SIMCON, remarcándose la importancia que representa el tener esta alternativa dentro de SIMULADOR.

4.1.4 Procesos con corrientes de recirculación y especificaciones de diseño (SIMSIM)

Este grupo de problemas comprende a aquellos sistemas en cuyo diagrama de flujo se tienen por lo menos una corriente de recirculación y una especificación de diseño (figura 4.5).

En el esquema se pueden apreciar los tres casos que suelen encontrarse en este tipo de problemas:

a) Procesos con los ciclos de control y recirculación

aislados.

b) Procesos con los ciclos de control y recirculación anidados.

c) Procesos con los ciclos de control y recirculación entrelazados.

Todos estos sistemas son resueltos en la modalidad SIMSIM, para lo cual el usuario debe plantear aquellos circuitos que comprendan a los ciclos de recirculación y control con el menor número de equipos posible sin importar el que queden ambos tipos de ciclos incluidos en un mismo circuito; por ejemplo, en el caso (A) de la figura anterior se tendría que establecer el circuito formado por los equipos 1 y 2, para el ciclo de control, y el 3-4-5 para el ciclo impuesto por la corriente de recirculación; a diferencia del caso (B) en donde el circuito sería el 1-2-3-4-5, y para (C) el circuito 1-2-3-4.

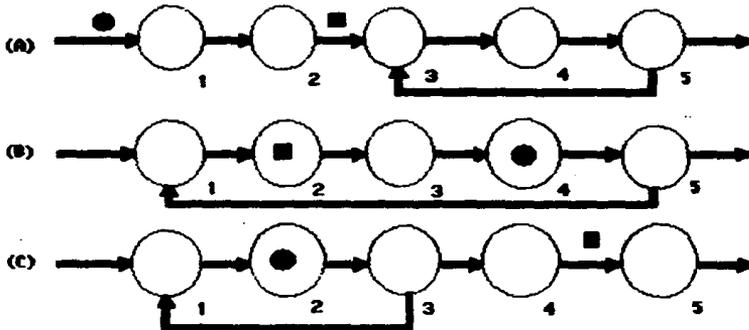


FIGURA 4.5 PROBLEMAS DE SIMULACION CONTROLADA CON CORRIENTES DE RECIRCULACION

Al contarse con corrientes de recirculación en el sistema se abre una nueva posibilidad para la simulación controlada, y es el hecho de poder elegir variables libres que se encuentren en algún equipo posterior a la corriente o equipo en el que esté la especificación de diseño, existiendo una dependencia entre ellos por la presencia de la recirculación (caso B anterior).

En los problemas de esta sección, se requieren suministrar las estimaciones iniciales de las variables de corte y variables libres para poder construir la matriz jacobiana empleada en el método de solución de Broyden. Para las variables de corte, en caso de no contar con estimaciones adecuadas, existe la posibilidad de producirlas mediante cualquiera de los métodos de aceleración lineal o no acelerados disponibles en SIMULADOR, quedando a criterio del usuario la selección del número de iteraciones utilizadas para su generación. Este número de iteraciones se recomienda entre 3 y 5, pues un número menor todavía no genera valores confiables y uno mayor es innecesario dada la potencialidad que tiene el método de aceleración multivariable. Más aún, si resultara insuficiente el número de iteraciones, el programa tiene la facultad de aumentarlo hasta producir dichos valores, o en un momento dado, si el sistema se resuelve durante las iteraciones iniciales, el programa automáticamente detiene su proceso para presentar los resultados.

Se recomienda utilizar como método de inicialización de variables al de Sustituciones Sucesivas por su estabilidad

durante la convergencia (13), además de que cualquiera de los otros métodos involucra la ejecución de por lo menos tres sustituciones antes de aplicar la primera aceleración (ver sección 2.1.2).

El suministro de buenos estimados iniciales para las variables libres no debe representar gran dificultad al usuario, puesto que el estar usando esta modalidad dentro de un sistema, implica ya cierta familiaridad de éste hacia el proceso.

La comprobación de convergencia del sistema se hace con la comparación entre la norma euclidiana de las funciones error, y la tolerancia suministrada por el usuario (ver sección 2.2.2). Esta tolerancia se recomienda sea fijada de un 0.1 a un 0.01 % de la magnitud de la mayor de las especificaciones de diseño o variables de corte, de tal forma que no presente problemas de convergencia pero que al mismo tiempo el error sea mínimo.

Los porcentajes que se fijan para la perturbación se recomiendan sean menores o cuando mucho iguales a los valores establecidos para la tolerancia (11). Esto se hace con el propósito de que las aproximaciones del Jacobiano sean las mejores posibles, y que verdaderamente direccionen el sistema hacia la convergencia con el menor número de cálculos.

Las recomendaciones hechas en esta sección para la modalidad SIMSIM, son en general válidas para las otras modalidades.

En el Problema IV se ejemplifican algunos casos desarrollados para facilitar el entendimiento de su uso y

potencialidad.

4.2 PLANTEAMIENTO DE LOS PROBLEMAS

Antes de enumerar los pasos a seguir en el planteamiento de un problema específico, cabe recordar al usuario tener siempre en mente el sentido físico del proceso, pues ello le ayudará a extraer la mayor información posible de los resultados, y le permitirá manejar el programa de forma más eficiente.

Primeraente, el usuario debe discernir cuál es la modalidad del simulador que se debe aplicar al problema específico en cuestión. Para ello tiene que realizar el siguiente análisis:

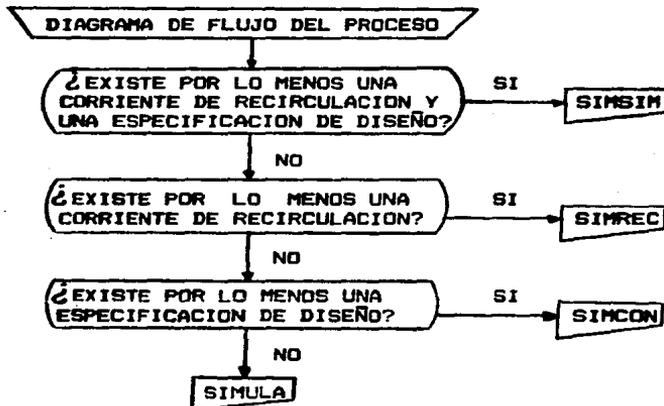


FIGURA 4.6 DIAGRAMA DE FLUJO PARA LA SELECCION DE LA MODALIDAD

Una vez elegida la modalidad, hay que dirigirse a la sección de este capítulo en donde se discuta sobre ella, con

el objeto de observar las recomendaciones pertinentes.

En seguida se debe referir el usuario al Capítulo III para proceder a preparar el archivo de datos, y finalmente, iniciar el proceso de cálculo.

A continuación se presentan los cuatro problemas que fueron seleccionados para mostrar el uso de SIMULADOR. En cada uno de ellos se incluye el diagrama de proceso, archivo de entrada y tablas de los resultados más representativos.

Todas las corridas del simulador se hicieron en una computadora BURROUGHS modelo 7800. Los tiempos de procesamiento consumidos en la solución de los problemas son representativos del comportamiento del programa, pero la factibilidad de reproducirlos dependerá de algunos aspectos ajenos al usuario. Es por ello que se decidió realizar cada corrida varias veces y reportar sólo los tiempos promedio obtenidos.

Los archivos de salida del programa contienen una gran cantidad de información que es innecesaria para los fines de este trabajo, por lo que no se consideró conveniente incluirlos.

En el trabajo de M. Hidalgo y G. Ortega (7) pueden verse otros ejemplos del uso de SIMULADOR.

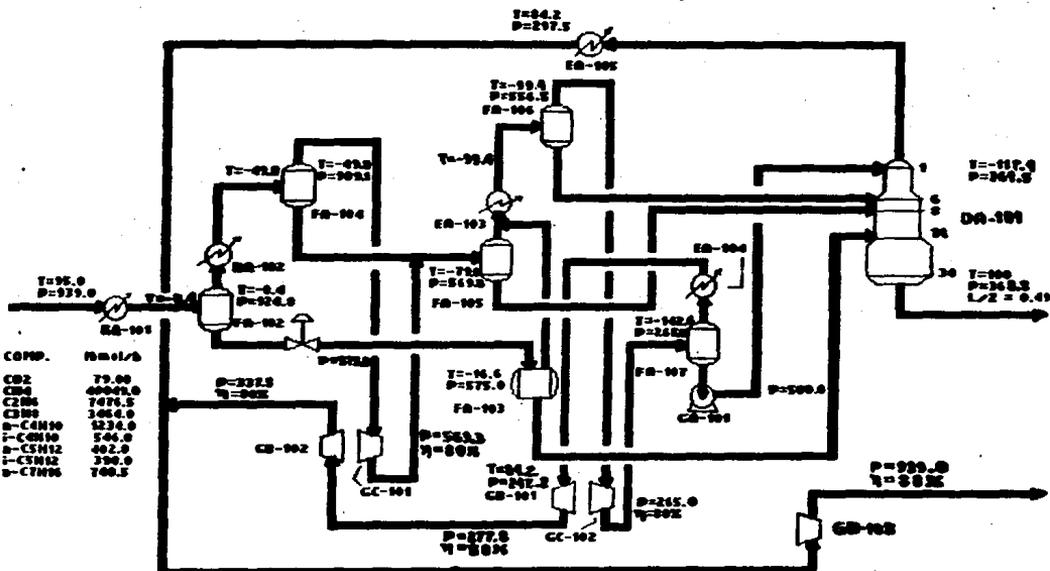
4.2.1 Problema I - Aplicación de la opción SIMULA

Este problema tiene por objeto ilustrar el planteamiento básico para la simulación de un proceso, ejemplificar el uso de la modalidad SIMULA y mostrar la forma de alimentar datos a una gran parte de los equipos con los que cuenta el

programa.

Descripción

En la figura (4.7) se muestra el diagrama de proceso simplificado de una unidad recuperadora de etano y licuables para la obtención de gas natural y etano e hidrocarburos más pesados, utilizando el proceso criogénico con turbo expansión.



NOTA:
 T= TEMPERATURA EN °F
 P= PRESION EN psia

FIGURA 4.7 DIAGRAMA DE PROCESO DE UNA UNIDAD RECUPERADORA DE ETANO Y GAS NATURAL.

Durante el proceso, el gas es sometido a enfriamientos y expansiones sucesivas, hasta alcanzar la temperatura

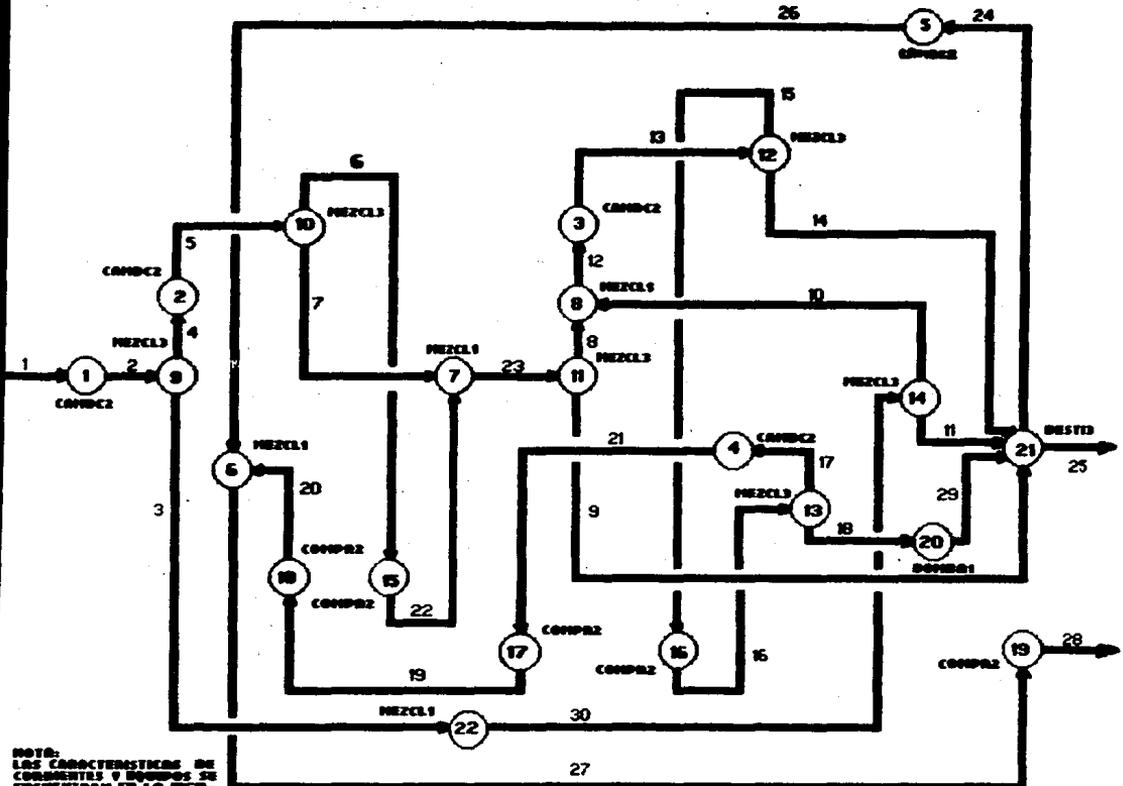
necesaria que permita la separación de la mezcla de hidrocarburos.

El gas se enfría en dos trenes de intercambio térmico con gas residual y propileno refrigerante, completando su enfriamiento por expansión a través de dos turboexpansores. Además se tienen intercalados en los trenes de enfriamiento, tanques separadores para eliminar los líquidos que se producen por el enfriamiento progresivo. Al final de los trenes se obtienen cuatro corrientes líquidas que se alimentan a los platos 1, 6, 8 y 18 de la torre demetanizadora. Como productos se obtienen el gas natural por el domo de la torre, y por el fondo los licuables (etano y más pesados), con una relación de 0.49 con respecto a lo alimentado en la torre.

Planteamiento

Una vez entendido el proceso, es recomendable elaborar un diagrama en bloques del sistema, con el fin de vaciar en él sólo la información necesaria a alimentar al simulador (numeración de las corrientes y equipos, especificaciones de los equipos, estimaciones iniciales y datos de las corrientes de alimentación), como se muestra en la figura (4.8).

Este tipo de diagramas permiten visualizar más fácilmente la existencia de corrientes de recirculación, las variables libres que pueden ser modificadas para alcanzar alguna especificación de diseño, además de facilitar la definición de la secuencia de cálculo.



NOTA:
 LOS CARACTERÍSTICAS DE
 LOS CORRIENTES O EQUIPOS SE
 ENCONTRARÁN EN LA FIGURA 4.7

FIGURA 4.8 DIAGRAMA SIMPLIFICADO DE PROCESO DEL PROBLEMA I

El proceso bajo estudio no presenta ninguna corriente de recirculación ni contiene especificaciones de diseño, por lo que será resuelto bajo la modalidad SIMULA.

El archivo de alimentación de datos al simulador para este problema se muestra en la tabla (4.1).

dos corrientes de producto.

TABLA 4.2 RESULTADOS DE LOS EQUIPOS DEL PROBLEMA I

EQUIPO	CARACTERISTICA	VALOR
EA-101	CARGA TERMICA (Btu/h)	-1.1105E+08
EA-102	CARGA TERMICA (Btu/h)	-4.3139E+07
EA-103	CARGA TERMICA (Btu/h)	-1.6205E+07
EA-104	CARGA TERMICA (Btu/h)	5.7993E+07
EA-105	CARGA TERMICA (Btu/h)	2.9921E+07
GC-101	POTENCIA (HP)	-3.9867E+03
GC-102	POTENCIA (HP)	-3.1767E+03
GB-101	POTENCIA (HP)	1.8964E+03
GB-102	POTENCIA (HP)	2.8141E+03
GA-101	PRESION DE DESCARGA (psia)	2.3500E+02
DA-101	FLUJO DE METANO (lbmol/h)	1.3728E+04

TABLA 4.3 CORRIENTES DE PRODUCTO DEL PROBLEMA I.

25
 *** 25 ***
 D.

 [FASE LIQUIDA]

PRESION = .368000E+03 PSIA

TEMPERATURA = 84.27 CF

CALOR TOTAL = .7542823E+08 BTU/MRA.

COMPONENTE	LB MOL/MRA LIQUIDO	LB/MRA	LB MOL/MRA VAPOR	LB/MRA
BENT.	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
METANO	1.3728E+04	2711028E+04	0.0000E+00	0.0000E+00
ETANO	1.1105E+08	4477938E+08	0.0000E+00	0.0000E+00
PROPANO	4.3139E+07	1725502E+07	0.0000E+00	0.0000E+00
N-BUTANO	1.6205E+07	6482008E+06	0.0000E+00	0.0000E+00
I-PENTANO	5.7993E+07	2319720E+07	0.0000E+00	0.0000E+00
N-HEPTANO	2.9921E+07	1196840E+06	0.0000E+00	0.0000E+00
WATER	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
TOTAL	1.3680E+03	349080E+06	0.0000E+00	0.0000E+00
FLUJO VOLUMETRICO	881455E-03	BARILS/DIA	0.	PCS/DIA

26
 *** 26 ***
 D.

 [FASE VAPOR]

PRESION = .939000E+03 PSIA

TEMPERATURA = 293.02 CF

CALOR TOTAL = .2786819E+09 BTU/MRA.

COMPONENTE	LB MOL/MRA LIQUIDO	LB/MRA	LB MOL/MRA VAPOR	LB/MRA
BENT.	0.0000E+00	0.0000E+00	1.2707E+08	5082948E+08
METANO	0.0000E+00	0.0000E+00	1.3728E+04	5491028E+04
ETANO	0.0000E+00	0.0000E+00	4.3139E+07	1725502E+07
PROPANO	0.0000E+00	0.0000E+00	1.6205E+07	6482008E+06
N-BUTANO	0.0000E+00	0.0000E+00	5.7993E+07	2319720E+07
I-PENTANO	0.0000E+00	0.0000E+00	2.9921E+07	1196840E+06
N-HEPTANO	0.0000E+00	0.0000E+00	2.1881E+07	875240E+06
TOTAL	0.	0.	4078307E+05	1683949E+08
FLUJO VOLUMETRICO	0.	BARILES/DIA	389694E+09	PCS/DIA

4.2.2 Problema II - Aplicación de la opción SIMCON

De los equipos empleados en procesos químicos, las torres de destilación ocupan uno de los lugares más importantes dentro de la simulación debido a la frecuencia con la que aparecen en los diferentes sistemas, y a la gran variedad de situaciones interesantes que puede presentar su estudio. Por ello se ilustrará el uso de la modalidad SIMCON utilizando uno de estos equipos.

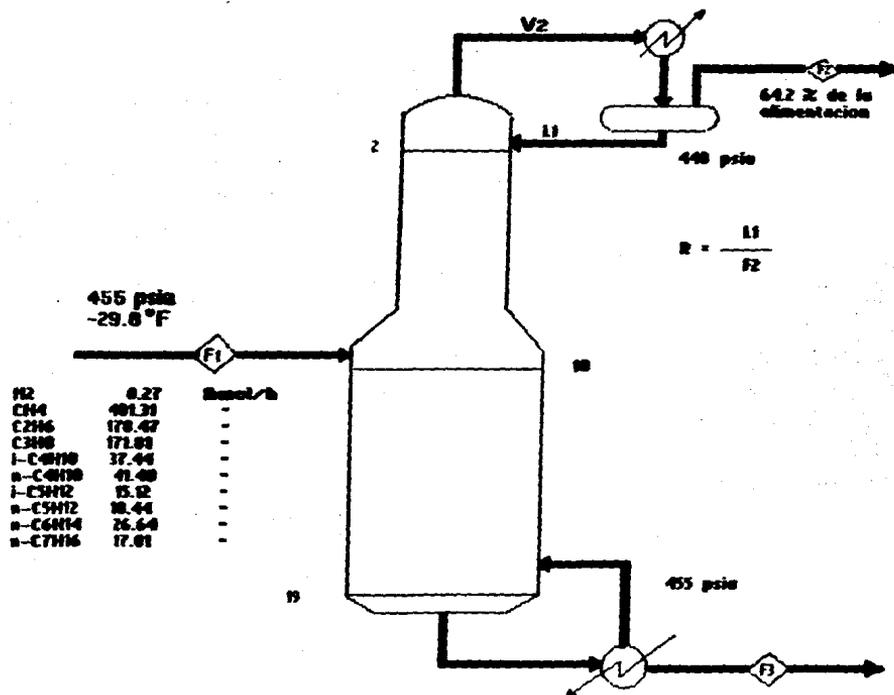


FIGURA 4.9 DIAGRAMA DE UNA TORRE DEETANIZADORA

Descripción

La torre destanizadora consta de 18 platos ideales, un condensador y un rehervidor parciales. Tiene una sola alimentación, la cual es introducida en el plato 10 a 455 psia y -29.8°F como se indica en la figura (4.9). El producto del domo (corriente 2), es vapor y corresponde al 64.2% de la alimentación. El producto del fondo (corriente 3), es líquido y corresponde al 35.8% de la alimentación. La presión en el domo es de 440 psia y en el fondo de 455 psia.

La simulación controlada se presenta comúnmente cuando se requiere investigar si un equipo existente puede ser utilizado para una operación determinada. Con este proceso se mostrarán dos casos en los cuales se verá cómo se comporta el programa cuando se le suministran a las variables libres estimados iniciales cercanos o alejados de la solución.

Plantamiento CASO A

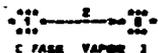
Se requiere saber si modificando la relación de reflujo, la torre de destilación existente es capaz de separar el 97.7% del etano alimentado, es decir, obtener 174.33 lbmol/h de etano en la corriente 2. Por lo tanto, el reflujo de la torre será la variable libre y el flujo de etano en la corriente 2 la especificación de diseño.

El archivo de datos para la primera corrida se indica en la tabla (4.4), y los datos para las otras corridas de este caso difieren tan sólo en el tercer elemento de la línea 1900, de acuerdo al estimado inicial del reflujo que se suministre.

0.535, el cual se obtuvo partiendo de estimados iniciales entre 0.4 y 0.6; mientras que en el segundo conjunto se probaron reflujos iniciales entre 0.9 y 8.0 para llegar a un valor final de 6.983.

Aunque el reflujo final es muy diferente entre ambos conjuntos, sus perfiles de composición dentro de la torre y en las corrientes de salida se parecen mucho, por lo que las características de las corrientes de producto mostradas en la tabla (4.6) son representativas de cualquiera de las corridas anteriores.

TABLA 4.6 CORRIENTES DE PRODUCTO DEL PROBLEMA II

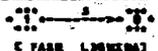


PRESION = .448000E+03 PSIA

TEMPERATURA = -35.00 CF

CALOR TOTAL = -.2430199E+07 BTU/HRA

COMPONENTE	LIQUIDO		VAPOR	
	LB MBL/HRA	LB/HRA	LB MBL/HRA	LB/HRA
HIDRO	0.0	0.0	0.0	0.0
ETANO	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPANO	0.0	0.0	0.0	0.0
I-ETANO	0.0	0.0	0.0	0.0
A-ETANO	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPANO	0.0	0.0	0.0	0.0
BUTANO	0.0	0.0	0.0	0.0
PENTANO	0.0	0.0	0.0	0.0
HEXANO	0.0	0.0	0.0	0.0
TOTAL	0.0	0.0	578388E+03	117946E+05
FLUJO VOLUMETRICO	0.	BARRILES/DIA	5526723E+07	PCB/DIA



PRESION = .435000E+05 PSIA

TEMPERATURA = 234.86 CF

CALOR TOTAL = -.3572993E+07 BTU/HRA

COMPONENTE	LIQUIDO		VAPOR	
	LB MBL/HRA	LB/HRA	LB MBL/HRA	LB/HRA
HIDRO	2.91032E+08	5.70703E+07	0.0	0.0
ETANO	1.09172E+08	2.18344E+07	0.0	0.0
PROPANO	3.74399E+07	7.48798E+06	0.0	0.0
I-ETANO	1.17899E+08	2.35798E+07	0.0	0.0
A-ETANO	1.17899E+08	2.35798E+07	0.0	0.0
PROPANO	1.17899E+08	2.35798E+07	0.0	0.0
BUTANO	1.17899E+08	2.35798E+07	0.0	0.0
PENTANO	1.17899E+08	2.35798E+07	0.0	0.0
HEXANO	1.17899E+08	2.35798E+07	0.0	0.0
TOTAL	3.29418E+09	6.58836E+08	0.0	0.0
FLUJO VOLUMETRICO	2181821E+04	BARRILES/DIA	0.	PCB/DIA

Es de notarse que los intervalos fueron impuestos por limitaciones en las funciones del módulo de la torre para manejar los otros valores de operación, como fué el caso de la primera corrida, y no por problemas en el método de solución ya que en las zonas en donde la torre trabajó de forma adecuada, el programa convergió rápidamente hacia un mismo valor de reflujo final, con el cálculo de una sola matriz jacobiana y diferentes números de aproximaciones del Jacobiano mediante la fórmula de Householder (número de iteraciones).

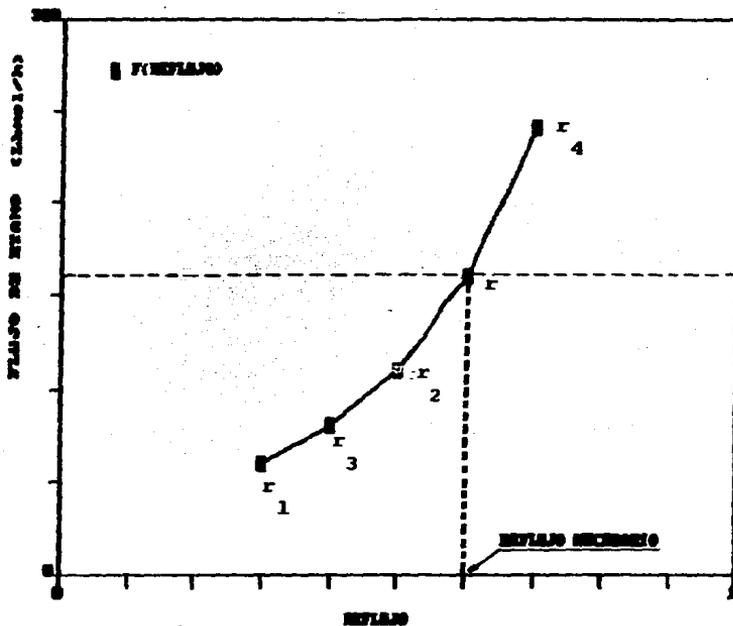


FIGURA 4.10 SOLUCION CUALITATIVA DEL PROBLEMA II - CASO A CON LA MODALIDAD SIMULA

Resultados CASO B

Se probaron varias condiciones iniciales que permitieran resolver el sistema, encontrándose para las estimaciones del reflujo un intervalo de 0.4 a 0.6 y en la temperatura de alimentación de 20 a -40 F, siendo las cotas nuevamente impuestas por limitaciones en el módulo de la torre de destilación. Los resultados fueron vaciados en la tabla (4.8).

TABLA 4.8 RESULTADOS DEL PROBLEMA II - CASO B

CORRIDA	REFLUJO		TEMP. (°F)		NUMERO DE		TIEMPO DE PROCESO (S)
	INIC.	FINAL	INIC.	FINAL	JAC.	ITER.	
1	0.4	0.533	20	-35.1	1	8	354.80
2	0.4	0.531	-40	-36.8	2	4	306.95
3	0.6	0.535	20	-34.2	1	5	230.37
4	0.6	0.531	-40	-36.7	2	2	274.71

Puede notarse que la introducción de una especificación más al problema, representó un aumento proporcional en el tiempo de cómputo por el incremento en el número de iteraciones.

Los valores finales a los que llegaron las variables libres en todas las corridas son muy parecidos, aunque no son exactamente los que se esperaban (0.545 y -29.8°F). Esto se debe a que numéricamente es posible encontrar varias condiciones de operación que satisfagan la especificación, pero no puede asegurarse que todos ellos sirvan, por lo que sólo hay que tomarlos como buenas aproximaciones de la realidad.

El resolver el mismo sistema mediante las corridas individuales con la modalidad SIMULA, implicaría el plantear un sistema de cálculo similar al descrito para el caso A, pero ahora construyendo esta gráfica para cada temperatura supuesta hasta cumplir con las dos especificaciones simultáneamente (ver figuras 4.11a y 4.11b).

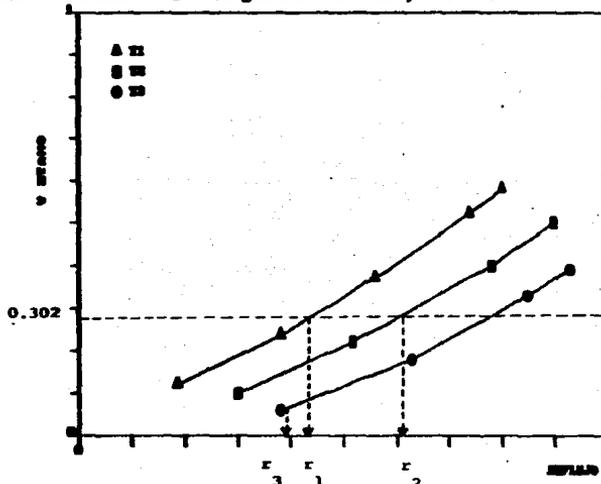


FIGURA 4.11a SOLUCION CUALITATIVA DEL PROBLEMA II - CASO B CON LA MODALIDAD SIMULA.

Si se toma en cuenta el grado de dificultad que adquiere el problema al trabajar con dos o más especificaciones de diseño, manejar variables libres como la temperatura que tienen un rango muy amplio de valores que pueden suponerse, o una alta sensibilidad del proceso a las modificaciones de estas variables, es difícil pensar que un usuario a base de experiencia pudiera obtener mejores resultados en menor tiempo; ello hace patente la importancia que tiene la

modalidad SIMCON en el nuevo programa.

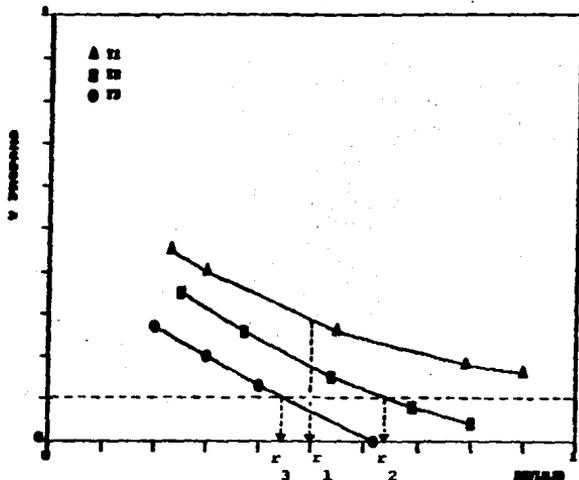


FIGURA 4.11b SOLUCION CUALITATIVA DEL PROBLEMA II - CASO B CON LA MODALIDAD SIMULA.

4.2.3 Problema III - Aplicación de la opción SIMREC

El problema de "los cuatro tanques" propuesto por Cavett en 1963 fué seleccionado para ilustrar el uso de las modalidades SIMREC y SIMSIM, debido a que aún siendo un sistema relativamente sencillo, cuenta con un número grande de corrientes de recirculación que permiten extrapolar sus resultados a procesos más complejos.

Además, el sistema se presta para estudiar el comportamiento de los métodos de convergencia disponibles en SIMULADOR, sin que ésto represente un alto consumo de tiempo de computo.

Descripción

Este problema ha sido ampliamente usado en estudios comparativos de métodos de aceleración y en el análisis de la influencia de la selección de las corrientes de corte sobre la convergencia.

El proceso contiene cuatro unidades isotérmicas de separación súbita, entrelazadas con tres corrientes de recirculación y dos puntos de unión de corrientes. En la figura (4.12) se puede ver el sistema, así como sus condiciones de operación.

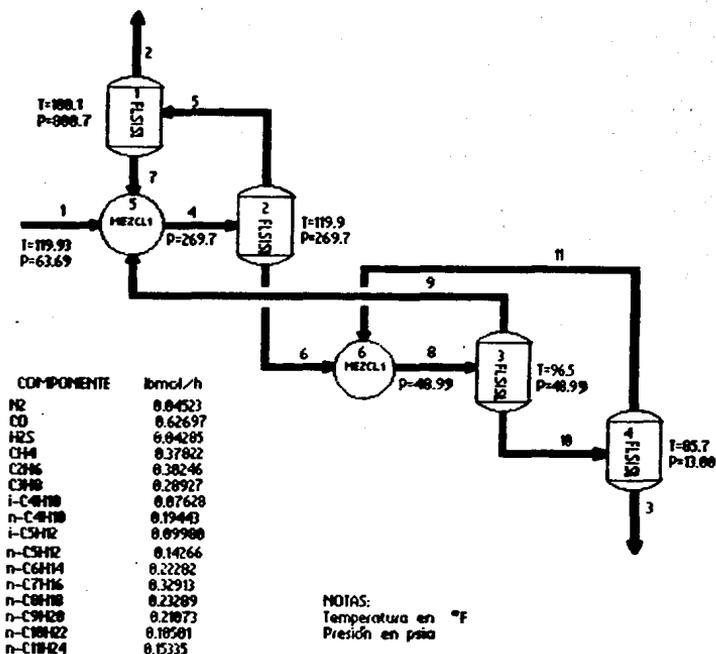


FIGURA 4.12 DIAGRAMA DE PROCESO DEL PROBLEMA CAVETT

Planteamiento

En esta sección se utilizará el problema de Cavett para seleccionar el método de convergencia que mejor se comporte en el presente caso, considerando diferentes grupos de corrientes y variables de corte.

Las conclusiones obtenidas serán particulares del sistema estudiado, sin embargo, si el usuario carece de la experiencia suficiente para seleccionar un método, éstas pueden ayudarle.

Analizando el proceso se encuentran tres conjuntos diferentes de corrientes de corte: (7,9,11), (4,8) y (4,11). Dentro de estas corrientes pueden distinguirse dos clases, las que provienen de un mezclador de corrientes, y las que provienen de los tanques de separación.

En la primera clase pueden elegirse como variables de corte solamente a la carga térmica y el flujo de líquido, puesto que la temperatura en la corriente es constante y las condiciones de mezclado no permiten la existencia de la fase vapor. Las corrientes pertenecientes a la segunda clase aceptan como variables de corte a la carga térmica y el flujo de líquido o vapor; la temperatura queda descartada por ser corrientes que provienen de equipos isotérmicos y no pueden utilizarse ambos flujos por tratarse de corrientes de una sola fase.

Se realizarán corridas en la computadora utilizando los tres conjuntos de corrientes de corte, con los métodos de Sustituciones Sucesivas, Wegstein Acotado, Relajación Acotado y Broyden (inicializado con Sustituciones Sucesivas), para

seleccionar el mejor conjunto de corrientes de corte y descartar a los métodos que resuelvan con menor eficacia el problema.

El estudio comprenderá además la observación de la influencia que tiene sobre el tiempo de procesamiento el emplear diferentes números y tipos de variables de corte.

Para poder comparar los métodos de convergencia se establecieron las siguientes bases:

1. El error final será la norma euclidiana de las diferencias entre los valores estimados y los calculados de las variables de corte en su última iteración.
2. Se obtendrá un número equivalente de iteraciones para el método multivariable, a partir del tiempo total consumido por ésta y la evaluación de un tiempo de cómputo promedio por iteración de los métodos lineales.

$$\text{No. ITER. EQUIV.} = \frac{\text{Tiempo de proceso del método multivariable}}{\text{Tiempo de proceso promedio por iteración de los métodos lineales}}$$

El archivo de datos para la simulación realizada aplicando Sustituciones Sucesivas como método de convergencia, y cuyas variables de corte sean el flujo de líquido de la corriente 7 y el flujo de vapor de las corrientes 9 y 11, se muestra en la tabla (4.9). Cuando se utilicen otros métodos univariados, la única línea que cambia es la 300. Al emplear otros conjuntos de variables de corte pueden verse modificadas las líneas comprendidas entre la 1200 y la 2400, en función del tipo de variable y

Relajación presentó los peores resultados en todos los aspectos.

TABLA 4.11 RESULTADOS DEL PROBLEMA III PARA DIFERENTES METODOS DE CONVERGENCIA Y VARIABLES DE CORTE

CORRIDA	METODO DE CONVERG.	VARIABLES DE CORTE	NUM. DE ITERAC.	TIEMPO DE PROC. (S)	ERROR
1	SUSTDI	FL7, FV9, FV11	38	107.01	4.6415E-04
2	WEGSTE	"	24	86.56	7.1093E-04
3	RELAJA	"	50	195.72	8.3578E-04
4	BROYDE	"	12	41.69	1.1234E-04
5	SUSTDI	FL4, FL8	37	113.15	4.4223E-03
6	WEGSTE	"	33	124.11	3.8402E-03
7	RELAJA	"	8	204.00	1.8861E-02
8	BROYDE	"	15	50.74	9.9983E-06
9	SUSTDI	FL4, FV11	32	94.12	1.6546E-03
10	WEGSTE	"	23	86.41	4.2102E-03
11	RELAJA	"	40	127.95	1.4849E-03
12	BROYDE	"	10	33.70	6.2667E-04

† Después de 50 iteraciones no alcanzó la convergencia

En la figura (4.13) puede apreciarse el comportamiento de los métodos durante las corridas 9, 10 y 11, siendo ésta representativa de cualquiera de los otros casos.

De la figura se observa que los métodos acelerados alcanzan la solución en forma oscilante, a diferencia del método de Sustituciones Sucesivas que lo hace en forma continua; y se corrobora el hecho de que cuando el método de Wegstein funciona, el de Relajación es más ineficiente.

Las corrientes de corte que presentan los mejores tiempos de procesamiento fueron la 4 y 11 con todos los métodos, por lo que exclusivamente con este conjunto se proseguirá el estudio; así mismo, dado que el Broyden y Wegstein mostraron las mayores ventajas, se descartaron los otros dos métodos para el resto del trabajo.

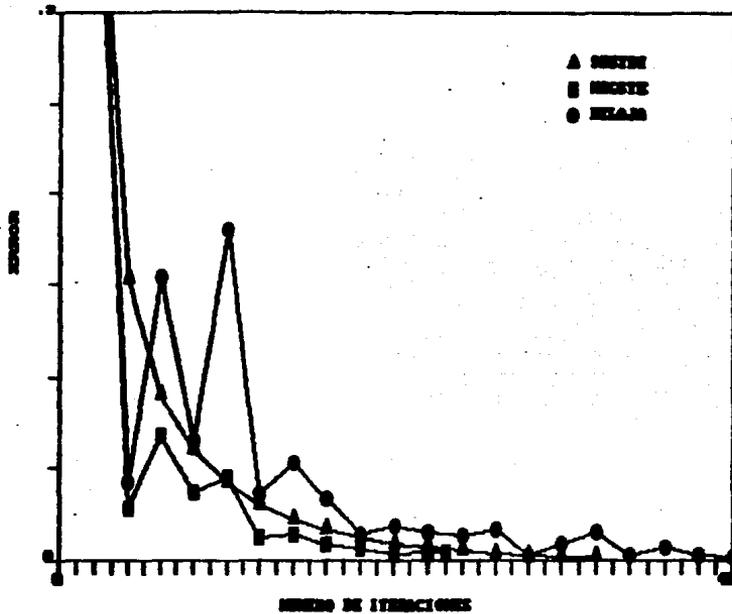


FIGURA 4.13 COMPORTAMIENTO DE LOS METODOS UNIVARIABLES

En las corridas de la tabla (4.12) se utilizaron diferentes números de variables de corte.

TABLA 4.12 INFLUENCIA DEL NUMERO DE VARIABLES DE CORTE

CORRIDA	METODO DE CONVERGENCIA	VARIABLES DE CORTE	TIEMPO DE PROCESO (S)
10	BROSTE	FL4, FV11	86.41
12	BROSTE	"	33.70
13	BROSTE	H4, FL4, FV11	150.15
14	BROSTE	"	53.34
15	BROSTE	H4,FL4,H11,FV11	235.42
16	BROSTE	"	57.24

Estos resultados demuestran que al aumentar el número de variables aumenta también el tiempo consumido, debido a que se tienen que realizar más cálculos: en los métodos lineales durante la comprobación de la convergencia y actualización de las corrientes; y en el multivariable principalmente cuando se construye e invierte la matriz jacobiana.

La tabla (4.13) se obtiene al cambiar el tipo de variable de corte.

TABLA 4.13 INFLUENCIA DEL TIPO DE VARIABLE DE CORTE

CORRIDA	METODO DE CONVERGENCIA	VARIABLES DE CORTE	TIEMPO DE PROCESO (S)
10	WEGSTE	FL4, FV11	86.41
12	BROYDE	"	33.70
17	WEGSTE	H4, FV11	147.79
18	BROYDE	"	57.57
19	WEGSTE	FL4, H11	115.59
20	BROYDE	"	78.83
21	WEGSTE	H4, H11	230.38
22	BROYDE	"	49.66

Como puede verse, cuando se utilizó a la entalpia como variable, los tiempos de cómputo tanto en el método lineal como en el multivariable se vieron incrementados. Esto se debe a que cada nueva estimación de las entalpias involucra la ejecución de una vaporización adiabática durante la actualización de las corrientes de corte, lo cual no es necesario para el flujo de líquido o vapor.

Si se pudiera emplear a la temperatura como variable, consumiría un tiempo similar al que presentan los flujos pues durante la actualización de las corrientes se realiza exclusivamente una vaporización isotérmica.

Del estudio anterior puede concluirse que el método que

presentó las mayores ventajas fue el de Broyden; en primera instancia por ser aproximadamente tres veces más rápido que el resto de los métodos, además de verse menos afectado por la selección del número y tipo de variables, lo cual puede ayudar a un usuario que esté poco familiarizado con la simulación.

Entre los métodos univariados el de Wegstein Acotado fue el más rápido, aunque no presenta tanta estabilidad como el de Sustituciones Sucesivas, y finalmente los resultados colocan al método de Relajación Acotado como el menos eficiente para este problema.

4.2.4 Problema IV - Aplicación de la opción SIMSIN

Se plantearon tres casos utilizando el problema de "los cuatro tanques" de Cavett en los que se involucran además de las variables de corte, las especificaciones de diseño, con el fin de mostrar la utilidad de la simulación simultánea modular.

El conjunto de variables de corte que será usado, está compuesto por el flujo de líquido de la corriente 7 y el de vapor de las corrientes 9 y 11, siendo la tolerancia máxima permitida de $1.0E-04$.

Planteamiento CASO A

Utilizando el sistema mostrado en la figura (4.12), se buscará la presión conveniente en el tanque de separación 4 para obtener una composición en el líquido de salida de 19.23 % en mol de n-heptano. Por lo tanto, la variable libre es la P4 y la especificación de diseño a satisfacer será la

la presión; ello es comprensible ya que al trabajar con un sistema de ecuaciones tan grande como es el simulador, es factible encontrar diferentes soluciones numéricas dependiendo de los valores de partida.

TABLA 4.15 RESULTADOS DEL PROBLEMA IV - CASO A

CORRIDA	PRESION (PSIA)		NUMERO DE		TIEMPO DE
	INICIAL	FINAL	JACOB.	ITERAC.	PROCESO (S)
1	5	11.9	1	8	95.70
2	10	12.3	1	3	117.81
3	20	14.3	1	5	73.65
4	25	14.8	1	8	113.09

Sin embargo, la diferencia entre los resultados no es muy grande si se toma en cuenta el grado de precisión que podría obtenerse al resolver el mismo problema con un simulador secuencial modular, en el que se tendría que alcanzar la solución completa del sistema iterativo impuesto por las variables de corte, para cada valor estimado de la presión, y después corroborar si se cumplió con la composición deseada.

Planteamiento CASO B

Se desea llevar a cabo la separación de una mezcla de hidrocarburos, de tal forma que se cumpla con una composición en la corriente gaseosa producida de 23% en mol de metano y en el producto líquido de 3.33% en mol de propano. Para ello se tomarán como variables libres las temperaturas de los tanques 1 y 4.

TABLA 4.17 RESULTADOS DEL PROBLEMA IV - CASO B

CORRIDA	TEMPERATURA (°F)				NUMERO DE		TIEMPO DE PROCESO (S)
	INICIAL		FINAL		JAC.	ITER.	
	T1	T4	T1	T4			
1	50.1	35.7	80.6	85.5	13	6	319.33
2	130.1	35.7	123.3	86.8	1	8	102.66
3	130.1	115.7	112.3	83.0	1	8	83.74
4	50.1	115.7	102.8	82.9	1	10	83.76

Mediante una simulación simple del problema Cavett se sabe que para un valor de T1 y T4 de 100.1 y 85.7 °F respectivamente, se tienen las composiciones deseadas en este caso, por lo que si se comparan con los obtenidos en las corridas anteriores puede verse que T4 fue encontrada con muy buena aproximación, en tanto que T1 mostró un comportamiento más inestable, desviándose 20 °F aproximadamente, lo cual es todavía aceptable.

No obstante haber sido introducidos estimados iniciales de 50 F alejados de la solución, el programa fué capaz de alcanzar resultados razonables, aunque esto le implicó un mayor esfuerzo, es decir, requirió de un tiempo de cómputo más grande.

A excepción de la primera corrida, el incremento de tiempo que implicó el introducir una especificación más de diseño, es mínimo en relación al aumento de complejidad, pues con sólo imaginar el trabajo que significaría el resolver dos circuitos externos al impuesto por las corrientes de corte, salta a la vista la potencialidad del sistema de solución.

TABLA 4.18 ARCHIVO DE DATOS DEL PROBLEMA IV - CASO C

NO	DESCRIPCIÓN	VALORES
1	FLUJO	1.000E+00
2	FLUJO	1.000E+00
3	FLUJO	1.000E+00
4	FLUJO	1.000E+00
5	FLUJO	1.000E+00
6	FLUJO	1.000E+00
7	FLUJO	1.000E+00
8	FLUJO	1.000E+00
9	FLUJO	1.000E+00
10	FLUJO	1.000E+00
11	FLUJO	1.000E+00
12	FLUJO	1.000E+00
13	FLUJO	1.000E+00
14	FLUJO	1.000E+00
15	FLUJO	1.000E+00
16	FLUJO	1.000E+00
17	FLUJO	1.000E+00
18	FLUJO	1.000E+00
19	FLUJO	1.000E+00
20	FLUJO	1.000E+00
21	FLUJO	1.000E+00
22	FLUJO	1.000E+00
23	FLUJO	1.000E+00
24	FLUJO	1.000E+00
25	FLUJO	1.000E+00

Planteamiento CASO C

Se establecerán los valores de las cargas térmicas en los cuatro tanques de separación como especificaciones de diseño, y las temperaturas de ellos como variables libres. En este caso se buscará aumentar la complejidad del problema para ver como afecta en el desenvolvimiento de SIMULADOR, aunque este planteamiento no tenga una aplicación práctica.

El archivo de datos para la primera corrida, está contenido en la tabla (4.18).

Resultados CASO C

Se probaron temperaturas iniciales de los tanques

separadores en una vecindad de 50 F alrededor de la solución (T1 = 100.1, T2 = 119.9, T3 = 96.5, T4 = 85.7 °F).

Los resultados difieren de los valores esperados en 20 °F, mostrando además una cierta proporcionalidad con respecto a los estimados iniciales. Esto debe ser considerado como una casualidad, pues como puede verse en los casos y problemas anteriores, no se presentó este comportamiento.

TABLA 4.19 RESULTADOS DEL PROBLEMA IV - CASO C

COR:	TEMPERATURA (°F)								NUM. DE JAC:	TIEMPO DE ITER:	PROC. (S)
	INICIAL				FINAL						
	T1:	T2:	T3:	T4	T1:	T2:	T3:	T4			
1	50:	70:	47:	36	83:	108:	77:	74	1	8	94.11
2	80:	100:	77:	66	93:	115:	88:	80	1	6	90.40
3	90:	110:	87:	76	97:	117:	92:	83	1	6	102.33
4	130:	150:	127:	116	110:	128:	111:	96	1	6	98.88
5	150:	170:	147:	136	117:	135:	122:	105	1	7	84.22

A lo largo del problema se intentó mostrar la capacidad del programa para aceptar diferentes estimados iniciales, puntualizando que las limitaciones se presentaron por restricciones de operación en los equipos y no por el método de solución de ecuaciones a nivel proceso.

El tiempo de cómputo para resolver un problema de simulación controlada con corrientes de recirculación, utilizando la modalidad SIMSIM, se ve muy poco afectado al incrementar su complejidad, es decir, al manejar un mayor número de especificaciones de diseño. Contrariamente a esto, el intentar resolver problemas de la misma envergadura con

simuladores secuenciales modulares, involucrará un esfuerzo excesivo para el usuario y un consumo de tiempo notoriamente mayor.

Finalmente, el grado de exactitud que se alcanza en los valores finales de las variables libres, es lo suficientemente bueno como para llevar a cabo la traducción de los resultados matemáticos a la aplicación práctica en laboratorios, plantas piloto o inclusive a nivel industrial.

CAPITULO V

CONCLUSIONES

Se le dió el nombre de SIMULADOR al programa originado en el presente trabajo, el cual representa los balances de materia y energía de un proceso en estado estacionario en el que se involucran corrientes de recirculación y/o especificaciones de diseño.

Este programa se obtuvo al modificar un simulador secuencial modular, el cual mostraba altos consumos de tiempo de cómputo al resolver procesos con corrientes de recirculación o problemas de simulación controlada, notándose una mayor ineficiencia a medida que los problemas crecían en complejidad.

Considerando las ventajas que tiene la técnica simultánea modular sobre la secuencial al resolver en un mismo nivel de convergencia los ciclos impuestos por las corrientes de recirculación, especificaciones de diseño y funciones objetivo; aprovechando la gran cantidad de paquetería disponible a nivel modular, se decidió orientar el funcionamiento del nuevo programa hacia la técnica simultánea modular.

Las dificultades encontradas durante la construcción del simulador simultáneo modular se debieron principalmente a la necesidad de entender la estructura y funcionamiento del programa original antes de poderlo modificar.

El cambio más importante consistió en la introducción de un método multivariable (Método de Broyden), que permite resolver las ecuaciones impuestas por las variables de corte y especificaciones de los equipos al mismo tiempo.

Se resolvieron algunos ejemplos con el fin de probar el comportamiento de SIMULADOR, encontrándose que el método de Broyden es por lo menos tres veces más rápido que los métodos univariables del simulador en los problemas con corrientes de recirculación y es menos sensible al número, tipo de variables de corte y topología que se seleccione del sistema, lo cual puede ayudar a un usuario poco familiarizado con la simulación.

Entre los métodos univariables, el de Wegstein Acotado fue el más rápido, aunque no presenta tanta estabilidad como el de Sustituciones Sucesivas.

Así mismo, en la solución de problemas de simulación controlada, al aumentar el número de especificaciones de diseño, es decir, al elevar la complejidad del sistema se afecta en grado mínimo el tiempo de cómputo de un simulador simultáneo modular, comparado con el que se consumiría empleando uno secuencial modular. Los resultados que se alcanzan con el simulador presentan una exactitud aceptable para ser utilizados como puntos de partida en aplicaciones a plantas industriales.

Por último, la evolución del programa deberá orientarse hacia el campo de la optimización, por lo que es conveniente que el investigador interesado en mejorar a SIMULADOR, cuente con la suficiente experiencia en esta área y esté familiarizado con

los métodos de solución derivados de la programación cuadrática.

A P E N D I C E

METODO DE WEBSTEIN

El método de Wegstein es un método de aceleración lineal cuyo objetivo es generar un nuevo estimado de la variable de iteración ($X(k+1)$), utilizando dos puntos obtenidos previamente ($[X(k-1), Y(k-1)]$, $[X(k), Y(k)]$). A continuación se hace la deducción de la fórmula que da directamente el nuevo valor.

1. La ecuación de la recta que pasa por los puntos $k-1$, k y $k+1$ es:

$$Y(k+1) - Y(k) = m (X(k+1) - X(k)) \quad (a)$$

donde m puede expresarse como

$$m = \frac{Y(k) - Y(k-1)}{X(k) - X(k-1)}$$

y $Y(k-1)$, $Y(k)$, $Y(k+1)$ son los valores calculados de $X(k-1)$, $X(k)$ y $X(k+1)$ respectivamente.

2. La condición para alcanzar la convergencia consiste en hacer

$$X(k+1) = Y(k+1)$$

3. Sustituyendo esta condición en (a)

$$X(k+1) - Y(k) = m (X(k+1) - X(k))$$

rearrreglando

$$X(k+1) = \frac{m}{m-1} X(k) - \frac{1}{m-1} Y(k) \quad (b)$$

4. Definiendo

$$Q = \frac{m}{m-1}$$

sumando y restando $Q Y(k)$ en el segundo miembro de (b), se tiene

$$X(k+1) = Q X(k) - \frac{1}{m-1} Y(k) + \frac{m}{m-1} Y(k) - Q Y(k)$$

y finalmente

$$X(k+1) = Y(k) + Q (X(k) - Y(k))$$

METODO DE BROYDEN

El método de Broyden puede verse como una modificación del método de Newton-Raphson para resolver sistemas de n ecuaciones independientes en n variables. En este caso, la ecuación G para la obtención de los nuevos estimados no es tan explícita como cuando se aplicaron métodos lineales. Ahora estos valores son obtenidos al satisfacer

$$J(k) \Delta X(k) = -F(k)$$

en donde $J(k)$ es la matriz jacobiana de orden n de la k -ésima iteración, siendo sus elementos:

$$J(k) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(k)}{\partial x_1(k)} & \dots & \frac{\partial f_1(k)}{\partial x_n(k)} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_n(k)}{\partial x_1(k)} & \dots & \frac{\partial f_n(k)}{\partial x_n(k)} \end{pmatrix}$$

$\Delta X(k)$ es un vector columna de diferencias entre $X(k+1)$ y $X(k)$ expresadas como:

$$\Delta X(k) = X(k+1) - X(k)$$

y

$$X(k) = [x_1(k), x_2(k), \dots, x_n(k)]^T$$

$F(k)$ es el vector columna de las funciones evaluadas en $X(k)$, es decir:

$$F(k) = [f(x(k)), f(x(k)), \dots, f(x(k))]^T$$

$$\begin{matrix} & 1 & & 2 & & n \\ & 1 & & 2 & & n \end{matrix}$$

El método de Broyden está basado en el uso de aproximaciones numéricas de las derivadas parciales que aparecen en la matriz jacobiana, y de una aproximación de la inversa del Jacobiano $H(k)$ utilizando la fórmula de Householder; así, generalmente es necesario invertir el Jacobiano solamente una vez, lo que conduce a un consumo de tiempo de proceso menor al que se tendría si se hiciera una evaluación rigurosa de $H(k)$ en cada iteración.

Los pasos del algoritmo propuesto por Broyden son los siguientes(4):

PASO 1. Estímese un conjunto de valores iniciales para las variables $X(0)$, y calcule

$$F(0) = F(X(0))$$

PASO 2. Evaluar los elementos aproximados de la matriz jacobiana $J(0)$, utilizando las siguientes fórmulas para cada derivada parcial.

$$h = \xi x_j$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_j} = \frac{f(x_i + h_j) - f(x_i)}{h_j}$$

en donde ξ es un número fraccionario (generalmente 0.001).

PASO 3. Calcular $H(0)$ mediante la expresión:

$$H(0) = -J(0)^{-1}$$

PASO 4. Con los últimos valores de H y F, es decir H(k) y F(k), calcular

$$\Delta X(k) = H(k) F(k)$$

PASO 5. Encuentre un valor para s(k) tal que la norma euclidiana de F(X(k) + s(k) ΔX(k)) sea menor que la de F(X(k)). Pruebe primero con s(k)=1 y si se satisface la siguiente desigualdad

$$\left[\sum_{i=1}^{i=n} f(x_i(k) + s(k) \Delta x_i(k))^2 \right]^{1/2} < \left[\sum_{i=1}^{i=n} f(x_i(k))^2 \right]^{1/2}$$

proceder con el paso 6. De otra forma, calcular s(k) mediante las siguientes fórmulas desarrolladas por Broyden

$$s(k) = ((1 + 6 \eta)^{1/2} - 1) / 3 \eta$$

donde

$$\eta = \frac{\sum_{i=1}^{i=n} f(x_i(k) + s(k) \Delta x_i(k))^2}{\sum_{i=1}^{i=n} f(x_i(k))^2}$$

Si la norma no se reduce después de haber probado con varios valores de s(k) calculados con estas fórmulas, se debe regresar al paso 2 para reevaluar las derivadas parciales de J(k) tomando como punto base a X(k).

PASO 6. Probar si ya se llegó a la convergencia del sistema

$$\left[\sum_{i=1}^{m} f_i(x_i(k) + s(k) \Delta x_i(k))^2 \right]^{1/2} < \text{error max. permitido}$$

si no es así, continuar con el algoritmo

PASO 7. Durante el paso 5, ya se deben haber evaluado los siguientes vectores:

$$X(k+1) = X(k) + s(k) \Delta X(k)$$

$$F(k+1) = F(X(k+1))$$

por lo que se puede calcular la nueva aproximación del inverso del Jacobiano usando la fórmula de Householder.

$$Y(k) = F(k+1) - F(k)$$

$$H(k+1) = H(k) - \frac{(H(k)Y(k) + s(k) \Delta X(k)) X(k)^T H(k)}{X(k)^T H(k)Y(k)}$$

y regrese al paso 4.

BIBLIOGRAFIA

- (1) Berna, T.J.; Locke, M.A.; Westerberg, A.W., "A New Approach to Optimization of Chemical Processes", *AIChE J.*, 26, 37 (1980).
- (2) Biegler, L.T.; Hughes, R.R., "Infeasible Path Optimization with Sequential Modular Simulators", *AIChE J.*, 28, 994 (1982).
- (3) Biegler, L.T.; Hughes, R.R., "Feasible Path Optimization with Sequential Modular Simulators", *Comput. Chem. Eng.*, 7, 115 (1983).
- (4) Blau, G.E., "Session Summary: Nonlinear Programming", *Foundations of Computer - Aided Chemical Process Design*, Vol.1, R.S.H. Mah and W.D. Seider, Eds., New York (1981).
- (5) Chapela, G.A.; Lozada, A.; Medina, R.J., "Simulacion de Una Planta de Proceso", Tesis profesional, Fac. Quimica UNAM (1970).
- (6) Chen, H.S.; Stadtherr, M.A., "A Simultaneous Modular Approach to Process Flowsheeting and Optimization", *AIChE J.*, 31, 1843 (1985).
- (7) Hidalgo, M.A.; Ortega, G., "Análisis Termodinámico del Proceso de Obtención de Acrilonitrilo", Tesis profesional, Fac. Quimica UNAM (1987).
- (8) Holland, Ch. D., "Fundamentals of Multicomponent Distillation", Mc. Graw - Hill Book Company, U.S.A. (1981).
- (9) Jirapongphan, S., "Simultaneous Modular Convergence Concept in Process Flowsheet Optimization, Ph.D. Thesis, MIT U.S.A. (1980).
- (10) Locke, M.H.; Edhal, R.H.; Westerberg, A.W., "An Improved Successive Quadratic Programming Optimization Algorithm for Engineering Design Problems", (1982).
- (11) Sargent, R. W. H., "A Review of Methods for Solving Non-linear Algebraic Equations", *Foundations of Computer Aided Chemical Process Design*, Vol.1, R.S.H. Mah and W. D. Seider, Eds., New York (1981).
- (12) Stadtherr, M. A.; Hilton, C. M., "Development of a New Equation Based Process Flowsheeting System: Numerical Studies", *AIChE Symp. Ser.*, 78 (214), 12 (1982).
- (13) Westerberg, A. W. & col., "Process Flowsheeting", Cambridge Univ. Press, Cambridge (1979).

- (14) Westerberg, A. W., "Optimization in Computer Aided Design", Foundations of Computer-Aided Chemical Process Design, Vol. 1, R.S.H. Mah and W.D. Seider, Eds., New York (1981).