

Taller 2 - Destilación

Rafael Montagut, Cristian Pineda, Deyver Rivera

Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Calle 44 # 45-67. Bogotá D.C., Colombia.
Facultad de Ingeniería, Departamento de Ingeniería Química y Ambiental,
Modelación y simulación.

TAREA 2.1. Método de convergencia de Wegstein:

Consiste en una modificación al método iterativo de punto fijo con un factor que acelera la tasa de convergencia si la iteración converge y que puede inducir la convergencia si la ecuación diverge. Es aplicable en la solución de ecuaciones algebraicas y trascendentales no lineales.

Es de gran valor para reducir la carga de cómputo y mejorar la rapidez de convergencia en métodos iterativos.

Considerando una ecuación de la forma

$$F(x) = 0 \quad eq. 1$$

Y si esta puede ser expresada de la forma

$$x = f(x) \quad eq. 2$$

El algoritmo de solución (iterativo) por punto fijo es

$$x_{n+1} = f(x_n) \quad eq. 3$$

El procedimiento normalmente seguido consiste en reemplazar valores sucesivos de x al lado derecho para obtener un nuevo valor de x hasta que $|x_{n+1} - x_n|$ sea tan pequeño como se desea. Este procedimiento puede no converger y aún cuando lo hace, suele tardar bastante en hacerlo.

Generalmente la secuencia de valores x_n sigue una de las siguientes tendencias:

Caso 1: Los valores de x_n oscilan y convergen.

Caso 2: Los valores de x_n oscilan y divergen.

Caso 3: Los valores de x_n convergen de forma monótona.

Caso 4: Los valores de x_n divergen de forma monótona.

La modificación de Wegstein consiste en reemplazar los sucesivos valores de x_n , en donde:

$$\hat{x}_{n+1} = q * x_n + (1 - q) * x_{n+1} \quad eq. 4$$

De esta manera, en la siguiente aplicación de la ecuación 3, x_n es reemplazado por \hat{x}_{n+1} y no por x_{n+1} .

Valores adecuados de q para cada caso, para cada iteración y para acelerar la convergencia pueden ser obtenidos. A continuación, se presenta el desarrollo de la expresión para q :

Como se puede notar de la ecuación 2, la solución del sistema se encuentra cuando la función $y = x$ es igual a la función $y = f(x)$. Esto se representa en la figura 1.

Al ubicarse sobre un punto A cuyas coordenadas son $(x_n, f(x_n))$, se puede trazar una línea horizontal hasta cortar la curva $y = x$. El punto de intersección B tiene las coordenadas (x_{n+1}, x_{n+1}) . Sobre la recta AB la ubicación ideal

$$\frac{q}{1-q} = \frac{\overline{BC}}{\overline{AC}} \quad eq.5$$
$$q = \frac{a}{a-1} \quad eq.6$$

$$a \cong \frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}} = \frac{x_{n+1} - x_n}{x_n - x_{n-1}} \quad eq.7$$

De manera adicional, la secuencia general para el uso de esta modificación se presenta en la figura 2. En la primera iteración la secuencia sigue el método de punto fijo sin correcciones ya que no hay un valor de \hat{x}_{n-1} . Desde la segunda iteración la secuencia sigue al método anteriormente presentado.

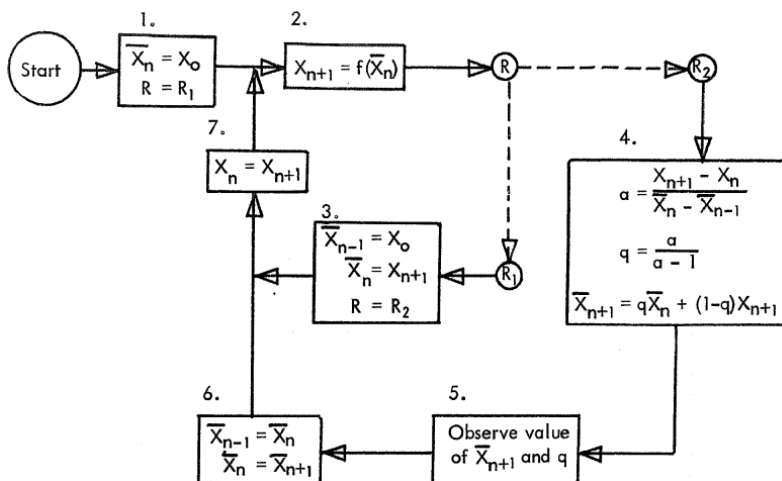


Figura 2. Secuencia de cálculo.

De manera adicional, para cada uno de los casos presentados anteriormente, el autor presenta los valores óptimos de q para lograr la convergencia.

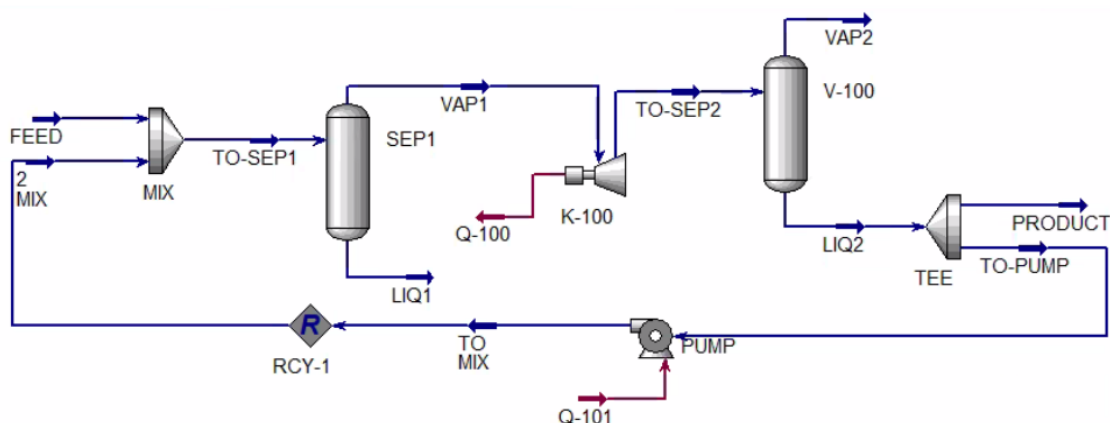
Caso 1: $0 < q < 0.5$

Caso 2: $0.5 < q < 1$

Caso 3: $q < 0$

Caso 4: $1 < q$

TAREA 2.2. Diagramas P-T.



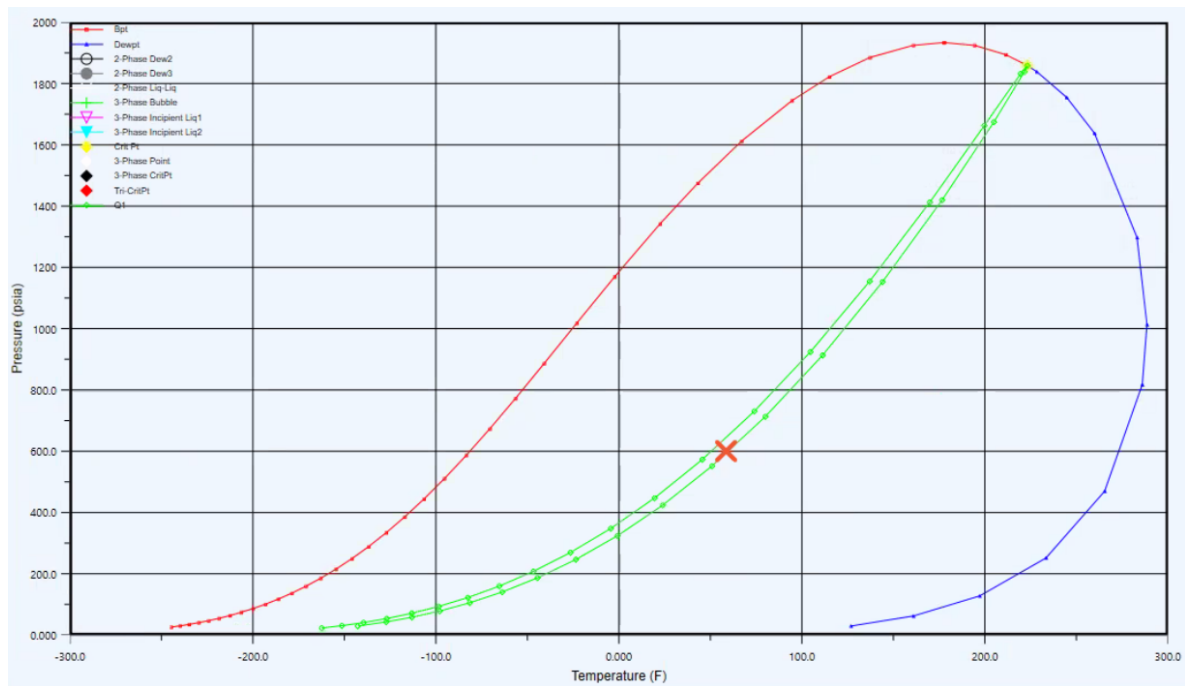
En la figura se puede observar el sistema modelado con ASPEN-HYSIS. Para lo cual, se obtuvieron los siguientes resultados.

Tabla 1: Resultados simulación en ASPEN-HYSIS.

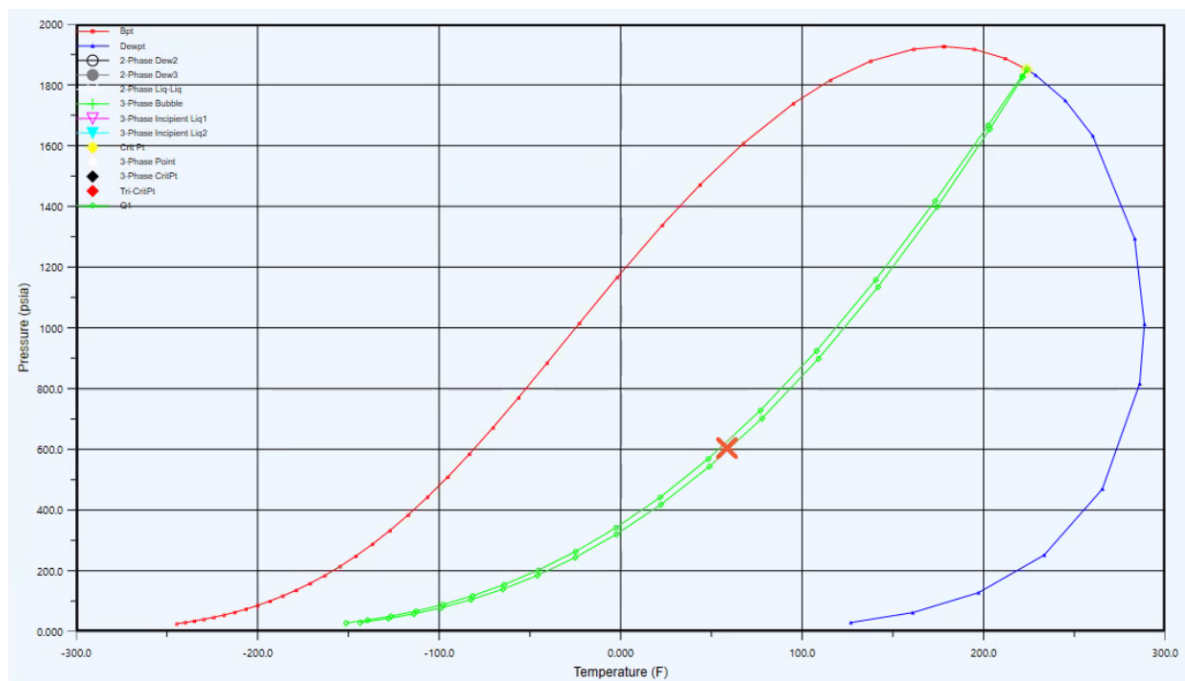
Corriente	T, °F	P, psia	x	N2	CO2	C1	C2	C3	N-C4	I-C4	N-C5	I-C5	N-C6	N-C7	N-C8
FEED	60,00	600,00	0,509	0,007	0,483	0,014	0,138	0,069	0,062	0,055	0,048	0,041	0,034	0,028	0,021
TO-SEP1	59,73	600,00	0,506	0,007	0,481	0,014	0,138	0,069	0,063	0,056	0,049	0,042	0,035	0,028	0,021
VAP1	59,73	600,00	1,000	0,013	0,768	0,018	0,133	0,033	0,016	0,011	0,005	0,003	0,001	0,000	0,000
LIQ1	59,73	600,00	0,000	0,001	0,187	0,009	0,143	0,107	0,111	0,102	0,094	0,081	0,069	0,055	0,041
TO-SEP2	7,35	300,00	0,978	0,013	0,768	0,018	0,133	0,033	0,016	0,011	0,005	0,003	0,001	0,000	0,000
VAP2	7,35	300,00	1,000	0,013	0,782	0,018	0,133	0,031	0,013	0,008	0,002	0,001	0,000	0,000	0,000
LIQ2	7,35	300,00	0,000	0,001	0,125	0,008	0,149	0,145	0,164	0,149	0,114	0,089	0,039	0,014	0,004
PRODUCTO	7,35	300,00	0,000	0,001	0,125	0,008	0,149	0,145	0,164	0,149	0,114	0,089	0,039	0,014	0,004
TO-PUMP	7,35	300,00	0,000	0,001	0,125	0,008	0,149	0,145	0,164	0,149	0,114	0,089	0,039	0,014	0,004
TO-MIXER	8,95	600,00	0,000	0,001	0,125	0,008	0,149	0,145	0,164	0,149	0,114	0,089	0,039	0,014	0,004

Como se puede observar, hay algunas corrientes que tienen composiciones diferentes de las otras. Con base en que las propiedades de la mezcla dependen de la composición de la misma, en cada una de las corrientes de diferente composición se tendrán diagramas termodinámicos diferentes. Ubicando las condiciones de la mezcla en el diagrama P-T, encontramos.

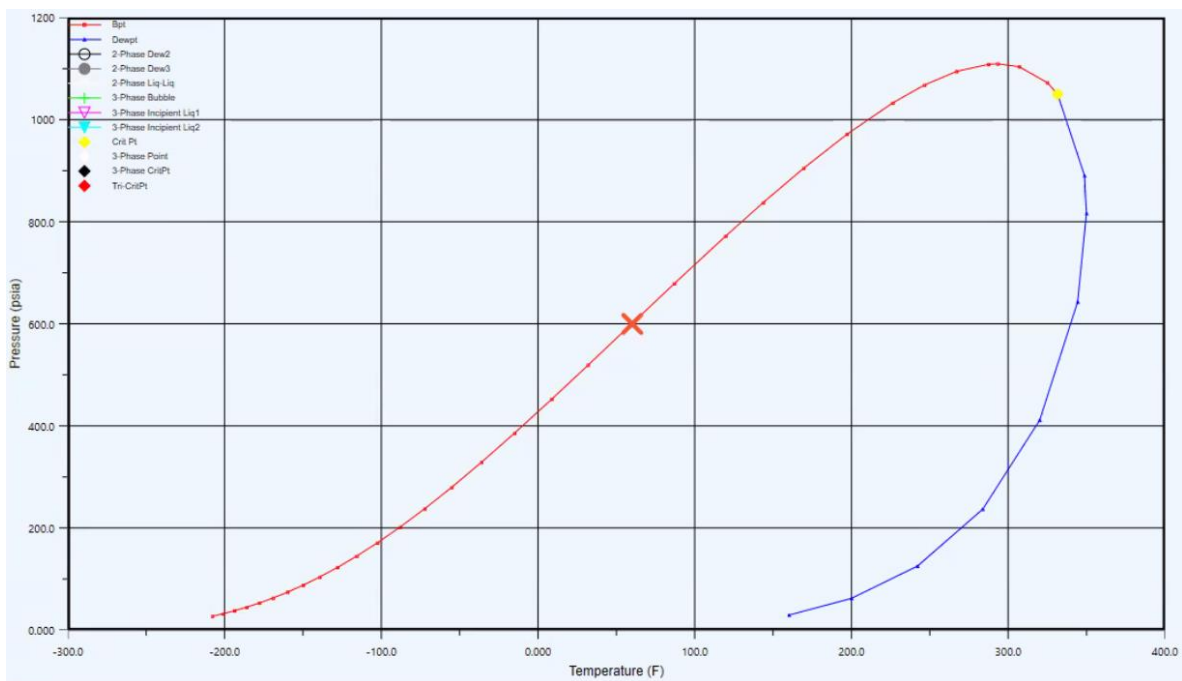
Feed (X):



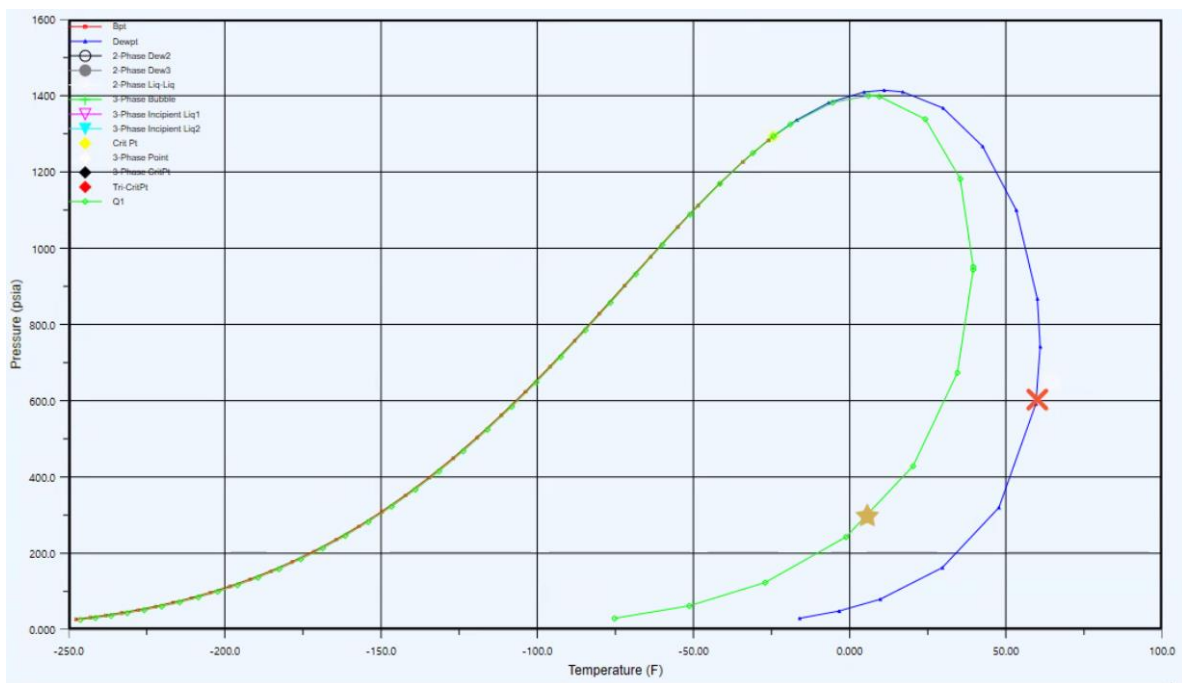
TO SEP1 (X):



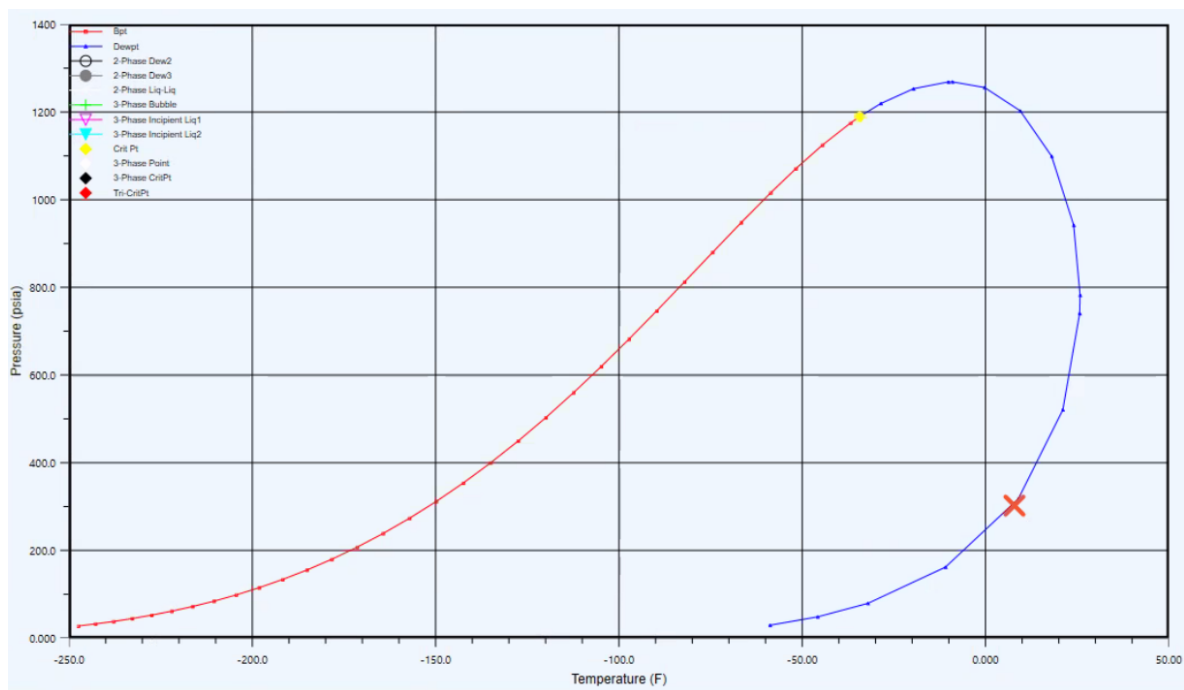
LIQ1 (X):



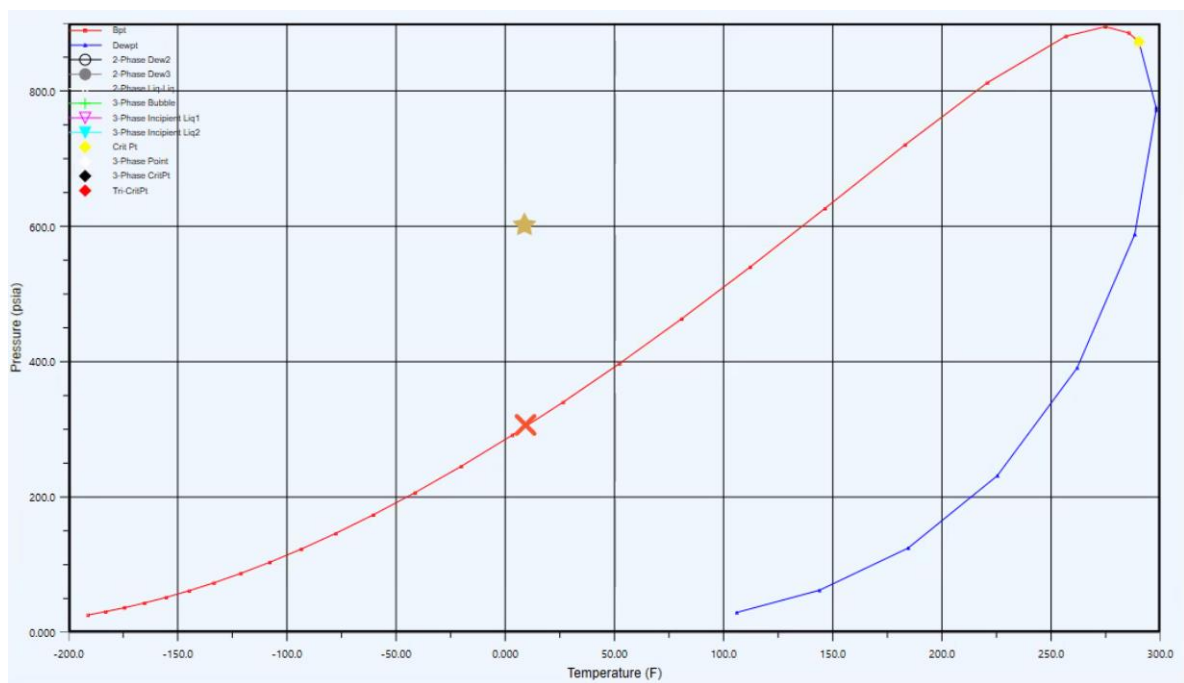
VAP1 (X) //TO-SEP2 (★):



VAP2 (X):



LIQ2/PRODUCTO/TO-PUMP (X) // TO-MIXER (★):



TAREA 2.3. GRADOS DE LIBERTAD:

Cuando se estaba elaborando la simulación, cada una de las operaciones solicitaban cierta información para poder completar los grados de libertad necesarios para la resolución de ejercicio. Entonces, teniendo en cuenta cada una de las variables y relaciones solicitadas por cada unidad, podemos estimar los grados de libertad que tenía cada unidad.

Equipo	Grados de libertad	Variables ind. Especificadas/ Relaciones
MIX	13	x_i, T, P
SEP-1	2	T, P
EXPAND	2	$P, Isoentrópico$
SEP-2	2	P, T
TEE	1	$50/50$
PUMP	1	P

TAREA 2.4. CLASIFICACIÓN DEL MODELO

Equipo	Complejidad	Fenomenología
MIX	Algebraica	Macroscópica
SEP-1	Algebraica	Macroscópica
EXPAND	Algebraica	Macroscópica
SEP-2	Algebraica	Macroscópica
TEE	Algebraica	Macroscópica
PUMP	Algebraica	Macroscópica

Bibliografía

Wegstein, J. H. (1958). Accelerating convergence of iterative processes. *Communications of the ACM* (1(6)), 9-13.