

Título de la Tesis: "Métodos robustos para resolver problemas de simulación y diseño"

Magister en Ingeniería Química

Autor: Aparicio, Lucrecia

Director: Dr. Jorge Paloschi

Resumen

La representación de un proceso químico en estado estacionario se efectúa por medio de ecuaciones que describen balances de masa, de energía, reacciones de equilibrio químico, etc., las que involucran determinadas variables como temperatura, presión, concentración, etc. Se tiene así un cierto número m de ecuaciones algebraicas y un cierto número n de variables, siendo la diferencia $r = n - m$ los grados de libertad del problema. Para que el mismo sea consistente se debe establecer el valor de r variables y de acuerdo a cuáles de ellas se fijan, el problema resultará de simulación o diseño. Dada la cantidad de ecuaciones y variables que involucra este tipo de problema, se han desarrollado paquetes computacionales a efectos de agilizar y facilitar su resolución. Dichos paquetes necesitan de un método numérico apropiado, capaz de resolver el sistema de ecuaciones algebraicas $f(x) = 0$, al que se reduce el problema.

La resolución de estos problemas generalmente presenta inconvenientes debido a la disparidad de magnitud de las variables que se manejan en Ingeniería Química, la falta de buenas estimaciones iniciales de la solución o la necesidad de trabajar en condiciones de operabilidad extremas. Todo esto produce situaciones numéricas difíciles que tornan complicada la resolución del problema. La obtención de la solución dependerá pues, del método numérico empleado y de su robustez, es decir, la capacidad del método para converger partiendo de puntos iniciales lejos de la solución o en malas condiciones numéricas. El método de continuación tiene la particularidad de haber sido diseñado teniendo en cuenta esta situación. En esta tesis se analiza la robustez de dicho método, en base a su comportamiento frente a un conjunto de problemas matemáticos y de ingeniería química.

En el Capítulo 1 exponemos los fundamentos del método de continuación y sus diferentes enfoques, además de una recopilación bibliográfica sobre el tema. Describimos en particular el proceso de continuación iterativa, haciendo referencia a las propuestas tradicionales y los inconvenientes que estas presentan. En el Capítulo 2 proponemos un nuevo enfoque de continuación desarrollado con el propósito de superar estas deficiencias.

Título de la Tesis: “Métodos robustos para resolver problemas de simulación y diseño”

Magister en Ingeniería Química

Autor: Aparicio, Lucrecia

Director: Dr. Jorge Paloschi

Los resultados numéricos que convalidan las afirmaciones y propuestas que efectuamos en los Capítulos 1 y 2, se presentan en el Capítulo 3. Las pruebas han sido realizadas con un conjunto de problemas matemáticos, ya que de haberse ejecutado con los problemas de ingeniería química el consumo de tiempo de cómputo hubiera sido excesivo.

Por último, el Capítulo 4 lo dedicamos a aplicar el método de continuación a la resolución de problemas de flowsheeting con el empleo del paquete de simulación SPEED-UP. En este caso hemos considerado la propuesta de continuación identificada como la más robusta en capítulos anteriores.