

Título de la Tesis: "Dinámica de columnas de destilación estudios numéricos"

Magister en Ingeniería Química

Autor: Lagar, Gustavo Alberto

Director: Dr. José Romagnoli

Resumen

La separación de productos por destilación representa en general el mayor consumo de energía en las plantas químicas modernas.

Un factor fundamental que influencia el rendimiento de una columna de destilación es la efectividad de su sistema de control. La estabilidad de los productos o la separación en procesos aguas abajo de las columnas, depende a menudo en forma crítica de propiedades que pueden resultar degradadas por una variación en la operación de la columna. Existe por tanto un claro incentivo económico para un control adecuado de columnas de destilación.

Podemos considerar en general dos tipos de estudios de control para los cuales requerimos modelos dinámicos diferentes. Para controlar cerca del estado estacionario son necesarios modelos lineales que relacionen las variables controladas con las variables manipuladas. Es decir, modelos simples entrada-salida para una determinada condición operativa. Por otro lado cuando queremos analizar un dado diseño o definir la estructura de control, es necesario poseer un conocimiento más preciso del comportamiento dinámico de la columna ya que debemos tener en cuenta muchas variables interactuantes. Por otra parte, la estimación de parámetros requiere obtener respuestas muy exactas. Esto conduce a la necesidad de modelos más sofisticados, de alta complejidad matemática.

En nuestro caso se utilizó para el estudio, el modelo dinámico no lineal desarrollado por Gani (1980). Este modelo que consiste en realizar los b

Título de la Tesis: "Dinámica de columnas de destilación estudios numéricos"

Magister en Ingeniería Química

Autor: Lagar, Gustavo Alberto

Director: Dr. José Romagnoli

lances de masa y energía en cada plato y resolver el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (ODE'S) resultante, da en cada instante de tiempo el comportamiento dinámico requerido. Dicho modelo se describe en detalle en el Capítulo 2.

El problema de seleccionar el algoritmo de integración adecuado para el sistema de ODE'S es de la mayor importancia para lograr una simulación rápida y exacta. El principal problema que se debe enfrentar para esto es la presencia de constantes de tiempo muy separadas entre sí, es decir el carácter "stiff" de los sistemas. Este tema ha sido bastante considerado en la literatura. El primer trabajo presentado sobre el tema es el de Mah y otros (1962) donde se discuten algunas inconsistencias físicas de la linealización del sistema de ODE'S y se presenta un método de resolución paso a paso. Distéfano (1968 a y b) discute la estabilidad y efectividad de varios métodos numéricos aplicados a cálculos de destilación batch. Tyreus y otros (1975) estudian los autovalores del sistema de ODE'S linealizado y la relación existente entre las condiciones de operación y el aumento del carácter "stiff" del sistema de ecuaciones.

Los autores coinciden en su mayoría en la imposibilidad de utilizar métodos explícitos en problemas "stiff" y la necesidad de diseñar métodos específicos para estos debido a las limitaciones que la estabilidad impone al tamaño de paso.

En el Capítulo 3 se presenta un pequeño resumen de la mayoría de los métodos numéricos disponibles para la resolución del sistema de ODE'S, se puntualizan sus ventajas y limitaciones y se brinda una serie de referencias para un estudio más profundo de los mismos.

Título de la Tesis: "Dinámica de columnas de destilación estudios numéricos"

Magister en Ingeniería Química

Autor: Lagar, Gustavo Alberto

Director: Dr. José Romagnoli

De todos los métodos reportados en la década pasada, el desarrollado por Gear (1971 a, b y c) ha sido uno de los más exitosos por sus excelentes características de estabilidad y su capacidad de manejar simultáneamente sistemas de ecuaciones diferenciales y algebraicas. Consiste básicamente en fórmulas multipaso lineales que Gear (1971 b) implementó utilizando una técnica debida a Nordsieck (1962) en la cual se conservan aproximaciones a las derivadas en el paso actual en lugar de guardar la historia de los valores previos de integración de las variables. La ventaja fundamental de este método es que sólo se requiere el cálculo del Jacobiano cada varios pasos de integración mientras que los métodos semi-implícitos de Runge-Kutta (Michelsen 1976 a y b) requieren la evaluación del Jacobiano por lo menos una vez en cada paso. Este método se describe en profundidad en el Capítulo 4 y será la base para el desarrollo de los capítulos siguientes.

Resulta claro el interés de conocer a priori si el sistema que debemos integrar es "stiff" o no, ya que esto conducirá a la elección del método de integración más eficiente. Lamentablemente en general no se conoce la constante de tiempo que controla la dinámica del sistema y además esta varía mucho con las condiciones de operación como demuestran Tyreus y colaboradores (1975). Sin embargo es posible obtener una estimación de la constante de tiempo que controla la integración de acuerdo al desarrollo de Distéfano (1968 a). En el Capítulo 5 se lleva a cabo un análisis del Jacobiano del sistema para varias mezclas multicomponentes. Los resultados generales que confirman los obtenidos por Tyreus y otros para la matriz de coeficientes del sistema, permiten algunas conclusiones adicionales interesantes relacionadas con el comportamiento de las constantes de tiempo del sistema en condiciones de gran pureza. También se lleva a cabo una caracterización numérica de los sistemas en términos del gra-

Título de la Tesis: "Dinámica de columnas de destilación estudios numéricos"

Magister en Ingeniería Química

Autor: Lagar, Gustavo Alberto

Director: Dr. José Romagnoli

do de dificultad de resolución. Por otro lado se obtiene una cota más realista para la constante de tiempo que controla la integración haciendo uso de la ecuación de Francis, que mejora la obtenida por Distéfano.

En el Capítulo 6, se estudia el carácter localizado del fenómeno de "stiffness" y se presenta un algoritmo de integración que saca ventaja de esta y del carácter "sparse" de la matriz del Jacobiano. Además se presentan las estadísticas de integración y discusión de resultados comparando el algoritmo propuesto con otros métodos numéricos disponibles para dos sistemas de diferente dificultad numérica.

Título de la Tesis: “Dinámica de columnas de destilación estudios numéricos”

Magister en Ingeniería Química

Autor: Lagar, Gustavo Alberto

Director: Dr. José Romagnoli