

Cálculo numérico mejorado de una vaporización instantánea. Caso generalizado de una mezcla de hidrocarburos ligeros

En este trabajo se presenta un nuevo método numérico - Método Mejorado de Memoria, IMM- para el cálculo de una vaporización instantánea de una mezcla de multicomponentes. La técnica numérica extensivamente se utiliza para delimitar la zona donde el proceso físico corresponde a un evento real -temperaturas de punto de rocío y de burbuja-. Como caso de estudio se utilizó una mezcla de hidrocarburos ligeros que permitió contrastar la bondad de la nueva técnica numérica. Se efectúan algunas comparaciones contra técnicas convencionales para alcanzar la solución del problema y así resaltar la superioridad del método IMM.

HERMES A. RANGEL JARA
Ingeniero Químico, M.Sc. I. Q
Profesor Asociado, U.N.

JORGE E. SPINEL GOMEZ
Ingeniero Químico
Profesor Asistente, U.N.

INTRODUCCION

Uno de los problemas típicos en la Ingeniería Química que requiere la solución de una ecuación no lineal es el cálculo de una vaporización isotérmica para una mezcla de multicomponentes. En la fase inicial del cálculo de la vaporización isotérmica es necesario la evaluación de dos ecuaciones no lineales (funciones de punto de rocío y punto de burbuja), para una determinada presión en el vaporizador y composición de entrada del alimento. De ahí el gran interés en la búsqueda de nuevas y eficientes técnicas numéricas para la solución del problema [1], [2], [6], [9], [10], [11], [13].

El uso del Método de Memoria fue propuesto en 1972 por Shachan y Kehat, [12], para la solución de una ecuación no lineal, basado en la interpolación inversa de Lagrange y demostró ser superior en la solución del problema que otros métodos.

En el artículo se presenta e implementa un Método Mejorado de Memoria -IMM- que trabaja con una interpolación inversa basada en fracciones continuas. Estas técnicas de interpolación basadas en fracciones continuas han sido propuestas en informaciones recientes [8], [11]. La técnica de fracciones parciales continuas para representar una ecuación no lineal reduce el número de operaciones matemáticas, cuando se compara con métodos tradicionales, y adicionalmente la representación en fracciones permite una fácil adaptación algorítmica muy útil para ser implementada a nivel de computación.

La vaporización isotérmica de una mezcla de hidrocarburos ligeros se toma como caso de estudio para presentar el IMM, indicar el algoritmo de cálculo e implementar la técnica a nivel de un programa de computación. El programa y los resultados del mismo son demostrativos de la eficiencia de la técnica mejorada propuesta.

LA VAPORIZACION ISOTERMICA [4], [5]

La vaporización instantánea isotérmica en equilibrio es un proceso de separación en una sola etapa, para el cual la temperatura (t) y la presión (P) están especificadas, así como la velocidad de flujo molar total de la alimentación (F) y su composición $\{X_{fi}\}$. Para que se realice, a una presión determinada, es necesario que la temperatura de operación esté comprendida entre las temperaturas de punto de burbuja y de punto de rocío de la mezcla de alimentación.

Las funciones de temperaturas de punto de burbuja y de rocío son, respectivamente [4]:

$$F(t) = \sum_{i=1}^n K_i X_i - 1 \text{ y } G(t) = \sum_{i=1}^n (Y_i/K_i) - 1.$$

Para el conjunto de especificaciones que se imponen a este proceso de separación, el problema consiste en encontrar las velocidades de flujo molar total V y L , así como las composiciones respectivas $\{Y_{vi}\}$ y $\{X_{Li}\}$ de las corrientes de vapor y líquido en equilibrio.

La relación de equilibrio entre las fases, para cada componente, se expresa así:

$$Y_{vi} = K_i X_{Li} \quad (1)$$

donde K_i es el coeficiente de distribución, el cual depende de la temperatura y de la presión.

Como resultado de aplicar las ecuaciones de normalización a cada una de las fases, se obtiene:

$$\sum_{i=1}^n Y_{vi} = 1.0 \quad \text{y} \quad \sum_{i=1}^n K_{Li} = 1.0 \quad (2)$$

donde n es el número de componentes del sistema.

Para un proceso de separación como el que se analiza, donde no está comprometida la variación de la composición química de las especies del sistema, el principio de conservación de los moles totales y de cada componente, permite establecer:

$$F = L + V$$

$$X_{fi} F = X_{Li} L + Y_{vi} V \quad (3)$$

Para un sistema de n componentes, las ecuaciones (3) son en números iguales a $n+1$, que con aplicación de las ecuaciones (2), determinan, por ejemplo, la dependencia de la ecuación de balance total de las ecuaciones de componente, ya que:

$$F \sum_{i=1}^n X_{fi} = L \sum_{i=1}^n X_{Li} + V \sum_{i=1}^n Y_{vi} \quad (4)$$

$$\text{y} \quad F = L + V$$

En resumen, podrán escribirse n ecuaciones del tipo (1), 2 ecuaciones de normalización y n ecuaciones de balance, para un total de $2n+2$ ecuaciones de carácter independiente. De otra parte, el número de incógnitas del problema es también igual a $2n+2$, correspondientes a L , V , $\{X_{Li}\}$ y $\{Y_{vi}\}$.

Este sistema de ecuaciones no lineales puede transformarse a diversas formas funcionales para el cálculo de la vaporización instantánea; veamos una de ellas:

a) La eliminación de Y_{vi} , y V de la última ecuación (3) permite obtener:

$$X_{Li} = \frac{X_{fi}}{1 + \phi (K_i - 1)} \quad (5)$$

donde $\phi = V/F$

Además,

$$0 < \phi < 1.0 \text{ para } t_b < t < t_r$$

siendo t_b la temperatura de burbuja y t_r la temperatura de rocío.

b) Cuando la ecuación (5) se aplica a los n componentes de la fase líquida en equilibrio y se ejecuta la suma de todos los términos, resulta:

$$\sum_{i=1}^n X_{Li} = \sum_{i=1}^n \frac{X_{fi}}{1 + \phi (K_i - 1)} \quad (6)$$

c) La sustitución de (5) en la ecuación (1) brinda:

$$Y_{vi} = \frac{K_i X_{fi}}{1 + \phi (K_i - 1)} \quad (7)$$

d) Cuando la ecuación (7) se aplica a los n componentes de la fase gaseosa en el equilibrio y se ejecuta la suma de todos los términos, resulta:

$$\sum_{i=1}^n Y_{vi} = \sum_{i=1}^n \frac{K_i X_{fi}}{1 + \phi (K_i - 1)} \quad (8)$$

e) La diferencia entre las ecuaciones (8) y (6) provee la siguiente función de la vaporización instantánea:

$$f(\phi) = \sum_{i=1}^n \frac{X_{fi} (1 - K_i)}{1 + \phi (K_i - 1)} \quad (9)$$

Una vez que se determina la raíz que hace $f(\phi)=0$, puede evaluarse V y L ya que $\phi = V/F$ y $L = F - V$.

Asimismo, el empleo de las ecuaciones (5) y (1), en forma secuencial, permite calcular el conjunto de las soluciones $\{X_{Li}\}$ y $\{Y_{vi}\}$.

Como caso de estudio se utilizará el relativo a una mezcla de hidrocarburos ligeros con predominio de la serie parafínica, compuestos para los cuales se han obtenido correlaciones satisfactorias conducentes al cálculo del coeficiente de distribución (K_i). En efecto, McWilliams [7] presenta la siguiente ecuación de correlación para K_i en función de la presión (en Psia) y de la temperatura en ($^{\circ}R$):

$$\ln(K_i) = a_{1i}(1/t^2) + a_{2i}(1/t) + a_{3i}(\ln t) + a_{4i}t + a_{5i}t^2 + a_{6i} + a_{7i}(\ln p) + a_{8i}(1/p^2) + a_{9i}(1/p) + a_{10i}(\ln p)^2 + a_{11i}(\ln p)^3 + a_{11i}(p) \quad (10)$$

en donde: $14.7 \text{ Psia} < p < 120 \text{ Psia}$ y $460 \text{ }^{\circ}R < t < 760 \text{ }^{\circ}R$

La información sobre las constantes (a_{ji}) está provista para los siguientes hidrocarburos (en el orden respectivo asociado con el programa de computador): 1. Metano, 2. Etileno, 3. Etano, 4. Propileno, 5. Propano, 6. Isobutano, 7. n-Butano, 8. Isopentano, 9. n-pentano, 10. n-Hexano, 11. n-Heptano, 12. n-Octano, 13. n-Nonano, 14. n-Decano.

CALCULO DE RAICES CON FRACCIONES CONTINUAS

Sea la función no lineal $y(t)$ a la cual se desea encontrar la raíz, en un intervalo $I=[a,b]$, por lo tanto:

$$y(t)=0 \quad (11)$$

Si $t=\phi(y)$, la función inversa, puede formarse y aproximarse por una fracción continua:

$$t = \phi_o(y)$$

$$= a_0 + \frac{y-y_0}{a_1 + \frac{y-y_1}{a_2 + \frac{y-y_2}{\dots}}}$$

$$a_{m-1} + \frac{y-y_{m-1}}{a_m} \quad (12)$$

Los coeficientes a_i , con los valores de t_i y los respectivos y_i , pueden determinarse mediante el siguiente procedimiento.

Si $y=0$ en la ecuación (12), t será aproximadamente la raíz, o:

$$t = a_0 - \frac{y_0}{a_1 - \frac{y_1}{a_2 - \frac{y_2}{\dots}}}$$

$$a_{m-1} - \frac{y_{m-1}}{a_m} \quad (13)$$

Para obtener valores de t , de la ecuación (13), son necesarios los coeficientes a_i . De Hildebrand, [3], y arreglando la ecuación (13) como:

$$t = \phi_o(y) = a_0 + \frac{y-y_0}{\phi_1(y)} \quad (14)$$

donde:

$$\phi_1(y) = a_1 + \frac{y-y_1}{\phi_2(y)}$$

$$\phi_2(y) = a_2 + \frac{y-y_2}{\phi_3(y)}$$

$$\phi_{i-1}(y) = a_{i-1} + \frac{y - y_{i-1}}{\phi_i(y)}$$

$$\phi_m = a_m$$

Los coeficientes a_i son evaluados tomando $\phi_0(y_i)$ igual a t_i .

EL METODO IMM

Remplazando el polinomio de interpolación de Lagrange en el método de memoria por fracciones continuas resulta el siguiente algoritmo para el IMM.

Algoritmo (IMM)

1. Seleccionar dos valores iniciales, t_0 y t_1 . Evaluar y_0 y y_1 .

2. Calcular t_2 , así:

$$a_0 = t_0$$

$$a_1 = (y_1 - y_0) / (t_1 - t_0)$$

$$t_2 = a_0 - y_0 / a_1$$

3. $m=2$ y evaluar y_2

4. Calcular t_{m+1} utilizando las siguientes ecuaciones de recurrencia:

$$b_0 = t_m$$

$$b_i = (y_m - y_{i-1}) / (b_{i-1} - a_{i-1})$$

$$(i=1, 2, 3, \dots, m-1) \quad 4.1$$

$$\phi_m = a_m = (y_m - y_{m-1}) / (b_{m-1} - a_{m-1}) \quad 4.2$$

$$\phi_{i-1} = a_{i-1} - y_{i-1} / \phi_i$$

$$(i=m, m-1, m-2, \dots, 1) \quad 4.3$$

$$t_{m+1} = \phi_0 \quad 4.4$$

5. Calcular y_{m+1}

6. Observar el criterio de convergencia. Si el criterio de convergencia no es satisfecho, $m=m+1$ y regresar al numeral 4.

Programa de computador

El programa de computador elaborado para los fines de aplicación generalizada del Método Mejorado de Memoria IMM (ver Anexo), contiene los siguientes elementos esenciales:

1. Matriz de datos para el cálculo del coeficiente de distribución (K_i) de 14 hidrocarburos ligeros.
2. Algoritmo de ordenamiento para adecuar la simulación de vaporizaciones instantáneas isotérmicas al número de componentes que se desee (con un máximo de 14).
3. Algoritmo generalizado que representa al Método Mejorado de Memoria IMM.
4. Rutinas para el cálculo de coeficientes de distribución (K_i) y de funciones que alternativamente pueden referirse a puntos de burbuja, puntos de rocío y vaporización isotérmica.

PRESENTACIÓN DE RESULTADOS, ANÁLISIS Y CONCLUSIONES

--Para una presión de 100 Psia y una composición de la alimentación de: $x(1)=0.02$, $x(2)=0.02$, $x(3)=0.02$, $x(4)=0.02$, $x(5)=0.02$, $x(6)=0.20$, $x(7)=0.20$, $x(8)=0.20$, $x(9)=0.20$, $x(10)=0.02$, $x(11)=0.02$, $x(12)=0.02$, $x(13)=0.02$ y $x(14)=0.02$, se obtuvieron los siguientes resultados:

Temperatura de punto de burbuja: 526.3440 °R

Temperatura de punto de rocío: 721.1946 °R

En la Tabla 1 se indican algunas comparaciones de cálculo entre una técnica muy convencional y de fácil programación - Método de Posición Falsa- y el MMI, para la temperatura de burbuja anotada anteriormente.

Tabla 1

Error	No. de iteraciones	
	Posición falsa	IMM
1.e-1	13	7
1.e-2	17	8
1.e-4	23	8
1.e-8	37	9
1.e-10	43	9

El error se evaluó como: $e_d = \text{abs}(t_{n+1} - t_n)$.

Es importante anotar la gran diferencia en el número de iteraciones entre las dos técnicas numéricas y adicionalmente la gran exactitud del IMM cuando llega a la solución y que implica una gran velocidad media de convergencia.

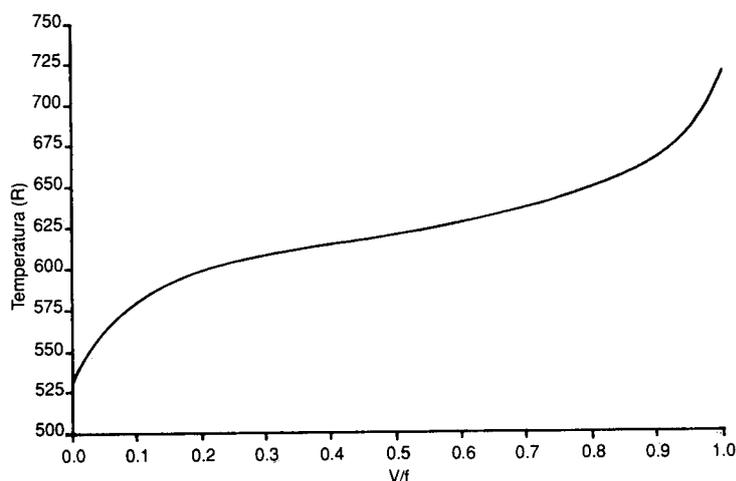


FIGURA 1. Variación de la fracción vaporizada

-- Para las mismas condiciones inmediatamente anteriores se evaluó el tiempo de computación. Para un error de $1e-10$ es necesario un 215% mayor de tiempo para la Posición Falsa que el IMM, sobre una base del 100% para el IMM.

Es necesario indicar que las comparaciones se efectuaron para condiciones completamente iguales (error, valores iniciales y eficiencia en las rutinas).

-- Con el método de Newton-Raphson se consiguieron resultados favorables, en términos de funciones y derivadas evaluadas y tiempo de cálculo, a favor del método IMM. Aunque las diferencias no fueron tan marcadas, el método NR necesita la evaluación de las derivadas de las funciones de punto de burbuja, punto de rocío y de la vaporización isotérmica. Además, de una buena y correcta inicialización del cálculo para la convergencia. En la referencia [11], donde se trabajó una muestra más representativa, se concluye que el IMM es un 40% en

promedio superior al NR y al método de Richmonds, que trabajan con la primera derivada y la primera y segunda derivada, respectivamente.

--Paralelamente, se lograron las mismas ventajas con el IMM en el cálculo de la temperatura de rocío y la vaporización isotérmica.

-- Para resaltar la bondad de la técnica numérica empleada en este artículo, se calcularon vaporizaciones isotérmicas con un incremento en la temperatura de operación de un grado; los resultados se muestran en la figura 1.

-- Como conclusión general se destaca que el IMM es superior a los métodos de Brent y Muller, comparados sobre la base de la velocidad media de convergencia. Análisis teóricos permiten concluir que el IMM requiere operaciones aritméticas de orden n , en vez de n^2 requeridas en el Método de Memoria inicial usado por Shacham y Kehat [12].

BIBLIOGRAFIA

1. Carnahan, B., Luther, A. Applied Numerical Methods. Wiley, J. O., 1969.
2. Constantinides, A. Applied numerical methods with personal computers. McGraw-Hill Book Co., 1988.
3. Hildebrand, F.B., Introduction to Numerical Analysis. Second Edition. McGraw-Hill, 1974.
4. Holland, C.D. Fundamentos de destilación de mezclas multicomponentes. McGraw-Hill. Book Co., Ed. Limusa., 1988.
5. King, J. Procesos de separación. McGraw-Hill Book Co., Ed. Reverte, 1980.
6. Lapidus, L. Digital Computation for Chemical Engineers. Mc Graw-Hill. 1962
7. Mc Williams, M.L. An equation to relate K-factors to pressure and temperature. Plant Notebook. Chemical Eng. Oct. 29, 1973.
8. Pang, T., Knopf, F.C. Numerical analysis of single variable problems with the use of continued fractions. Computers Chem. Eng. 10, 87, 1986.
9. Paterson, W.R. A new method for solving a class of nonlinear equations. Chem. Eng. Sc. 41, p. 1935, 1986.
10. Paterson, W.R. On preferring iteration in a transformed variable to the method of successive substitution. Chem. Eng. Sc. 41, p. 601, 1986.
11. Shacham, M. An improved memory method for the solution of a nonlinear equation. Chem. Eng. Sc. 44, p. 1495, 1989.
12. Shacham, M., Kehat, E. An iteration method with memory for the solution of an nonlinear equation. Chem. Eng. Sc. 27, 2099, 1972.
13. Shacham, M., Kehat, E. Converging interval methods for the iterative solution of nonlinear equations. Chem. Eng. Sc. 28, p. 2187, 1973.

ANEXO

```

REM-----
REM Este programa calcula las temperaturas de punto de
REM burbuja, punto de rocío y procesos de
REM vaporización instantánea, para mezclas de hidro-
REM carburos ligeros. Para el cálculo de las funciones de
REM burbuja, rocío y de vaporización instantánea, utiliza un
REM método mejorado de memoria IMM
REM-----
DIM a(14,11), a1(14),a2(14),a3(14),a4(14),a5(14),a6(14),a7(14),
DIM a8(14),a9(14),a10(14),a11(14),x(14),xx(14),yy(14),k(14)
DIM y(50),t(50),aa(50),b(50),c(50),fi(50)
INPUT "número de componentes=?",n%
INPUT "presión(Psia)= ?", P
FOR i%=1 TO 14
  PRINT "X( "; i%; ")= ?"
  INPUT x(i%)
NEXT i%
GOSUB datos
REM "-----ordenamiento-----"
ordenamiento:
j%=1
FOR i%=1 TO 14
  IF x(i%)> 0 THEN
    x(j%)=x(i%)
    a1(j%)=a(i%,1)
    a2(j%)=a(i%,2)
    a3(j%)=a(i%,3)
    a4(j%)=a(i%,4)
    a5(j%)=a(i%,5)
    a6(j%)=a(i%,6)
    a7(j%)=a(i%,7)
    a8(j%)=a(i%,8)
    a9(j%)=a(i%,9)
    a10(j%)=a(i%,10)
    a11(j%)=a(i%,11)
    j%=j%+1
  ENDIF
NEXT i%
REM "comienzo"
aa%=1
rutina1:
IF aa%=1 THEN
  t1=200
  t2=1000
  GOTO imm
ELSE
  IF aa%=2 THEN
    t1=tb
    GOTO Imm
  ELSE
    INPUT "t=";t
    GOSUB coeficientes
    t1=0
    t2=1
    GOTO imm
  ENDIF
ENDIF
REM "-----algoritmo de IMM-----"
imm:
t=t1
t(0)=t1
IF aa%=3 THEN
  GOTO siga1
ELSE
  GOSUB coeficientes
ENDIF
siga1:
GOSUB función
y(0)=fun
t=t2
t(1)=t2
IF aa%=3 THEN
  GOTO siga2
ENDIF
GOSUB coeficientes
siga2:
GOSUB funcion
y(1)=fun
comienzo:
aa(0)=t(0)
aa(1)=(y(1)-y(0))/(t(1)-t(0))
t(2)=aa(0)-(y(0)/aa(1))
m%=2
calculando:
t=t(m%)
IF aa%=3 THEN
  GOTO siga3
ENDIF
GOSUB coeficientes
siga3:
GOSUB funcion
y(m%)=fun
b(0)=t(m%)
FOR i%=1 TO m%-1
  b(i%)=(y(m%)-y(i%-1))/(b(i%-1)-aa(i%-1))
NEXT i%
c(m%)=(y(m%)-y(m%-1))/(b(m%-1)-aa(m%-1))
aa(m%)=c(m%)
FOR i%=m% TO 1 STEP -1
  c(i%-1)=aa(i%-1)-(y(i%-1)/c(i%))
NEXT i%
t(m%+1) = c(0)
t=t(m%+1)
IF aa%=3 THEN
  GOTO siga4
ENDIF
GOSUB coeficientes
siga4:
GOSUB funcion
y(m%+1)=fun
erro=ABS(t(m%+1)-t(m%))
IF erro < 0.0001 THEN
  IF aa%=1
    tb=t
    PRINT "temperatura de burbuja=";tb
  ELSE
    IF aa%=2 THEN
      tr=t
      PRINT "temperatura de rocío=";tr
    ELSE
      PRINT "fi=";t
    END
  ENDIF
ENDIF
aa% = aa%+1
GOTO rutinal
ENDIF
m%=m%+1

```

```

GOTO calculando
PROCEDURE datos
FOR i%=1 TO 14
FOR j%=1 TO 11
READ a(i%,j%)
NEXT j%
NEXT i%
DATA -2.9286e5, 0, 0, 0, 0, 8.2445, -0.8951, 59.8465, 0, 0, 0
DATA -6.00076875e5, 0, 0, 0, 0, 7.90595, -0.84677, 42.94594, 0,
0, 0
DATA -6.8724825e5, 0, 0, 0, 0, 7.90699, -0.886, 49.02654, 0, 0, 0
DATA -9.23484687e5, 0, 0, 0, 0, 7.71725, -0.87871, 47.67624,
0, 0, 0
DATA -970688.5625, 0, 0, 0, 0, 7.15059, -0.76984, 0, 6.90224, 0, 0
DATA -1166846, 0, 0, 0, 0, 7.72668, -0.92213, 0, 0, 0, 0
DATA -1280557, 0, 0, 0, 0, 7.94986, -0.96455, 0, 0, 0, 0
DATA -1481583, 0, 0, 0, 0, 7.58071, -0.93159, 0, 0, 0, 0
DATA -1524891, 0, 0, 0, 0, 7.33129, -0.89143, 0, 0, 0, 0
DATA -1778901, 0, 0, 0, 0, 6.96783, -0.84634, 0, 0, 0, 0
DATA -2013803, 0, 0, 0, 0, 6.52914, -0.79543, 0, 0, 0, 0
DATA 0, -7646,81641, 0, 0, 0, 12.48457, -0.73152, 0, 0, 0, 0
DATA -2.55104e5, 0, 0, 0, 0, 5.69313, -0.67818, 0, 0, 0, 0
DATA 0, -9.76045703e3, 0, 0, 0, 13.80354, -0.7147, 0, 0, 0, 0
RETURN
PROCEDURE coeficientes
FOR i%=1 TO n%
zz=a1(i%)/(t^2)+a2(i%)/t+a3(i%)*LOG(t)+a4(i%)*t+a5(i%)
*t^2+a6(i%)+a7(i%)*LOG(p)

```

```

zz=zz+a8(i%)/p^2+a9(i%)/p+a10(i%)*(LOG(p))^2+
a11(i%)*(LOG(p))^3+a11(i%)*p
k(i%)=EXP(zz)
NEXT i%
RETURN
PROCEDURE funcion
IF aa%=1
fun=0
FOR i%=1 TO n%
fun=fun+x(i%)*k(i%)
NEXT i%
fun=fun-1
ELSE
IF aa%=2
fun=0
FOR i%=1 TO n%
fun=fun+x(i%)/k(i%)
NEXT i%
fun=fun-1
ELSE
fun=0
FOR i%=1 TO n%
fun=fun+((x(i%)-x(i%)*k(i%))/(1-t*(1-k(i%))))
NEXT i%
ENDIF
ENDIF
RETURN

```