

Simulación y análisis de un segmento de proceso.

Parte II: Estabilidad y convergencia

Daniel Bogoya M., I.Q., M.I.S.
Profesor Titular
Universidad Nacional de Colombia

Este es el segundo de una serie de trabajos que ilustran las características y potencialidades de la simulación matemática de un segmento de proceso químico en estado estable, aplicada en microcomputadores digitales, con miras al análisis y diseño de procesos. Aquí se estudia la estabilidad y la convergencia de los cálculos, en cuanto comportamiento intrínseco de la simulación, en función de la sensibilidad del sistema, la inicialización de las variables iteradoras, el tamaño de error requerido y el método numérico empleado. El análisis se presenta para un cálculo iterativo bifuncional bivariado, mediante la simulación modular secuencial.

INTRODUCCION

De acuerdo y en consecuencia con el artículo "Simulación y análisis de un segmento de proceso - parte I: planteamiento del problema", presentado en el número anterior de esta Revista (1), aquí se retoma el segmento que allí se indicó y, con base en el simulador SIMUNI, se encadena el análisis de las características propias e

intrínsecas de la simulación digital determinística, en cuanto técnica numérica. Para ésto se definen **cuatro variables de análisis** o de entrada -las cuales se perturban con base en un diseño de experimentos- y **tres variables de respuesta** o de salida -las cuales se perturban con base en un diseño de experimentos- y **tres variables de respuesta** o de salida -las cuales permiten

cuantificar el comportamiento de la simulación; luego, se realizan los diferentes experimentos y se miden los valores de las variables de respuesta; y finalmente, se explica el comportamiento de estabilidad y convergencia y la naturaleza referida de la simulación que, para balances de materia, se lleva a cabo aquí.

SEGMENTO DE PROCESO

La malla unitaria, que ya se presentó junto con el modelo matemático (1), es bastante sencilla: consta de un mezclador, un reactor y un vaporizador instantáneo. No obstante, contempla las **operaciones básica unitarias** de mez-

atributos se suponen (o inicializan) en una y se calculan para la otra. Los atributos de la primera se inicializan mediante algún criterio, para que ya caracterizada pueda procederse a un cálculo **secuencial** de unidad tras unidad; en este caso, tales atributos son el flujo o caudal de cada componente. Los atributos de la segunda se obtienen resolviendo una cascada de modelos matemáticos (... mezclador, reactor, vaporizador, mezclador,...), en un orden que surge como consecuencia de elegir la corriente de rasgado. Así, los valores de los atributos de la corriente de rasgado corresponden a los de convergencia entre la inicialización y la resolución, luego de algún número de iteraciones de cálculos.

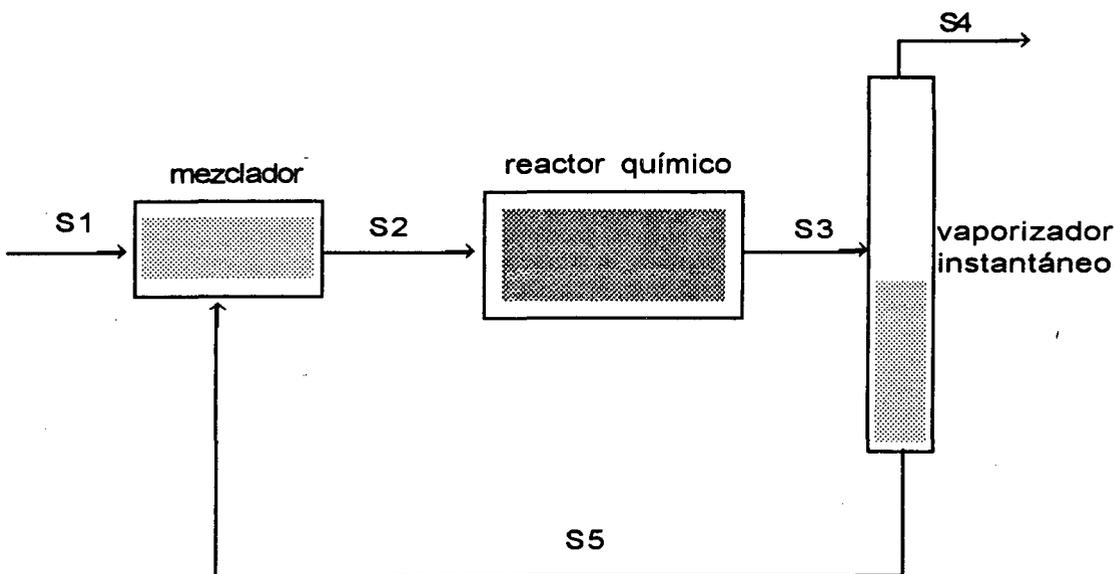


Diagrama 1
Estructura del segmento de proceso

cla y separación física y el **proceso unitario básico** de transformación química. La estructura se ilustra en el diagrama 1.

Esta malla presenta una recirculación, la cual torna más interesante la tarea del balance de materia mediante simulación, ya que debe establecerse una nueva variable: la corriente de rasgado. Esta variable indica la corriente que se "bifurca" para generar así dos corrientes cuyos

La corriente que se define para rasgar el ciclo es la S5.

VARIABLES DE ANALISIS

El comportamiento intrínseco de una simulación depende, en forma diferenciada, de diversas variables. En el mismo sentido, cuando se analiza **alguna variable**, aparecen también incidencias combinadas, según como se elija el nivel de

las demás. Para este análisis se toman cuatro variables, en los siguientes niveles:

1. Sensibilidad del sistema. Se refiere aquí a la "diferencia relativa" que presentan los componentes que fluyen y se transforman dentro del segmento, en cuanto naturaleza físicoquímica, tanto dentro de una corriente (que abandona una unidad y entra a otra) como a través de una unidad (donde se modifican sus atributos de presión, temperatura, fase, entalpía y composición). Los niveles que se toman, para medir la sensibilidad combinada de transformación y separación, corresponden a los valores cualitativos "relativos" de bajo y alto, reflejados en sistemas, así:

1.1. Sistema 1: Sensibilidad baja.

Condiciones en el reactor:

volumen: 1.25 m³
 fase: líquida
 presión: 400 Pa
 temperatura: 400 K
 k₁: .08 (1/sg.)
 k₂: .03 (1/sg.)

Condiciones en el vaporizador:

presión: 101.325 kPa
 temperatura: 380 K

Caudal en el alimento:

componente A: 45 kg/sg.
 componente B: 5 kg/sg.

Propiedades de los componentes:

densidad (en fase líquida): 800 kg/m³
 $P_a^0 (kPa) = 101.325 \times 10^{4.665 - \frac{1910}{T(K)}}$
 $P_b^0 (kPa) = 101.325 \times 10^{4.4211 - \frac{1564}{T(K)}}$

Solución buscada:

caudal de A en S2: 59.72290 kg/sg.
 caudal de B en S2: 13.19706 kg/sg.
 caudal de A en S3: 28.70053 kg/sg.

caudal de B en S3: 44.21943 kg/sg.
 caudal de A en S4: 13.97763 kg/sg.
 caudal de B en S4: 36.02236 kg/sg.
 caudal de A en S5: 14.72289 kg/sg.
 caudal de B en S5: 8.197064 kg/sg.

1.2 Sistema 2: Sensibilidad alta.

Condiciones en el reactor:

volumen: 128 m³
 fase: gaseosa
 presión: 200 kPa
 temperatura: 300 K
 k₁: .008 (1/sg.)
 k₂: .007 (1/sg.)

Condiciones en el vaporizador:

presión: 101.325 kPa
 temperatura: 268.88 K

Caudal en el alimento:

componente A: 9 kg/sg.
 componente B: 1 kg/sg.

Propiedades de los componentes:

$$X = 1 - \frac{T}{T_c}$$

$$\ln \frac{P^0}{P_c} = \frac{A_1 X + A_2 X^{1.5} + A_3 X^3 + A_4 X^6}{1 - X}$$

con estas constantes:

	P _c (kPa)	T _c (K)	A ₁	A ₂	A ₃	A ₄
para A:	3850.35	425.2	-6.8870	1.1515	-1.9987	3.1300
para B:	3698.36	408.2	-6.9557	1.5009	-2.327	1.4977

Solución buscada:

caudal de A en S2: 14.22273 kg/sg.
 caudal de B en S2: 2.877743 kg/sg.
 caudal de A en S3: 11.68344 kg/sg.
 caudal de B en S3: 5.417032 kg/sg.
 caudal de A en S4: 6.460716 kg/sg.
 caudal de B en S4: 3.539292 kg/sg.
 caudal de A en S5: 5.222720 kg/sg.
 caudal de B en S5: 1.877743 kg/sg.

2. Inicialización de la corriente de rasgado.

Esta incidencia significa la "distancia relativa" entre el valor asignado a cada uno de los atributos ya referidos y aquel que como "único" (o solución analítica hipotética) le correspondería cuando converjan los cálculos matemáticos, es decir, cuando refleje precisamente el estado de estabilidad del proceso "físico". En este caso, por tratarse de un sistema bicomponente, es necesario inicializar dos variables (comúnmente llamadas variables iteradoras) que mutuamente se afectan: flujos o caudales de A y de B en la corriente S5. Los niveles que se toman indican la ubicación relativa en un plano bivariado, sobre un círculo de radio dado, alrededor de la solución buscada; estos niveles se dan como factores de la solución normalizada, así:

- radio 1 = 0.25 veces la norma de la solución.
- radio 2 = 0.50 veces la norma de la solución.
- radio 3 = 1.00 vez la norma de la solución.

Ahora bien, una distancia dada entre un valor inicial y la solución única buscada (o analítica hipotética) puede significar un número infinito de valores iniciales, alrededor de la solución. Para este caso, con cada distancia se toman cuatro valores: cada uno de ellos sobre un punto, en cada uno de los cuatro cuadrantes de un sistema coordenado que se genera al tomar dicha solución como origen, y equidistante angularmente del siguiente valor. En consecuencia, surgen aquí doce niveles para esta variable, con radios y ángulos, respecto del eje coordenado X, así:

- radio 1, con 22°, 112°, 202° y 292°;
- radio 2, con 45°, 135°, 225° y 315°; y
- radio 3, con 67°, 157°, 247° y 337°.

3. Tamaño del error. Se refiere aquí al radio de la vecindad, dentro del plano de las variables de la corriente de rasgado, que permite: de una parte, finalizar el proceso de cálculo iterativo y

juzgarlo como convergente; y de otra parte, aceptar los últimos valores calculados de las variables de la corriente de rasgado como solución. La solución "única" sería la solución analítica, la cual satisfaría en forma "exacta" todas y cada una de las ecuaciones de los modelos matemáticos; mientras que la solución que se acepta, como consecuencia de una solución numérica -vía simulación-, satisface sólo en forma aproximada las ecuaciones de los modelos mencionados. Esta aproximación indica la mayor o menor precisión de la simulación y se mide en términos del radio de la vecindad referida, los niveles que se toman para esta variable son:

- tamaño < .1 kg/sg.
- tamaño < .001 kg/sg.
- tamaño < .00001 kg/sg.

4. Método numérico. Para lograr una serie técnica de cálculos, con miras a mejorar la convergencia de los valores de las variables iteradoras (o flujos de los dos componentes), suelen emplearse métodos numéricos y aún aceleradores de convergencia. Estos métodos permiten modificar, iteración tras iteración, el valor que va tomando cada variable iteradora, de acuerdo con una expresión recurrente. Los niveles de esta variable de análisis corresponden al tipo de método numérico empleado, así:

- sustitución directa.
- relajación.
- Newton Raphson.

VARIABLES DE RESPUESTA

La manera de "calificar" el comportamiento de una simulación, bajo ciertas condiciones, consiste en "medir" alguno de sus atributos. Tales atributos o variables de respuesta se erigen como **consecuencia** observable y cuantificable de los valores que tomen las variables de análisis. Para este caso se toman como variables de respuesta las siguientes:

- Estabilidad de la simulación, en cuanto convergencia o divergencia de los cálculos. Esta estabilidad se refleja en los valores finales de las variables AS5 y BS5, luego de satisfacer el error establecido.
- Número de iteraciones para llegar a la solución que se acepta.
- Tiempo de cómputo requerido.

El valor de la variable tiempo de cómputo debe verse relativamente, ya que depende de la programación elaborada y del procesador utilizado. En este caso, los tiempos de proceso reportados, en segundos, corresponden a los empleados por un procesador 80286, sin coprocesador matemático, mediante el sistema SIMUN1.

DISEÑO DE EXPERIMENTOS

Con el propósito de realizar experimentos de simulación en forma racional, en tanto que el número de experimentos sea reducido y proporcione información suficiente para el análisis, se opta por un **diseño experimental factorial** de las cuatro variables de análisis referidas, en los dos, doce, tres y tres niveles también indicados; es decir, deben realizarse:

$$2 \times 12 \times 3 \times 3 = 216 \text{ experimentos.}$$

RESULTADOS

Los valores obtenidos para las variables AS5 y BS5, con los cuales se refleja el comportamiento de cada simulación, sujeta a ciertas condiciones, se presentan mediante las tablas 1 a 5 y las gráficas 1 a 4. Las tablas 1 y 2 muestran cada valor para el sistema 1, cuando se emplea el método de sustitución directa y el de relajación, respectivamente; las tablas 3 y 4 muestran cada valor para el sistema 2, cuando se emplea el método de relajación y el de Newton Raphson, respectivamente. Los valores iniciales para las

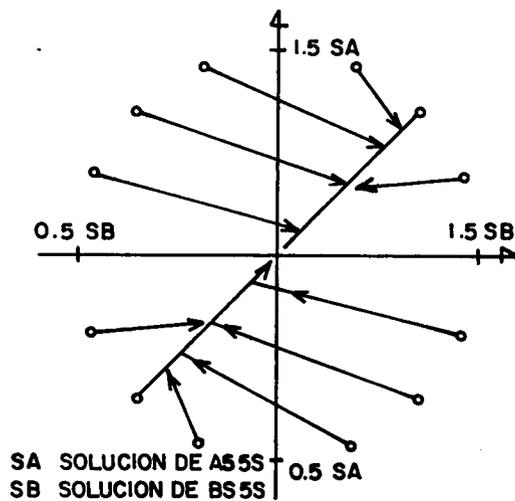
variables mencionadas en la tabla 2 son idénticos a los de la tabla 1; y los de la tabla 4, idénticos a los de la tabla 3. La tabla 5 muestra los tiempos requeridos para 500 iteraciones, con cada método. No se presentan resultados para el sistema 1 con el método de Newton Raphson, ya que en ningún caso converge el cálculo; tampoco se presentan los resultados para el sistema 2 con el método de relajación, ya que el comportamiento es análogo al presentado con el método de sustitución directa y mostrado ya en la tabla 3.

A continuación las gráficas 1 y 2 ilustran las rutas seguidas en cada simulación para el sistema 1, según el valor inicial de AS5S y BS5S, mediante sustitución directa y relajación (con factor de 1.5), respectivamente. La gráfica 3 ilustra las rutas seguidas para el sistema 2, según el valor inicial de AS5S y BS5S, mediante Newton Raphson. En las gráficas 1 y 3 se han seleccionado como puntos iniciales, en el plano coordenado normalizado, aquellos que cubren los diferentes cuadrantes y siempre a la misma distancia de 0.5 veces la norma. La gráfica 4 ilustra, en escala logarítmica, el número promedio de iteraciones (para las diferentes iniciaciones) en función del tamaño de error deseado y del método que se emplee.

ANALISIS Y CONCLUSIONES

La convergencia y estabilidad que aquí se analizan están íntimamente relacionadas con el método empleado, la inicialización de las variables iteradoras y el tamaño de error aceptado, de manera marcada por tratarse de sistemas de dos variables iteradoras. Para el análisis se genera un plano coordenado normalizado, cuyo origen es la solución buscada, y en donde se establecen las rutas seguidas en cada simulación.

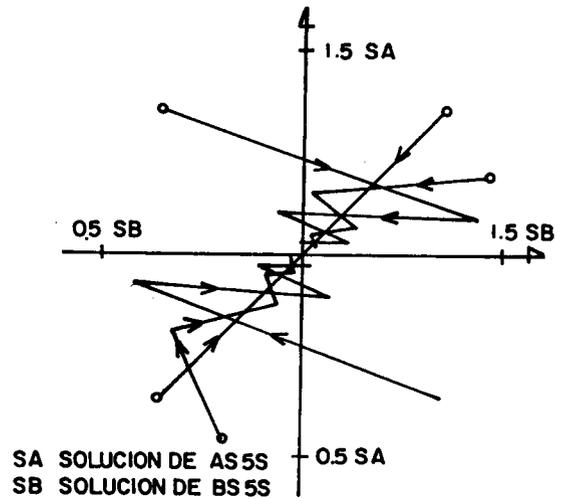
El método de sustitución directa converge adecuadamente con el sistema 1 y no con el



Gráfica 1

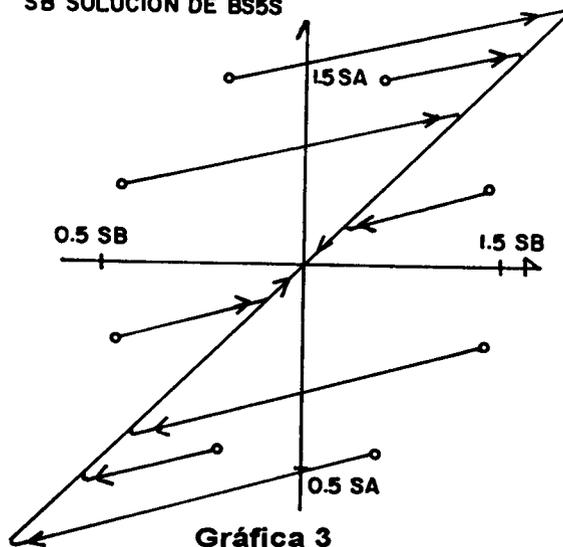
Rutas de simulación - Sistema 1 Mediante sustitución directa

SA SOLUCION DE AS5S
SB SOLUCION DE BS5S



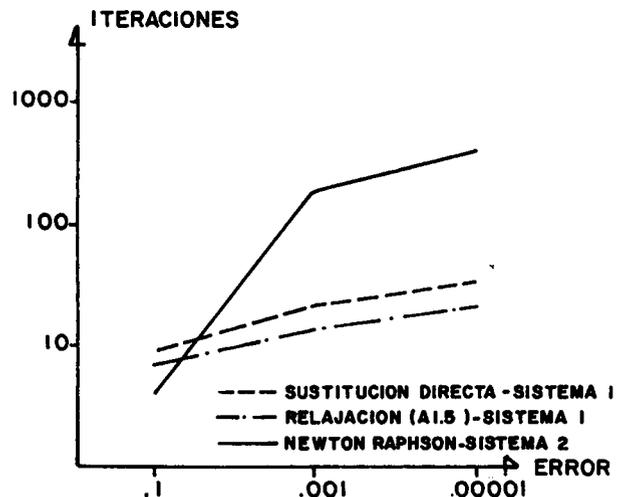
Gráfica 2

Rutas de simulación - Sistema 1 Mediante relajación



Gráfica 3

Rutas de simulación - Sistema 2 Mediante Newton Raphson



Gráfica 4

Iteraciones promedio vs. Error

sistema 2. Esta situación se gobierna con la pendiente de las funciones que se calculan, en términos de las variables incidentes, así: cuando la pendiente es mayor que uno, el cálculo converge sólo cuando el error es grande, ya que cada paso es más pequeño; y cuando la pendiente es menor que uno, el cálculo siempre converge, aún con errores pequeños. La causa

principal de una u otra pendiente es la sensibilidad del sistema. Los resultados, de acuerdo con la inicialización que se haga, convergen así: a la parte superior de la vecindad de la solución, cuando se inicia desde los cuadrantes uno y dos; y a la parte inferior, cuando se inicia desde los cuadrantes tres y cuatro. La ruta que sigue la simulación llega, en la primera iteración, a la

Tabla 1

Valores iniciales y finales de AS5 y BS5 e iteraciones, mediante sustitución directa, luego de satisfacer el error previsto, para el sistema 1.

Máximo error		<.1 kg/sg.				<.001 kg/sg.				<.00001 kg/sg.			
Angulo		22°	112°	202°	292°	45°	135°	225°	315°	67°	157°	247°	337°
	inicial	16.10	18.14	13.34	11.31	17.326	17.326	12.120	12.120	18.11101	16.16106	11.33477	13.28472
	AS5 final	14.94	14.90	14.51	14.49	14.725	14.725	14.721	14.721	14.72291	14.72291	14.72288	14.72287
inicia													
a	inicial	10.10	7.429	6.297	8.965	9.6461	6.7480	6.7480	9.6461	8.99778	6.31070	7.39635	10.08342
radio1	BS5 final	8.320	8.298	8.079	8.072	8.1982	8.1981	8.1961	8.1961	8.19707	8.19707	8.19705	8.19705
	iteraciones	6	8	6	7	21	20	21	20	36	31	35	29
	inicial	17.48	21.55	11.97	7.897	19.928	19.928	9.5175	9.5175	21.49914	17.59924	7.94664	11.84654
	AS5final	14.95	14.92	14.52	14.51	14.725	14.725	14.720	14.721	14.72291	14.72291	14.72287	14.72287
inicia													
a	inicial	12.00	6.662	4.397	9.732	11.095	5.2990	5.2990	11.095	9.79849	4.42435	6.59564	11.96978
radio 2	BS5 final	8.325	8.305	8.082	8.080	8.1983	8.1982	8.1957	8.1957	8.19707	8.19707	8.19705	8.19705
	iteraciones	8	10	8	9	23	22	22	21	38	33	35	31
	inicial	20.24	28.37	9.207	1.072	25.134	25.134	4.3122	4.3122	28.27538	20.47558	1.17040	8.97020
	AS5final	14.97	14.95	14.53	14.54	14.725	14.725	14.721	14.721	14.72291	14.72291	14.72287	14.72287
inicia													
a	inicial	15.80	5.126	.5969	11.27	13.993	2.4009	2.4009	13.993	11.3991	.65163	4.99422	14.74250
radio3	BS5 final	8.332	8.322	8.088	8.094	8.1980	8.1983	8.1959	8.1959	8.19707	8.19707	8.19705	8.19705
	iteraciones	10	12	10	11	26	24	24	23	41	35	37	33

Tabla 2

Valores finales de AS5 y BS5 e iteraciones, mediante relajación, luego de satisfacer el error previsto, para el sistema 1.

Máximo error		<.1 kg/sg.				<.001 kg/sg.				<.00001 kg/sg.			
Angulo		22°	112°	202°	292°	45°	135°	225°	315°	67°	157°	247°	337°
inicia	AS5	14.85	14.84	14.60	14.62	14.725	14.724	14.721	14.722	14.72291	14.72291	14.72288	14.72289
a	BS5	8.267	8.260	8.131	8.141	8.1982	8.1978	8.1961	8.1964	8.19707	8.19707	8.19705	8.19706
radio1	iteraciones	5	6	5	6	13	13	13	13	22	19	21	20
inicia	AS5	14.87	14.86	14.59	14.62	14.724	14.724	14.721	14.722	14.72292	14.72291	14.72287	14.72289
a	BS5	8.278	8.274	8.125	8.138	8.1978	8.1979	8.1960	8.1963	8.19708	8.19707	8.19705	8.19706
radio2	iteraciones	6	7	6	7	15	14	14	14	23	20	22	21
inicia	AS5	14.90	14.82	14.59	14.62	14.725	14.725	14.721	14.721	14.72291	14.72290	14.72288	a
BS5	radio3	8.293	8.253	8.121	8.139	8.1981	8.1981	8.1961	9.1962	8.19707	8.19707	8.19706	8.19705
	iteraciones	7	9	7	8	16	15	15	15	25	23	22	22

Tabla 3

Valores iniciales y finales de AS5 y BS5 e iteraciones, mediante sustitución directa, luego de satisfacer el error previsto, para el sistema 2.

Máximo error Angulo		<.1 kg/sg.				<.001 kg/sg.				<.00001 kg/sg.			
		22°	112°	202°	292°	45°	135°	225°	315°	67°	157°	247°	337°
inicia a radio 1	AS5 inicial	5.712	6.433	4.734	6.1460	4.012	6.1460	4.2995	4.2995	6.424605	5.732890	4.020835	4.712550
	AS5 final	4.968	nc	5.426	-1.75	nc	nc	-2.328	-2.328	nc	nc	-2.33195	-2.33196
inicia a radio 2	BS5 inicial	2.313	1.702	1.442	2.054	2.2097	1.5458	1.5458	2.2097	2.061164	1.445624	1.694318	2.309858
	BS5 final	1.786	nc	1.951	-629	nc	nc	-8368	-8370	nc	nc	-838413	-838415
	iterac.	2		2	30		84	58			90	86	
inicia a radio 3	AS5 inicial	6.201	7.644	4.244	2.802	7.0692	7.0692	3.3762	3.3762	7.626490	6.243060	2.818950	4.202380
	AS5 final	4.657	nc	5.567	-1.74	nc	nc	-2.328	-2.328	nc	nc	-2.33195	-2.33195
inicia a radio 1	BS5 inicial	2.748	1.526	1.007	2.229	2.5416	1.2139	1.2139	2.5416	2.244587	1.013506	1.510895	2.741976
	BS5 final	1.674	nc	2.002	-.624	nc	nc	-8369	-8369	nc	nc	-838415	-838413
	iterac.	2		2	11		67	39			73	68	
inicia a radio 2	AS5 inicial	7.179	10.07	3.266	.3803	8.9157	8.9157	1.5297	1.5297	10.03026	7.263399	.415181	3.182041
	AS5 final	3.915	nc	5.633	-2.66	nc	nc	-2.328	-2.337	nc	nc	-2.33195	-2.33205
inicia a radio 3	BS5 inicial	3.619	1.174	.1367	2.581	3.2055	.54998	.54998	3.2055	2.611433	.149271	1.144049	3.606211
	BS5 final	1.408	nc	2.025	-.955	nc	nc	-8370	-8401	nc	nc	-838412	-838448
	iterac.	2		2	6		50	27			50	51	

nc: no converge

Tabla 4

Valores finales de AS5 y BS5 e iteraciones, mediante Newton Raphson, luego de satisfacer el error previsto, para el sistema 1.

Máximo error Angulo		<.1 kg/sg.				<.001 kg/sg.				<.00001 kg/sg.			
		22°	112°	202°	292°	45°	135°	225°	315°	67°	157°	247°	337°
inicia a radio1	AS5	5.402	6.934	5.038	3.405	5.2718	5.2718	5.1737	5.1744	5.223418	5.223382	5.222052	5.22031
	BS5	1.942	2.493	1.811	1.224	1.8954	1.8954	1.8601	1.8604	1.877799	1.877979	1.877500	1.877493
	iteraciones	3	4	3	4	152	179	146	173	390	377	383	371
inicia a radio2	AS5	5.640	8.579	4.795	1.542	5.2719	5.2722	5.1741	5.1737	5.223424	5.223317	5.222111	5.222180
	BS5	2.028	3.085	1.724	.5543	1.8954	1.9855	1.8602	1.8601	1.877994	1.877956	1.877521	1.877546
	iteraciones	4	4	4	5	190	217	178	204	430	418	419	416
inicia a radio3	AS5	6.089	11.60	4.334	nc	5.2723	5.2715	5.1733	nc	5.223424	5.223520	5.221864	5.222085
	BS5	2.189	4.169	1.558	nc	1.8956	1.8953	1.8600	nc	1.877994	1.878029	1.877433	1.877512
	iteraciones	5	5	4		231	260	206		474	442	431	440

Tabla 5

Tiempos requeridos mediante cada método

Método empleado	Tiempo medio para 500 iteraciones
Sustitución directa	13 sg.
Relajación	14 sg.
Newton Raphson	49 sg.

diagonal principal del plano normalizado y luego, cuando converge, sigue por esta diagonal hacia la solución, independiente del punto inicial; esta ruta comienza con pendientes simétricas que sólo dependen del ángulo (en coordenadas polares) desde donde se inician los cálculos.

El método de relajación permite acelerar la convergencia de los cálculos para el sistema 1 y atenuarla para el sistema 2, según sea el valor del factor empleado: cuando se acelera se genera una ruta en zig zag, alrededor de la diagonal principal del plano normalizado, que permite llegar a la solución en menos iteraciones; y cuando se atenúa se sigue una ruta similar a la del método de sustitución directa, se hace más pequeño cada paso y es posible llegar a la solución con errores más pequeños. También con este método las pendientes de las rutas seguidas durante la simulación son simétricas y dependen sólo del ángulo (en coordenadas polares) desde donde se inician los cálculos.

El método de Newton Raphson, para los casos estudiados, no converge con el sistema 1, mientras que sí converge (salvo en dos casos) con el sistema 2. Las rutas que la simulación sigue con este método, también simétricas y según el ángulo del punto inicial, llegan mediante un giro suave a una paralela cercana a la diagonal principal del plano normalizado, con pendientes más pequeñas que con el método de sustitución directa, en un número bastante mayor de iteraciones, y luego avanzan muy lentamente hacia la solución. Este comportamiento de lenta convergencia se debe a la compleja perturbación de dos variables a través de la malla unitaria, en donde la corriente de recirculación depende fuertemente de la operación en tres unidades de proceso que le anteceden.

El número de iteraciones requerido depende levemente del tamaño del error y de la iniciación

con el método de sustitución directa y de relajación, mientras que muy fuertemente con el método de Newton Raphson, circunstancias visibles en sistemas bivariados de perturbaciones complejas. De otra parte, el tiempo requerido para cada iteración mediante el método de Newton Raphson (tomando como referencia el tiempo para 500 iteraciones) es del orden de tres veces el que se requiere para cada iteración mediante sustitución directa o relajación.

Los valores finales de las variables iteradoras (lejos o cerca de la solución, según el tamaño de error previsto), luego de cálculos convergentes, corresponden a dominios positivos o negativos, según dos situaciones positivas, cuando se llega al límite superior o inferior de la vecindad de un tamaño dado, en el plano normalizado, alrededor de la solución; y negativos, cuando se llega a soluciones válidas solo matemáticamente, pero que no tienen ningún significado ni factibilidad física. Esta circunstancia indica la importancia de restringir los valores de las variables en los modelos matemáticos, de manera que reflejen más cercanamente el mundo físico y la simulación sea una herramienta estable y confiable.

Definitivamente no es posible generalizar una recomendación para emplear un determinado método, más aún, cuando se trata de cadenas de modelos matemáticos con recirculación y de situaciones bivariadas. Para algunos casos convienen unos métodos y para otros no. De otra parte, la iniciación de cada variable se torna crítica, tanto para la convergencia como para la velocidad de los cálculos: es necesario "percibir" inicialmente, aunque sea gruesamente, la región donde se encuentra la solución.

La realización de este tipo de trabajos es viable sólo como consecuencia de la popularización de máquinas de cómputo veloz, ya que de otra manera es imposible realizar un número tan

grande de cálculos para obtener tan abundante información, la cual información facilita estudiar y comprender situaciones de manejo de símbolos abstractos, para inferir comportamientos de sistemas físicos.

ENLACE

El próximo trabajo de esta serie consiste en

aplicar SIMUN1 en la simulación y análisis del segmento planteado, para estudiar las características del proceso de función de las condiciones de operación del reactor y del vaporizador instantáneo. El análisis se presentará para diferentes conversiones por paso en el reactor y globales en el segmento, con diferentes niveles de recirculación y con condiciones estables en cada unidad.

NOMENCLATURA

S1, S2, ..., S5 corrientes del segmento de proceso.

AS1, ..., AS5 caudal del componente A en cada corriente, en kg/sg.

BS1, ..., BS5 caudal del componente B en cada corriente, en kg/sg.

k_1, k_2 constantes específicas de velocidad, directa e inversa, para la reacción química, en 1/sg.

P_A^0, P_B^0 presiones de vapor de los componentes A y B, puros, en kilopascales.

P_c presión crítica, para los componentes A y B, en kilopascales.

T_c temperatura crítica, para los componentes A y B, en K.

T temperatura.

X parámetro de temperatura reducida.

A1, A2, A3 y A4 constantes para evaluación de presiones de vapor.

BIBLIOGRAFIA

1. BOGOYA, J. D. (92). Simulación y Análisis de un Segmento de Proceso. Parte I - Planteamiento del Problema. Ingeniería e Investigación, N° 28.
2. CARNAHAN, B., H. A. Luther and J. O. Wilkes (79). Cálculo Numérico. Métodos, Aplicaciones. Rueda.
3. HOLLAND, C. D. (75). Fundamentals and Modeling of Separation Processes. Prentice Hall.

4. LEVENSPIEL, O. (72). Chemical Reaction Engineering. John Wiley. 2a. edición.
5. REID, R. C., J. M. Prausnitz and B. E. Poling (87). The Properties of Gases and Liquids. McGraw Hill. 4a. edición.
6. WESTERBERG, A. W. (78). Process Design Strategy. Curso Latinoamericano de Diseño de Procesos por Computadora. Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química, Argentina.