

PQI 3408 - Reciclo

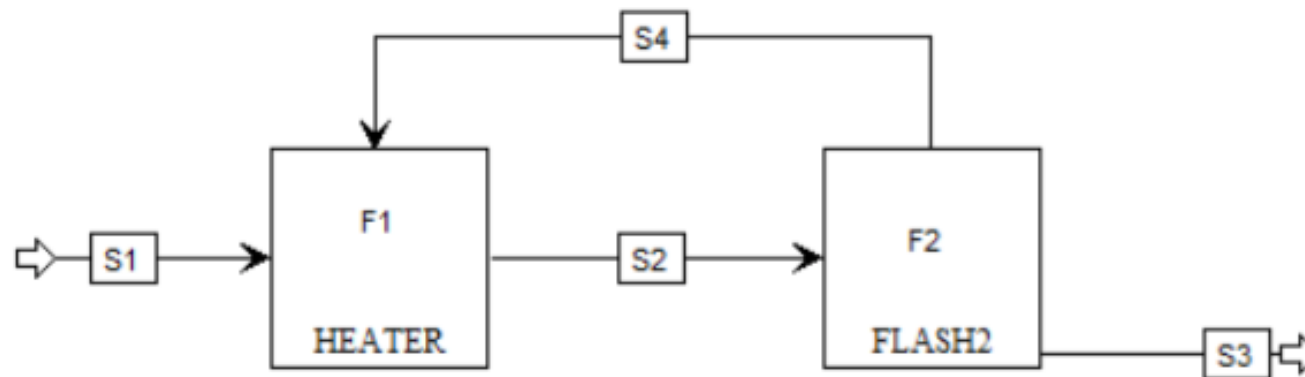
Prof. Galo A.C. Le Roux

Outline

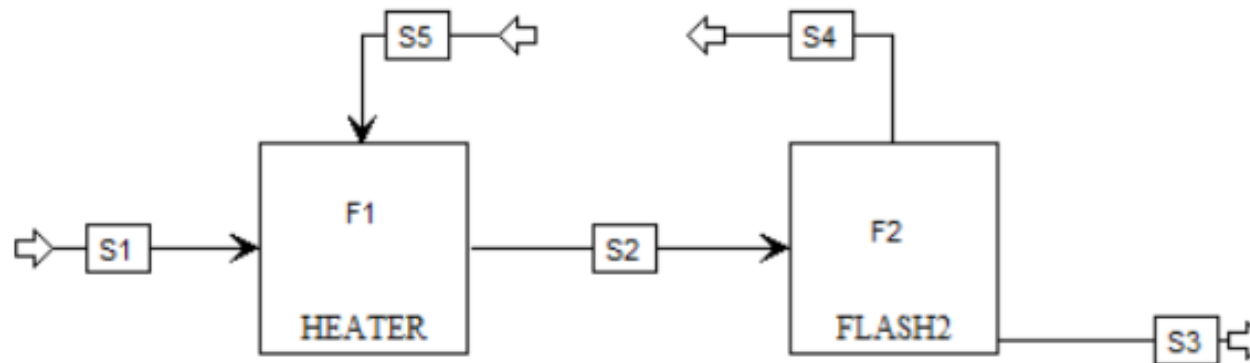
- Colunas - Modelos ShortCut
 - DSTWU
- Colunas - Modelos Rigorosos
 - Radfrac

Introdução

RECICLO EM SIMULADORES SEQUENCIAIS MODULARES:



Introdução



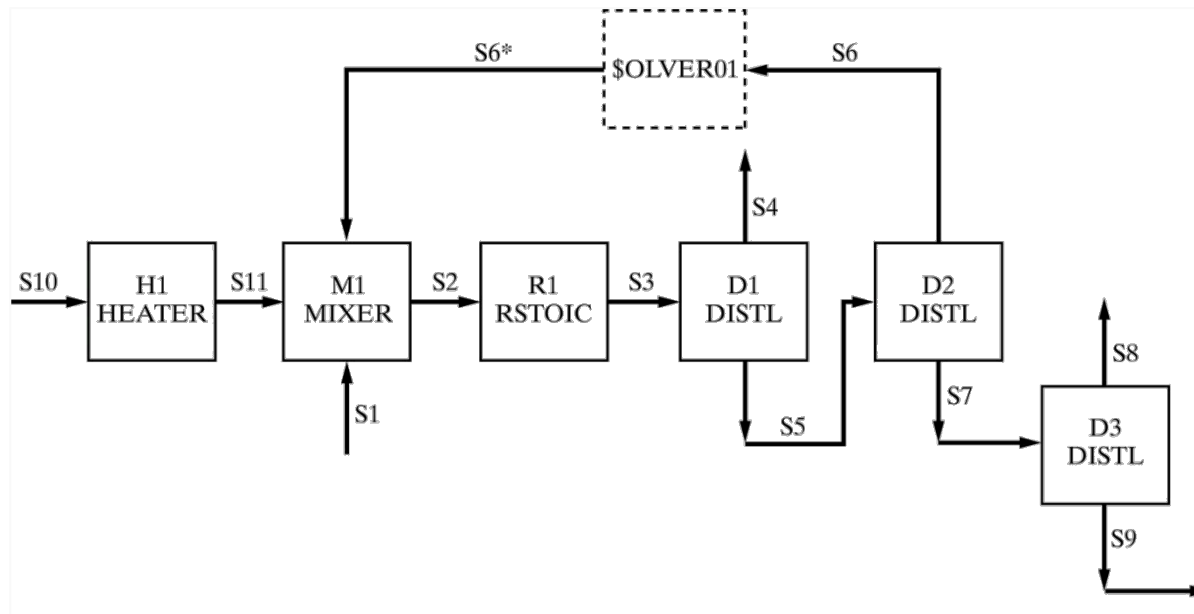
S4: Corrente Cortada (*torn stream, tear stream*)

Sequência de cálculo: F1 → F2: converge S4

Introdução

- Determinar Partições
- Determinar loops de reciclo
- Determinar correntes cortadas
- Determinar sequência de cálculo
- Determinar método de convergência

Análise do Fluxograma

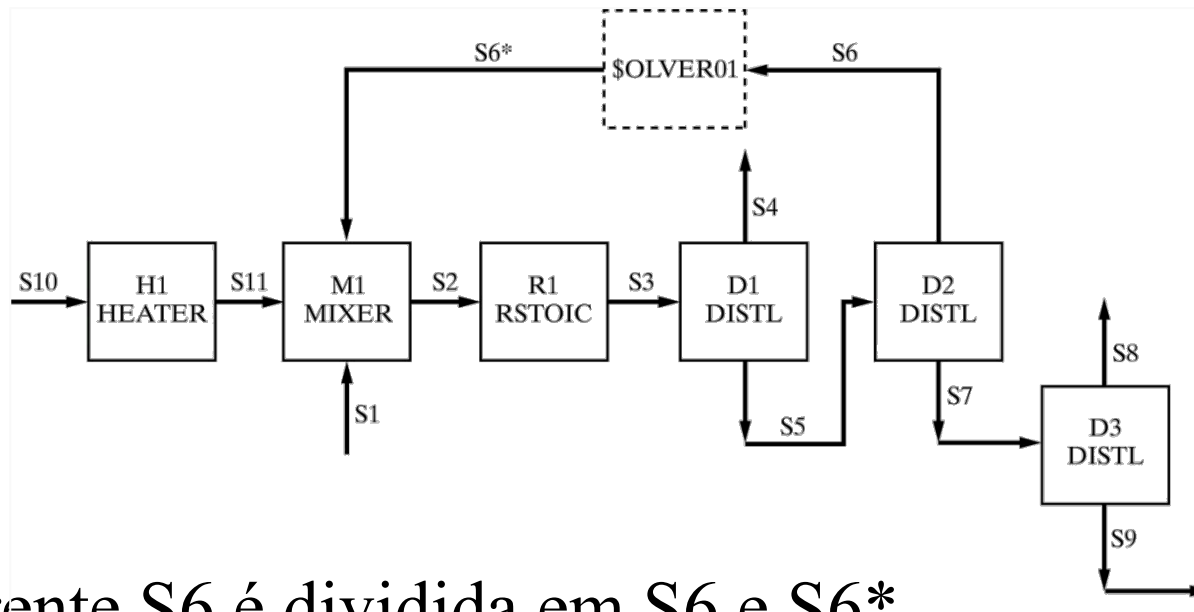


A corrente S6 é dividida em S6 e S6*

É introduzido um módulo de convergência

Pode ser dado um chute inicial para S6*

Análise do Fluxograma

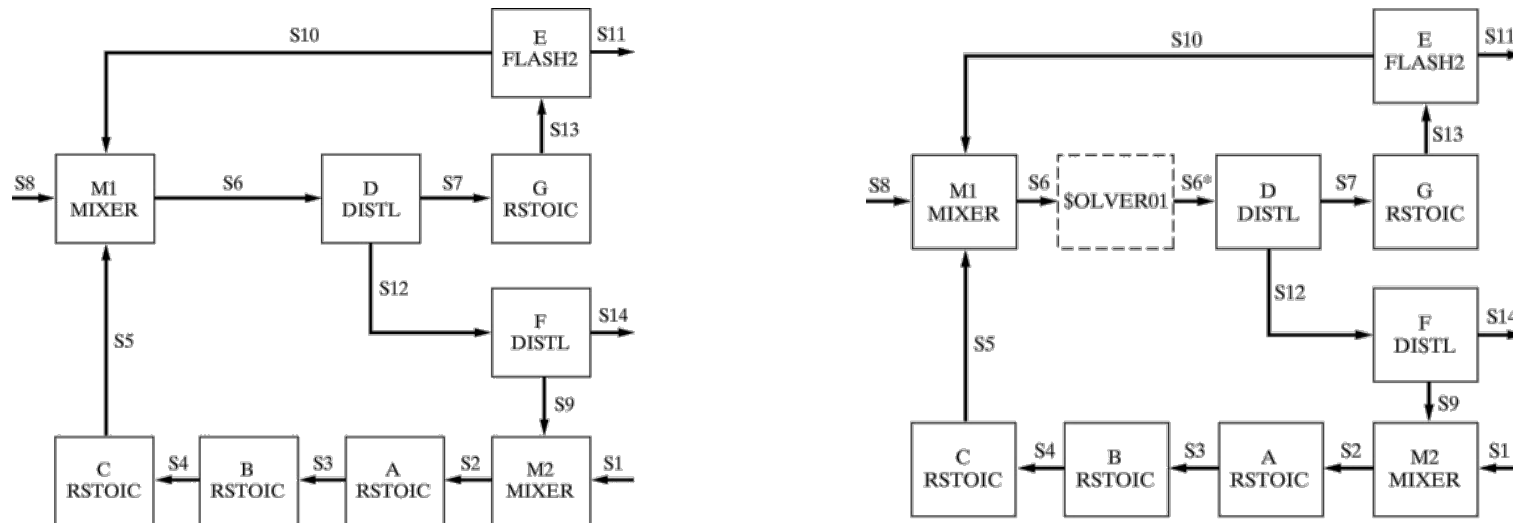


A corrente S6 é dividida em S6 e S6*

É introduzido um módulo de convergência (\$SOLVER01) que não é mostrado no PFD

Pode ser dado um chute inicial para S6* pelo usuário ou o simulador pode fornecer um chute automaticamente

Análise do fluxograma



- Para o fluxograma acima o Aspen Plus introduz automaticamente o módulo de convergência \$SOLVER01 e estabelece a ordem de cálculo:

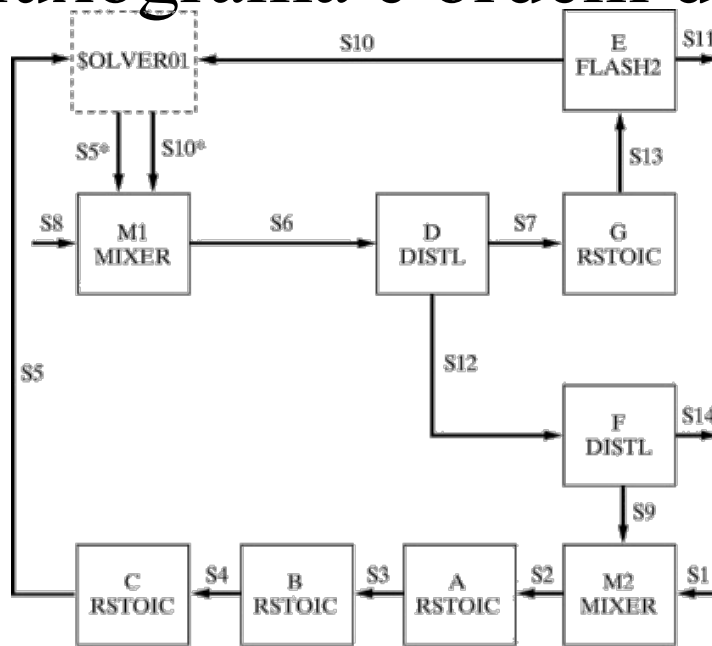
\$SOLVER01

D G E F M2 A B C M1

(RETURN \$SOLVER01)

Análise do Fluxograma

- Pode-se preferir cortar as correntes S5 e S10 simultaneamente obtendo do seguinte fluxograma e ordem de cálculo:



A sequência de cálculo é:

\$SOLVER01

M1 D G E F M2 A B C

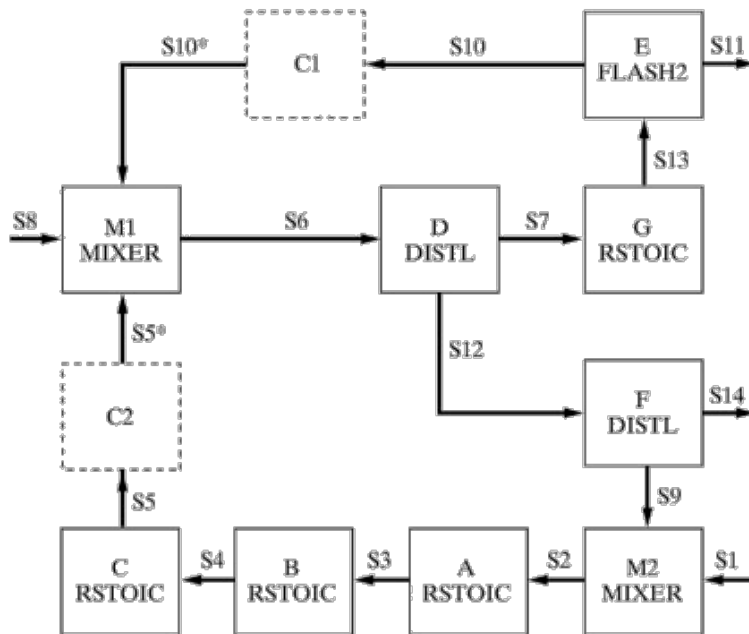
(RETURN \$SOLVER01)

Análise do Fluxograma

- Para tal o usuário deve entrar em *Convergence* no menu *Data* e selecionar *Tear* o que leva ao formulário *Tear Streams Specifications*.
- Introduzir S5 e S10 como *tear streams*.

Análise do Fluxograma

- Alternativamente, se o usuário preferir convergir as duas correntes de reciclo S5 e S10 com **duas** unidades de convergência:



A sequência de cálculo é:

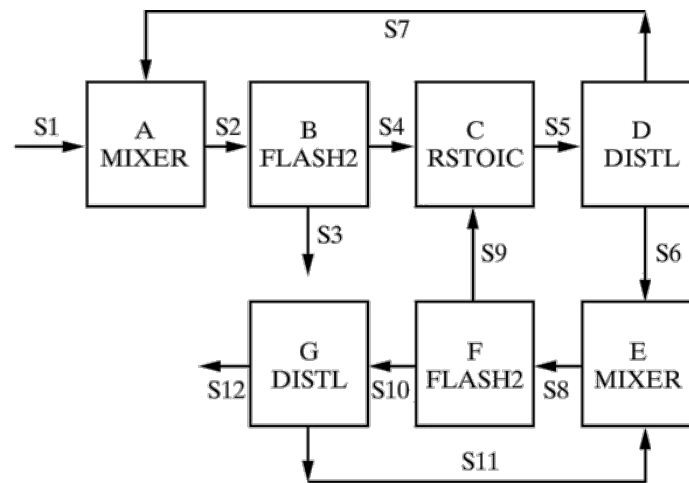
```
C2
  C1 M1 D G E
  (RETURN C1)
F M2 A B C
(RTURN C2)
```

Análise do Fluxograma

- Para tal o usuário deve selecionar *Convergence* no menu *Data* e selecionar *Convergence*→*New* para criar duas unidades de convergência C1 e C2 (Selecionar S5 como *tear stream* para C2 e S10 como *tear stream* para C1).
- Nesta sequência o loop interno, C1, converge a cada iteração do loop externo, C2 (que inclui C1). Isto pode ser eficiente quando os módulos for a de C1 necessitam de cálculos extensivos (**nested**).

Reciclo

- Um fluxograma mais complexo que inclui três reciclos:



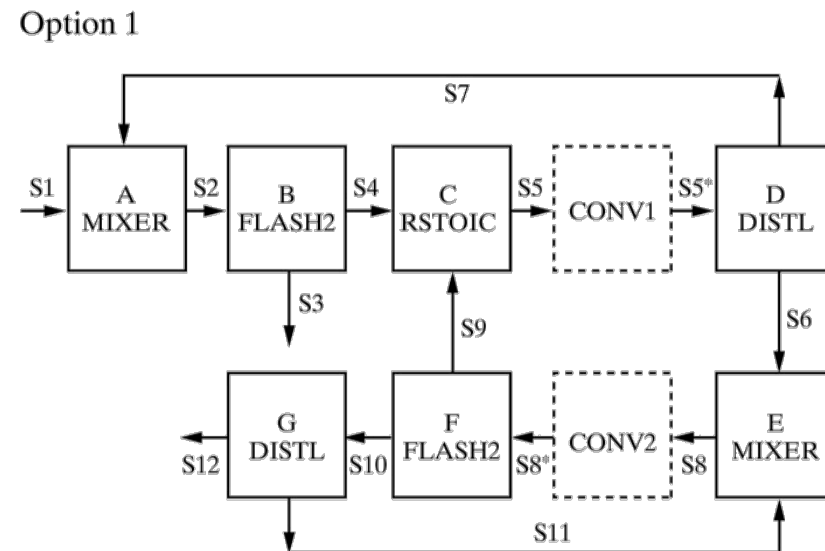
Reciclo

Ele pode ser decomposto de acordo com o número mínimo de correntes cortadas (2): S5 e S8

Que podem ser resolvidas sequencialmente:

Opção 1 sequência de cálculo:

```
CONV2 F G  
CONV1 D A B C  
(RETURN CONV1)  
E  
(RETURN CONV2)
```



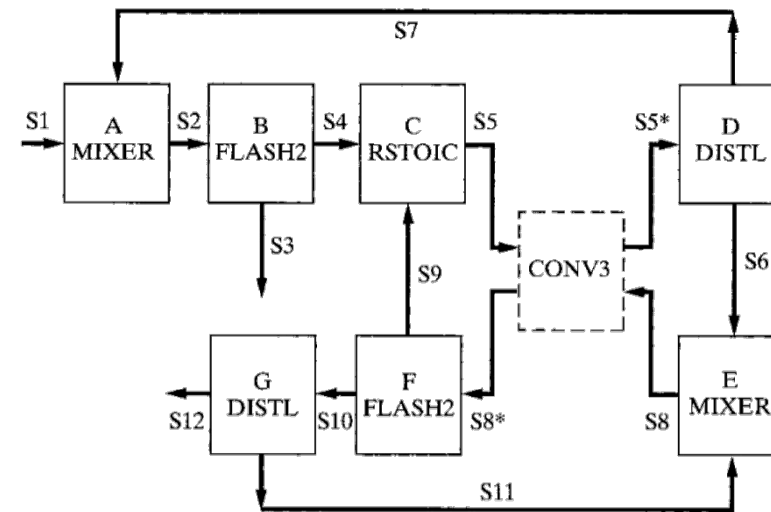
Reciclo

Ou simultaneamente;

Opção 2 sequência de cálculo:

CONV3 F G D A B C E
(RETURN CONV3)

Option 2



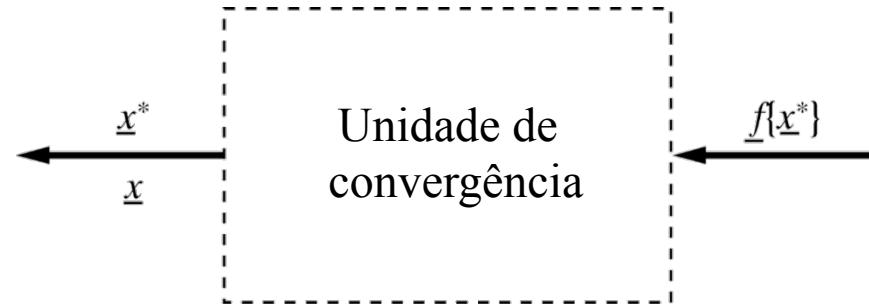
Reciclo

- O número mínimo de correntes cortadas pode não fornecer a convergência mais rápida.
- Uma solução alternativa para este fluxograma envolve três correntes cortadas, por exemplo, S7, S9, e S11 com uma única unidade de convergência.

Método de convergência

- Substituição direta
- Método de Wegstein
- Newton-Raphson
- Broyden (Quasi-Newton)
- Auto-valor dominante

Método de convergência



x^* - valor de x antes do loop

$f(x^*)$ – valor de x depois do loop

x – novo valor de x

$$y = x^* - f(x^*)$$

Método de Convergência

- Substituição direta:

$$x = f(x^*)$$

- Método de Wegstein:

$$x = \alpha x + (1-\alpha) f(x^*)$$

Método de Convergência

- Newton-Raphson

Resolver: $y = 0$

Necessita do Jacobiano

- Quasi-Newton. Não necessita Jacobiano mas é menos rápido e eficiente

- Auto-valor dominante. Usa o maior auto-valor do Jacobiano calculado a cada quatro ou mais iterações para acelerar o método de Wegstein

Conclusão

- É tudo um pouco artesanal
- É necessário entender que sempre tem um jeito de convergir se o problema tiver uma solução fisicamente factível
- É importante ter noção que podem ser feitas várias coisas diferentes para obter a convergência