



Simulación y Optimización de Procesos Químicos 4º Curso

Dpto Informática y Automática. USAL



Programa de Simulación

- Introducción
- Modelado y Simulación de sistemas continuos en el tiempo
 - ✓ Sistemas Amortiguados (Ppio acumulación)
 - ✓ Solución estacionaria
 - ✓ Solución dinámica
 - ✓ Sistemas distribuidos
 - ✓ Solución estacionaria
 - ✓ Solución dinámica
 - ✓ Ejemplos de modelado de procesos químicos
 - ✓ Identificación de sistemas
- Modelado y Simulación de sistemas discretos
 - ✓ Herramientas matemáticas
 - ✓ Ejemplos y herramientas



Introducción

- ✍ Definiciones
- ✍ Objetivos de la simulación
- ✍ Clasificación de modelos
- ✍ Metodología para la solución de problemas de modelado
- ✍ Herramientas
 - ✓ Teóricas
 - ✓ Simulación (Software)



Definiciones

- ✍ “Simulación es el proceso de diseñar un modelo de un sistema real y llevar a cabo experiencias con el mismo con la finalidad de aprender el comportamiento del sistema o de evaluar diferentes estrategias (dentro de los límites impuestos por un criterio o un conjunto de ellos) para el funcionamiento del sistema”

C. Shannon



Definiciones

✍ Sistema

- ✓ Conjunto de entes (gentes, máquinas, elementos físicos) que interaccionan conjuntamente con un mismo objetivo
 - ✓ Evaporador (Recipiente, quemador, ...)
 - ✓ Fabrica (Máquinas herramienta, almacenes, ...)

✍ Estado (de un sistema)

- ✓ Conjunto de variables que determinan el comportamiento de un sistema
 - ✓ Evaporador (Temperaturas, alturas, ...)
 - ✓ Nº de empleados activos, estado de ocupación de las máquinas



Objetivos de un proyecto de simulación

- ✍ Comparación de un número finito de estrategias frente a un problema concreto del mundo real
 - ✓ Examen de configuraciones de diseño para una planta
- ✍ Obtención de relaciones funcionales
 - ✓ Comportamiento de Var de estado = f (parámetros del sistema, entradas)
- ✍ Etapa previa al diseño
 - ✓ ASPEN
- ✍ Fines educativos o de adiestramiento
 - ✓ Simuladores de vuelo
 - ✓ Procedimientos de Operación en centrales nucleares



Clasificación de modelos

Dependencia de las variables de estado

✓ Variable temporal

✓ Respuesta buscada

- Estático
 - Solución estado estacionario
 - Ecuaciones algebraicas (DSCT) o diferenciales (CSCT)
- Dinámico
 - Soluciones del transitorio
 - Ecuaciones diferenciales ordinarias (DSCT) o en derivadas parciales (CSCT)

✓ Dependencia funcional

- Discreta
 - Las variables cambian de valor en un conjunto finito o numerable de instantes de tiempo
- Continuo
 - Las variables cambian de valor en un conjunto finito o numerable de instantes de tiempo



Clasificación de modelos

Dependencia de las variables de estado

✓ Variable espacial

✓ Continua

- Existe una dependencia continua de las variables de estado con la variable espacial
 - Ejemplo: Reactor tubular

✓ Discreta

- **NO** existe una dependencia continua de las variables de estado con la variable espacial
 - Ejemplo: Reactor agitado

✓ Comportamiento aleatorio

✓ Estocástico

- Comportamiento aleatorio de las variables de estado
 - Ejemplo: Sistema de colas

✓ Determinista



Clasificación de modelos

CSCT (Continuos en el espacio y en el tiempo)

- ✓ Deterministas
- ✓ Áreas de aplicación
 - Transferencia de energía
 - Meteorología
- ✓ Modelado
 - Ecuaciones diferenciales en derivadas parciales
- ✓ Ecuaciones características
 - Ecuaciones de Maxwell, Navier-Stokes, difusión, ...
- ✓ Herramientas
 - PDEL, LENS
- ✓ Ejemplos
 - Transitorio de reactor tubular
 - Sistemas atmosféricos



Clasificación de modelos

DSCT (Discretos en el espacio y continuos en el tiempo)

- ✓ Deterministas
- ✓ Áreas de aplicación
 - Circuitos eléctricos
 - Sistemas de control (Parámetros localizados)
- ✓ Modelado
 - Ecuaciones diferenciales ordinarias
- ✓ Ecuaciones características
 - Leyes de Newton, Kirchoff, Ppios de conservación, ...
- ✓ Herramientas
 - CSMP, ACSL, MatLab
- ✓ Ejemplos
 - Transitorio de reactor agitado (CSTR)
 - Columna de destilación



Clasificación de modelos

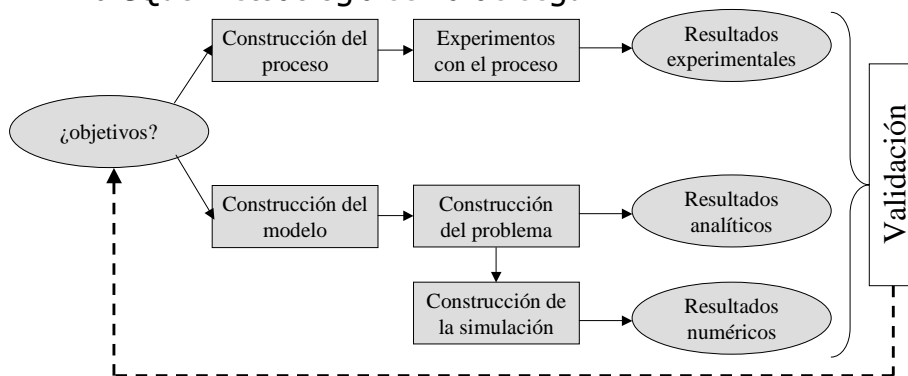
- ✎ DSDT (Discretos en el espacio y en el tiempo)
 - ✓ Estocásticos
 - ✓ Áreas de aplicación
 - Sistemas de tráfico
 - Fabricación discreta (manufactura)
 - ✓ Modelado
 - Ecuaciones algebraicas
 - Distribuciones de probabilidad
 - ✓ Ecuaciones características
 - Teoría de colas, ...
 - ✓ Herramientas
 - GPSS
 - ✓ Ejemplos
 - Sistema de colas (Ej.: Banco)



Metodología para la solución de problemas de modelado

✎ Ante un problema de diseño

✓ ¿Qué metodología se ha de seguir?





Herramientas teóricas

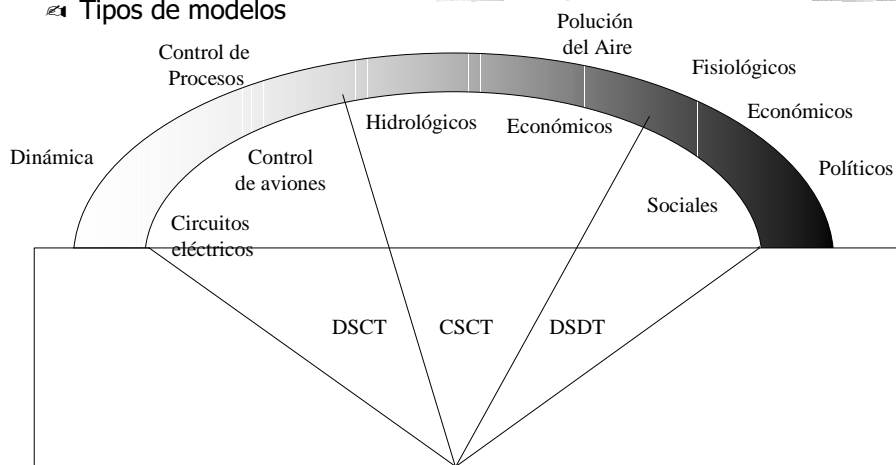
Conocimiento aportado a un modelo

- ✓ Datos experimentales
 - ✓ Modelado inductivo
 - Ejemplo
 - Datos sobre los pedidos, ritmo de fabricación, aparición de fallos en una empresa
 - Aplicabilidad
 - Sistemas DSDT
 - ✓ Interno
 - ✓ Modelado deductivo
 - Ejemplo
 - Aporte de leyes y otros tipo de conocimiento que permite generar un conjunto de ecuaciones que describen el comportamiento de un sistema
 - Aplicabilidad
 - Sistemas DSCT
- Se pueden considerar enfoques mixtos
 - ✓ Proponer como hipótesis de trabajo la utilización de un modelo y posteriormente comprobar si existe un conjunto de parámetros que hacen viable la utilización de dicho modelo
 - ✓ Problema de Identificación



Herramientas matemáticas

Tipos de modelos





Modelado deductivo

Definición

- ✓ Procedimiento por el cual partiendo de una serie de principios (o leyes) se obtienen mediante técnicas analíticas las ecuaciones que describen el comportamiento de un sistema

Conceptos fundamentales

- ✓ Estructura
- ✓ Leyes
- ✓ Parámetros



Modelado deductivo. Estructura

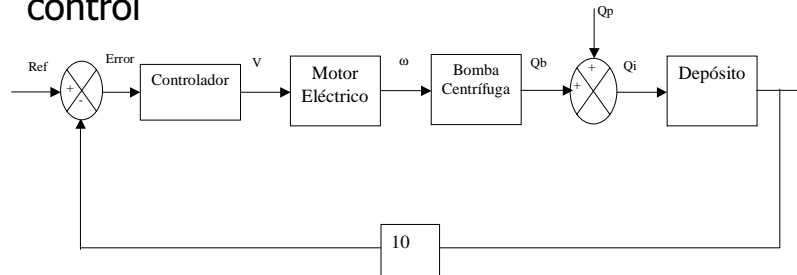
Estructura

- ✓ Sistema
 - ✓ Conjunto de elementos interconectados
- ✓ Definiciones
 - ✓ Elemento
 - Determina qué es lo que sucede (Operación de transferencia, transformación, ...) a la materia
 - ✓ Interconexión
 - Especifican las rutas por las cuales circula la materia o la energía
- ✓ Ejemplo
 - ✓ Diagrama bloques de un sistema de control
 - ✓ Proceso



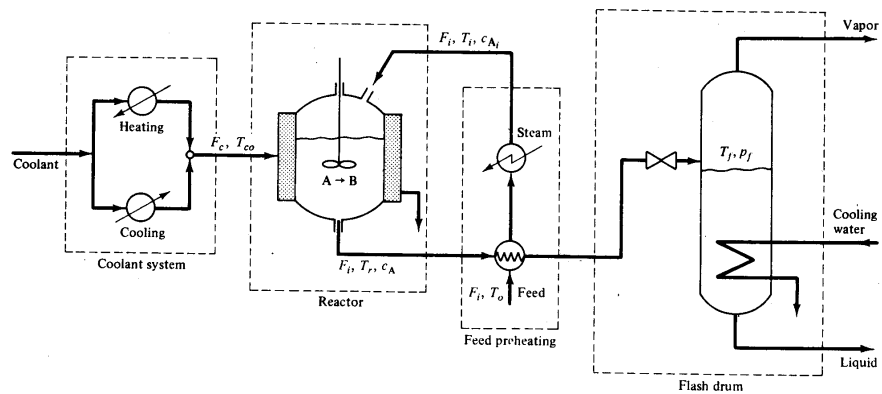
Modelado deductivo. Estructura

Ejemplo I: Diagrama de bloques de sistema de control



Modelado deductivo. Estructura

Ejemplo II: Unidad de proceso





Modelado deductivo. Leyes

Definición

- ✓ Principios básicos que determinan el comportamiento (ecuaciones) en un aspecto que describen la evolución de un sistema

Ejemplos

- ✓ Conservación de propiedades
 - ✓ Masa (total, especies químicas)
 - ✓ Energía (térmica, eléctrica)
- ✓ Newton (Mecánicos)
- ✓ Maxwell (Electromagnetismo)
- ✓ Kirchoff (Conservación de la carga)



Modelado deductivo. Parámetros

Definición

- ✓ Conjunto de valores numéricos asignados a los coeficientes que aparecen en las ecuaciones diferenciales

Ejemplos

- ✓ Magnitudes (consideradas constantes) para los diferentes elementos del sistema
 - ✓ Valores de las variables en los puntos de operación
 - ✓ Valores iniciales, condiciones de contorno
 - ✓ Características geométricas, constantes



Herramientas software

- ✍ Lenguajes de programación
 - ✓ Válido para cualquier sistema (Modelo)
 - ✓ Requiere un largo periodo de desarrollo
 - ✓ Portable a cualquier máquina
 - ✓ Condicionado a la existencia de un compilador
- ✍ Simuladores
 - ✓ Válido para entornos muy reducidos
 - ✓ Tiempo de desarrollo nulo
 - ✓ Facilidad de uso
 - ✓ Poca portabilidad
- ✍ Lenguajes de simulación
 - ✓ Situación intermedia



Lenguajes de simulación

- ✍ Tienen campos de aplicación que abarcan diferentes ámbitos
- ✍ Requieren escasos conocimientos de programación
- ✍ Tipos
 - ✓ DSCT
 - ✓ Ejemplo ACSL, Matlab
 - ✓ Específicos de Ingeniería Química
 - ✓ DSDT
 - ✓ Ejemplo GPSS/H



Software de simulación

📁 Ejemplos (<http://www.che.ufl.edu/www-che/topics/software.html>)

✓ ASPEN Technology

✓ Utilizado en todos los sectores de la industria química

✓ BIOSYM

✓ Simulaciones moleculares

✓ Bryan Research & Engineering, Inc

✓ PROSIM, Simulador de propósito general

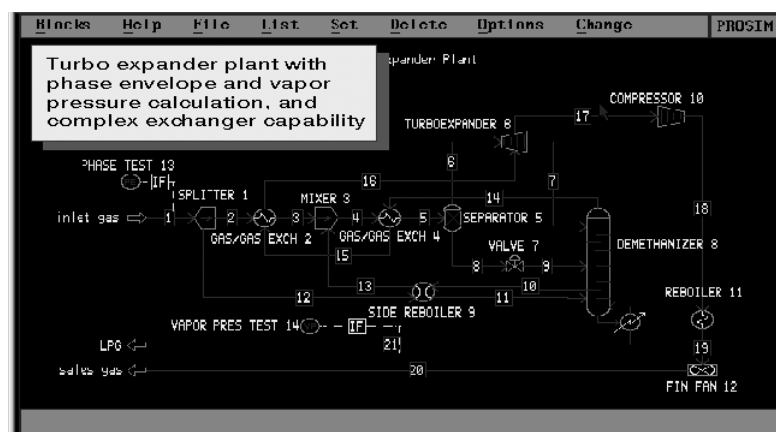
✓ Chemical Reaction Network Toolbox (CRNT)

✓ Utilizado en ordenadores personales



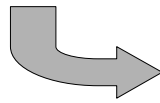
Software de simulación

📁 PROSIM





Software de simulación. ASPEN



```

----- Problem Definition -----
TITLE 'EXAMPLE 4-1: Simple Mixer Model/Mass Balances'
DESCRIPTION "Simulation of a gas collection system with a
           simple mixer model - MIXER"
----- Units Of Measurement -----
IN-UNITS SI
OUT-UNITS SI
----- Simulation Options -----
SIM-OPTIONS ENERGY-BAL=NO ; Only Do Mass Balance Calculations
----- Report Options -----
STREAM-REPORT MASSFRAC MASSFLOW MOLEFRAC MOLEFLOW
----- Components in the Simulation -----
COMPONENTS CH4 METHANE/ CO2 CARBON-DIOXIDE/ N2 NITROGEN/ H2O WATER
----- Flowsheet Connectivity -----
FLOWSHEET
BLOCK WELL-HDR IN=WELL1 WELL2 WELL3 WELL4 OUT=RAW-GAS
----- Feed Streams -----
STREAM WELL1 MASS-FLOW=200 [LB/HR]
MOLE-FRAC CH4 0.54/ CO2 0.43/ N2 0.01/ H2O 0.02
STREAM WELL2 MASS-FLOW=280 [LB/HR]
MOLE-FRAC CH4 0.50/ CO2 0.44/ N2 0.04/ H2O 0.02
STREAM WELL3 MASS-FLOW=190 [LB/HR]
MOLE-FRAC CH4 0.59/ CO2 0.38/ N2 0.02/ H2O 0.01
STREAM WELL4 MASS-FLOW=350 [LB/HR]
MOLE-FRAC CH4 0.44/ CO2 0.47/ N2 0.07/ H2O 0.02
----- Block Models and Parameters -----
BLOCK WELL-HDR MIXER
DESCRIPTION 'Gas Collection System Header'

```



Software de simulación

Herramientas de propósito general

- ✓ Matlab
- ✓ ACSL

