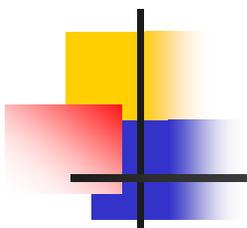


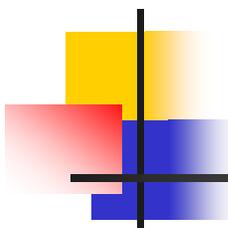
Simulación de Procesos

La simulación de procesos químicos está vinculada al cálculo de los balances de materia, energía y eventualmente cantidad de movimiento de un proceso cuya estructura y los datos preliminares de los equipos que lo componen, son conocidos.



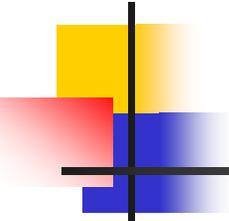
En función del ciclo iterativo se puede decir que los simuladores de procesos son la herramienta más importante junto con las técnicas de optimización en la etapa de análisis.

Esto es, luego de haberse generado diversas alternativas estructurales viables para un proceso dado, se evalúan cada una de ellas. Con estos datos estamos en condiciones de obtener un costo estimativo además de otros datos tales como emisiones al medio ambiente. Ello nos dará una base para discriminar entre diversas opciones posibles competitivas, o bien para verificar la performance de un diseño ya decidido, en sus etapas más finas, como ser control, confiabilidad, viabilidad de la puesta en marcha y parada, etc. Existen en la actualidad una gran variabilidad de simuladores comerciales como ser aspen plus, hysys, chemcad y otros

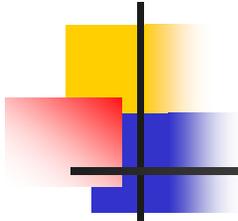


Clasificación de los métodos de Simulación

Podemos considerar a la tarea de simulación como aquella en la cual proponemos ciertos valores de entrada al simulador o programa de simulación para obtener ciertos resultados o valores de salida, tales que estiman el comportamiento del sistema real bajo esas condiciones.

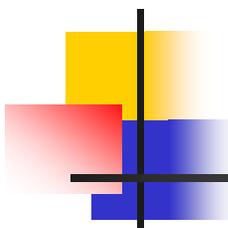


Las herramientas de simulación pueden clasificarse según diversos criterios, por ejemplo según el tipo de procesos (batch ó continuo), si involucra el tiempo (estacionario ó dinámico), si maneja variables estocásticas o determinísticas, variables cuantitativas ó cualitativas.



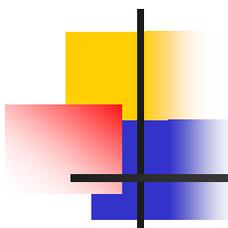
Simulación Cualitativa

La simulación cualitativa tiene por objeto principalmente el estudio de las relaciones causales y las tendencias temporales cualitativas de un sistema, como así también la propagación de perturbaciones a través de un proceso dado. Llamamos valores cualitativos de una variable, a diferencia del valor numérico (cuantitativo) a su signo, ya sea absoluto, o bien con relación a un valor dado o de referencia. Por lo tanto, en general se trabaja con valores tales como (+, -, 0). Son varios los campos de aplicación de la simulación cualitativa, como ser análisis de tendencias, supervisión y diagnóstico de fallas, análisis e interpretación de alarmas, control estadístico de procesos, etc.



Simulación Cuantitativa

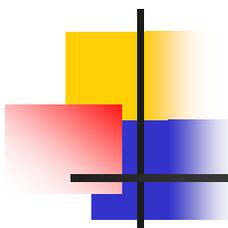
La simulación cuantitativa, en cambio es aquella que describe numéricamente el comportamiento de un proceso, a través de un modelo matemático del mismo. Para ello se procede a la resolución de los balances de materia, energía y cantidad de movimiento, junto a las ecuaciones de restricción que imponen aspectos funcionales y operacionales del sistema. La simulación cuantitativa abarca principalmente la simulación en estado estacionario y la simulación en estado dinámico.



Simulación Estacionaria

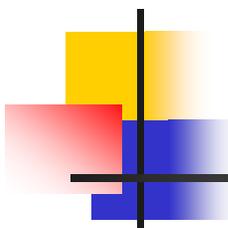
La simulación en estado estacionario implica resolver los balances de un sistema no involucrando la variable temporal. Si el modelo deseara estudiar las variaciones de las variables de interés con las coordenadas espaciales será un modelo a parámetros distribuidos.

Un ejemplo podría ser la variación radial de la composición en un plato de columna de destilación, la variación de las propiedades con la longitud y el radio en un reactor tubular, etc. Por lo general en simuladores comerciales se utilizan modelos a parámetros concentrados.



Simulación Dinámica

Por otro lado, la simulación dinámica plantea los balances en su dependencia con el tiempo ya sea para representar el comportamiento de equipos batch o bien para analizar la evolución que se manifiesta en el transiente entre dos estados estacionarios para un equipo o una planta completa. En este caso, el modelo matemático estará constituido por un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias cuya variable diferencial es el tiempo, en el caso de modelos a parámetros concentrados. En caso contrario se deberá resolver un sistema de ecuaciones diferenciales a derivadas parciales, abarcando tanto las coordenadas espaciales como la temporal (parámetros distribuidos).



Desde el punto de vista de los fenómenos o sistemas que se estudian, la simulación puede también clasificarse en **determinística** o **estocástica**.

Como modelo determinístico consideramos aquel en el cual las ecuaciones dependen de parámetros y variables conocidas con certeza, no existe incertidumbre ni leyes de probabilidades asociadas a las mismas. En cambio en uno estocástico, ciertas variables estarán sujetas a incertidumbre, que podrá ser expresada por funciones de distribución de probabilidad.

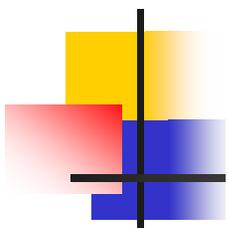


Simuladores de procesos químicos Complejos

Debe diferenciarse la noción de un simulador general de procesos químicos de un programa de simulación de equipos o unidades operacionales aisladas. En efecto, mientras que para estas últimas solo se requiere el modelo del equipo y un sistema de entrada/salida de datos , programar un simulador de uso general implica varios problemas adicionales.

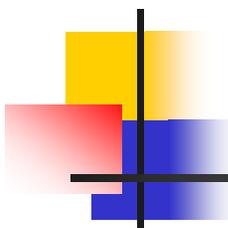
Deberá contemplarse una biblioteca de módulos individuales para poder simular distintas operaciones o equipos de proceso

Deberá programarse la forma de interacción de los equipos de acuerdo al flowsheet de la planta y la metodología de ingreso de datos



Dependerá del tipo de estructura del flowsheet la complejidad matemática para resolver los balances correspondientes, ya que por lo general deberá recurrirse a métodos iterativos. El orden y la secuencia de cálculo dependerá de cada caso en particular.

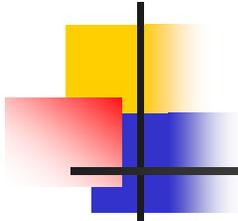
Por otra parte, los aspectos vinculados a los cálculos de estimación de propiedades fisicoquímicas son bastante diferentes si se plantea el problema de un equipo dado procesando una mezcla determinada o bien un sistema generalizado capaz de simular diversos procesos de separación. En este caso deberá contarse con un sistema de estimación de propiedades generalizado, lo cual implica un problema de una magnitud importante ya que deberá tener aptitud para calcular las propiedades fisicoquímicas y termodinámicas tanto para sustancias puras como para mezclas.



Simuladores modulares secuenciales vs. Simuladores globales

Los simuladores de procesos pueden dividirse en los siguientes tipos según la filosofía bajo la cual se plantea el modelo matemático que representa el proceso a simular:

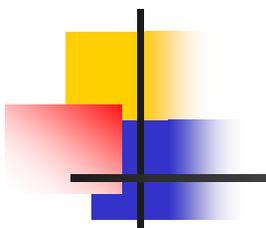
- Simuladores globales u orientados a ecuaciones
- Simuladores secuenciales modulares
- Simuladores híbridos



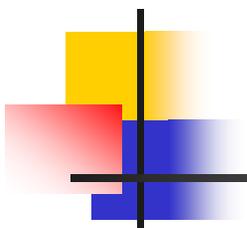
Simuladores Globales

Bajo el enfoque de la *simulación global u orientada a ecuaciones*, se plantea el modelo matemático que representa al proceso construyendo un gran sistema de ecuaciones algebraicas que representa a todo el conjunto o planta a simular

De esta forma, el problema se traduce en resolver un gran sistema de ecuaciones algebraicas, por lo general altamente no lineales. Tienen el problema de la convergencia y la consistencia de la solución. En efecto, en problemas altamente no lineales pueden producir múltiples soluciones.

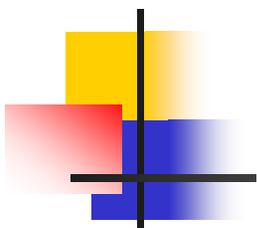


Uno de los cuestionamientos a este tipo de simuladores es la imposibilidad de identificar los sectores de la planta en correspondencia con el sistema de ecuaciones que lo representa, dado que una vez que se hubo armado el sistema total, se pierde la correspondencia bionívoca entre el equipo y el subsistema de ecuaciones que lo representa. De esta manera, si existieran inconvenientes durante la simulación resulta difícil asignar el problema a un sector específico de la planta ó bien inicializar convenientemente

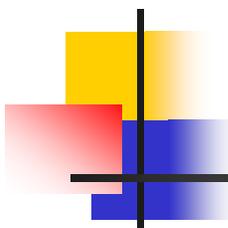


Principales características de los simuladores globales u orientados a ecuaciones:

- Cada equipo se representa por las ecuaciones que lo modelan. El modelo es la integración de todos los subsistemas.
- Resolución simultánea del sistema de ecuaciones algebraicas resultante, mayor velocidad de convergencia
- Necesita una mejor inicialización (mejor cuanto mayor sea el problema a resolver)
- A mayor complejidad, menor confiabilidad en los resultados y más problemas de convergencia (soluciones sin sentido físico)



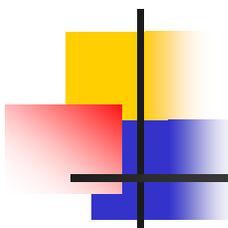
Una ventaja importante es que puede lograrse una velocidad de convergencia cuadrática, esto es, mayor que en los simuladores secuenciales. Además, dado que el sistema se plantea orientado a ecuaciones, es posible incorporar las expresiones de restricción para definir problemas de optimización en forma directa ya que solo basta con plantear las restricciones y función de optimización. Esta flexibilidad es imposible en los simuladores secuenciales modulares, debido a que los módulos están orientados y definidos en forma rígida, esto es, resulta imposible agregar restricciones y/o variables, además de la expresión analítica de la función de optimización debiéndose proceder tipo "caja negra".



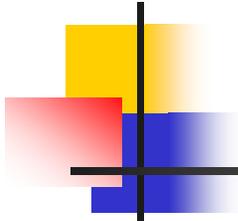
Simuladores secuenciales

Los simuladores *modulares secuenciales* se basan en módulos de simulación independientes que siguen aproximadamente la misma filosofía que las operaciones unitarias, es decir, cada equipo, bomba, válvula, intercambiadores, etc. Son modelados a través de modelos específicos para los mismos y además, el sentido de la información coincide con el “flujo físico” en la planta.

En esta filosofía se tiene como ventaja el hecho de que cada sistema de ecuaciones es resuelto con una metodología que resulta adecuada para el mismo.



Conceptualmente, bajo esta filosofía, para cada equipo se plantea su modelo matemático. Obviamente deben diferenciarse los valores conocidos de las incógnitas teniendo en cuenta los grados de libertad. El enfoque en la teoría secuencial modular supone que se especifican las variables de las corrientes de entrada, o sea las alimentaciones a los equipos, mientras que deben calcularse las corrientes de salida y los correspondientes parámetros de operación si correspondiere.

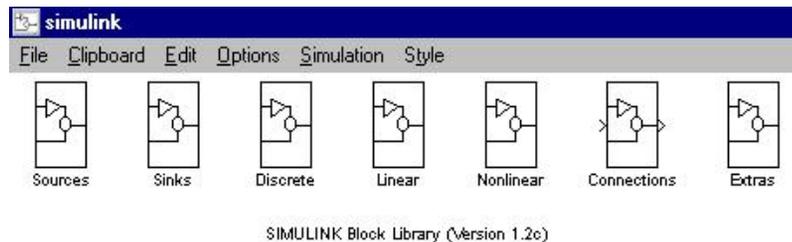


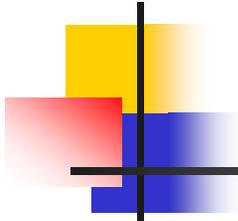
Simuladores híbridos

El tipo de simulador restante es el basado en una estrategia híbrida. En efecto es posible plantear el desarrollo de simuladores combinando la estrategia modular y la orientada a ecuaciones. Para ello se selecciona un grupo de variables sobre las cuales se procederá según la filosofía global resolviéndolas simultáneamente, mientras que para el resto se mantiene la filosofía modular, tratando de encontrar una secuencia acíclica que provea por su cálculo los valores de las variables a resolverse simultáneamente.

Simulación con Simulink

Simulink es un entorno gráfico para modelación y simulación de sistemas dinámicos. Permite crear diagramas de bloques, simular el comportamiento del sistema y ajustar el diseño del mismo. Las diferentes librerías que posee, permiten construir funciones y realizar el análisis del modelo de una manera sencilla. La construcción del modelo se realiza a partir de elementos básicos construidos previamente

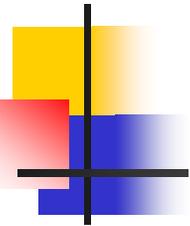


The logo consists of a vertical black line on the left, a horizontal black line at the bottom, and three overlapping squares: a yellow one at the top left, a red one at the middle left, and a blue one at the bottom left. The word "Simulink" is written in a blue, sans-serif font to the right of the vertical line.

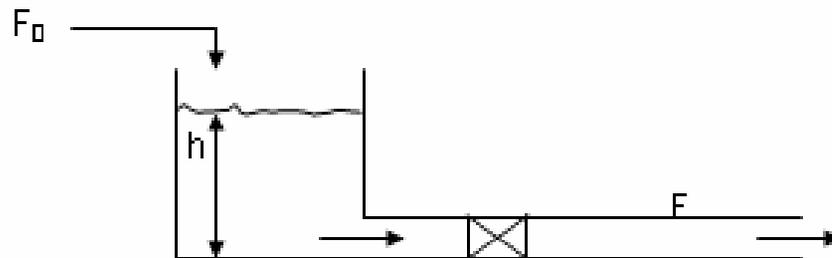
Simulink

- *Simulink* es un entorno gráfico para modelado y simulación de sistemas dinámicos.
- La construcción del modelo se realiza a partir de elementos básicos construidos previamente.
- Permite crear diagramas de bloques, simular el comportamiento del sistema y ajustar el diseño del mismo.
- Simulink puede simular cualquier sistema que pueda ser definido por ecuaciones diferenciales.

Para comenzar a trabajar con el simulink, vamos a trabajar directamente sobre un ejemplo que corresponde al primer ejercicio de la práctica.



La siguiente figura muestra un tanque en el cual un líquido incompresible (densidad constante) es bombeado a una velocidad variable F_0 (ft³/s). Esta velocidad de flujo puede variar con el tiempo debido a cambio en las operaciones corriente aguas arriba. La altura del líquido en el tanque cilíndrico vertical es h (ft). La velocidad de flujo hacia fuera del tanque es F (ft³/s). Ahora, F_0 , h y f variarán con el tiempo



Dados los siguientes parámetros, analice su comportamiento en el estado dinámico y estacionario.

Tubería:

Diámetro: 3 ft Area: 7,06 ft²

Longitud: 3000 ft

Tanque:

Diámetro: 12 ft Area: 113 ft² Altura: 7 ft

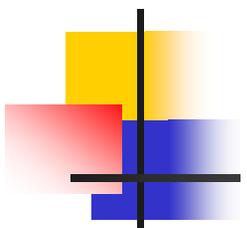
$KF = 2.81 \cdot 10^{-2} \text{ lbf}/[(\text{ft}/\text{seg})^2\text{ft}]$

$Re = 1380000$

$\rho = 62.43 \text{ lb}/\text{ft}^3$

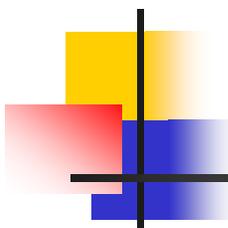
$\mu = 6.7197 \cdot 10^{-4} \text{ lb}/(\text{ft} \cdot \text{seg})$

La simulación de procesos está directamente vinculada al cálculo de los balances, de materia, energía y cantidad de movimiento, por lo que en principio debemos orientarnos a evaluarlos



La velocidad de flujo puede variar con el tiempo debido a cambios en las operaciones corriente arriba. La altura del líquido en el tanque cilíndrico vertical es $h(\text{ft})$. La velocidad de flujo hacia fuera del tanque es $F(\text{ft}^3/\text{s})$. Ahora F_0 , h y F variarán con el tiempo y por lo tanto son función del tiempo. El líquido abandona la base del tanque por una larga tubería horizontal y descarga en la parte superior de otro tanque. Ambos tanques están abiertos a la atmósfera.

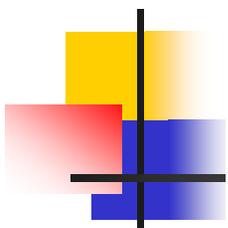
Primeramente analizaremos las condiciones en el estado estacionario. Por estado estacionario nosotros estamos hablando del sistema que no cambia con el tiempo. Matemáticamente esto corresponde a tener todas las derivadas en el tiempo igualadas a cero. En el estado estacionario, la velocidad de flujo que sale del tanque debe ser igual a la velocidad de flujo que ingresa al tanque. (en el estado estacionario).



Para un determinado valor de \bar{F} , la altura del líquido en el tanque para el estado estacionario debe ser también algún valor constante. Ese valor de h debe ser la altura que provee suficiente presión hidráulica en la entrada de la tubería para superar las pérdidas por fricción del líquido que fluye aguas abajo por la tubería.

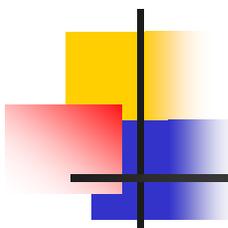
Para el diseño en el estado estacionario del tanque, debemos medir el diámetro de la línea de salida y la altura del tanque tal que para la máxima velocidad de flujo esperada no se produzca un rebalse.

Habitualmente se incluye en diseño un factor de seguridad de un 20 a 30% sobre la altura del tanque.



Hasta acá hemos considerado solamente aspectos del diseño en estado estacionario tradicional de este sistema de flujo de fluidos. Ahora pensaremos qué sucederá dinámicamente si cambiamos F_0 . ¿Cómo variarán con el tiempo $h(t)$ y $F(t)$? Además la otra pregunta es cómo llega el sistema hasta el estado estacionario.

Nuestros cálculos del diseño en el estado estacionario no nos dicen nada acerca de cuál será la respuesta dinámica del sistema. Por lo tanto debemos encontrar un modelo matemático de este sistema para determinar su respuesta dinámica por simulación.



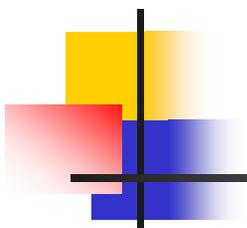
Balance de Masa: El principio de conservación de masa aplicado a un sistema dinámico nos dice que:

[Flujo de masa que ingresa al sistema] - [flujo de masa que sale del sistema] = [velocidad de cambio de masa dentro del sistema]

Las unidades de esta ecuación son masa por unidad de tiempo. Consideraremos el tanque dentro del cual fluye una corriente líquida a una

velocidad volumétrica F_0 (ft³/min), para la cual la densidad es ρ_0 (lbm/ft³). El holdup volumétrico del líquido en el tanque es V (ft³). La velocidad de flujo volumétrico desde el tanque es F y la densidad de la corriente de salida es la misma que la del contenido del tanque:

$$\frac{d(\rho V)}{dt} = F_0 \rho_0 - F \rho$$



A partir de la segunda ley de Newton se pueden escribir las ecuaciones de movimiento para un sistema en forma más general donde la masa puede variar con el tiempo.

$$\frac{1}{g_c} \frac{d(Mv_i)}{dt} = \sum_{j=1}^N F_{ji}$$

donde v_i = velocidad en la dirección i , ft/s

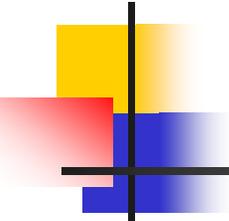
F_{ji} = fuerza j que actúa en la dirección i , lbf

M = masa, lbm

a = aceleración, ft/s²

g_c = constante de conversión = 32.2 lbm ft/lbf s²

La ecuación anterior nos dice que la velocidad de cambio del momento en la dirección i es igual a la suma neta de las fuerzas que actúan en la dirección i

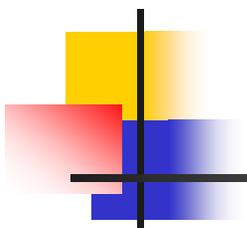


Consideraremos que en el tanque del sistema es $L(\text{ft})$ el largo de la tubería de salida, el área de su sección cruzada es $A_p(\text{ft}^2)$ y que el área de la sección cruzada del tanque cilíndrico es $A_T(\text{ft}^2)$.

La parte de este proceso que está descrita por un balance de fuerzas es el líquido que fluye a través de la tubería. Este líquido tendrá una masa igual al volumen de la tubería ($A_p L$) veces la densidad del líquido ρ . Esta masa de líquido tendrá una velocidad $v(\text{ft}/\text{s})$ igual al flujo volumétrico dividido por el área de la sección cruzada de la tubería (hemos supuesto condiciones de flujo pistón y líquido incompresible y entonces toda el líquido está en movimiento a la misma velocidad).

$$M = A_p L \rho \quad v = \frac{F}{A_p}$$

La fuerza que empuja el líquido hacia el final de la tubería es la fuerza de presión hidráulica del líquido en el tanque



$$\text{Fuerza hidráulica} = A_p \rho h \frac{g}{g_c} \text{ en lbf, donde } g \text{ es la aceleración de la gravedad de } 32.2 \text{ ft/s}^2$$

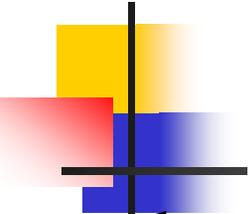
La única fuerza que empuja en dirección opuesta desde derecha hacia izquierda y se opone al flujo es la fuerza de fricción debido a la viscosidad del líquido. Si el flujo es turbulento, las fuerzas de fricción será proporcional al cuadrado de la velocidad y al largo de la tubería

$$\text{Fuerza de fricción} = K_F L v^2$$

$$\frac{1}{g_c} \frac{d(A_p L \rho v)}{dt} = A_p \rho h \frac{g}{g_c} - K_F L v^2$$

$$\frac{d(v)}{dt} = \frac{g}{L} h - \frac{K_F g_c}{\rho A_p} v^2$$

Resumiendo, las ecuaciones que modelan este sistema son


$$A \frac{dh}{dt} = F_0 - F \quad \text{(Ecuación de continuidad)}$$

$$\frac{dv}{dt} = \frac{g}{L} h - \frac{K_F g_c}{\rho A_P} v^2 \quad \text{(Balance de fuerzas)}$$

Estas son dos ecuaciones diferenciales ordinarias acopladas, el balance de fuerzas es no lineal por el término cuadrático de la velocidad

Los cálculos para el estado estacionario se realizan considerando que los términos de las derivadas son nulos, no hay acumulación, los valores de v , h y F para el estado estacionario son los siguientes

$$H = 4.7 \text{ ft}$$

$$V = 4.95 \text{ ft/s}$$

$$F = 34.95 \text{ ft}^3/\text{s}$$