

Simulación de plantas Parte I

Enrique E. Tarifa, Facultad de Ingeniería, UNJu

Mapa curricular de la materia

Simulación

Optimización



```
graph TD; A[Simulación] --> B[Optimización]
```

Mapa curricular de la materia

Simulación



Optimización

Mapa curricular de Simulación

Definiciones

Modelo de espacio de estados

Resolución de modelos

Simulación de plantas

Mapa curricular de Simulación

Definiciones

Modelo de espacio de estados

Resolución de modelos

Simulación de plantas



Mapa curricular de simulación de plantas

1. Definiciones
2. Enfoque global
3. Utilitarios
4. Enfoque modular secuencial
5. Enfoque modular simultáneo
6. Estructura de un simulador
7. Módulo de físico-químico
8. Selección de físico-química

Definiciones

Modelado

- Planta: Conjunto de sectores
- Sector: Conjunto de equipos



Enfoques de simulación de plantas

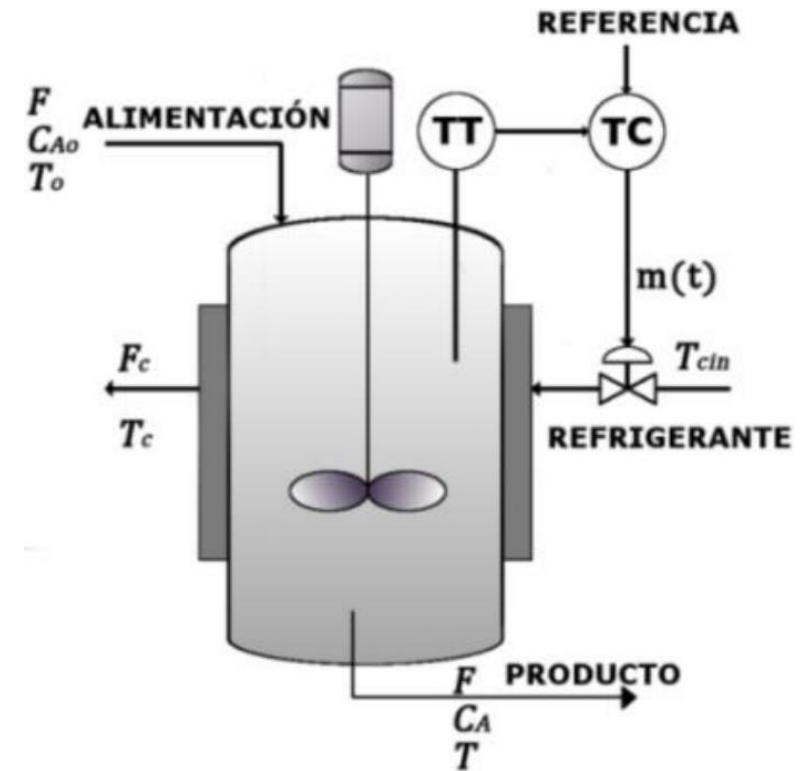
- Global u orientado a ecuaciones
- Modular



Enfoque global

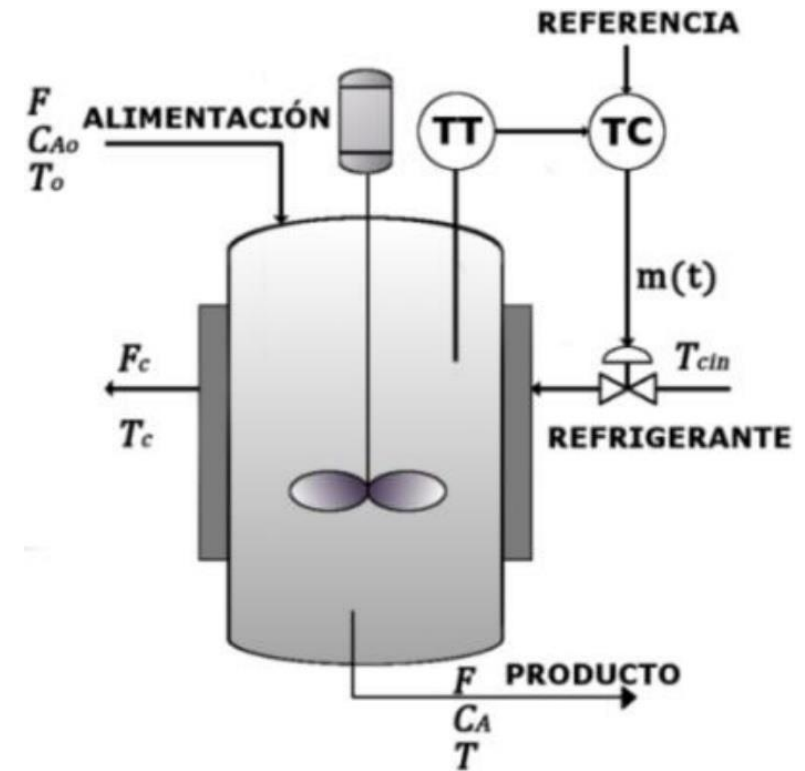
Enfoque global

- Toda la planta es un equipo.
- Modelo de espacio de estado:
 - Sistema ODEs
 - Sistema AEs
 - Datos



Enfoque global

- Reactor con CT:
 - Reactor
 - Serpentín
 - Válvula
 - Controlador



Alternativas para la resolución

Enfoques para la resolución de modelos



Orientado a ecuaciones

- E-Z Solve
- JSim
- EMSO
- Modelica
- gPROMS
- Berkeley Madonna

$$\frac{dy}{dt} = \frac{u_0 - y}{\tau}$$

[Video de Simulación con Berkeley Madonna](#)

```
{Sistema de primer orden.  
u0: valor del escalón en la entrada.  
tau: es la constante de tiempo.  
y: valor de salida}
```

```
METHOD RK4
```

```
STARTTIME = 0  
STOPTIME = 10  
DT = 0.01
```

```
; Inicialización  
INIT y = 0
```

```
; Sistema ODEs  
y' = (u0-y)/tau
```

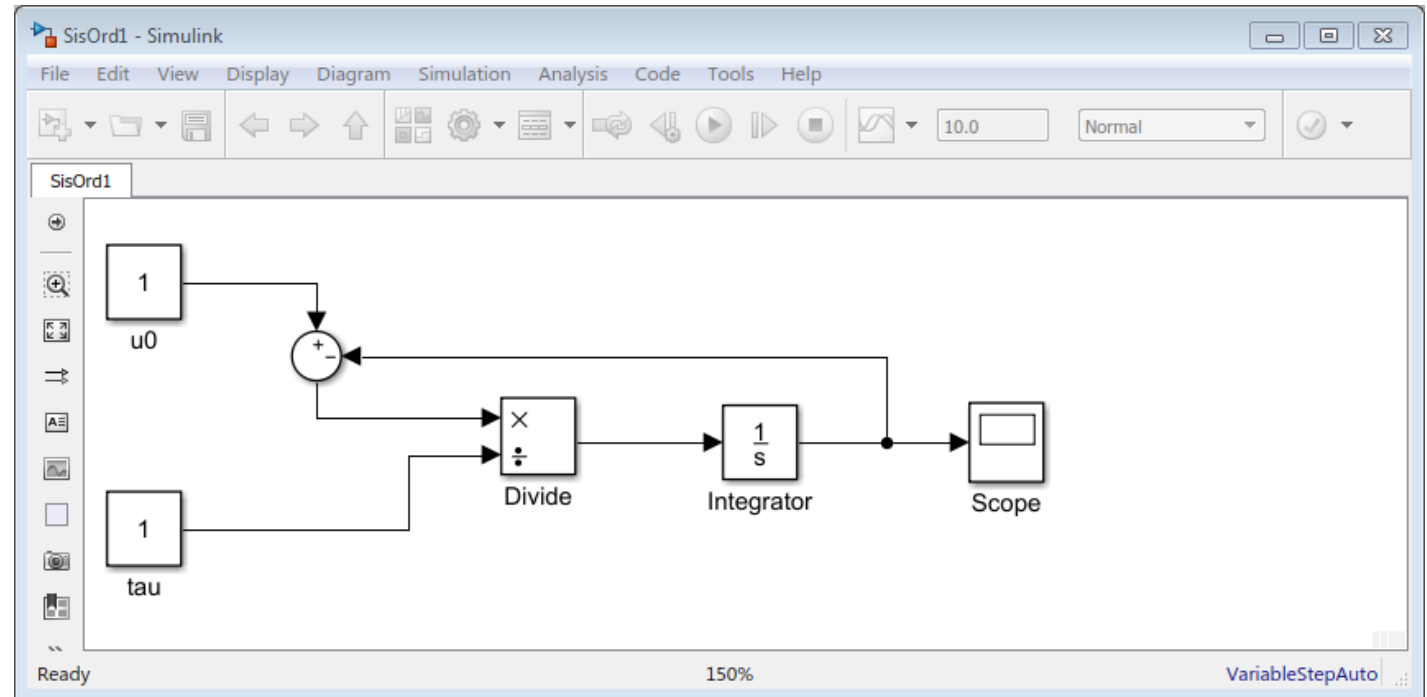
```
; Sistema AEs
```

```
; Datos  
u0 = 1  
tau = 1
```

Orientado a diagramas de bloques

- Simulink
- ViSim
- Xcos

$$\frac{dy}{dt} = \frac{U_0 - y}{\tau}$$



[Video Simulación con Simulink](#)

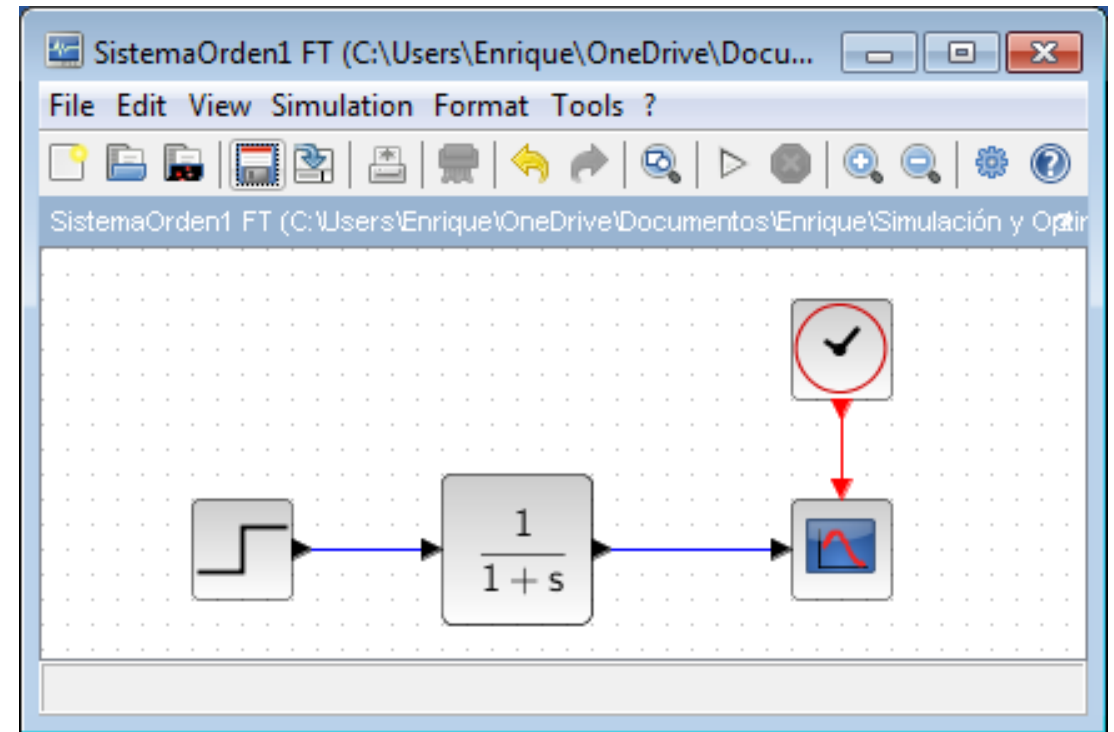
Orientado a diagramas de bloques

- Simulink
- ViSim
- Xcos

$$\frac{dy}{dt} = \frac{U_0 - y}{\tau}$$

$$G(s) = \frac{Y(s)}{U(s)} = \frac{K}{1 + \tau s}$$

Simulación con Xcos



Condiciones iniciales iguales a cero.

Orientados a programación

- Lenguajes:
 - Fortran, C, Pascal, Python, Julia
- Entornos:
 - MATLAB, Octave, Scilab
 - Spyder, Visual Studio Code
 - Mathcad, SMath

$$\frac{dy}{dt} = \frac{u_0 - y}{\tau}$$

[Video Simulación con MATLAB](#)

[Manual de GNU Octave](#)

```
% Sistema de primer orden

% Datos
global tau u0
tau = 1;
u0 = 1;

% ODEs
function dy = ODEs(y,t)
    global tau u0
    dy = (u0-y)/tau;
endfunction

% Parámetros de simulación
tfin = 10;
nts = 20;

% Inicialización
tpts = linspace(0, tfin, nts)';
y0 = 0;

% Resolución
y = lsode('ODEs',y0,tpts);

% Gráfica
figure(1);
plot(tpts,y)
```

Listado en Berkeley Madonna

```
{Reactor de propilenglicol con CT}

METHOD RK4
STARTTIME = 0
STOPTIME = 3
DT = 0.01

; Inicialización
INIT CA = 0.0377
INIT CB = 2.1256
INIT CC = 0.1439
INIT CM = 0.2269
INIT T = 138.7
INIT Ai = 0

; Sistema ODEs
CA' = F0*(CA0-CA)/V-r
CB' = F0*(CB0-CB)/V-r
CC' = F0*(CC0-CC)/V+r
CM' = F0*(CM0-CM)/V
T' = (F0*C0*Cp0*(T0-T)+V*r*(-DH)-Q)/(V*C*Cp)
Ai' = e
```

```
; Sistema AEs
r = alpha*exp(-Ea/(Rg*(T+460)))*CA

Ts = Ts0+(T-Ts0)*(1-exp(-UAs/(Ns0*Cps0)))
Q = Ns0*Cps0*(Ts-Ts0)

C = CA+CB+CC+CM
Cp = (CA*CpA0+CB*CpB0+CC*CpC0+CM*CpM0)/C
C0 = CA0+CB0+CC0+CM0
Cp0 = (CA0*CpA0+CB0*CpB0+CC0*CpC0+CM0*CpM0)/C0

e = Tsp-T
Ac = Ab+Kp*(e+Ai/taui)
xs = 1-Ac
LIMIT xs >= 0
LIMIT xs <= 1
Fs0 = Cvs*xs*sqrt(DPs)
Ns0 = Fs0*rhos/PMs
```

```
; Datos
V = 66.84

F0 = 440.63
T0 = 70
CA0 = 0.1816
CB0 = 2.2695
CC0 = 0
CM0 = 0.2269

CpA0 = 35
CpB0 = 18
CpC0 = 46
CpM0 = 19.5

Ts0 = 60
Cps0 = 18
UAs = 16000

DH = -36000
alpha = 16.96E12
Ea = 32400
Rg = 1.987

Tsp = 138.7
Ab = 0.5
Kp = 4.25E-3
taui = 0.152

rhos = 62.43
PMs = 18
DPs = 4.383E11
Cvs = 8.71E-4
```

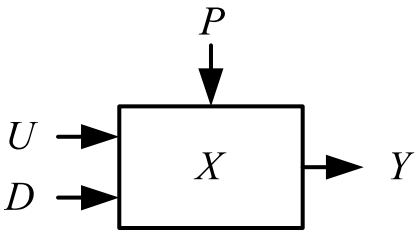
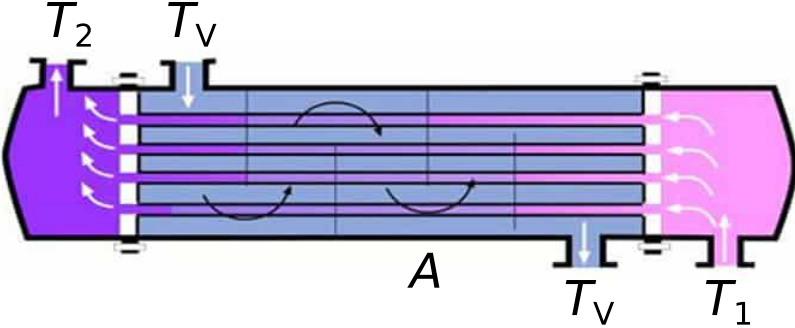
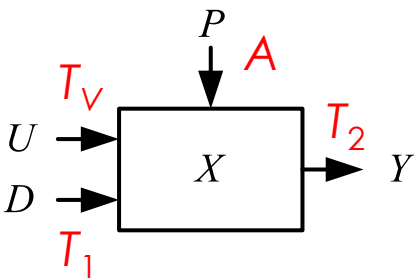
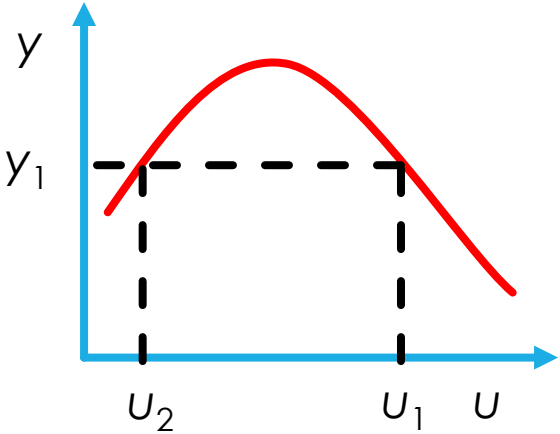
Ver Reactor con CT.mmd

Modos de Simulación

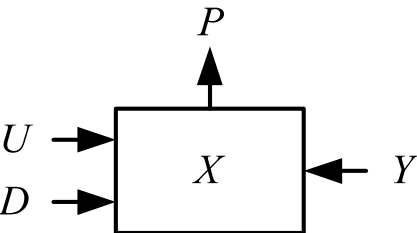
Intercambiador de calor



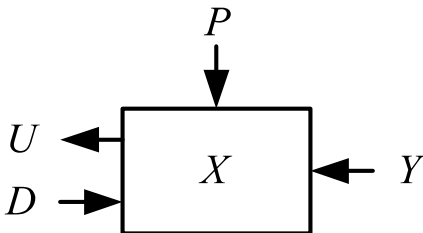
Modos de simulación



Modo Analisis

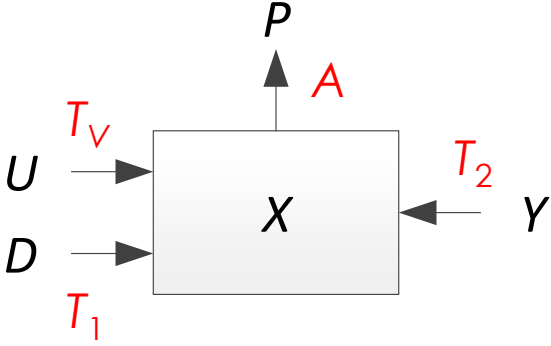
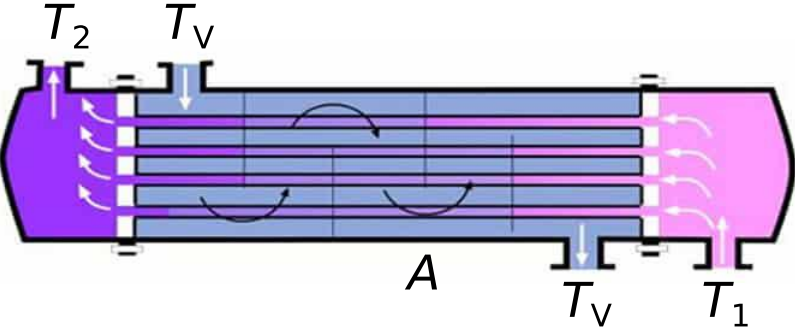


Modo Diseño



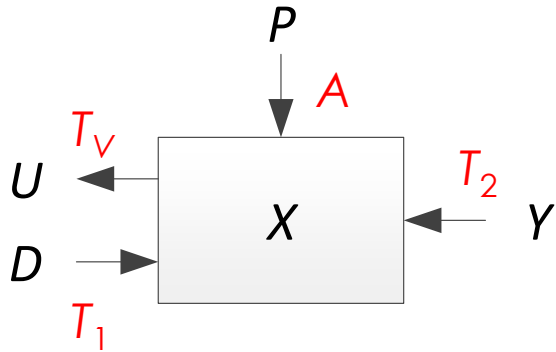
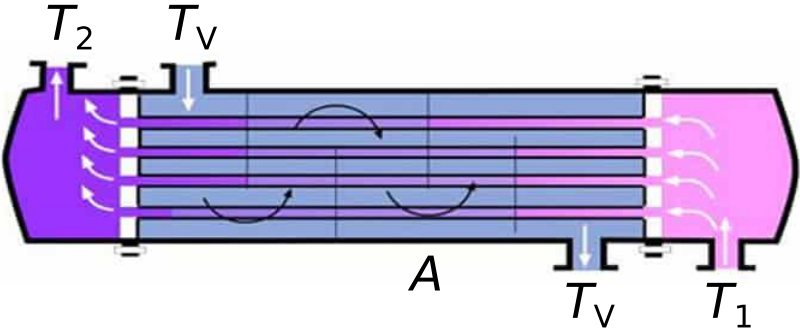
Modo Control

Emulación de modo diseño



Modo Diseño

Emulación de modo control



Modo Control

Enfoque global

Ventajas

- Más fácil de programar.
- Hecho a medida para el sistema.
- Puede funcionar en cualquier modo de simulación.
- Resolución eficiente.

Desventajas

- Difícil de depurar.
- Difícil de adaptar a cambios en el sistema.
- Requiere la solución de sistemas grandes de ecuaciones no lineales.
- No amigable con el usuario.

Aplicaciones

- Investigación
- Equipos especiales

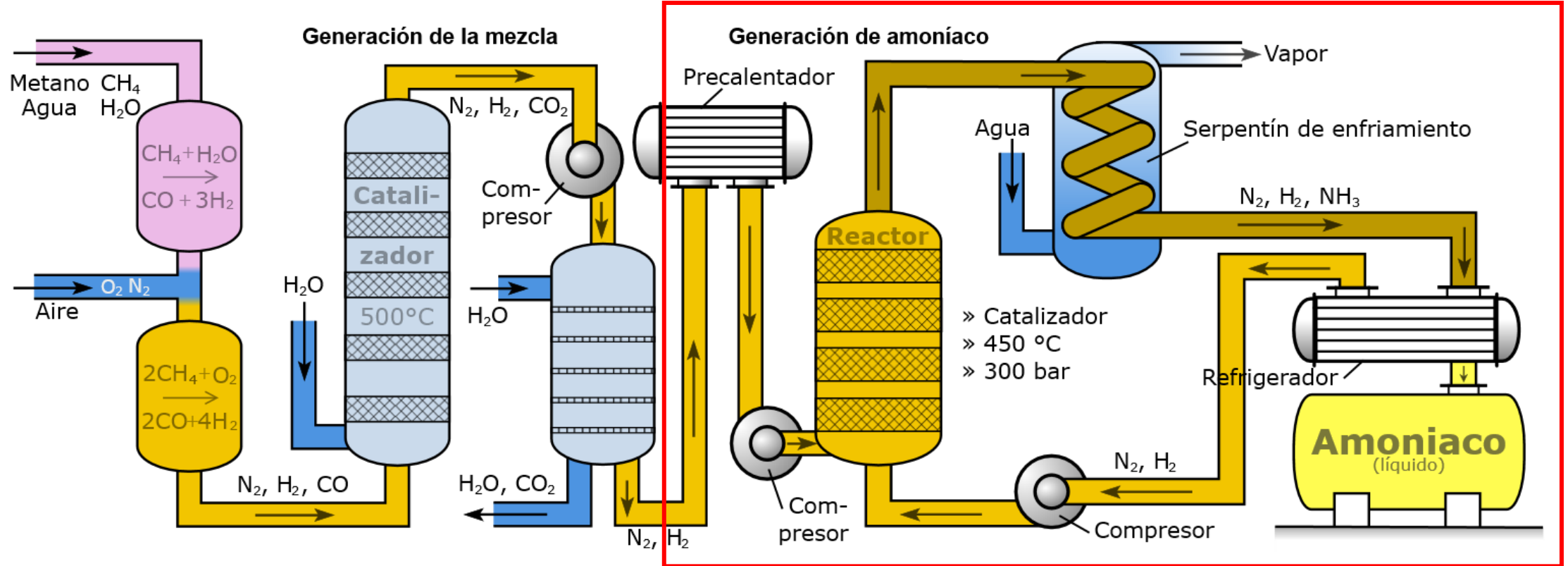
Enfoques de simulación de plantas

- Global u orientado a ecuaciones
- Modular

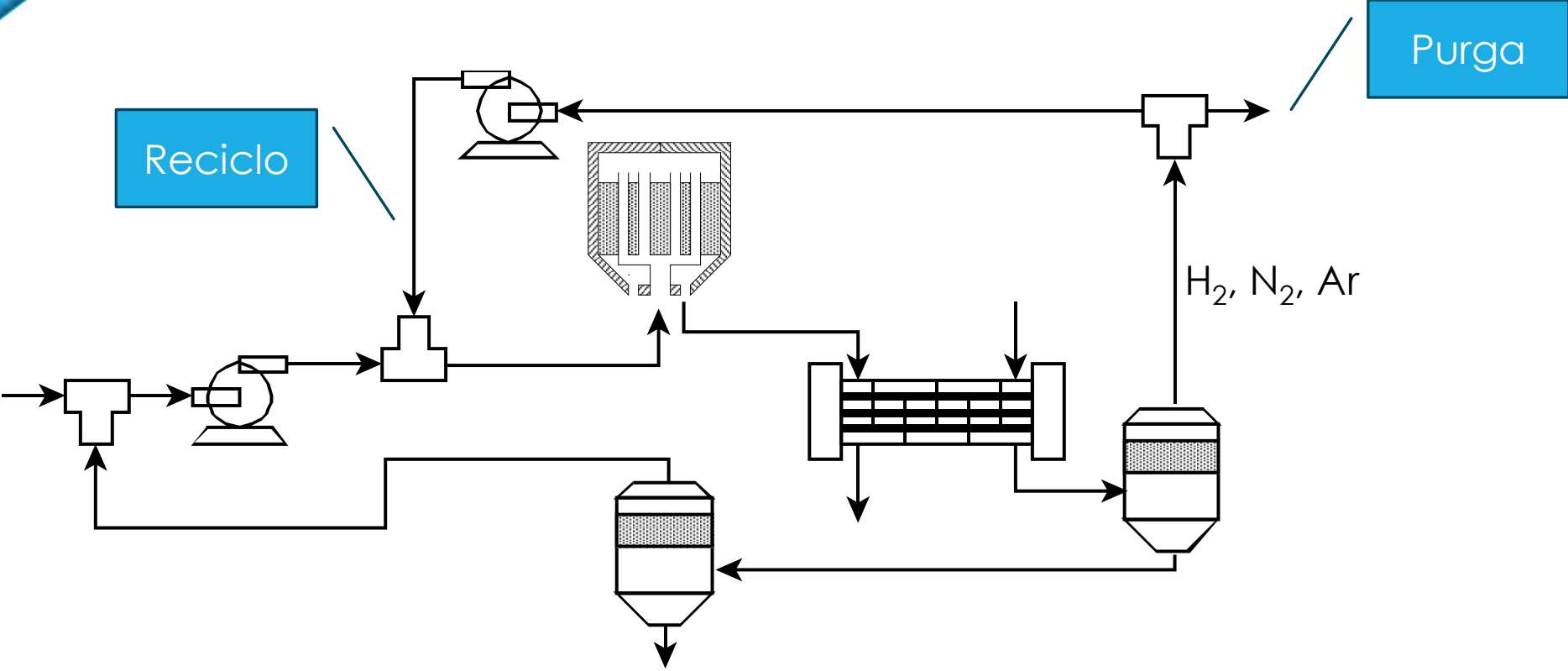


Enfoque modular

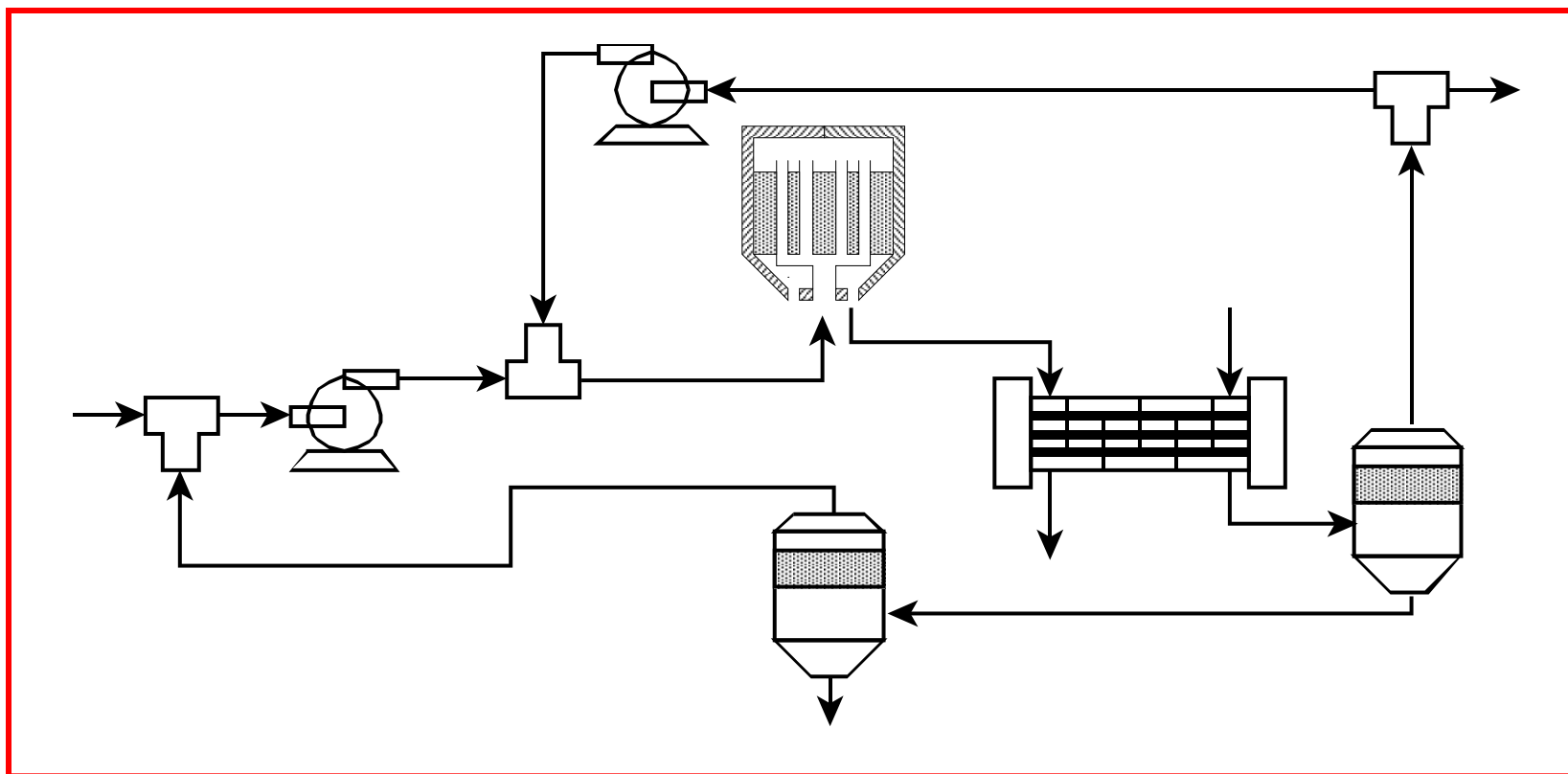
Proceso Haber-Bosch



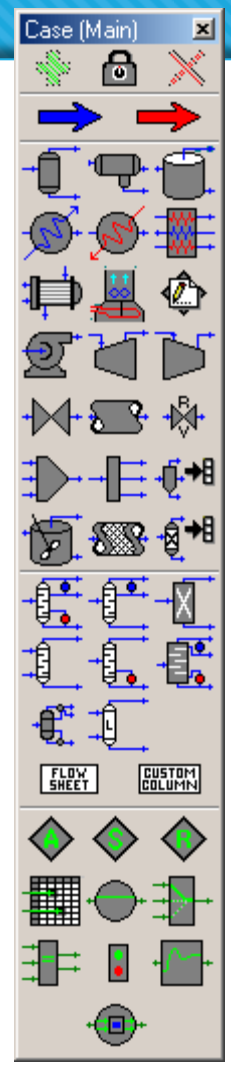
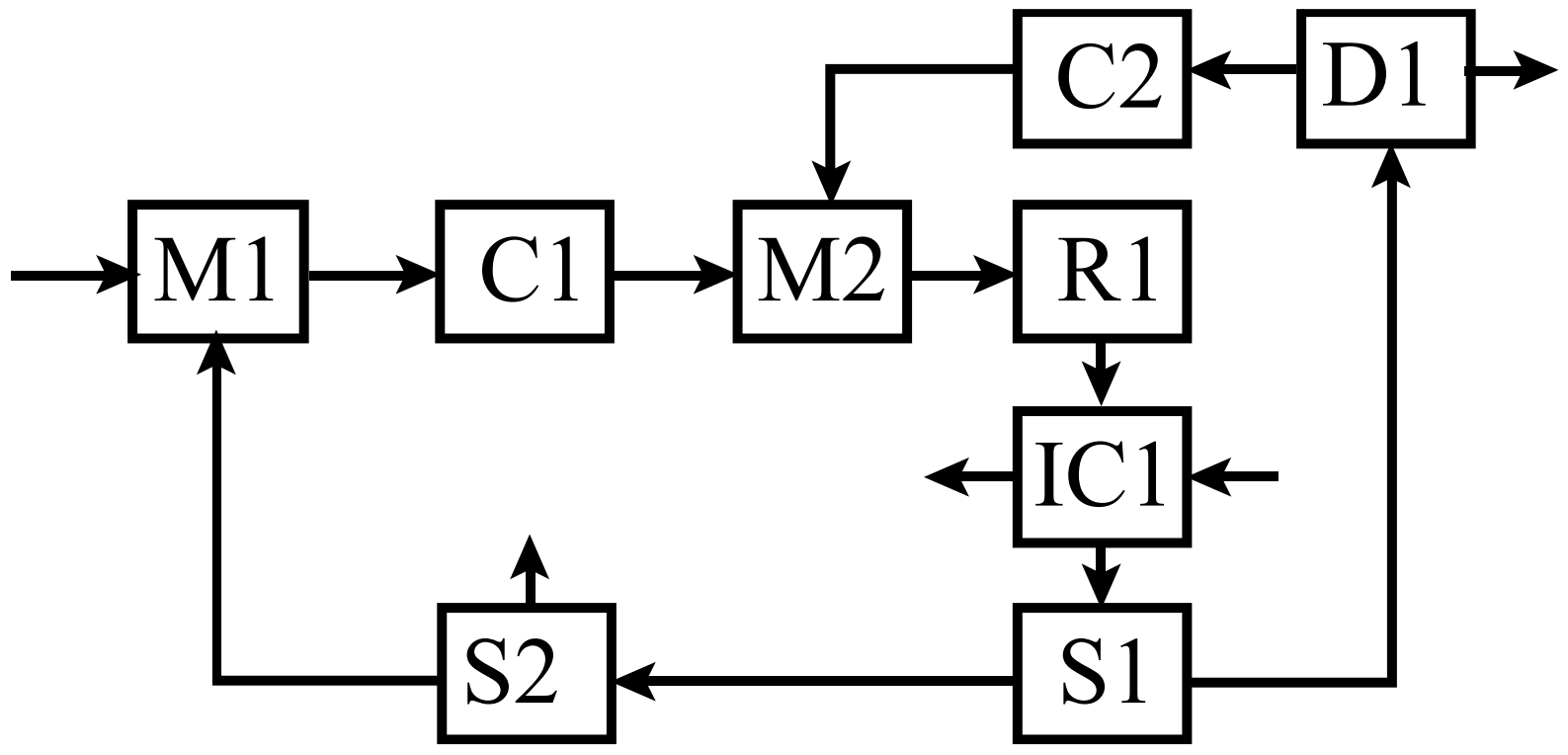
Planta de NH₃



Enfoque global

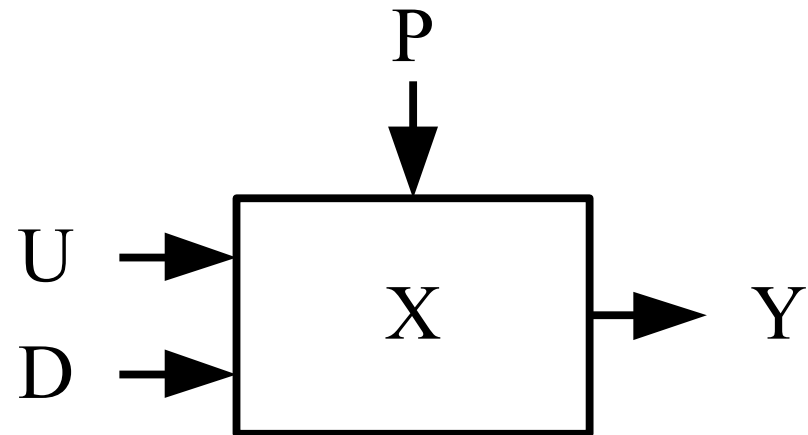


Enfoque modular

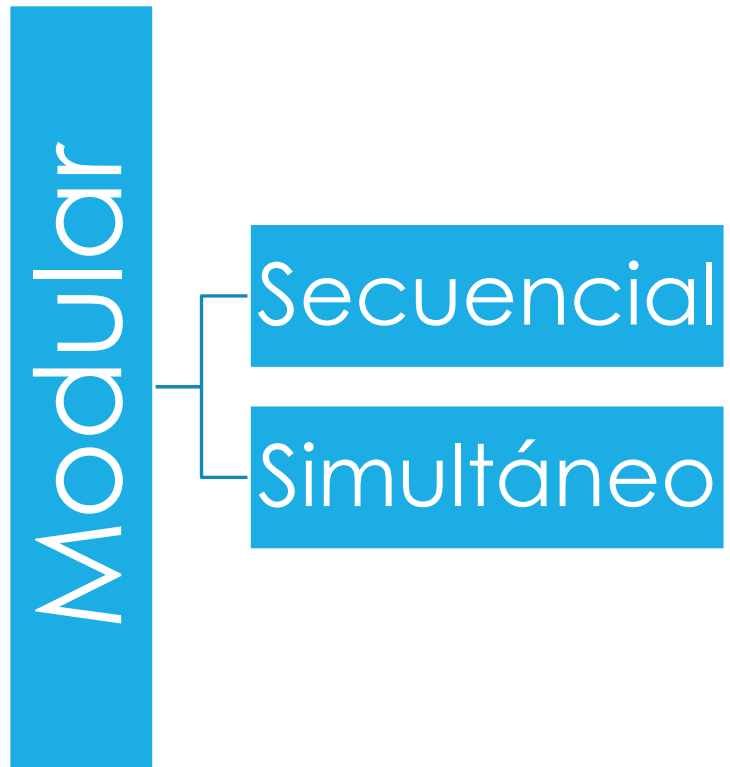


Módulo en modo análisis

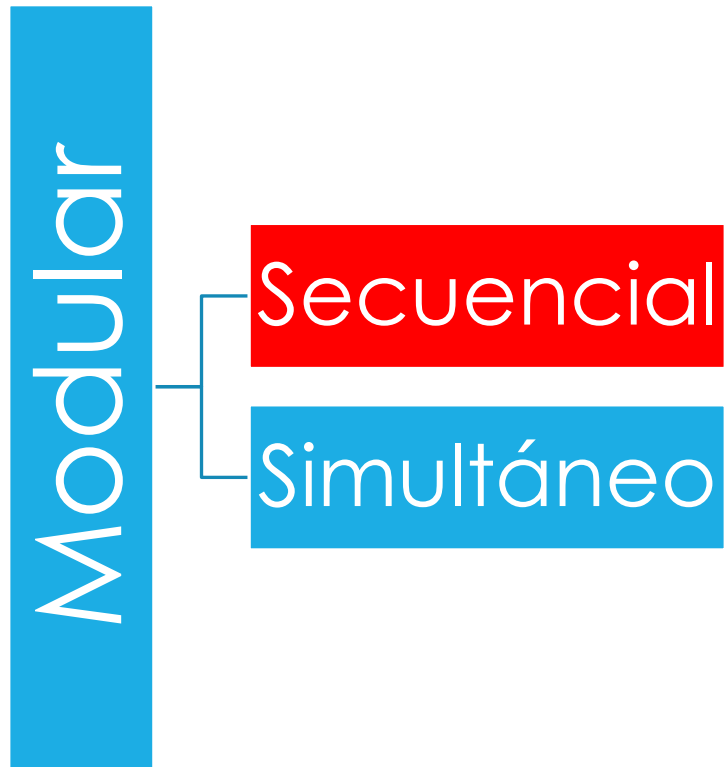
- Entrada (U y D)
- Parámetros (P)
- Estado (X)
- Salida (Y)



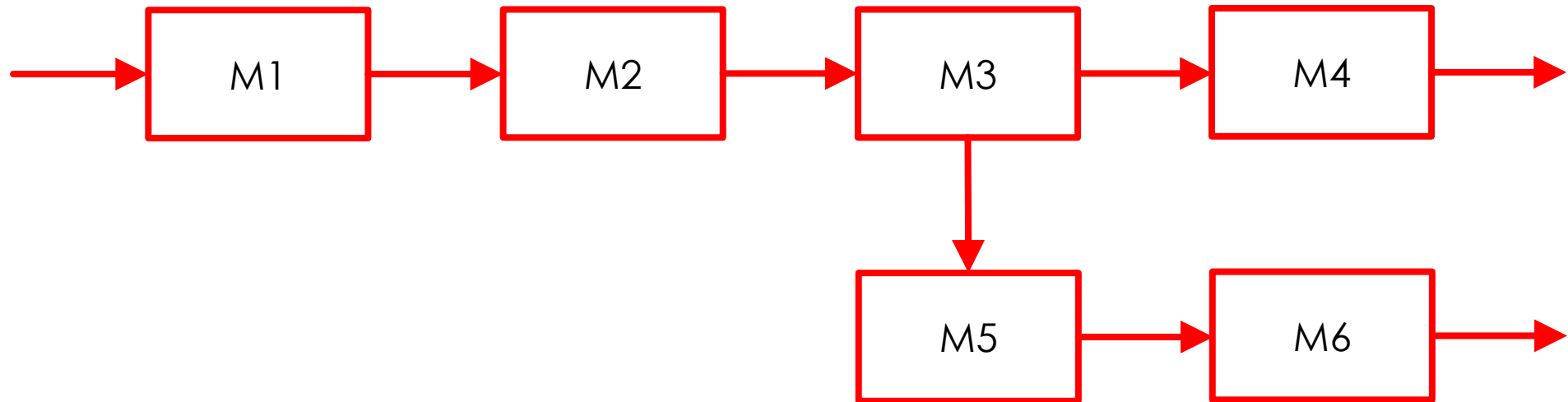
Enfoque modular



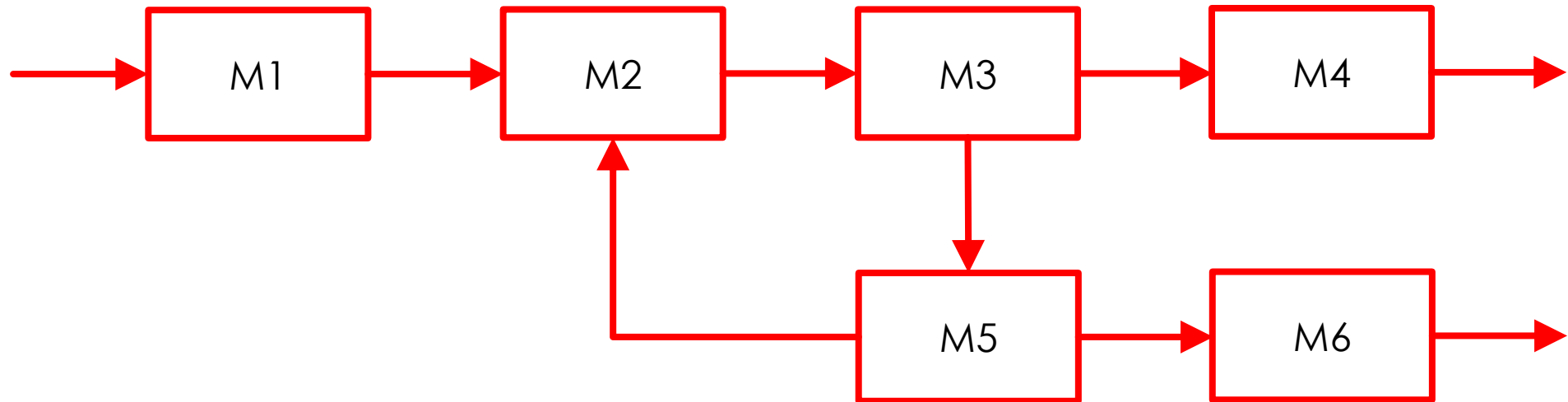
Enfoque modular



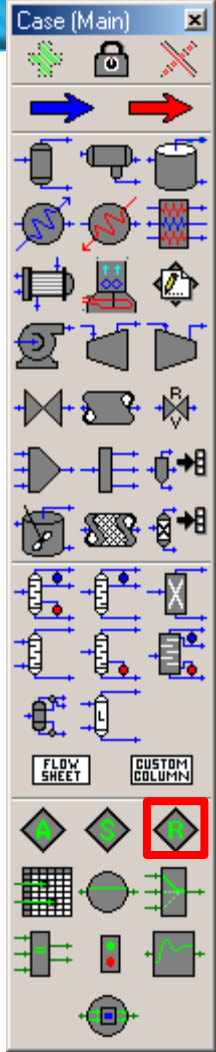
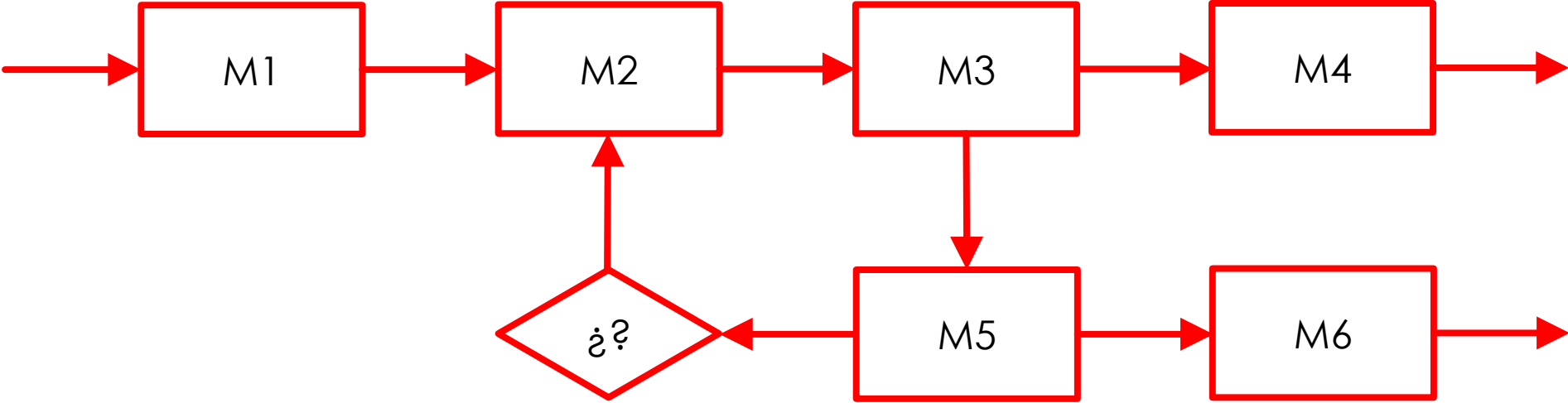
Modular secuencial



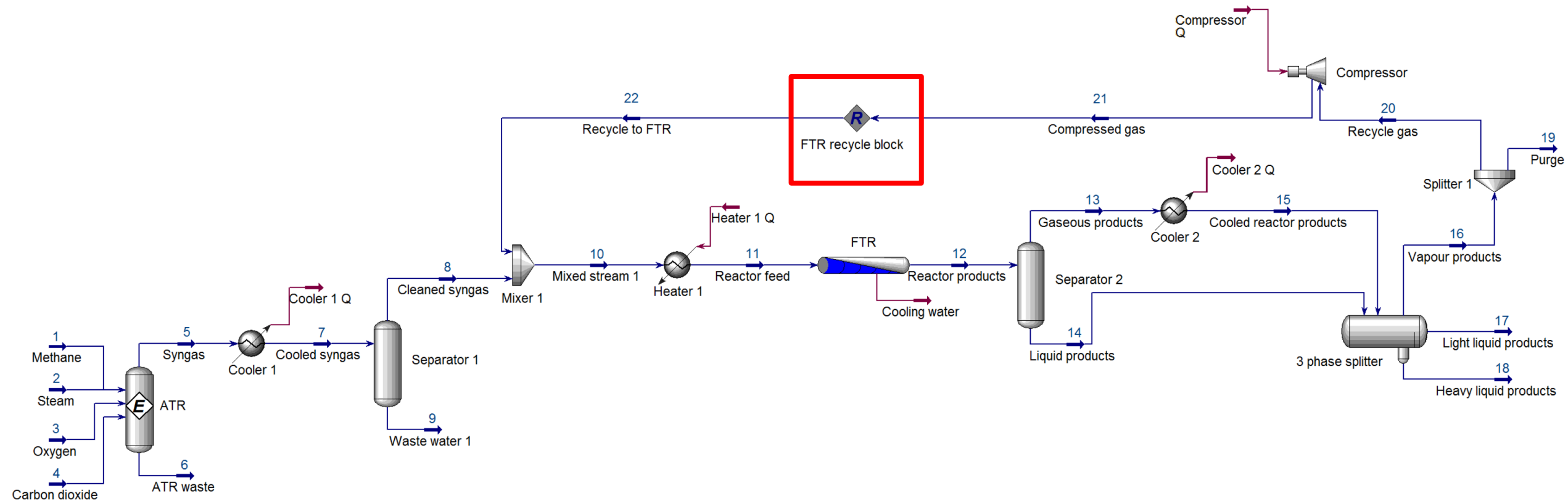
Modular secuencial



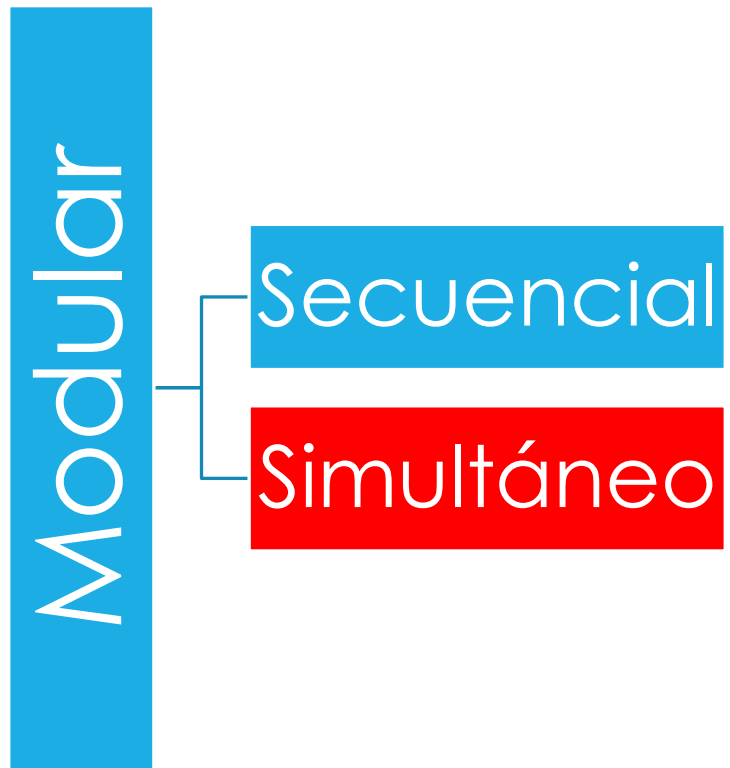
Modular secuencial



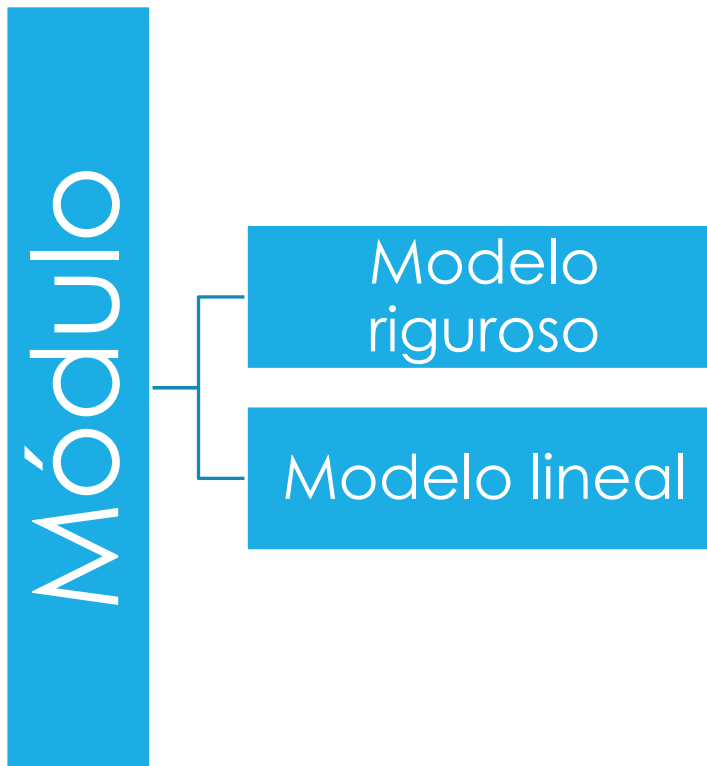
Módulo de reciclado en HYSYS



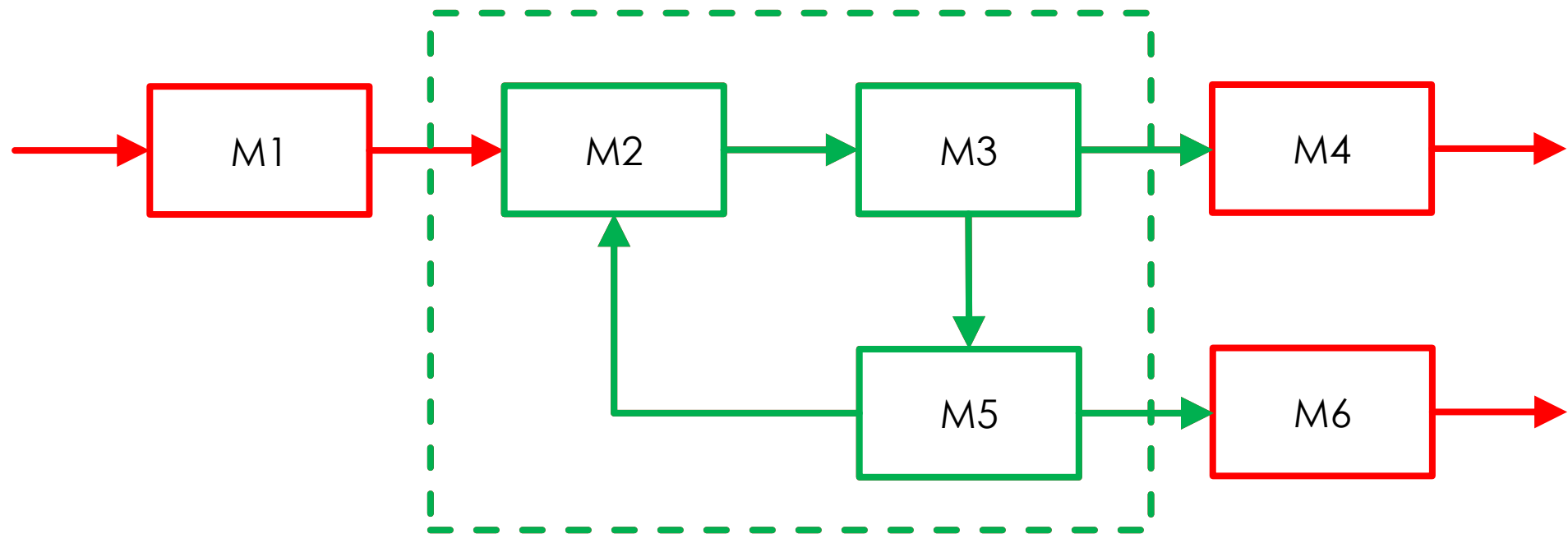
Enfoque modular



Modular simultáneo



Modular simultáneo



Modelo lineal

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n = b_m \end{cases}$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}$$

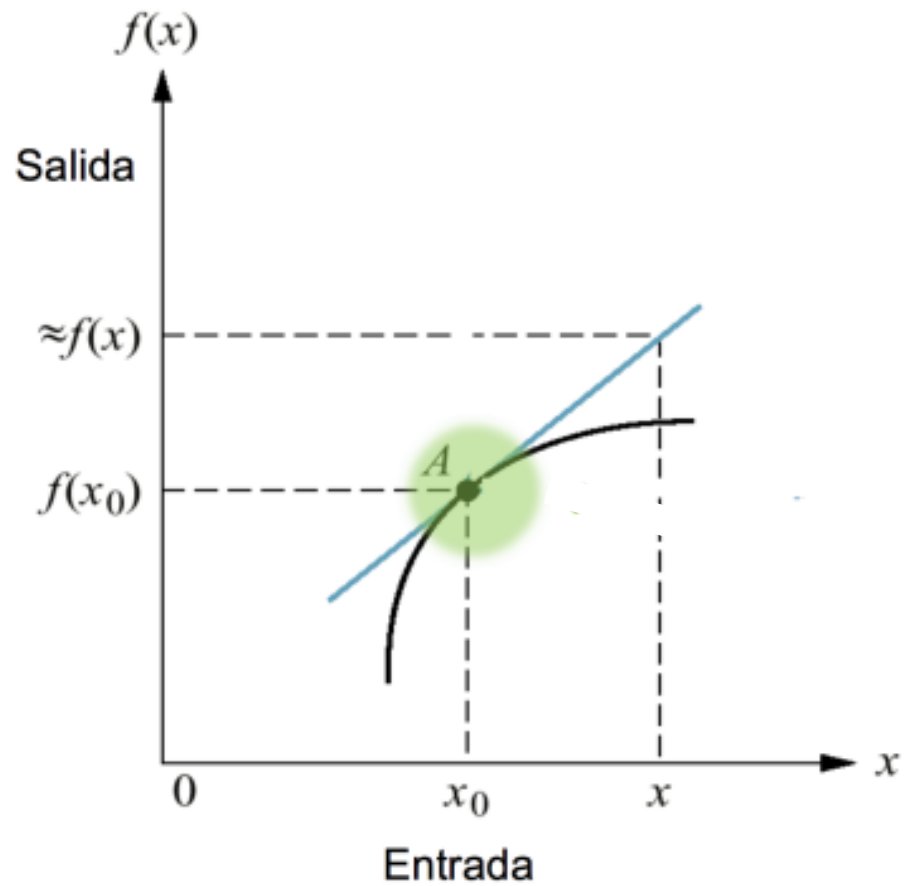
$$\Rightarrow Ax = b \Rightarrow x = A^{-1}b$$

Sistema de ecuaciones lineales

Modular simultáneo

1. Proponer A para el sistema lineal $Ax = b$.
2. Resolver el sistema $x = A^{-1}b$.
3. Usar x y los modelos rigurosos para determinar la nueva A_n .
4. Si $|A - A_n| < tol$, fin; si no, $A \leftarrow A_n$, ir a 2.

Linealización



Enfoque modular

Ventajas

- Flexible a cambios en el sistema.
- Grupos especializados en cada módulo.
- Físico-química separada.
- Consume menos memoria.
- Amigable con el usuario.
- Generales.

Desventajas

- Difícil de programar.
- No está disponible para algunos sistemas.
- Funciona solo en modo análisis.
- Resolución ineficiente.

Aplicaciones

- Simuladores comerciales
- Refinerías

Simuladores de planta

Estructura del simulador



Fluid Package

- Propiedades de compuestos puros:
 - Termodinámicas: H , S .
 - Físicas y de transporte: ρ , μ , k_T , σ .
- Propiedades de mezclas:
 - Termodinámicas
 - Físicas y de transporte
- Compuestos y propiedades del usuario
- EOSs:
 - Base teórica
 - Sistemas ideales: Petróleo, gas y petroquímica.
 - PR, PRSV
- *Activity Models*:
 - Empíricos
 - Sistemas no ideales: Substancias líquidas polares.
 - NRTL, Margules, UNIQUAC

Modelos físicos-químicos

- Chao Seader Models:
 - H₂, hidrocarburos pesados
- *Vapour Pressure Models*:
 - Mezclas ideales a baja presión
 - Antoine
- *Micellaneous*:
 - Amine, ASME Steam, NBS Steam
- Opciones:
 - Estimación de entalpía
 - Estimación de fase vapor
 - Estimación de múltiples fases líquidas

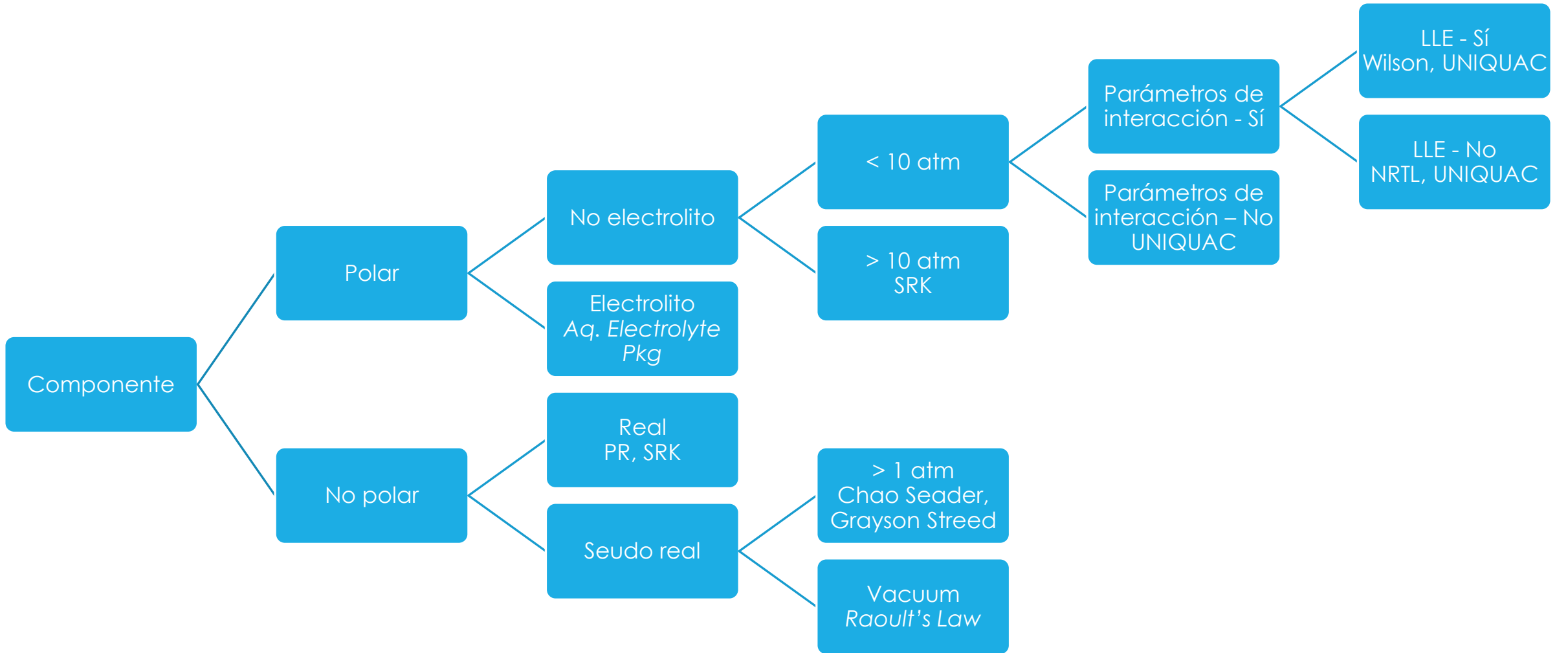
Selección del *fluid package*

Guía general

- EOSs: Componentes no polares. Amplio rango de P y T .
- *Activity Models*: Líquidos no ideales.
- Comparar los diagramas de fase con los experimentales.

Casos

- Hidrocarburos: Peng Robinson.
- Agua y vapor: *Steam Package*.
- H_2S , CO_2 y NH_3 : *Sour water*.
- Hidrocarburos, 0-500 °C, menos de 10000 kPa: Chao Seader.



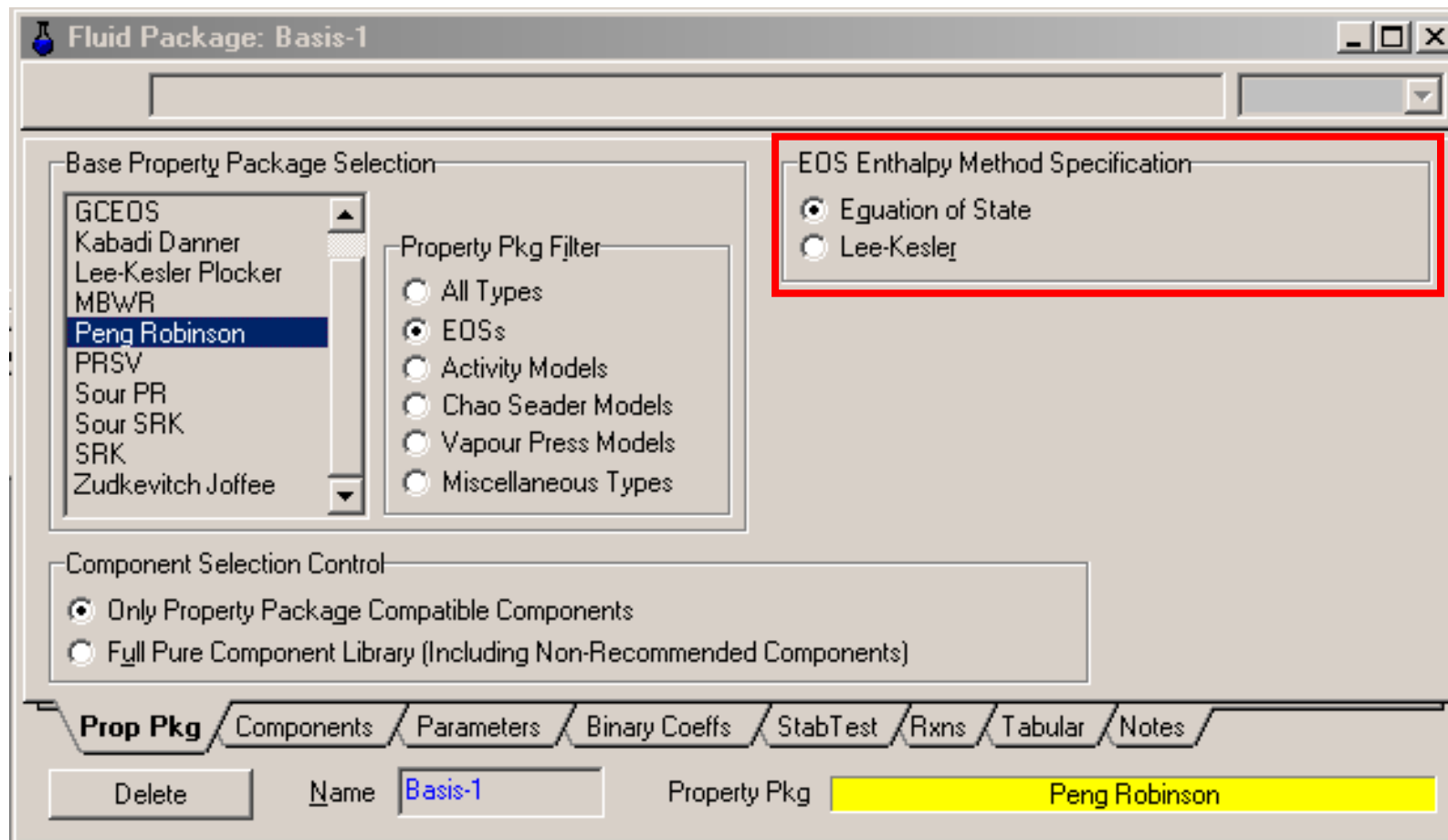
Modelos físicos-químicos

The screenshot displays the 'Fluid Package: Basis-1' window. The 'Activity Model Specifications' section is highlighted with a red box and contains the following table:

Vapour Model	Ideal
UNIFAC Estimation Temp	25.0000 C
Use Poynting Correction	<input checked="" type="checkbox"/>

Other visible elements include the 'Base Property Package Selection' list with 'UNIQUAC' selected, the 'Property Pkg Filter' with 'Activity Models' selected, and the 'Component Selection Control' with 'Only Property Package Compatible Components' selected. The bottom status bar shows 'Name: Basis-1' and 'Property Pkg: UNIQUAC - Ideal'.

Modelos físicos-químicos



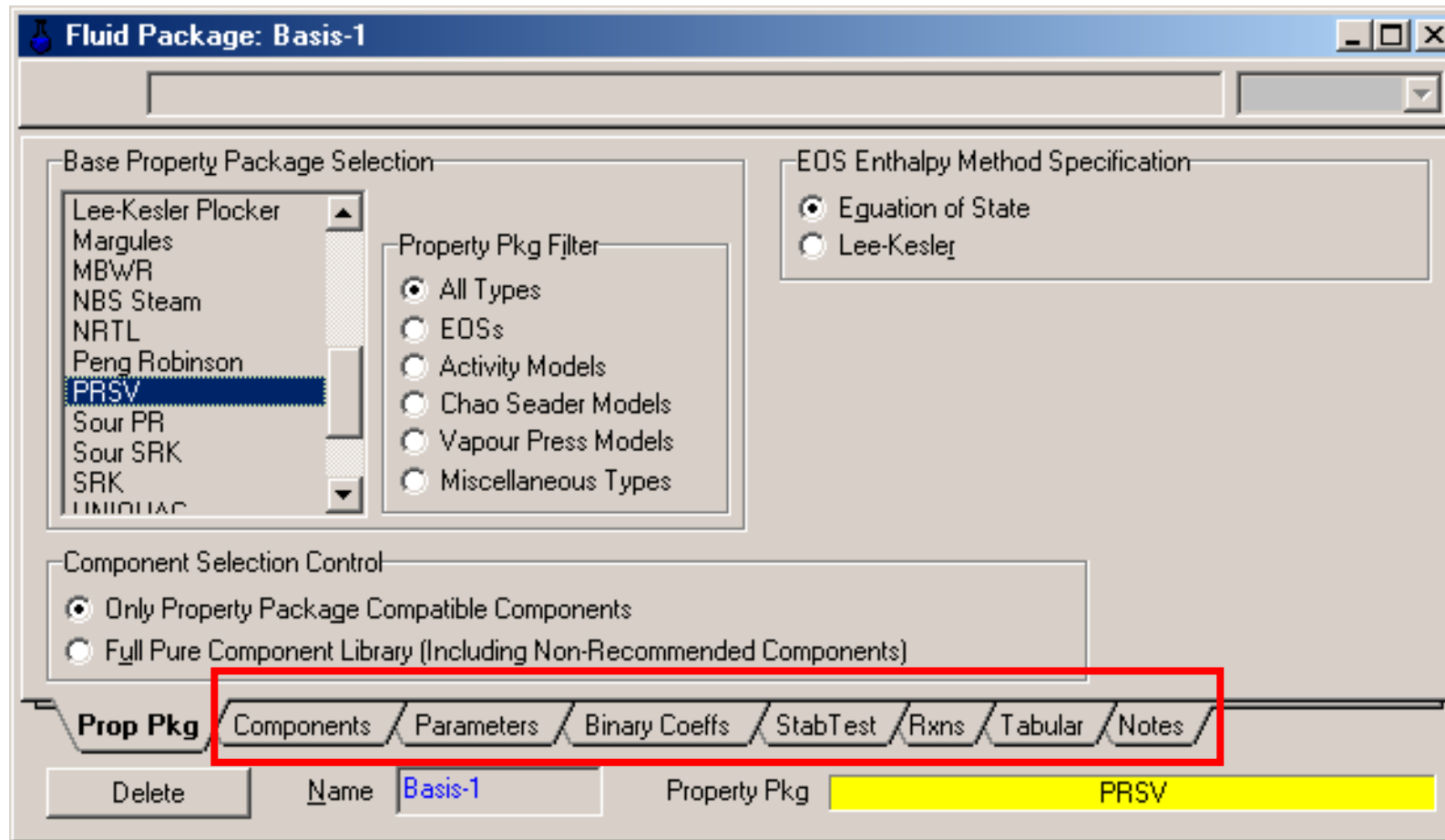
Modelos físicos-químicos

- Rango de aplicación:
 - Compuestos recomendados
 - Condiciones del proceso (P, T, x)

Modelos físicos-químicos

- Personalización:
 - Parámetros;
 - Tabular (regresión);
 - Hypothetical;
 - Oil Manager;
 - User Property.

Modelos físicos-químicos



Mapa curricular de simulación de plantas

1. Definiciones
2. Enfoque global
3. Utilitarios
4. Enfoque modular secuencial
5. Enfoque modular simultáneo
6. Estructura de un simulador
7. Módulo de físico-químico
8. Selección de físico-química