

MODELADO Y SIMULACIÓN DE UN PROCESO DE EVAPORACION CON ECOSIMPRO

Guillermo Baquerizo Araya, Juan José Ramos
Departamento de Ingeniería de Sistemas y Automática
Universitat Autònoma de Barcelona
gbaqueri@sunaut.uab.es, JuanJose.Ramos@uab.es

Resumen

En este trabajo se describe el desarrollo e implementación de un modelo de evaporación para una mezcla binaria en un entorno de modelado orientado a objetos. La herramienta utilizada es ECOSIMPRO, la que incluye las principales características de esta metodología, como son la encapsulación, la abstracción y la reutilización.

La separación entre el comportamiento del proceso químico (evaporador) y el medio escogido (agua-etanol) garantiza su reutilización para medios diferentes (mezclas multi-componentes). Así mismo, el enfoque otorgado al modelo permite su reutilización en procesos mas complejos (evaporadores multi-etapas o columnas de destilación)

Palabras Clave: Modelado orientado a objetos, Proceso de evaporación, Reutilización.

1 INTRODUCCION

El reciente aumento en la producción de pequeños volúmenes de sustancias químicas con un alto valor agregado ha renovado el interés en las técnicas de separación y purificación de productos.

Los procesos de separación se pueden operar en forma continua o en lotes (batch). La operación batch es particularmente atractiva gracias a su flexibilidad, la cual permite procesar mezclas donde existen grandes variaciones en las composiciones de la alimentación, operar con mezclas diferentes y obtener distintos productos en el mismo equipo y responder de manera más eficiente a los cambios en la demanda. Por otro lado, esta flexibilidad unida a la naturaleza no-estacionaria propia de la operación batch, incrementa las dificultades a la hora de resolver el modelo matemático del proceso.

La evaporación simple, o destilación diferencial, es uno de los procesos de separación batch mas antiguamente utilizados. Su efectividad esta

condicionada a que la volatilidad relativa de la mezcla a separar sea elevada.

El creciente interés en este tipo de procesos se ha traducido en el desarrollo de nuevas estrategias de modelado y simulación junto con un aumento en el número de publicaciones relacionadas con este tema [1].

La metodología de modelado orientado a objetos [2,6], desarrollada en los últimos años, ha demostrado ser muy efectiva en la solución de los problemas y limitaciones que presentan las técnicas de simulación consideradas clásicas hasta el día de hoy. Esta metodología incorpora la mayoría de las ideas básicas de la programación orientada a objetos [4] con el objetivo principal de posibilitar la reutilización de modelos predefinidos en la construcción de nuevos modelos.

Una de las principales características del modelado orientado a objetos es el desarrollo estructurado de modelos, en el cual los modelos se componen de submodelos cada vez más simples. De esta manera, el modelo de un sistema se construye a partir de la interconexión de modelos que representan a los diferentes subsistemas que integran el sistema. Este procedimiento puede ser recursivo obteniéndose así modelos de sistemas cada vez más complejos en el sentido del número de componentes (subsistemas) que lo integran. La Figura 1 ilustra este concepto, donde la relación de agregación representa la interconexión de los modelos.

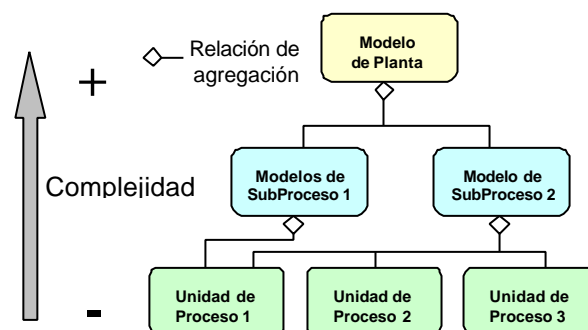


Figura 1: Descomposición recursiva de modelos en submodelos

El desarrollo estructurado de modelos debe permitir la reutilización de modelos predefinidos en librerías para que puedan ser interconectados en la construcción de nuevos modelos. Una de las características que facilitan esta forma de reutilización es el alto nivel de modularidad de los modelos obtenidos en los lenguajes de modelado orientado a objetos.

En estos entornos, los modelos son estructuras modulares en las que se establece una clara separación entre la representación del comportamiento físico del sistema modelado y la representación de la interacción del sistema con otros sistemas (interficie del modelo). La Figura 2 ilustra esta idea.

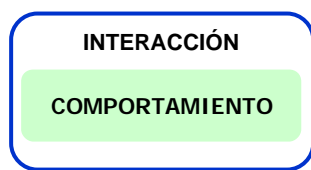


Figura 2: Representación modular de un objeto de modelado

Las estructuras modulares presentan la ventaja de encapsular la representación de algún tipo de comportamiento, de manera que sólo los atributos de la interficie son accesibles desde el exterior del módulo por otros módulos. La reutilización por medio de la agregación consiste en la interconexión de las interficies de los modelos. En ocasiones es posible conseguir que las conexiones entre modelos preserven la analogía con la topología de conexiones de los componentes del sistema.

Esta definición de los modelos proporciona una alta capacidad de abstracción, ya que para reutilizar un modelo no es necesario conocer los detalles internos de implementación, sino simplemente saber como interacciona con otros modelos. Esto posibilita que un usuario pueda agregar en su modelo el modelo de un componente o subsistema, sin que por ello deba tener un conocimiento profundo del comportamiento en el representado.

Además de la reutilización por agregación en el desarrollo estructurado del modelos, la metodología de orientación a objetos proporciona la capacidad de reutilizar mediante el mecanismo de la herencia. Este mecanismo permite crear modelos más complejos al aumentar el grado de descripción de su comportamiento (generalmente a través de la incorporación de nuevas ecuaciones), sin necesidad de escribir todo el modelo nuevamente. En la Figura 3 se observa un ejemplo de construcción de modelos cada vez más complejos a través del mecanismo de la herencia

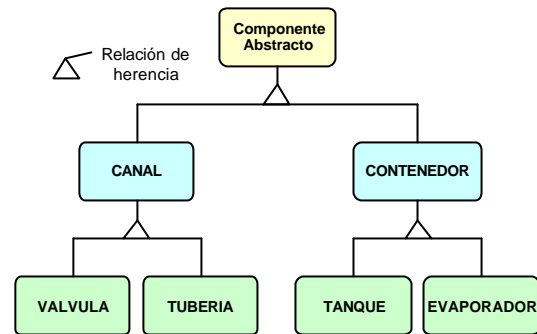


Figura 3: Construcción de modelos a través de herencia

Los lenguajes de modelado orientado a objetos de nueva generación como Modelica [5] o EcosimPro[6] están basados en estas ideas. En particular EcosimPro recoge las principales ventajas del modelado orientado a objetos, tales como la posibilidad de desarrollar modelos de sistemas complejos a partir de simples interconexiones de los componentes del sistema y la reutilización de los modelos de los componentes facilitando su uso en una gran variedad de aplicaciones. A través de la utilización de elementos definidos y validados en librerías es posible crear nuevos modelos, los cuales pueden ser simulados bajo distintas condiciones iniciales o variando algún parámetro entre cada simulación.

El objetivo de este trabajo es modelar un proceso de evaporación utilizando EcosimPro como herramienta de modelado. Se ha desarrollado un modelo riguroso del proceso, es decir, un modelo que considera los fenómenos físico más importantes que ocurren en esta operación (conservación de masa y energía) con un gran nivel de detalles y reduciendo las simplificaciones que tradicionalmente se asumen en este tipo de modelos. Siguiendo las ideas básicas de la modelado orientado a objetos se ha logrado implementar un modelo del proceso que permite su reutilización y su ampliación a distintas condiciones de operación.

El artículo se estructura de la siguiente manera: la sección 2 introduce las principales características del proceso de evaporación y la estrategia de modelado orientado a objetos de este proceso. En la sección 3 se muestran algunos problemas asociados a la generación del modelo de simulación así como algunos resultados para unas condiciones específicas de operación. Finalmente la sección 4 se presentan las principales conclusiones de este trabajo.

2 MODELO DEL PROCESO

El modelo de proceso de evaporación se muestra en la Figura 4. El sistema está constituido por un evaporador batch unido a una válvula proporcional que permite la salida del producto obtenido.

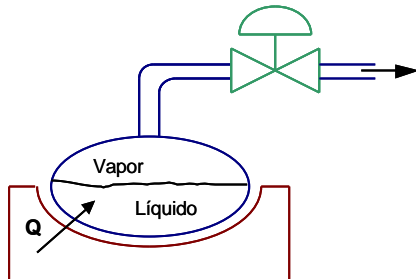


Figura 4: Esquema del proceso

En el desarrollo del modelo se incluyen los siguientes fenómenos:

- Balances de materia total
- Balances de componentes
- Balance de energía
- Relaciones físico-químicas entre las fases en equilibrio

Aplicando el modelado orientado a objetos se ha descompuesto el proceso en subsistemas más sencillos de tratar en forma independiente. A partir de los principios físicos que rigen cada subsistema derivaremos los componentes que describen su comportamiento. Con esto buscamos aumentar la capacidad del modelo para ser reutilizado en diferentes contextos.

2.1 Descripción de las unidades de proceso

Una vez que se ha estructurado el sistema en subunidades es posible crear *componentes* en EcosimPro que encapsulan el comportamiento de cada unidad de proceso (Figura 5). Cada una de las unidades encapsula el siguiente conocimiento físico:

- Fenómenos representados en el modelo. Se incorporan de forma implícita las hipótesis establecidas (temperatura uniforme, densidad constante, etc.)
- Las características físicas de los componentes (geometría, dimensión, etc) quedan establecidas de manera explícita en los parámetros

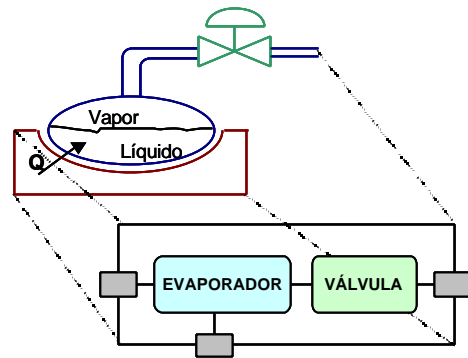


Figura 5: Estructuración en SubUnidades

Componente Válvula

Con el objeto de minimizar el coste de desarrollo y mantenimiento de los modelos se propone establecer una jerarquía de componentes aprovechando las propiedades de herencia disponibles en EcosimPro.

Identificando las características comunes a distintos sistemas es posible construir un componente abstracto que encapsule y represente el comportamiento común de diferentes subsistemas (Figura 3). En el caso de sistemas como una válvula o una tubería se observan características comunes tales como flujo constante a la salida y entrada del sistema, temperatura constante, etc. Todas estas características se incluyen en un componente abstracto (canal), el cual es utilizado, a través de la herencia, para construir el modelo de la válvula o la tubería incluyendo la ecuación específica que describe su comportamiento. Todas estas ideas están ilustradas en las Figuras 6 y 7, en las cuales se define un componente abstracto llamado canal y, mediante el mecanismo de herencia, el componente correspondiente a la válvula.

```

-----
-- Nombre del componente: CANAL
-- Descripción: componente abstracto
-- que modela el flujo que circula
-- por una conducción
-----

ABSTRACT COMPONENT CANAL

PORTS
  IN Fluid f_in
  OUT Fluid f_out

TOPOLOGY
  PATH f_in TO f_out

CONTINUOUS
  f_in.f = f_out.f
  f_in.T = f_out.T

END COMPONENT

```

Figura 6: Descripción de un componente abstracto

```

-----
-- Nombre del componente: VALVULA
-- Descripción: hereda el comporta
-- miento del canal
-- Modela la relación entre la presión
-- y el caudal en los extremos de una
-- válvula
-----

COMPONENT VALVULA IS_A CANAL

DECLS
  REAL Cv
  REAL Av

CONTINUOS
  f_out.f = Av*Cv*ssqrt(f_in.p-f_out.p)

END COMPONENT

```

Figura 7: Descripción del componente válvula

Componente Evaporador

El comportamiento físico de la subunidad *evaporador* viene descrito por ecuaciones dinámicas, generadas por los balances totales, por compuestos y de energía y por las ecuaciones algebraicas relacionadas con el equilibrio termodinámico. En este modelo se utilizó la ecuación de Antoine para el cálculo de las presiones de vapor puras y la ecuación de Van Laar para los coeficientes de actividad.

El componente evaporador generado en EcosimPro describe en forma rigurosa y genérica el comportamiento de esta unidad de proceso, independizándolo de la mezcla a procesar, tal como se explica en la siguiente sección.

2.2 Separación de las unidades de proceso del medio

Una situación habitual en la industria es que una misma unidad de procesos trabaje con mezclas diferentes. La representación modular de los componentes, separando el modelo de la unidad de proceso del modelo de mezcla, contribuye a incrementar la capacidad de reutilización del modelo de la unidad de procesos para diferentes contextos de simulación.

En el caso de estudio se ha buscado separar la representación del medio (mezcla a evaporar) de la representación de la unidad de proceso (Figura 8).

Para realizar esta tarea Ecosim dispone de estructuras de datos que permiten especificar los compuestos que se incluyen en el proceso sin necesidad de modificar el componente. En este trabajo las sustancias químicas a separar reciben el nombre de compuesto, para evitar confusiones con los componentes generados en EcosimPro.

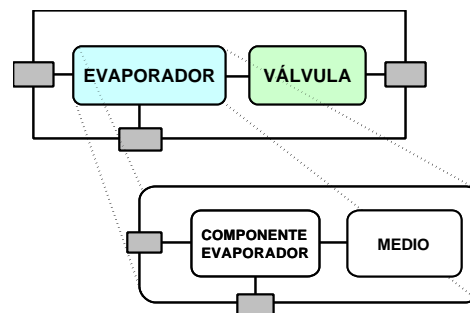


Figura 8: Separación Unidad-Medio

La sentencia ENUM permite al usuario definir diferentes tipos de datos:

```
ENUM Chemicals = {H2O, ETANOL, METANOL, PROPANOL}
```

La variable del tipo *Chemicals* definida anteriormente, es un tipo de dato que sólo puede tomar uno de los cuatro valores definidos para él. Los compuestos utilizados por un componente se definen como un subconjunto de los compuestos definidos anteriormente utilizando la sentencia SET_OF.

```
SET_OF (Chemicals) Mix = {H2O, ETANOL}
```

Una vez definido el tipo *Mix* es posible crear las variables que serán utilizadas en el modelo. Por ejemplo, para el caso de las fracciones líquidas y gaseosas tenemos que:

```
REAL x[Mix]      "Fracciones líquidas"
REAL y[Mix]      "Fracciones líquidas"
```

Por otro lado se presenta el problema de plantear los balances másicos y de energía debidos a que las ecuaciones asociadas a estos balances dependen de los compuestos incluidos en el modelo. Para resolver este problema se utiliza la sentencia EXPAND que permite formular en forma paramétrica el conocimiento físico encapsulado en el componente (balances másicos, de componentes y energía). Esta sentencia genera múltiples ecuaciones independientes a través de un índice que depende del tipo de dato que se está manejando.

De esta manera los compuestos incluidos en el modelo son independientes del componente y pasan a ser un parámetro más.

Finalmente las propiedades fisicoquímicas (entalpías, presiones de vapor, etc.), se calculan fuera del componente, utilizando una base de datos en la cual los parámetros de entrada son el compuesto (H2O, ETANOL, etc.) y la propiedad física a calcular.

Como ejemplo se incluye parte del código EcosimPro utilizado para modelar el comportamiento del evaporador. En la formulación del balance de materia

para los compuestos se demuestra claramente la independencia entre el modelo y el medio.

```

ENUM Chemicals = {H2O, ETANOL, METANOL, PROPANOL}
COMPONENT EVAPORADOR_1 (SET_OF (Chemicals) Mix)
DECLS
  REAL flujo_out
  REAL N
  REAL x[Mix]
  REAL y[Mix]
CONTINUOUS
N' = - flujo_out
EXPAND (i IN Mix)
  x[i]' = -flujo_out*(y[i] - x[i])/N
END COMPONENT

```

Figura 9: Formulación de los balances de materiales utilizando la sentencia EXPAND

2.4 Construcción del modelo

A partir de los componentes desarrollados anteriormente podemos implementar el modelo del proceso. Conectando el componente evaporador al componente válvula generamos la unidad de proceso que queremos modelar.

```

COMPONENT PROCESO
TOPOLOGY
  VALVULA      VAL (Ap=0.5, Cv=0.1)
  EVAPORADOR  EVAP (Q=4000)
CONNECT VAL TO EVAP
END COMPONENT

```

Una vez compilado el componente del proceso, se pueden efectuar distintas simulaciones, ya sea variando las condiciones de operación (composición de la mezcla a evaporar, flujo de calor adicionado, apertura de la válvula, etc.) o utilizando un medio diferente (mezclas distintas a evaporar). Un ejemplo concreto se presenta en la siguiente sección.

3 MODELO DE SIMULACIÓN

El modelado riguroso de este tipo de procesos genera un conjunto de ecuaciones DAE de alto índice, lo que dificulta su resolución numérica. El problema de índice distinto de cero se presenta cuando variables cuyas dinámicas están descritas por una ecuación diferencial (potencialmente variables de estado del sistema) se encuentran a su vez ligadas mediante ecuaciones algebraicas. En el caso del evaporador esta variable es la entalpía líquida de la mezcla, la cual depende de la temperatura del sistema.

A continuación se incluye parte de las ecuaciones del sistema donde se genera el problema de índice:

$$\frac{dN_l}{dt} = f_{out} \quad (1)$$

$$N_l \frac{dx_i}{dt} = -f_{out} \cdot (y_i - x_i) \quad (2)$$

$$N_l \frac{dH_l}{dt} = Q - f_{out} \cdot (H_v - H_l) \quad (3)$$

$$H_l = f(T, x_i) \quad (4)$$

donde:

- N_l : moles líquidos de mezcla
- f_{out} : flujo de vapor producido por la evaporación
- x_i : fracción líquida del componente i
- y_i : fracción vapor del componente i
- H_l : entalpía líquida de la mezcla
- H_v : entalpía vapor de la mezcla
- T : temperatura del sistema
- Q : calor adicionado al sistema

Se puede observar que la entalpía líquida aparece como solución de la ecuación diferencial (3) y a su vez, se resuelve de forma explícita en la ecuación algebraica (4). Debido a que la ecuación (4) no es una expresión analítica, EcosimPro no puede manipular las ecuaciones para resolver simbólicamente el DAE que aparece en el modelo.

El DAE se origina en las ecuaciones (3) y (4). La razón de incluir la ecuación (3) es disponer de una expresión para el cálculo del flujo de vapor, con lo que se soluciona un problema característico de este tipo de modelos en que no existe una ecuación específica para el cálculo del flujo de vapor producido.

Para resolver el problema del índice y al mismo tiempo el cálculo del flujo de vapor, se ha aproximado la derivada de la entalpía líquida en la ecuación (3) por medio de diferencias finitas. Esta nueva ecuación se sustituye en el modelo, eliminando el DAE y obteniendo una ecuación para el cálculo del flujo de vapor.

$$-f_{out} = \frac{Q - N_l \cdot \frac{dH_l}{dt}}{(H_v - H_l)}$$

De esta manera, se logra desacoplar las ecuaciones algebraicas de las ecuaciones diferenciales, transformando el sistema en un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias (ODE).

Este desacoplamiento permite resolver las ecuaciones de equilibrio termodinámico de la mezcla (ecuaciones algebraicas) mediante funciones externas al modelo, lo que permite la separación entre el modelo y el medio. En cada paso de integración esta función resuelve la temperatura del sistema, lo cual

permite a su vez resolver las ecuaciones diferenciales.

Al momento de realizar la simulación, EcosimPro se encarga de asignar la causalidad computacional para obtener una partición del modelo. Una vez resuelta la asignación computacional, sólo se deben especificar las condiciones iniciales de las variables de estado (cantidad inicial de mezcla y fracciones molares).

A continuación se presenta un ejemplo en el cual se evapora una mezcla etanol-agua. La cantidad de mezcla son 10 litros con una fracción molar inicial de etanol igual a 0.5.

En la figura 10 se observa la evolución de la temperatura del sistema mientras que en la figura 11 se muestra la evolución del destilado producido. La temperatura va aumentando a lo largo de la operación debido a que la mezcla se va empobreciendo de etanol, lo que incrementa su punto de ebullición. Además, la presencia de la válvula a la salida del evaporador aumenta la presión del sistema y, por lo tanto, aumenta también la temperatura de evaporación de la mezcla.

El flujo de destilado va variando debido a que la composición de la mezcla va cambiando a lo largo de la operación, mientras que la tasa de adición de calor se mantiene constante.

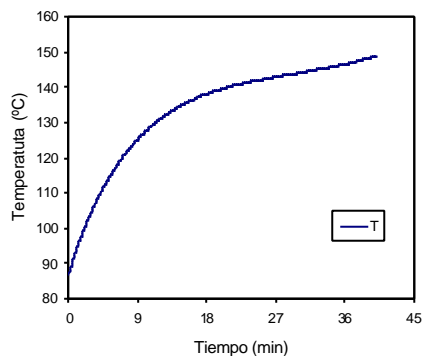


Figura 10: Temperatura del evaporador

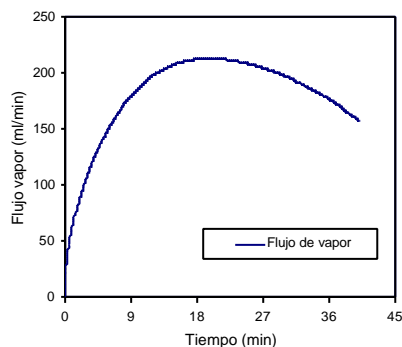


Figura 11: Flujo de vapor producido

Finalmente se puede observar en la figura 12 los perfiles de etanol y agua en el destilado. Al principio de la operación el producto es más rico en alcohol, debido a su mayor volatilidad, pero su concentración va disminuyendo a medida que se va agotando en el evaporador.

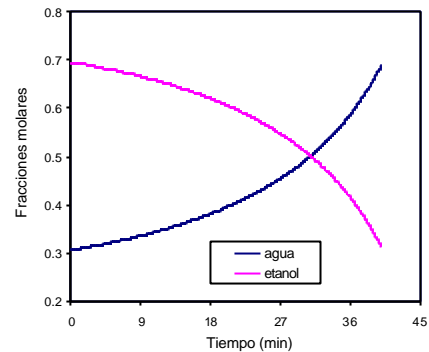


Figura 12: Perfiles molares del etanol y del agua

4 CONCLUSIONES

En este trabajo se ha desarrollado un modelo riguroso de un evaporador utilizando un lenguaje orientado a objetos. La herramienta utilizada para la modelación ha sido EcosimPro, el cual recoge las principales ventajas de esta metodología (encapsulación del comportamiento físico, abstracción y reutilización), logrando representar de manera modular los diferentes unidades de proceso.

El uso de esta metodología tiene una incidencia directa en la reducción significativa del elevado tiempo que tradicionalmente conlleva la obtención de nuevos modelos, así como un gran aumento en el grado de confianza en la validez de los modelos construidos.

Además Ecosim dispone características que lo hacen especialmente atractivo a la hora de modelar procesos industriales, como son la herencia y la agregación junto con la capacidad de separar el medio del modelo. De esta manera, se aumenta la capacidad de reutilización de los componentes generados en otros contextos de simulación, ya sea variando las condiciones de operación (evaporación de mezclas multi-compuestos) o utilizando los componentes en la construcción de modelos más complejos (evaporadores de doble efecto o columnas de destilación).

Agradecimientos

Agradecemos el soporte de este trabajo por parte de CICYT (TAP98-0364).

Referencias

- [1] Diwekar, U.M., (1996) Batch distillation: Simulation, Optimal Design and Control. Series in chemical and mechanical Engineering.
- [2] Cellier, F.E., (1991). Continuous System Modelling. Springer Verlag
- [3] Nilsson, B., (1993). Object-Oriented Modelling of Chemical Process. PhD. Thesis. Dpt. of Automatic Control. Lund Institute of Technology.
- [4] Meyer, B., (1997). Object-Oriented Software Construction. Prentice Hall.
- [5] Elmquist, H., et al., (2000). Modelica TM. A Unified Object-Oriented Modeling Language for Physical System Modelling. <http://www.dynasym.se>
- [6] Empresarios Agrupados, (1999). EcosimPro Reference Manual.