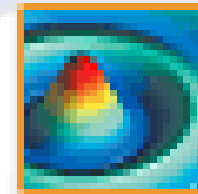
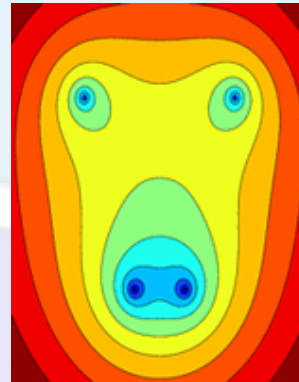
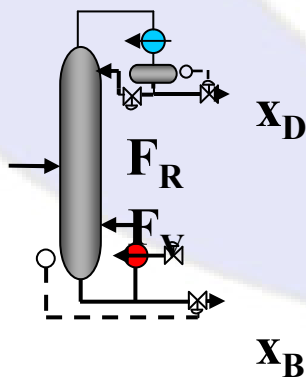


# MODELACION Y SIMULACION DE PROCESOS QUIMICOS MODELOS DE PROCESOS

Prof. FRANCISCO CUBILLOS



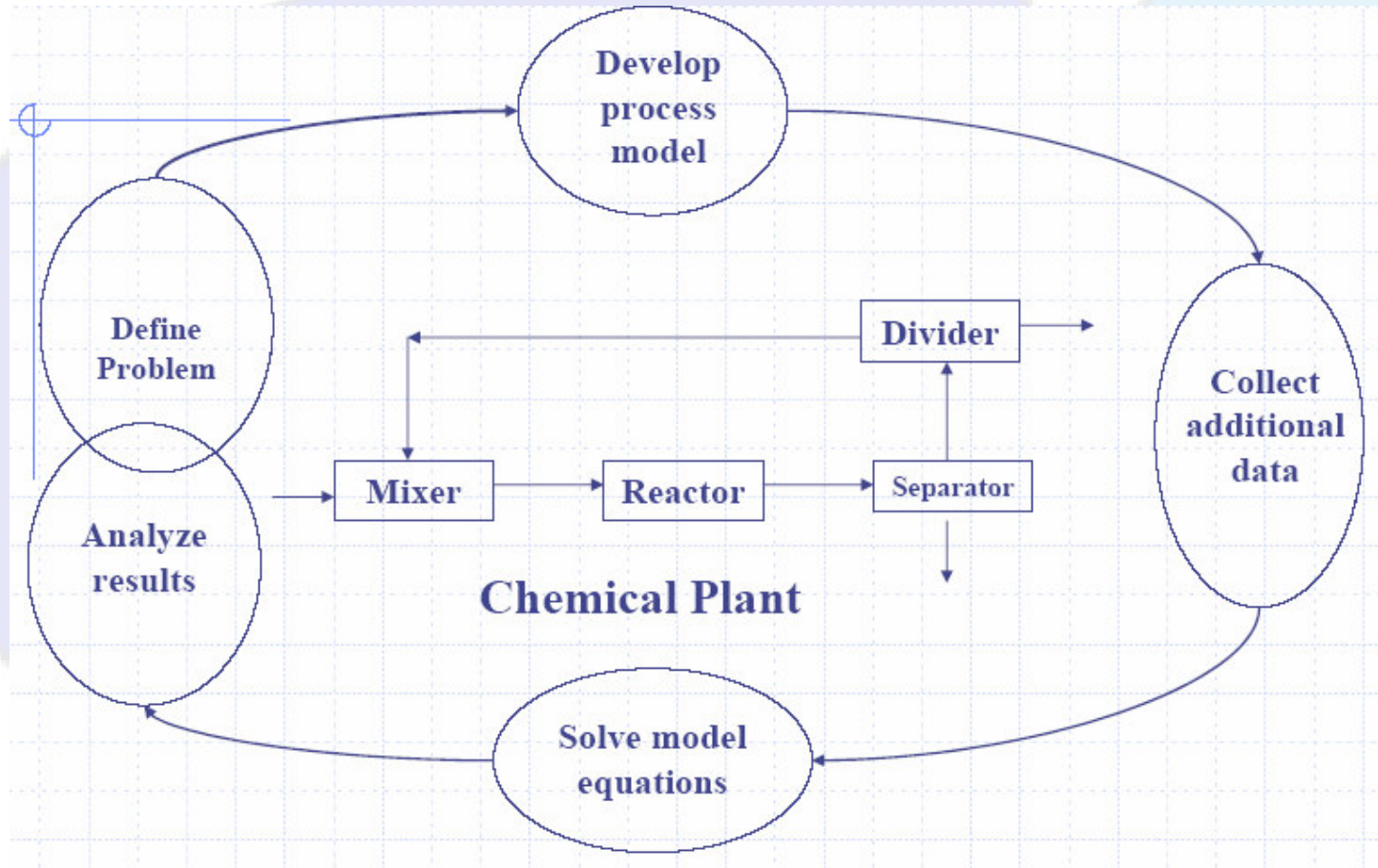
# Modelación & Simulación

**MODELACION:** Representación abstracta de la realidad en base a herramientas de información.

**SIMULADOR:** Programa que ejecuta el modelo de manera automática

**SIMULACION:** Emulación frente a diferentes escenarios controlados usando modelos

# RELACION MODELO/SIMULACION



# REALIDAD

(observada, medida, conocida, publicada, estudiada)

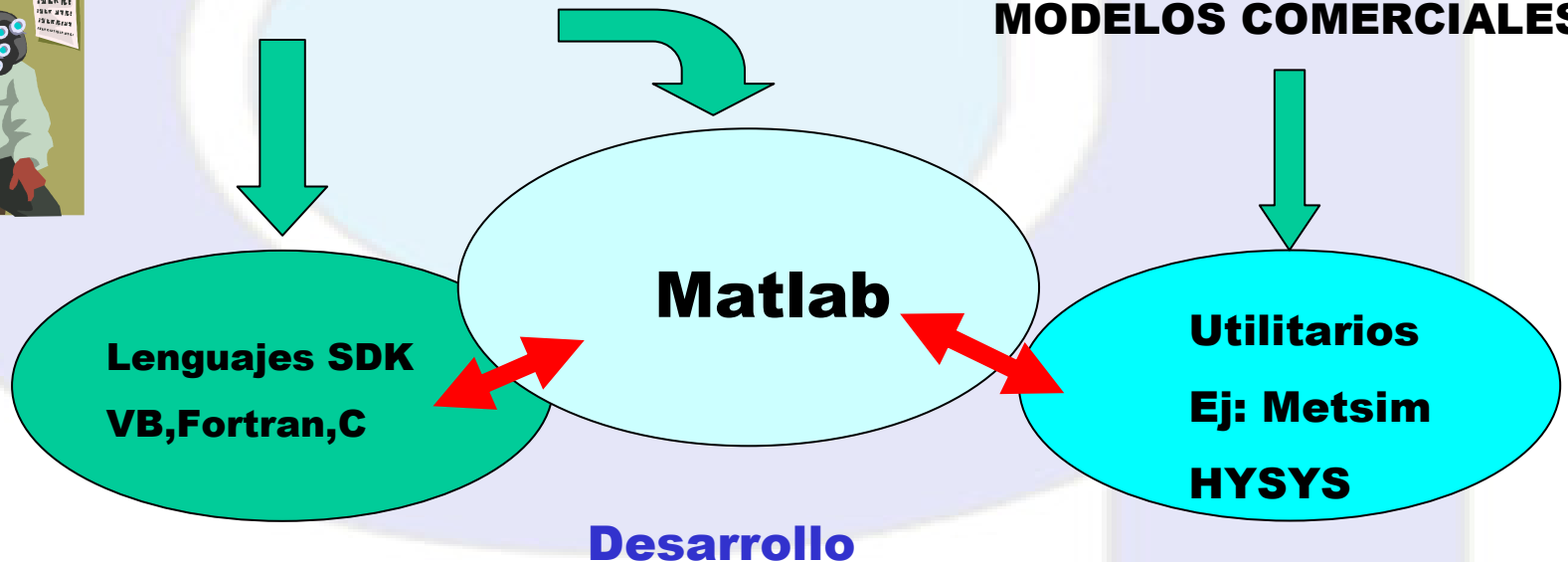
**PERCEPCION + CONOCIMIENTO PROPIO**

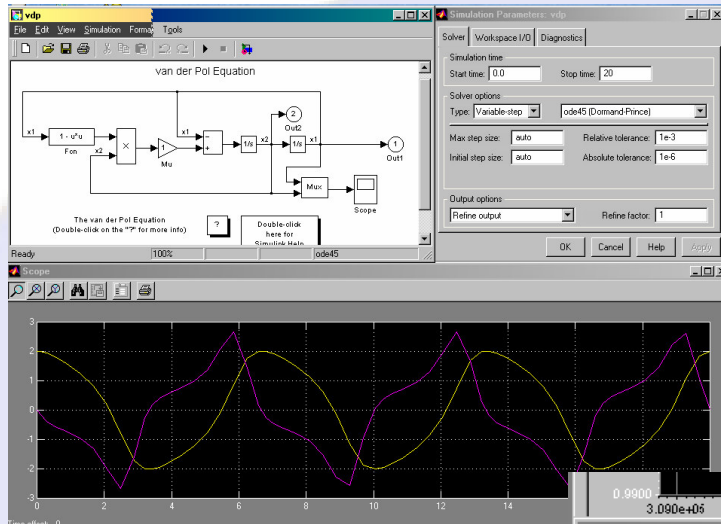
**CONOCIMIENTO**

**EXPERTOS**

**MODELOS PROPIOS**

**MODELOS COMERCIALES**

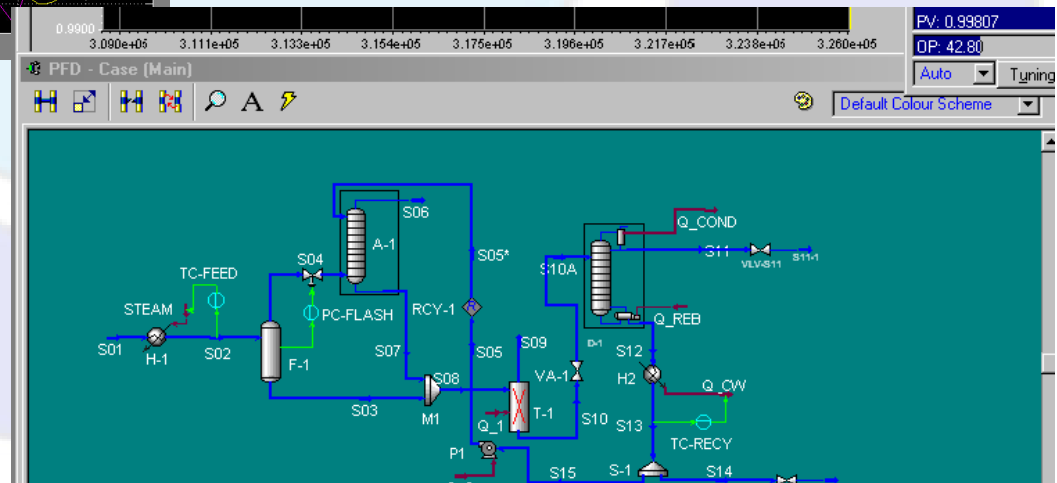




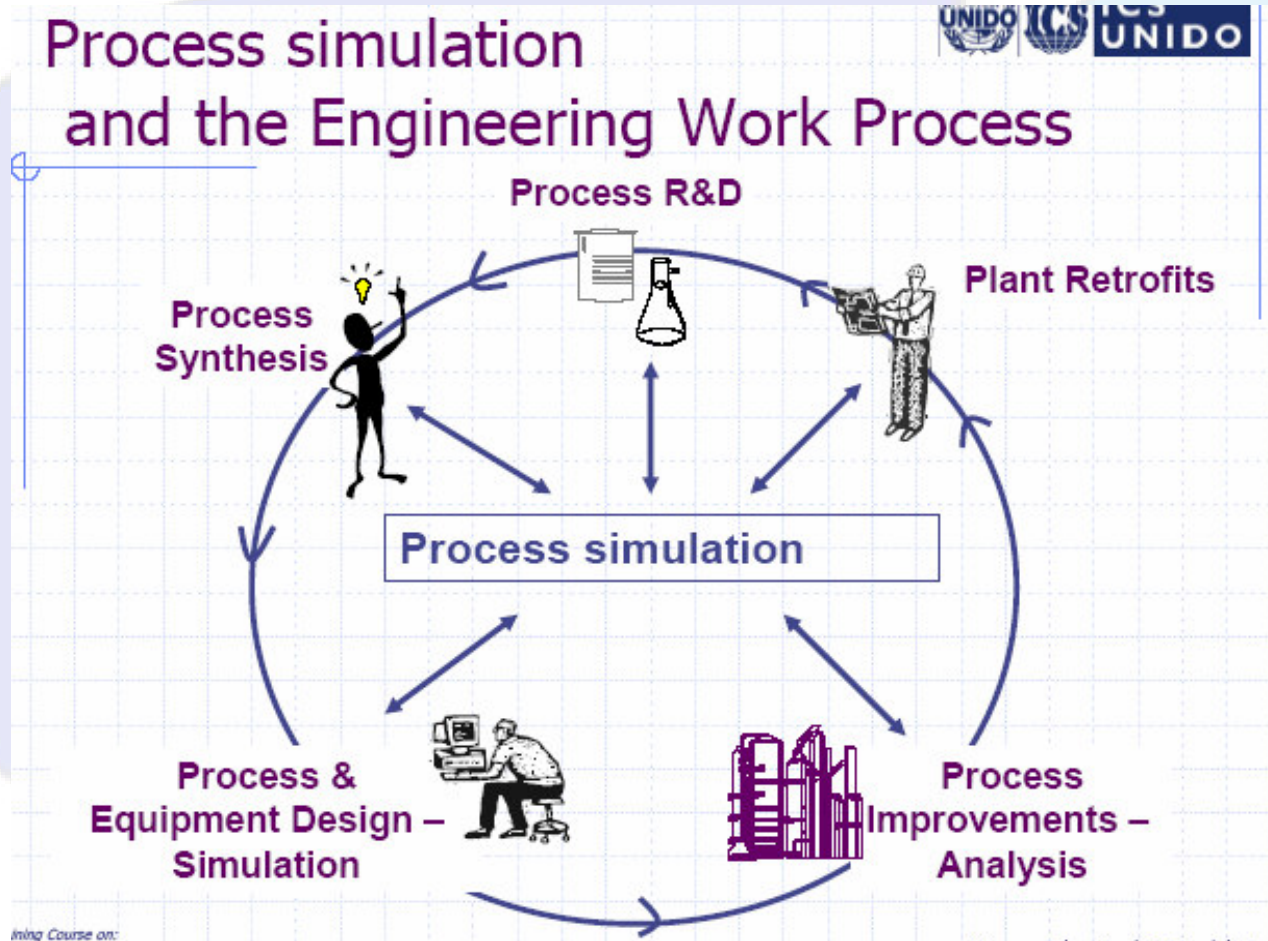
```

1 function[sys,x0]=secado7(t,x,u,flag)
2 %creado el 27.06.2003
3 %Modelo de Secado(Retromezcla de Sólido.Cuatro Zonas)
4 %Velocidad de secado variable con la Humedad y Temperatura del sólido.
5 %t en minutos;u(1)=T0;u(2)=X0;u(3)=tau;u(4)=alfa;u(5)=beta;u(6)=Ua;
6 %x(1)=X1/X0;x(2)=T1;x(3)=X2/X0;x(4)=T2;x(5)=X3/X0;x(6)=T3;x(7)=X4/X0;x(8)=T4;x(9)=Tg;
7 %-----programa-----
8
9 if abs(flag)==1
10
11 %asignaciones
12 T0=u(1);X0=u(2);alfa=u(4);beta=u(5);Ua=u(6);
13
14 %parámetros del modelo
15 Xe=0.026;Ms=.093;R1=0;R2=0;R3=0;
16 Cpg=.24;Cps=.23;L=557;Mg=.0038;
17
18 %Modelo para Simulación
19 Gs=.795*u(3);
20 beta=beta*1200;
21 N1=(alfa*exp(-beta/(x(2)+273)))*(x(1)-(Xe/X0));
22 N2=(alfa*exp(-beta/(x(4)+273)))*(x(3)-(Xe/X0));
23 N3=(alfa*exp(-beta/(x(6)+273)))*(x(5)-(Xe/X0));
24 N4=(alfa*exp(-beta/(x(8)+273)))*(x(7)-(Xe/X0));
25 Q1=Ua*Ms*(x(9)-x(2));
26 Q2=Ua*Ms*(x(9)-x(4));
27 Q3=Ua*Ms*(x(9)-x(6));
28 Q4=Ua*Ms*(x(9)-x(8));

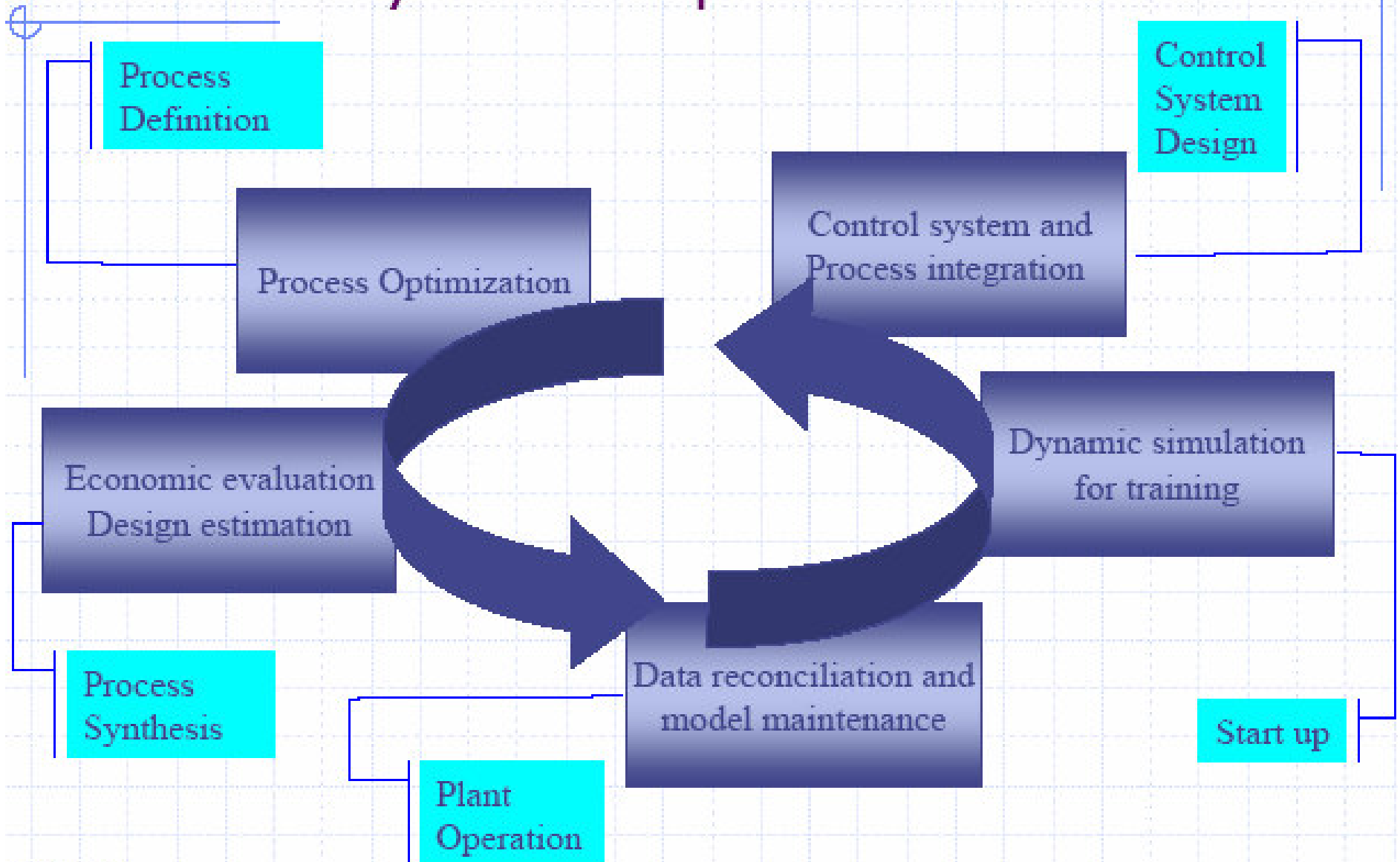
```



# DONDE USAR MODELACION Y SIMULACION



# The 'life cycle' of a process



## **CLASIFICACION DE MODELOS**

- Los modelos los podemos clasificar de diferentes maneras dependiendo de algún atributo específico a considerar.
- Estos atributos especiales dan origen a diferentes técnicas de modelación conformando áreas específicas de desarrollo por ejemplo:

De población, dinámicos, adaptables, CFD, de IA, moleculares, Realidad virtual etc.



## **Según el método del tratamiento de la información**

- Iconos: (la imagen asocia un comportamiento)
- Linguísticos o de Reglas: (conjunto de reglas que clasifican la respuesta)
- Tratamiento de Datos: (Colección de datos interpolados o extrapolados)
- Matemáticos: (La salida está definida en base a una funcionalidad matemática)

## Modelos Matemáticos:

$$\frac{dx}{dt} = g(u, p, t)$$

$$Y(t) = f(x, u, p, t)$$

$$x(t = 0) = X_0$$

Y: Salidas    u: Entradas    p: Parámetros

X : Estados    x<sub>0</sub>: Condiciones medidas

g=funcionalidad

De acuerdo a la síntesis (Construcción)  
podemos tener:

- Modelos empíricos o no paramétricos (caja negra)
- Modelos fenomenológicos (leyes válidas)
- Modelos grises (Mix entre los anteriores)

Si los parámetros del modelo se ajustan continuamente entonces hablamos de modelos “Adaptables” o “Adaptativos”

La adaptación puede ser realizada “en línea” o a partir de un nuevo archivo histórico.

# **VENTAJAS Y DESVENTAJAS**

## **Fenomenologicos**

Representan al fenómeno

Significado fisico

Generalidad

Escalable

Extrapolación acotada

Difíciles de formular y entender

Solución costosa

## **Empíricos**

No tienen interpretación física

Requieren adaptación con datos experimentales

Extrapolación limitada

Fáciles de formular

Solución simple

La representación del fenómeno observado da origen a los siguientes tipos de modelos:

- Modelos Determinísticos: (Imagen)
- Modelos Estocásticos: (Probabilidad)

Estos pueden ser

- Modelos Estáticos (Estacionario)
- Modelos Dinámicos (función del tiempo)

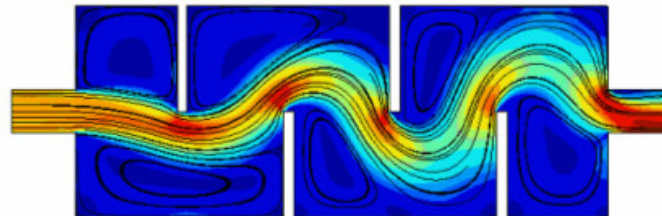
Según los requerimientos de entradas y salidas,  
pueden ser

- Modelos Contínuos (derivables)
- Modelos Discretos (discontínuos)
- Modelos Binarios o cuantizados (0,1,2,)
- Modelos Híbridos (Mix)

**Importante:** Impactan en la algorítmica de las aplicaciones

*El grado de detalle (escala física) a considerar en el modelo se llama “granularidad”.*

- Meso Escala (Red de plantas)
- Macro Escala (Planta completa)
- Macroscópico (Equipos completos)
- Microscópicos Espaciales (Fenómenos locales)
- Moleculares
- Atómicos



## Ejemplo del sector energético

Matriz de producción derivados del petróleo

Refinería

FCCU

Cinética en catalizador

Mecanismo de cracking

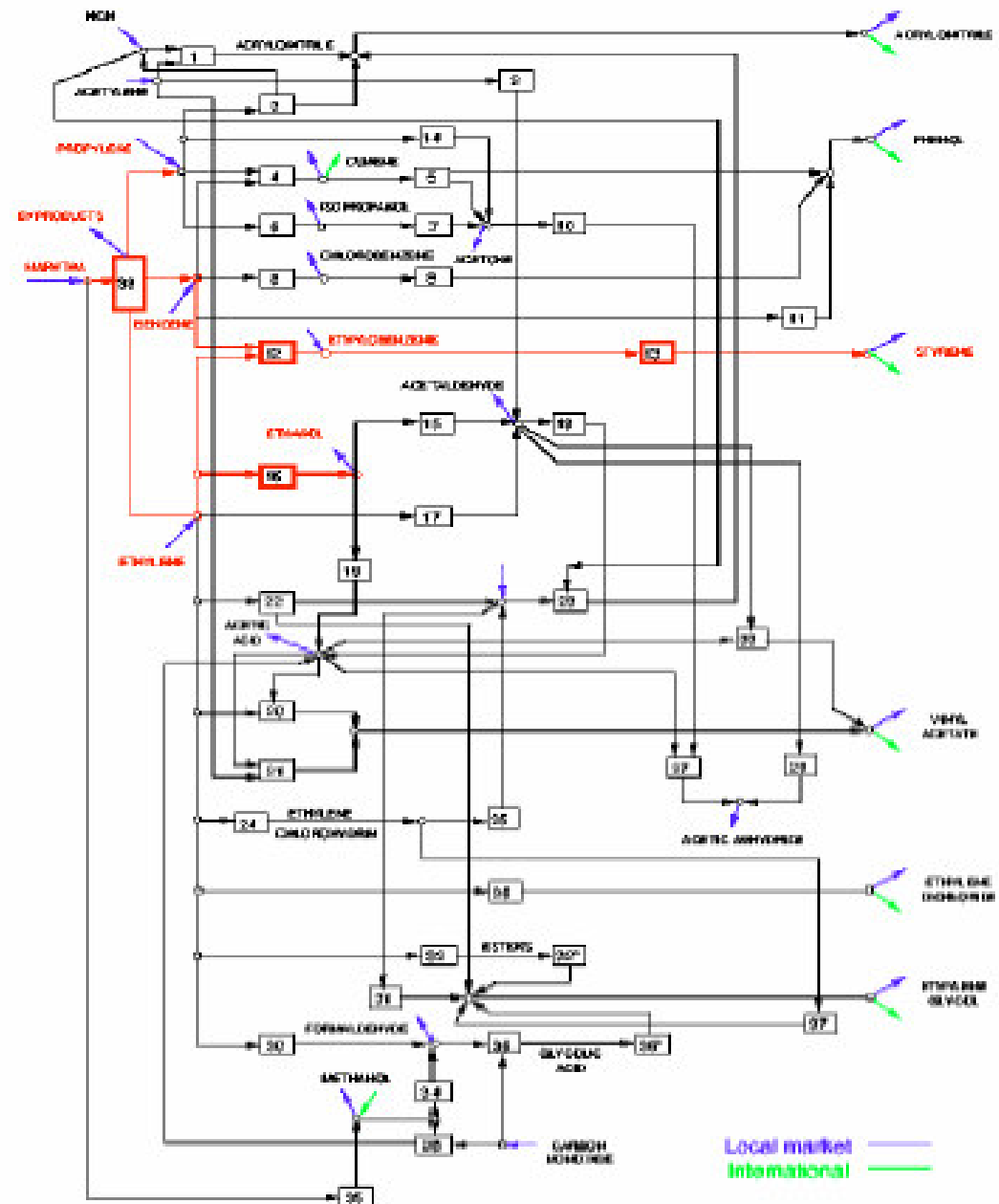
Energías de activación

En cada una de las etapas, los modelos son de diferente tipo dependiendo de los objetivos que se persiguen.

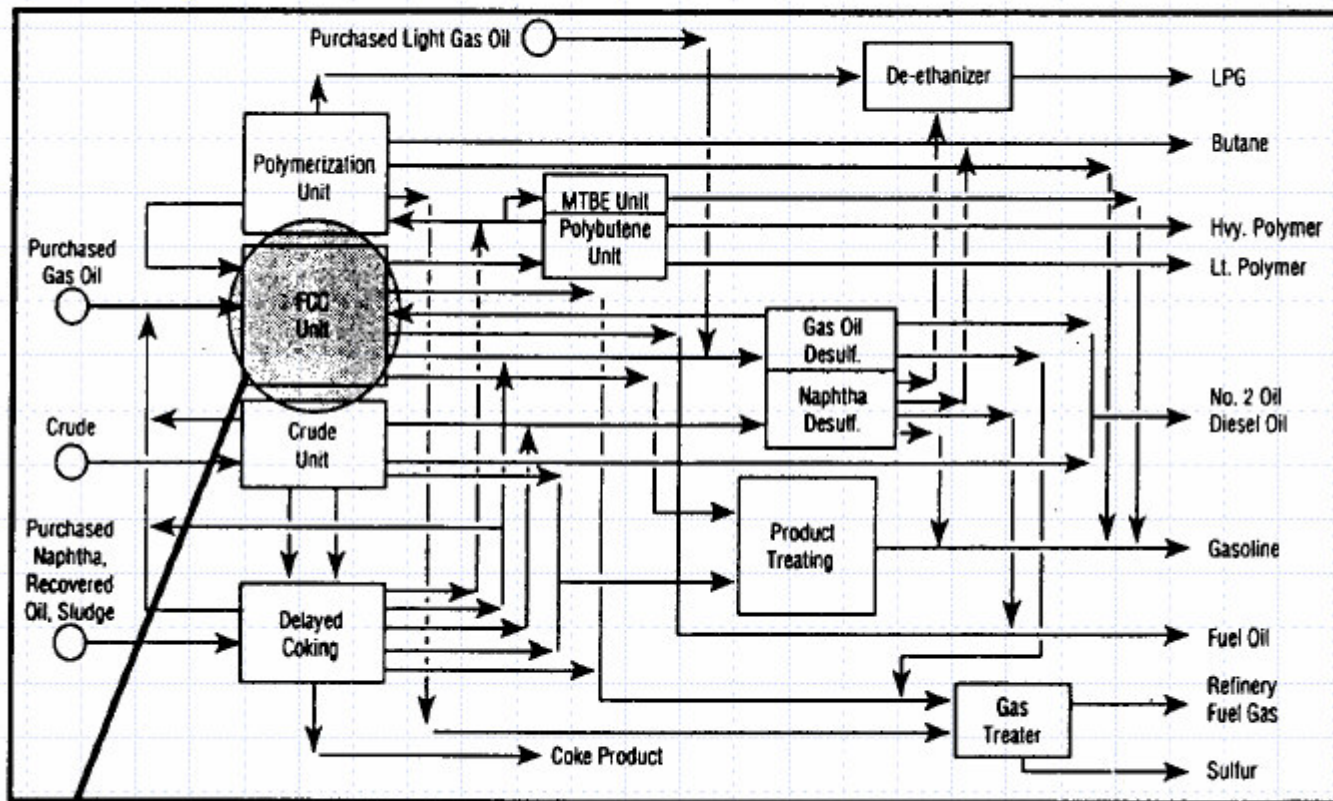


# PROCESS SUPPLY CHAIN

- A network of processes, chemicals and markets
- New products and processing technology are anticipated
- When and how much new capacity to bring on-line?



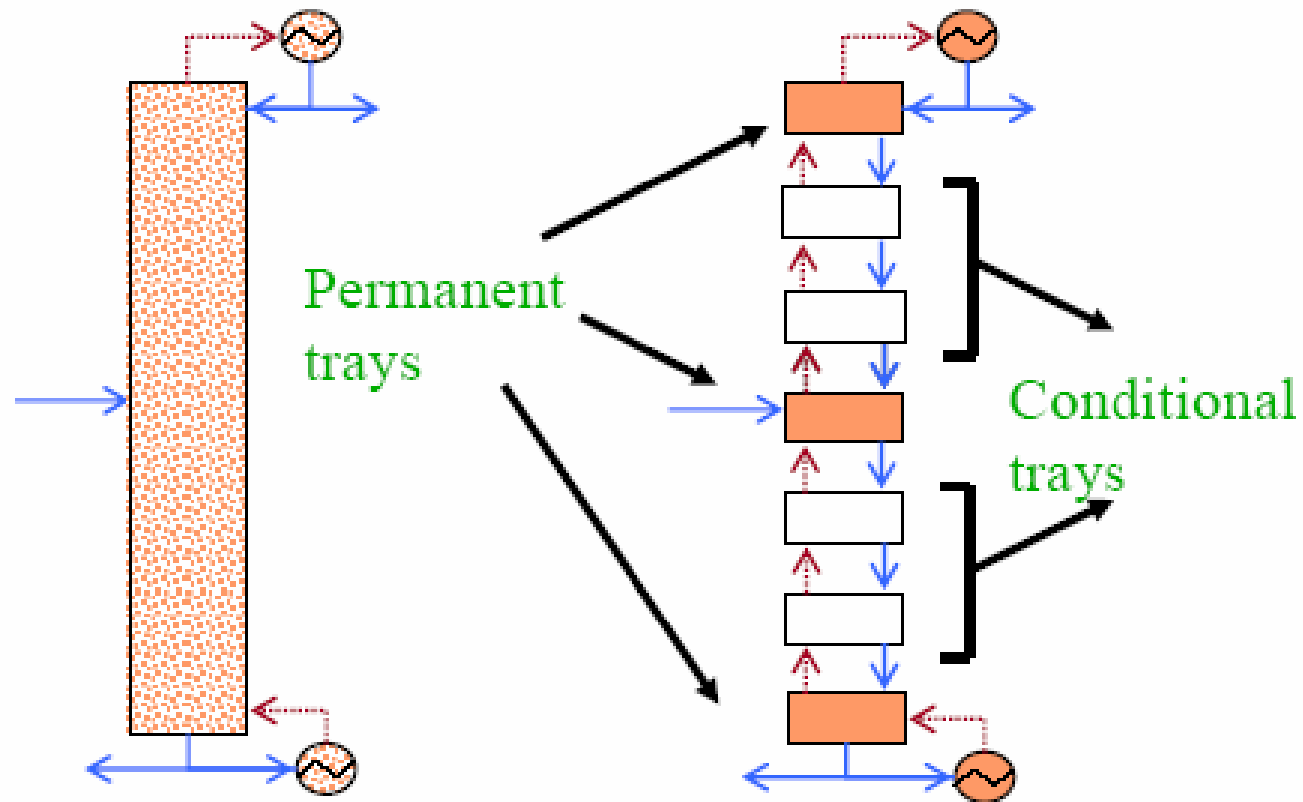
# Mesoscale analysis: Refinery



FCC Reactor

Process Engineering Scale

# Macroscópico Concentrados



# Macro/Micro distribuidos

## NUCLEAR REACTOR FUEL MANAGEMENT

