

DISEÑO DE LIBRERÍAS DE PROCESOS CON ECOSIMPRO

Mazaeda Rogelio, Merino Alejandro, Rueda Almudena
Centro de Tecnología Azucarera. Universidad de Valladolid
C/ Real de Burgos. Edificio Alfonso VIII. Planta baja s/n. 47011. Valladolid. España
Teléfono: 983 42 35 63. FAX: 983 42 36 16.
Email: rogelio@cta.uva.es; alejandro@cta.uva.es; almudena@cta.uva.es

Resumen

Palabras Clave: Modelado, Simulación, EcosimPro, desarrollo de librerías.

Abstract

En este artículo se describe la forma en la que se ha desarrollado una biblioteca de procesos químicos aplicada a la industria azucarera, se dan una serie de ideas clave para acometer el trabajo utilizando lenguajes orientados a objetos como EcosimPro. Se muestra con detalle la implementación de algunas partes de la librería, en las que se describe la forma de acometer ciertos problemas, procurando que los modelos obtenidos sean genéricos, fácilmente reutilizables y numéricamente robustos.

1. INTRODUCCIÓN

La aplicación de métodos de simulación dinámica en el estudio de los procesos industriales va, cada vez más, dejando de ser una práctica excepcional para convertirse en una herramienta imprescindible de ayuda al diseño y la operación de la industria actual.

Las ventajas que comporta la utilización de la simulación son conocidas y resultan difíciles de exagerar. La existencia de un modelo previo, facilita la toma de decisiones sobre el diseño de la planta a ser construida. Si esta ya existe, una simulación matemática fiel de la misma resulta útil al permitir realizar experimentos simulados que de ser realizados sobre el proceso real serían muy costosos o incluso peligrosos. La ejecución barata y segura de estos experimentos, sería a su vez de inestimable valor en el ensayo de nuevas variantes tecnológicas, y en el diseño y sintonía de estrategias de control más eficientes. Por último, pero no menos importante, la aplicación de las técnicas de simulación aseguran una mejor comprensión de la complejidades del proceso por parte del personal técnico, lo cual les será muy útil a la hora de tomar las decisiones adecuadas en el día a día de la operación de la fábrica.

A pesar de todo lo anterior, la utilización a gran escala de las técnicas de simulación dinámica de procesos está todavía hoy limitada por la complejidad inherente al desarrollo de los modelos matemáticos. No obstante, avances recientes como el surgimiento de herramientas de modelado y simulación orientada a objetos del estilo de EcosimPro, permiten esperar una mejoría importante en la situación actual.

El modelado orientado a objetos, al facilitar la reutilización de modelos previamente desarrollados, estimula la creación de librerías de componentes parametrizables que sean lo suficientemente generales como para ser usadas en multitud de proyectos de simulación. Esta posibilidad de utilizar de manera fácil, librerías de modelos bien probadas y confiables, significaría, como es evidente, un impulso importante a la actividad de modelado y simulación.

En este artículo, presentamos algunas experiencias en el diseño de una librería de modelos útiles en la industria azucarera. Esta librería ha sido desarrollada como el núcleo de un Simulador de Entrenamiento de Operarios de sala de Control para las fábricas de azúcar [de Prada C. et al. 2002], [Merino A., Acebes L.F. 2001] pero puede ser utilizada para otros objetivos diferentes a la formación.

La librería está diseñada de manera jerárquica, e incluye propiedades fisicoquímicas de muchas sustancias, modelo de elementos de transporte, modelo de elementos comunes a toda la industria de procesos, así como modelos específicos de la industria azucarera.

El artículo está organizado de la siguiente forma. Primero, en la sección 2 se hace una muy breve descripción de EcosimPro, haciendo énfasis en aquellos aspectos de la herramienta que la hacen útil en el desarrollo de librerías de modelos reutilizables, en la sección 3 Se explica la estructura general de la librería, en la sección 4 se describe como se han aprovechado ciertas capacidades de EcosimPro en el desarrollo de los puertos. En la sección 5 se describe la librería de propiedades fisicoquímicas. Para terminar en el apartado 6 se habla de el desarrollo de una librería de elementos de flujo, como ejemplo de la filosofía de trabajo en un tema directamente aprovechable en muchos campos.

2. ECOSIMPRO

EcosimPro es una herramienta de simulación matemática de sistemas dinámicos modelados por ecuaciones diferenciales y algebraicas (DAEs) aunque también permite simular la ocurrencia de eventos discretos.

EcosimPro permite modelar los sistemas físicos a partir de aplicar conceptos novedosos de orientación a objeto análogos a los utilizados en los lenguajes de programación como C++ y Java.

Utilizando el lenguaje de modelado propio de EcosimPro (EL), el modelador puede encapsular los datos y el comportamiento dinámico del sistema en componentes reutilizables que ofrecen una interfaz pública bien definida pero que esconden las complejidades de su realización interna. Los componentes individuales son descritos por las ecuaciones diferenciales y algebraicas que los definen. Componentes más complejos pueden crearse integrando otros más simples. También se permite definir un componente como una extensión o una especialización de otro componente base más general a través de los mecanismos de herencia.

La tecnología de modelado orientado a objetos que EcosimPro adopta, permite la creación de modelos dinámicos complejos a partir de la interconexión de sus componentes constituyentes, estimulando así una metodología de trabajo, que resulta muy productiva, de reutilización de componentes parametrizables que ya estén bien probados.

Aunque la orientación a objetos, en el caso específico de la simulación de sistemas dinámicos, presenta las características generales distintivas de dicho paradigma, si existen, como es lógico, diferencias importantes en relación con la programación orientada a objetos convencional. Estas diferencias están determinadas por la naturaleza específica del problema que se quiere resolver. Aquí no se trata de generar código para ser ejecutado en determinada plataforma informática, sino principalmente de obtener, a partir de los modelos de los componentes individuales, una descripción matemática correctamente planteada, en forma de un sistema de ecuaciones algebraicas y diferenciales, para el sistema en su conjunto. El modelo matemático así obtenido, puede ser estudiado desde diversos ángulos, dependiendo de que variables sean consideradas incógnitas y cuales datos. Esta es una decisión que debe realizar el usuario del modelo (siempre asistido por la herramienta) al definir las así llamadas particiones. Con esta información, EcosimPro estaría en disposición de ordenar las ecuaciones, asignando una causalidad computacional que está intencionalmente ausente en el modelo de partida.

Para ello, debe decidir qué variables son calculadas a partir de cuales otras y utilizando qué ecuaciones. Durante este proceso, pueden aparecer eventualmente bloques de variables intrínsecamente relacionadas que sólo pueden ser resueltas de conjunto. También pueden aparecer como incógnitas variables que aparecen como implícitas en ecuaciones no lineales o en tablas de datos que EcosimPro no es capaz de despejar. Estas variables (y las ecuaciones que las relacionan) forman lazos algebraicos y para resolverlos, EcosimPro debe acudir a los llamados algoritmos de *tearing*. También durante el proceso pueden aparecer problemas de alto índice. Estos problemas aparecen cuando existen ligaduras entre variables de estado del sistema. Los problemas de índice aparecen dentro de los modelos por varias causas. Estos problemas aparecen frecuentemente como consecuencia de las ligaduras entre variables que se generan al conectar varios componentes. En ocasiones aparecen dentro de los modelos de un componente y pueden solucionarse planteando el modelo en otros términos [bibliografía manuales de EcosimPro].

Finalmente, una vez obtenida la partición, el usuario del modelo está en disposición de simularlo, utilizando para ello potentes algoritmos numéricos que EcosimPro pone a su disposición.

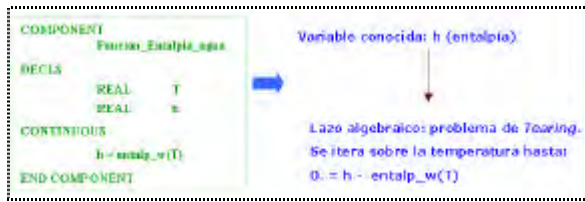
A pesar de las facilidades que presentan este tipo de lenguajes para automatizar la generación del modelo matemático y de lo interesante que resulta que la causalidad computacional esté libre, en ocasiones es necesario que el modelador fije de antemano algunas condiciones o de al modelo cierta flexibilidad de forma que se adapte a las posibles topologías en las que puede estar presente el objeto de forma que la estructura matemática de la superestructura que se genera sea robusta matemáticamente.

El lenguaje EL brinda algunas sentencias y palabras reservadas para ayudar al modelador en la tarea de orientar o restringir el proceso de asignación del orden de las ecuaciones.

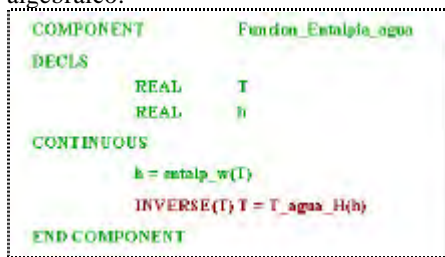
Por ejemplo, la palabra reservada EXPL puede ser usada modificando la declaración de alguna variable, para indicar que la misma no debe ser nunca utilizada para romper lazos algebraicos. La sentencia INVERSE por otra parte indica al algoritmo de ordenamiento de EcosimPro, la manera correcta de invertir determinada ecuación, si esta inversión fuera necesaria.

3. DEFINICIÓN Y ORGANIZACIÓN DE LA LIBRERÍA DE MODELOS

La librería de modelos desarrollada actualmente tiene tres grandes partes. En la primera se definen un conjunto de funciones que encapsulan las propiedades

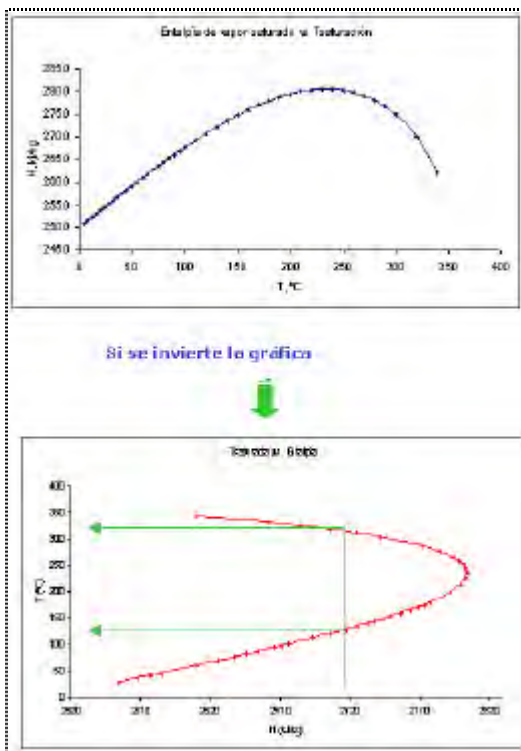


Esto puede ocasionar en algún momento problemas de convergencia a la hora de realizar las simulaciones, algo que debe evitarse siempre que sea posible para facilitar la utilización de los modelos. La solución propuesta en este caso es la utilización de la función INVERSE, que evita la aparición del lazo algebraico:

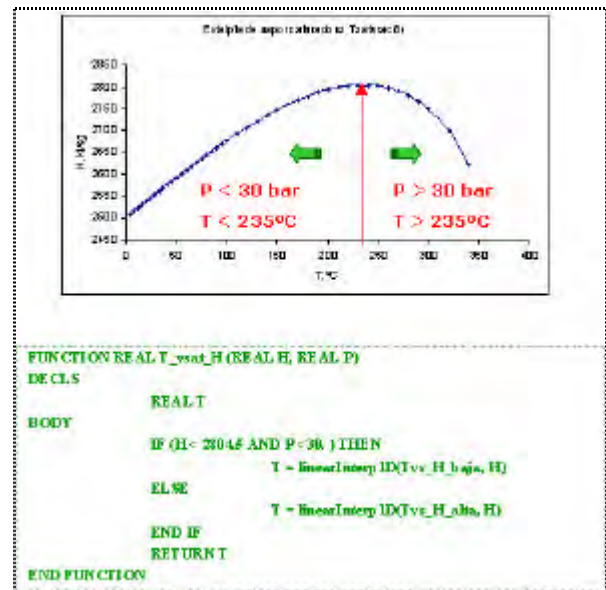


- Tablas cuya inversión dan lugar a más de una solución.

Otro problema que se plantea a la hora de construir una librería de modelos es que una propiedad físico-química definida en forma de tabla, donde es conocida la variable dependiente, tenga dos posibles soluciones. Son funciones de la siguiente forma:



La solución propuesta para este caso es invertir la tabla en dos tramos en función de dos argumentos de entrada:



5. LIBRERÍA DE PUERTOS

Los puertos son los elementos que permiten la conexión entre los distintos componentes. En ellos se definen aquellas variables que representan el intercambio de información entre componentes. Los puertos evitan el tener que conectar los componentes variable a variable, y crear componentes divisores y uniones.

Para permitir una utilización de los puertos de la forma más general posible se han utilizado ciertas características de EcosimPro que suponen una gran potencialidad y versatilidad a la hora de reutilizar componentes. Así los puertos de tipo líquido o gas se han parametrizado con un SET_OF de forma que cuando se utiliza un puerto de conexión dentro de un componente no hay más que definir entre paréntesis el tipo de enumerado que le corresponde y todas las propiedades del puerto serán las correspondientes a ese enumerado.

La asignación inteligente de propiedades descrita en el apartado anterior permite además que las llamadas a las funciones sean las que el usuario quiera en función de este SET_OF.

Otra característica de Ecosim que se ha utilizado es la sentencia EXPL, con ella se evita que ciertas variables con malas propiedades de convergencia aparezcan como variables de Tearing en los lazos algebraicos, o que Ecosim intente despejarlas a la hora de ordenar las ecuaciones. Con esto evitamos posibles problemas numéricos.

6. MODELADO DE ELEMENTOS DE TRANSPORTE

A la hora de desarrollar las librerías se vio la necesidad de fijar una estrategia para el desarrollo de los elementos que aparecían en la mayoría de las líneas de flujo de la planta. Esta estrategia debía ser tal, que alguien totalmente ajeno al desarrollo de los modelos fuera capaz de interconectar los elementos que aparecen en la librería, siendo capaz de prever y evitar los problemas numéricos asociados a este tipo de conexiones.

En el caso de la industria azucarera los elementos que aparecen son los siguientes:

Tuberías
Válvulas
Bombas

En un análisis de estos elementos se ve que comparten una estructura común; cumplen con la ecuación de la energía mecánica. Así, todos estos elementos se han modelado de tal forma que cumplen el balance de energía mecánica de Bernoulli. Así se ha creado un componente abstracto del que heredaran los demás elementos de flujo llamado Bernoulli.

```

ABSTRACT COMPONENT Bernoulli (SET_OF(Chemical)liquido_mix)
PORTS
  IN      liquido (Mix = liquido_mix) f_in
  OUT     liquido (Mix = liquido_mix) f_out
DATA
  REAL    z_in = 0.      "elevacion respecto a la horizontal de la entrada (m)"
  REAL    z_out = 0.     "elevacion respecto a la horizontal de la salida (m)"

DECLS
  REAL hf "pérdida de carga (m de fluido)"

TOPOLOGY
  PATH f_in TO f_out

CONTINUOUS
  f_out.F = f_in.F -- condición fluido incompresible
  EXPAND (j IN liquido_mix EXCEPT setofElem(liquido_mix,1)) f_out.C[j] = f_in.C[j]
  (f_in.P * 1.e5) + z_in * f_in.Rho * g = \
  (f_out.P * 1.e5) + z_out * f_in.Rho * g + hf * f_in.Rho * g -- ecuación Bernoulli (u=cte)

END COMPONENT
  
```

A partir de este componente abstracto, se desarrolla una estructura jerárquica con los distintos elementos de flujo.

Estos componentes han sido desarrollados siguiendo una serie de suposiciones:

Fluido incompresible
La temperatura del fluido permanece constante.
Las composiciones del fluido permanecen constantes.

Una vez fijadas estas suposiciones, las únicas variables a relacionar en los modelos serán las presiones o los caudales. Por tanto, lo que establecerán los componentes de la librería de elementos de flujo es una relación entre el caudal y la presión. Así, en general, los componentes

individuales aportarán una ecuación que será de la forma:

$$W = f(\Delta P) \quad [1]$$

Los problemas pueden aparecer a la hora de despejar las incógnitas de esta ecuación. Así en el caso sencillo de un solo elemento de flujo en una línea, si conocemos por ejemplo la presión de entrada y el caudal y se necesita calcular el caudal de salida y esta variable no puede ser despejada de la ecuación [1]. El programa de cálculo dejará la ecuación como implícita e iterará sobre ese valor hasta cerrar la ecuación. Tendremos un lazo algebraico.

Como se explicó con anterioridad, los lazos algebraicos pueden ser resueltos por Ecosim, pero en nuestro caso no es interesante que aparezcan ya que la iteración que se genera para la búsqueda de soluciones hace que la simulación se vuelva algo mas lenta y puede en ocasiones generar problemas de convergencia.

Para evitar lazos algebraicos en este tipo de situaciones empleamos la sentencia INVERSE. Con una estructura del tipo:

$$x = \text{myFun}(y) \\ \text{INVERSE}(y) \text{ y } = \text{evaluateY}(x)$$

Lo que hará EcosimPro será utilizar la primera ecuación y en el caso de que la incógnita sea la que le pasamos como argumento a INVERSE, utilizará esta otra ecuación. Esto nos garantiza que no tendremos lazos algebraicos cuando intentamos despejar de la ecuación [1].

6.1. CONEXIONES ENTRE ELEMENTOS DE FLUJO

También surgen problemas matemáticos a la hora de unir varios componentes del tipo elementos de flujo como son los problemas de índice superior y los lazos algebraicos.

Estos problemas surgen también de forma natural cuando se pretenden calcular de forma "manual" algunas conexiones entre este tipo de elementos.

Si por ejemplo tenemos una conexión de tuberías en paralelo, conocemos el caudal total que circula por las dos tuberías y la presión a la entrada de la línea, debemos iterar sobre los caudales, hasta que cerremos las ecuaciones de la caída de presión en las dos líneas. Analizando el sistema de ecuaciones que tendríamos sería el que sigue:

$$W_1 = f_1(\Delta P_1) \quad [2]$$

$$W_2 = f_2(\Delta P_2) \quad [3]$$

$$W_1 + W_2 = W_T \quad [4]$$

En la primera ecuación aparecen como incógnitas la presión de salida y el caudal. En la segunda Ecuación aparecen como incógnitas la presión de salida que será igual al de la primera y el caudal que está relacionado con el de la primera ecuación mediante la ecuación tercera.

Podemos ver que tenemos un sistema acoplado.

$$\begin{matrix} W_1=f(P_2-P_1) \\ W_2=f(P_2-P_1) \\ W_T=W_1+W_2 \end{matrix} \begin{matrix} W_1 & W_2 & P_2 \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix}$$

En este caso no es posible manipular las ecuaciones de forma que a cada incógnita le corresponda una sola ecuación.

Para evitar estos problemas se ha utilizado un método que consiste en transformar una de las variables desconocidas en variable de estado de forma que esta pasa a ser calculada. De esta forma el lazo no aparece. Así expresaremos las ecuaciones que relacionan el caudal con la presión de la forma.

$$\text{Alfa} * W_1' = f(P_2 - P_1)$$

Siendo alfa una constante de tiempo que deberá ser pequeña para que la dinámica de esta ecuación sea rápida y el resultado sea lo mas parecido al de la ecuación algebraica. Por otro lado si hacemos esta constante de tiempo demasiado pequeña estamos obligando al integrador a utilizar pasos de integración muy pequeños, por lo que alfa deberá tener un valor de compromiso.

Como ejemplo de componente que aplica todas estas características tenemos una tubería.

```

COMPONENT Tubo_liq IS_A Bernouilli (BOOLEAN impl)
DATA
  tubo(m) REAL D "diámetro interior del
  tubería(m)" REAL L "longitud de la
  tubería. valor por defecto:acero (m)" REAL e = 0.046e-3 "rugosidad de la
  para el cálculo del caudal" REAL alfa = =0.01 "constante de tiempo
DECLS
  tubería (m2)" REAL S "sección transversal
  fricción" REAL f "coeficiente de
CONTINUOUS
  S = PI/4.* D**2
<eqn1> IMPL (f) f = 1./(-2.5 * log(max(((e/D)*0.27),1.e-8)))**2
EXPAND(impl==TRUE) f_in.W = (S*sqrt(max(0.,hf*(2*g)/(8*f*(L/D))))+0)*
f_in.Rho
  INVERSE (hf) hf = 8.*f*(L/D)*(((f_in.W/f_in.Rho)/S)**2)/2./g
EXPAND(impl==FALSE) alfa * f_in.W'=
(S*sqrt(max(0.,hf*(2*g)/(8*f*(L/D))))+0)*f_in.Rho - f_in.W
  f_in.T = f_out.T
END COMPONENT

```

Podemos ver como la tubería utiliza un parámetro de tipo BOOLEAN que decide el uso de una sentencia u otra utilizando la sentencia EXPAND. De esta forma podemos decidir si utilizamos la ecuación algebraica o la ecuación diferencial para resolver el problema y evitar así ciertos problemas numéricos.

La incorporación de una ecuación diferencial al modelo aporta una dificultad añadida, que son los problemas de índice.

Estos se produce cuando por ejemplo conectamos dos tuberías en serie. El caudal que circula por las dos es el mismo. De esta forma si utilizamos la ecuación diferencial para las dos tuberías, tendremos el sistema de ecuaciones:

$$\text{Alfa} * W_1' = f(P_2 - P_1) \quad [5]$$

$$\text{Alfa} * W_2' = f(P_2 - P_1) \quad [6]$$

$$W_2 = W_1 \quad [7]$$

Aparece por lo tanto una ligadura entre variables de estado y por lo tanto un problema de índice que el algoritmo resolverá creando un lazo algebraico.

A continuación vamos detallar los posibles tipos de conexiones de elementos de flujo y los problemas numéricos asociados a estas conexiones.

Unión de elementos en serie

Pueden darse distintos casos, en función de cuales sean nuestras incógnitas:

Se conoce el caudal. En ese caso, el problema es mínimo, porque conocido el caudal de entrada se puede deducir la caída de presión en las tuberías, a partir de las ecuaciones del tipo 1.

Así que si definimos el parámetro impl = TRUE, en las dos tuberías, el problema se resuelve sin necesidad de lazos.

Si ponemos uno de los parámetros impl= FALSE, el problema se resuelve también aunque incluyendo una dinámica. El problema aparece si conectamos las dos tuberías con impl = FALSE. En este caso aparece un problema de índice, ya que, como comentamos anteriormente, tenemos 2 variables de estado que, por otro lado, estamos imponiendo que son iguales.

Se conoce la presión de entrada. Si los dos parámetros son TRUE, se genera un lazo algebraico ya que no existe ninguna ecuación que le diga que la caída de presión entre los extremos es la suma de las caídas de presión y que puede calcular el flujo a partir de esa diferencia de presión, por lo que el programa itera sobre el flujo para conseguir las caídas de presión necesarias en las tuberías.

Unión de elementos en paralelo.

Al igual que en las uniones en serie, para las uniones en paralelo puede darse distintos casos, en función de cuales sean nuestras incógnitas:

Se conoce la presión de entrada: no tenemos ningún problema en ninguno de los casos, ya que las caídas de presión para las dos ramas será la misma y, conocidas las presiones en los extremos, se calcula el caudal que va por cada una de las ramas.

Se conoce el caudal: podemos hacer dos cosas; si las dos tuberías se ponen con impl = FALSE aparece un problema de índice ya que el caudal estará ligado por la ecuación [4]. Si ponemos las dos a TRUE, se nos genera un lazo con el siguiente razonamiento de cálculo: Conocido el caudal desconocemos el caudal que circula por cada una de las ramas así como la presión de entrada, así que supondremos el caudal por una de las ramas, con este caudal podemos calcular el otro y con el otro la caída de presión de las dos ramas, si es igual tenemos la solución si no seguimos iterando.

Así la forma de evitar lazos en este tipo de uniones es poner una rama como TRUE y otra como FALSE.

7. CONCLUSIONES

Como se ha podido ver a lo largo de este artículo, la tarea de desarrollo de una librería de modelos utilizando un lenguaje de modelado orientado a objetos no se limita solamente a la creación de una serie de componentes que luego se unen sin más. El modelador debe tener en cuenta varios aspectos, en primer lugar debe intentar que los componentes que crea sean lo mas generales posible, de forma que puedan ser reutilizados con facilidad, debe también prever los posibles problemas derivados de la utilización y conexión de los modelos. Así en ciertos momentos habrá que limitar la flexibilidad a la hora de reordenar las ecuaciones. En otros momentos habrá que ofrecer distintas opciones mediante el uso alternativo de unas ecuaciones u otras dentro de los componentes, de forma que se controlan los posibles problemas matemáticos en el modelo. Ecosim nos ofrece mediante ciertas sentencias la posibilidad de controlar nuestro modelo en este sentido. En este artículo se ha descrito el desarrollo de una librería con estos principios, para ello, se ha mostrado el desarrollo concreto de ciertas librerías, como la de propiedades fisicoquímicas o elementos de transporte.

REFERENCIAS

Acebes, L.F. (1996). SIMPD: Sistema Inteligente de Modelado de Procesos Dinámicos. Tesis Doctoral. Departamento de Ingeniería de Sistemas y Automática. Universidad de Valladolid, España.

ACSL. <http://www.acslsim.com>

C. de Prada, F. Acebes, R. Alves, A. Merino, S. Pelayo, A. García, A. Rueda, G. Gutiérrez & M. García. "Un simulador de alcance total para la formación de los operarios de sala de control de factorías azucareras" II Taller Iberoamericano de Informática Industrial. Salamanca. 2002.

EcosimPro. <http://www.ecosimpro.com>

Merino A., Acebes. L. F. "Modelling and simulation of the diffusion section of a beet sugar process for a plant operator training simulator" ESS`2001 conference. Marsella 2001.

L.F. Acebes, A. García , A. Merino , S. Pelayo, C. de Prada & A. Rueda "Desarrollo de una librería de modelos de unidades de proceso de la industria azucarera " Wokshop en Metodología de Modelado y Simulación de Sistemas. Barcelona 2001.

Himmelblau, David M. – Bischoff, Kenneth B. "Análisis y simulación de procesos." ED. REVERTÉ, S.A. BARCELONA. 1976.

Macías Hernández, J. – Feliu Gil, J.A. "La simulación dinámica en ingeniería de procesos". Revista Ingeniería Química. Abril 2000. Pgs.127-131.

Perry & Chilton. "Manual del Ingeniero Químico" Vol.1 y 2. Editorial McGraw (1998).

Robert C.Reid, John M.Prausnitz, Bruce E.Poling "The Properties of Gases & Liquids" McGraw-Hill 4ª Edition 1988

Roger G. E. Franks. "Modeling and simulation in chemical engineering." ED. JOHN WILEY & SONS. 1972.

Urquía A. (2000)Modelado orientado a objetos y simulación de sistemas híbridos en el ámbito del control de procesos químicos.

Tesis Doctoral. Departamento de Informática y Automática Industrial. Facultad de Ciencias. UNED.

William L. Luyben. "Process modeling, simulation and control for chemical engineers." Ed. Mc Graw-Hill. Second Edition. 1990.