

Tarea 9

Rafael Montagut, Cristian Pineda, Deyver Rivera

Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Calle 44 # 45-67. Bogotá D.C., Colombia.
Facultad de Ingeniería, Departamento de Ingeniería Química y Ambiental,
Modelación y simulación.

Enunciado

Se requiere evaluar el comportamiento de dos reactores para producción de propilenglicol a partir de óxido de propileno y agua. La información detallada del ejercicio se describe en el documento adjunto.

En Aspen Plus:

1. Realizar el análisis de sensibilidad que permita evaluar cómo cambia la conversión global del proceso cuando los volúmenes de los reactores varían.
2. Realizar una especificación de diseño, que varíe el volumen del reactor 2 entre 0.1-4m³, con el fin de que la conversión global sea del 90%, con una tolerancia de 1E-3.
3. Empleando la herramienta de optimización, realizar la minimización de la función $V_1 + V_2$, variando el volumen del reactor 1 entre 0.8-1.4m³. La especificación de diseño debe estar activa para que mediante la variación del volumen del reactor 2 se alcance la conversión deseada.

En Aspen Hysys:

1. Realizar el caso de estudio, a las condiciones descritas en el análisis de sensibilidad de Aspen Plus.
2. Empleando un ajustador, definir la conversión del 90%, a las mismas condiciones de la especificación de diseño de Aspen Plus.
3. Optimizar los dos reactores, empleando las mismas especificaciones de Aspen Plus.

En documento escrito:

1. ¿Se obtienen los mismos resultados en los dos simuladores? ¿Qué diferencias encontró?
2. ¿Cuáles son los volúmenes óptimos? ¿Es posible calcularlos teóricamente?

DESARROLLO EN ASPEN PLUS

Parte 1. Realizar el análisis de sensibilidad que permita evaluar cómo cambia la conversión global del proceso cuando los volúmenes de los reactores varían.

El diagrama del proceso en Aspen Plus se presenta en la siguiente figura:

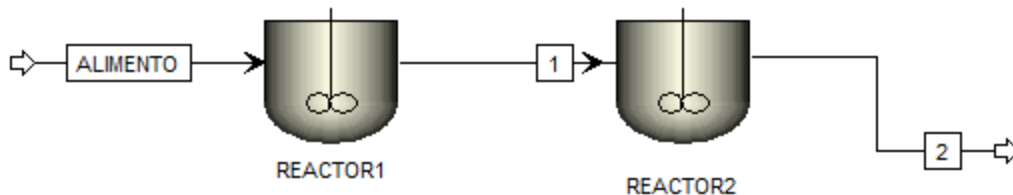


Figura 1. Diagrama del proceso en Aspen Plus.

Para realizar el análisis de sensibilidad de los volúmenes de los reactores se usa la herramienta Sensitivity. En el cual se definió como variable a tabular la conversión global del proceso:

| Column No. | Tabulated variable or expression |
|------------|----------------------------------|
| 1 | (FOX1-FOX3)*100/FOX1 |
| | |

Figura 2. Expresión para tabular en el análisis de sensibilidad.

Se varió el volumen de cada reactor entre 0,1 y 4 m³ y los resultados se encuentran a continuación:

S-1 (Sensitivity) 3D Surface Plot

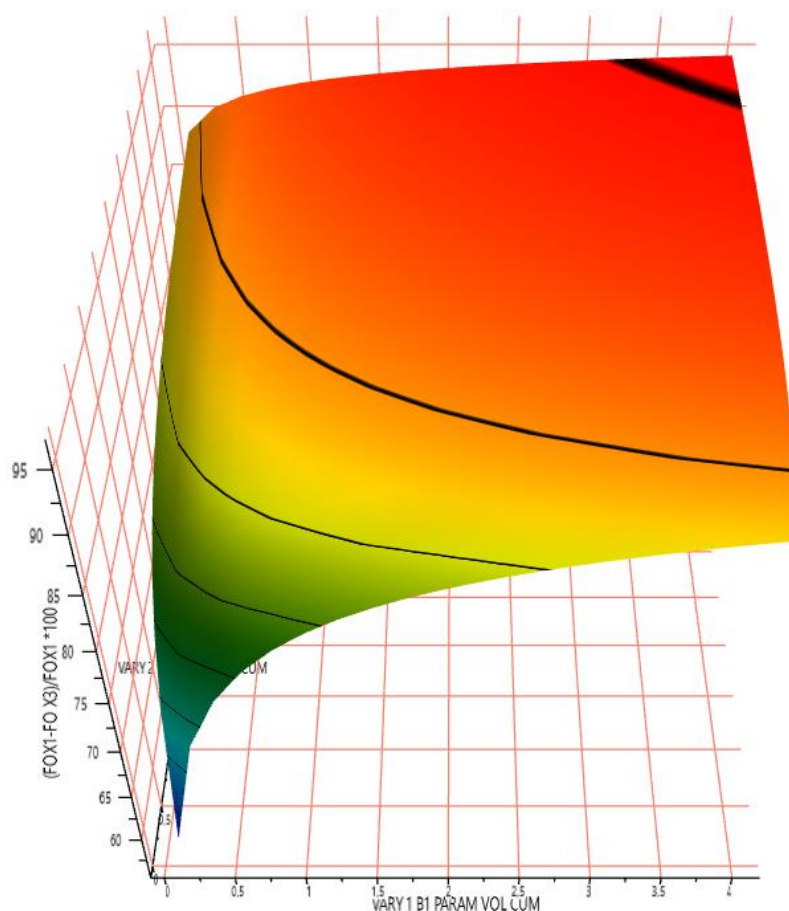


Figura 3. Variación de volúmenes – Resultados del análisis de sensibilidad.

Estos resultados también se presentan en la figura 4.

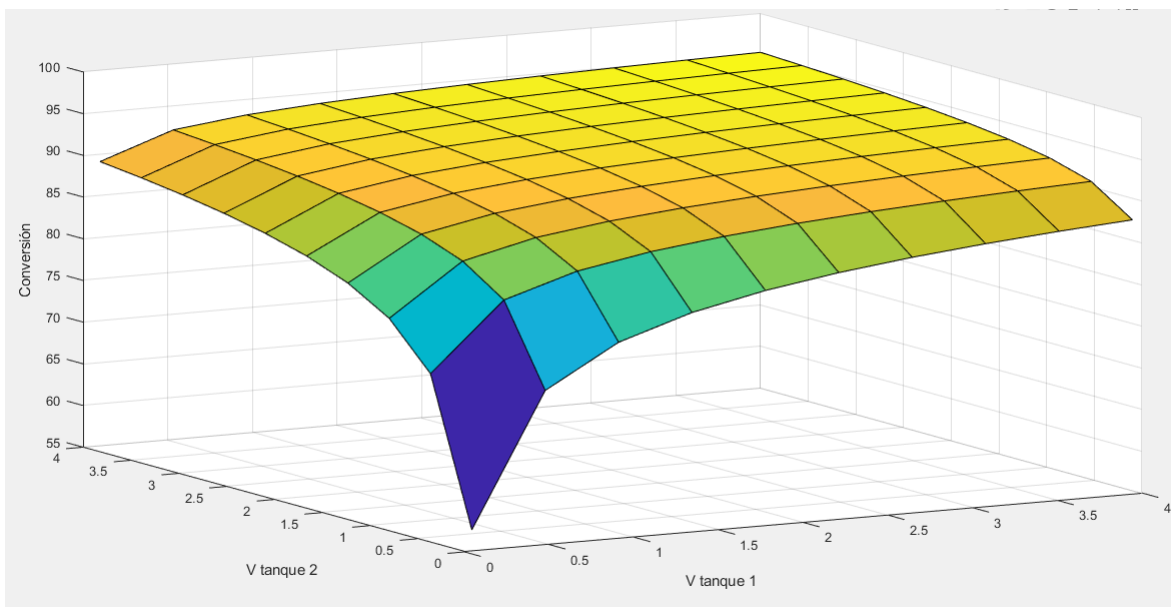


Figura 4. Variación de volúmenes – Resultados del análisis de sensibilidad.

Parte 2. Realizar una especificación de diseño, que varíe el volumen del reactor 2 entre 0.1-4m³, con el fin de que la conversión global sea del 90%, con una tolerancia de 1E-3.

A partir del diagrama de proceso planteado en la figura 1. Se realizó la especificación de diseño:

| Design specification expressions | |
|----------------------------------|------------------------|
| Spec | $(FOX1-FOX3)*100/FOX1$ |
| Target | 90 |
| Tolerance | 1E-3 |

| Manipulated variable | | Manipulated variable limits | |
|----------------------|-----------|-----------------------------|-----|
| Type | Block-Var | Lower | 0,1 |
| Block: | REACTOR2 | Upper | 4 |
| Variable: | VOL | Step size | |
| Sentence: | PARAM | Maximum step size | |

Figura 5. Especificación de diseño en Aspen Plus.

Nota: FOX1 corresponde al flujo molar del óxido de propileno en la corriente de alimento y FOX3 corresponde a este flujo en la corriente de salida del segundo reactor.

Se obtuvo de esta manera, un ajuste al volumen del segundo reactor, el cual toma el valor de 1,5535 m³ para lograr la conversión buscada. Los resultados de esta especificación se presentan en la siguiente figura:

| DS-1 - Results x Main Flowsheet x + | | | | |
|--|-------------|---------------|-------------|---------|
| Results <input checked="" type="checkbox"/> Status | | | | |
| | Variable | Initial value | Final value | Units |
| ▶ | MANIPULATED | 1 | 1,55335 | CUM |
| ▶ | FOX1 | 18,712 | 18,712 | KMOL/HR |
| ▶ | FOX3 | 2,20492 | 1,87131 | KMOL/HR |

Figura 6. Especificación de diseño en Aspen Plus - Resultados.

Parte 3. Empleando la herramienta de optimización, realizar la minimización de la función $V1+V2$, variando el volumen del reactor 1 entre 0.8-1.4m³. La especificación de diseño debe estar activa para que mediante la variación del volumen del reactor 2 se alcance la conversión deseada.

Se trabajó con la herramienta optimización variando el volumen del reactor 1 entre 0,8 y 1,4 m³, de tal manera que la suma de los volúmenes de los reactores fuera la menor posible para lograr una conversión total del 90% (la especificación de diseño que modifica el volumen del segundo reactor para lograr la conversión del 90% se mantiene activa).

Se especificó:

☒ Optimization is active

☐ Maximize ☐ Minimize

| Manipulated variable | | Manipulated variable limits | |
|----------------------|-----------|-----------------------------|---------|
| Variable | 1 | Lower | 0,8 cum |
| Type | Block-Var | Upper | 1,4 cum |
| Block: | REACTOR1 | Step size | cum |
| Variable: | VOL | Maximum step size | |

Figura 7. Optimización del volumen del reactor 1.

Con esto, se logró minimizar la suma de los volúmenes de los tanques a 2,55229 m³, donde el reactor 1 tiene un volumen de 1,07632 m³ y el reactor 2 un volumen de 1,47597 m³, para lo cual fueron necesarias 3 iteraciones (figura 8).

| | | | |
|---|--|---------|--|
| Objective function value | | 2,55229 | |
| Iteration count | | | |
| Number of iterations on last outer loop | | 2 | |
| Total number of flowsheet passes | | 8 | |
| Number of flowsheet passes on last outer loop | | 8 | |

| | | | | |
|---|------------------|---------------|-------------|-------|
| | Sampled variable | Initial value | Final value | Units |
| ▶ | VOL1 | 1 | 1,07632 | CUM |
| ▶ | VOL2 | 1,55335 | 1,47597 | CUM |

| | | | | | | |
|---|-----------|----------------------------|--------------------------|------|-----------------------------|---|
| | Iteration | OBJECT- IVE FUNCTION | KUHN- TUCKER ERROR | CMAX | LAGRANG- IAN FUNCTION | VARY 1 REACTOR1 PARAM VOL CUM |
| ▶ | 0 | 2,55335 | | | | 1 |
| ▶ | 1 | 2,55209 | 0,0325317 | 0 | 2,55209 | 1,07632 |
| ▶ | 2 | 2,55229 | 3,09025e-06 | 0 | 2,55209 | 1,07632 |

Figura 8. Optimización de la suma de volúmenes de los reactores en Aspen Plus.

DESARROLLO EN ASPEN HYSYS

Parte 1. Realizar el caso de estudio para desarrollar un análisis de sensibilidad que permita evaluar cómo cambia la conversión global del proceso cuando los volúmenes de los reactores varían.

Para realizar el análisis de sensibilidad de los volúmenes de ambos reactores se creó un caso de estudio (Case Study 1), en el cual se variaron los volúmenes de cada reactor entre 0,1 y 4 m³, cada caso con 10 pasos, con lo que se evaluaron un total de 100 casos. La configuración del caso de estudio se puede observar en la siguiente figura:

| | | | | | | | |
|------------------------|-----|------------------|-----------------|--|-------|-----------|---|
| Case Study Type | | Number of States | Number of Bases | <input checked="" type="radio"/> Unidirectional <input type="radio"/> Bidirectional | | Run | <input checked="" type="checkbox"/> Reset after run |
| Nested | | 100 | | | | | |
| Name | Tag | Current Value | Units | Start | End | Step Size | #Steps |
| Reactor1 - Tank Volume | | 1,000 | m3 | 0,1000 | 4,000 | 0,4333 | 10 |
| Reactor2 - Tank Volume | | 1,554 | m3 | 0,1000 | 4,000 | 0,4333 | 10 |

Figura 9. Variación de volúmenes – caso de estudio.

Los resultados obtenidos se presentan en la siguiente figura:

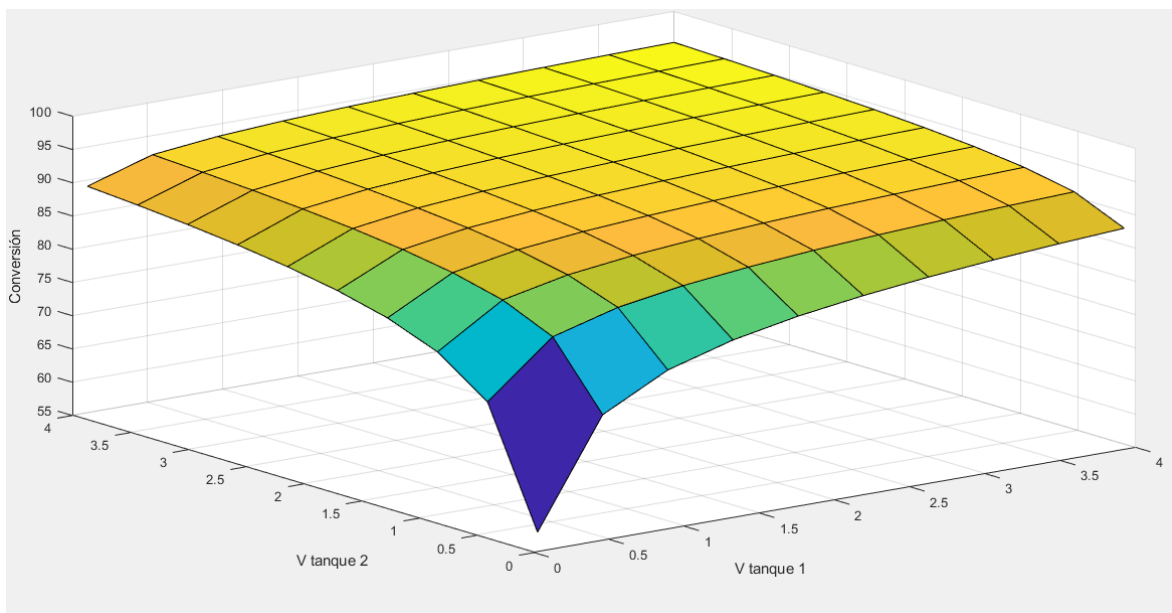


Figura 10. Variación de volúmenes – Resultados del caso de estudio.

Parte 2. Utilizando un ajustador, variar el volumen del reactor 2, con el fin de que la conversión global sea del 90%, con una tolerancia de $1\text{E}-3$.

Al utilizar el ajustador, se obtuvo el siguiente diagrama del proceso en Hysys:

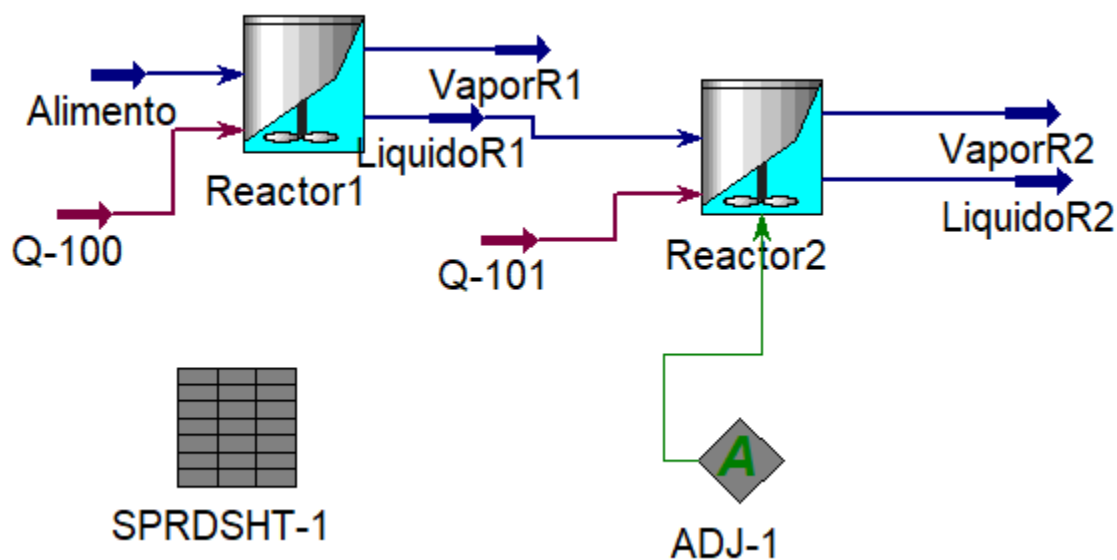


Figura 11. Diagrama del proceso en Hysys con el ajustador.

Luego de 6 iteraciones y con un error final de $-3,299\text{e}-4$ se obtuvo una conversión total de 90,00% con un volumen de $1,554 \text{ m}^3$ en el segundo reactor.

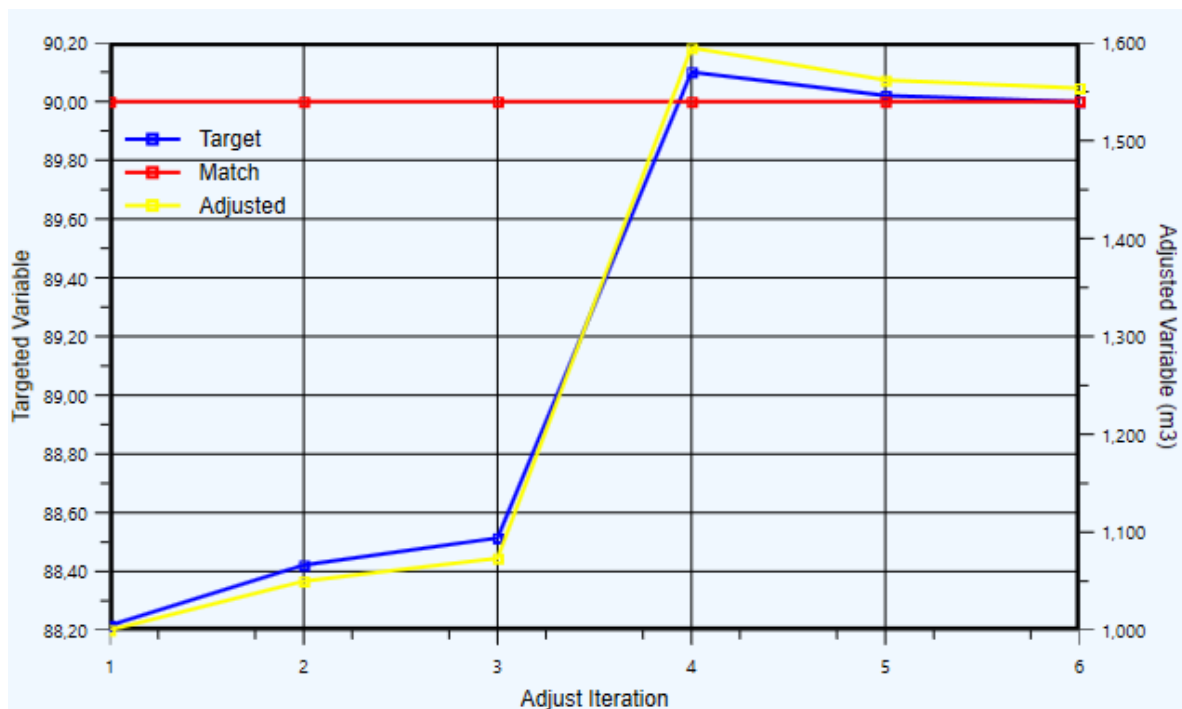


Figura 12. Convergencia del ajustador en Aspen Hysys.

Parte 3. Empleando la herramienta de optimización, realizar la minimización de la función $V1+V2$, variando el volumen del reactor 1 entre 0.8-1.4m³. La especificación de diseño debe estar activa para que mediante la variación del volumen del reactor 2 se alcance la conversión deseada.

Se trabajó con la herramienta optimización variando el volumen del reactor1 entre 0,8 y 1,4 m³, de tal manera que la suma de los volúmenes de los reactores fuera la menor posible para lograr una conversión total del 90%.

Utilizando el modelo SQP para la optimización, se logró minimizar la suma de los volúmenes de los tanques a 2,5536 m³, donde el reactor 1 tiene un volumen de 0,9975 m³ y el reactor 2 un volumen de 1,556 m³.

Este resultado se puede apreciar en la siguiente figura:

| Optimizer Monitor Information | | | |
|-------------------------------|------------------|--------------------|------------------|
| Iteration | Cum. Func. Eval. | Objective Function | Tank Volume [m3] |
| 4,00000 | 39,0000 | 2,55358 | 0,997501 |
| 3,00000 | 27,0000 | 2,55366 | 0,997516 |
| 2,00000 | 15,0000 | 2,55376 | 0,997539 |
| 1,00000 | 3,00000 | 2,55395 | 0,997613 |

Figura 13. Optimización de la suma de volúmenes de los reactores en Aspen Hysys.

PREGUNTAS PROPUESTAS

1. ¿Se obtienen los mismos resultados en los dos simuladores? ¿Qué diferencias encontró?

Si bien los resultados obtenidos son bastante similares, estos no son iguales. Para la primera parte de los procedimientos realizados, en la cual se cambian los volúmenes de los reactores con el fin de observar qué tanto se ve afectada la conversión, se muestra que para el caso de Hysys hay una mayor conversión comparada con Aspen Plus para los mismos volúmenes de cada uno de los reactores, sin embargo, como se mencionó anteriormente, las variaciones no son muy significativas, ya que la diferencia de los valores de conversión en general no es más de 1%.

En la primera parte (sensibilidad y caso de estudio), fueron los máximos volúmenes utilizados para hallar la conversión (4 m³ para ambos casos) los que arrojaron los valores más altos de esta. Sin embargo, como se observa en las figuras 3, 4 y 10, la conversión no aumenta significativamente a partir de 1 m³ para cada uno de los reactores aproximadamente, a pesar de ello, este ejercicio no era de optimización, sino de observar cómo cambiaba la conversión en función de los volúmenes de los reactores.

Para la segunda parte, en la que se usa el ajustador para cambiar el volumen del segundo reactor con el objetivo de lograr la conversión del 90 %, se observa que en Hysys tiene un volumen ligeramente mayor comparado con el de Aspen Plus (1,554 m³ y 1,5535 m³ respectivamente), sin embargo, la diferencia es por una milésima aproximadamente, por lo tanto, se considera que no es significativa.

Por último, la tercera parte consiste en emplear una herramienta de optimización con el fin de minimizar la suma de los volúmenes de los reactores, manteniendo el objetivo de que el proceso debe mantener la conversión global del 90 %. Para el caso del Hysys la suma de los volúmenes dio ligeramente mayor a la obtenida en Aspen Plus, sin embargo, como sucedió en la segunda parte, la diferencia es de milésimas, por lo tanto, se considera que la disparidad no es significativa nuevamente.

2. ¿Cuáles son los volúmenes óptimos? ¿Es posible calcularlos teóricamente?

En el apartado de optimización de la suma de volúmenes se encontró que en Aspen Plus el reactor 1 tiene un volumen de 1,07632 m³ y el reactor 2 un volumen de 1,47597 m³, mientras que en Hysys el reactor 1 tiene un volumen de 0,9975 m³ y el reactor 2 un volumen de 1,556 m³. Cabe resaltar que el volumen en Aspen plus para el reactor 1 está sobre el valor de 1 m³, y para el reactor 2 esta debajo del valor de 1.5 m³, caso contrario ocurre en Hysys, donde el valor del reactor 1 está debajo el valor de 1 m³, y para el reactor 2 esta sobre el valor de 1.5 m³. Sin embargo, la suma de los volúmenes es lo que determina cual programa logró minimizar más los volúmenes empleados, siendo este Aspen Plus, a pesar de ello, la diferencia de la suma entre ambos programas es de milésimas.

En principio, el cálculo de los volúmenes de forma teórica es el camino que toman los simuladores para hacer la optimización, por lo que este cálculo, aunque pueda ser tedioso, se puede realizar a partir un balance de materia en cada uno de los reactores CSTR:

Para el primer reactor tenemos

$$F_{A0} - F_{A1} + r_A|_{x_{A1}} V_1 = 0$$
$$F_{A0}(1 - x_{A1}) + r_A|_{x_{A1}} V_1 = 0$$

De igual forma, vemos que para el segundo reactor encontramos que

$$F_{A1} - F_{A2} + r_A|_{x_{A2}} V_2 = 0$$

$$F_{A0}(1 - x_{A1}) - F_{A0}(1 - x_{A2}) + r_A|_{x_{A1}} V_2 = 0$$

$$F_{A0}(x_{A2} - x_{A1}) + r_A|_{x_{A2}} V_2 = 0$$

Despejando el volumen de cada uno de los reactores, podemos ver que el volumen total del arreglo quedaría expresado como

$$V_{arreglo} = V_1 + V_2 = \frac{F_{A0}(1 - x_{A1})}{-r_A|_{x_{A1}}} + \frac{F_{A0}(x_{A2} - x_{A1})}{-r_A|_{x_{A2}}}$$

Cabe resaltar que $x_{A2} = 0.9$ y que se conocerían los valores asociados a los flujos de entrada que pueden ser necesarios para el cálculo de F_{A0} o concentraciones de iniciales para cálculos cinéticos (r_A), razón por la cual se tiene que el volumen del arreglo es función de la conversión del primer reactor x_{A1} . Es decir que, para optimizar el problema, basta con determinar los valores óptimos de la conversión del reactor 1 para encontrar los volúmenes, a diferencia del procedimiento elaborado iterativamente en el software que variaba los volúmenes de los reactores.