

Modelización y Simulación en Ingeniería Química.

Contenido

- Introducción al modelado y simulación.
- Modelado de sistemas físicos.
- Simulación estacionaria.
- Simulación dinámica.
- Sistemas de parámetros distribuidos / sistemas híbridos.

Tema 1: Introducción a la modelización y simulación de procesos.

Indice

- 1. Qué es un sistema.
- 2. Qué es un modelo, tipos de modelos.
- 3. Qué es simulación, fases y tipos de simulación.

system

[Búsqueda avanzada](#)
[Preferencias](#)Buscar en: ☒ la Web ☐ páginas en español ☐ páginas de España

La Web

Resultados 1 - 10 de aproximadamente 1.930.000.000 de system.

[Home](#)[Browse](#)[Search](#)[My Settings](#)[Alerts](#)[Help](#)**Quick Search** Title, abstract, keywords [? search tips](#)Journal/book title **921,710 articles found for: TITLE-ABS-KEY(system)**[Save Search](#)

1. Qué es un sistema

DEFINICIÓN: (B. Ziegler): “A system is a potential source of data.”

DEFINICIÓN: Es un conjunto de *componentes*, partes u objetos, que interactúan unos con otros dentro de unos límites para producir un determinado patrón de comportamiento.

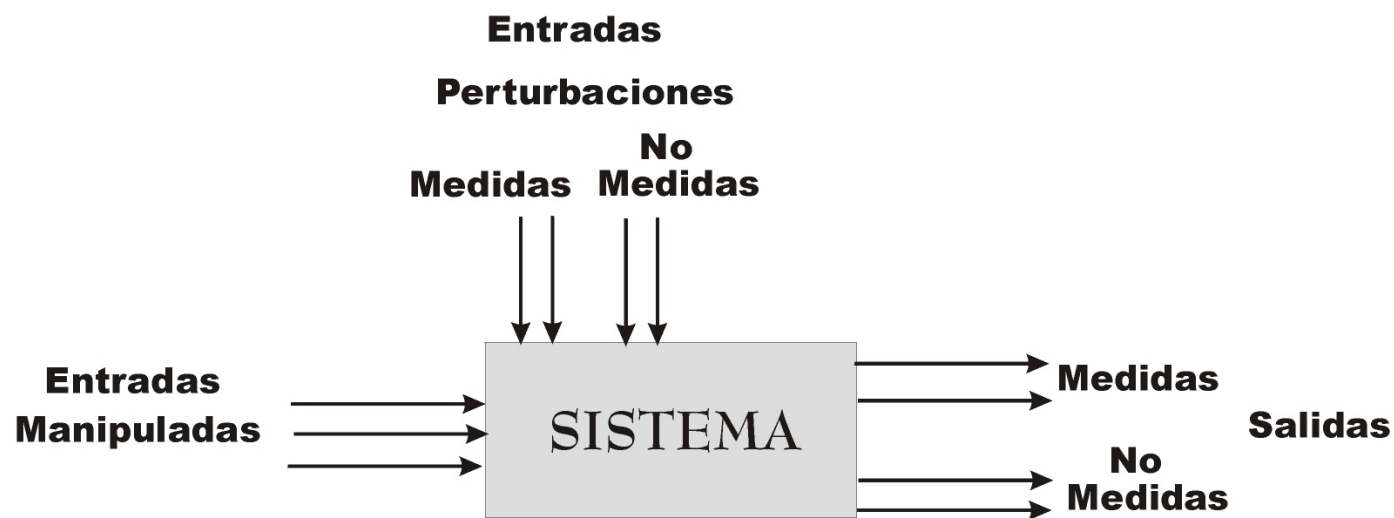
DEFINICIÓN: “A system is defined by its *boundary*.”

DEFINICIÓN: (B. Gaines): “A system is what is distinguished as a system.”

La definición completa de sistema mediante su contorno implica tener en cuenta:

- Especificación de la frontera
- Los canales del contorno a través de los cuales el sistema interacciona con el entorno (entradas y salidas).
- La estructura interna y el comportamiento del sistema.

El sistema y su entorno



TIPOS DE VARIABLES

○ **Entrada:** Denotan el efecto del entorno sobre el proceso

Manipuladas: Sus valores se pueden ajustar libremente por un operador o una acción de control.

Perturbaciones: Sus valores no son ajustables.

○ **Salida:** Denotan el efecto del proceso sobre el entorno

Medidas: Sus valores se conocen por los sistemas de medida.

No medidas: Sus valores no se pueden medir de forma directa.

○ **Internas:** Son variables propias del sistema.

De estado: Definen el estado del sistema y necesitan conocer la historia del mismo para ser definidas. Es el conjunto mínimo de variables internas que define el estado del sistema.

TIPOS DE SISTEMA (relación entorno)

○ **Aislado**: No intercambia ni materia ni energía con el entorno.

Reactor batch adiabático

○ **Cerrado**: No intercambia materia pero sí energía con el entorno.

Reactor batch no adiabático

○ **Abierto**: Intercambia materia y energía con el entorno.

Reactor CSTR

models

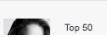
Google [Búsqueda avanzada](#)
[Preferencias](#)
 Buscar en: ☒ la Web ☐ páginas en español ☐ páginas de España


La Web

Resultados 1 - 10 de aproximadamente 1.010.000.000 de model.

models.com [Member Login](#) | [Signup \(it's FREE!\)](#)

[Top Rankings](#) [Of The Minute](#) [MDXtra](#) [Feed](#) [Ones 2 Watch](#) [Model Of The Week](#) [Member Spotlight](#) [Agencies](#) [Member Search](#)




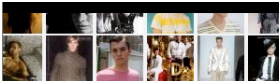
 **Of The Minute** latest modeling news **Daily Feed**

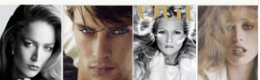

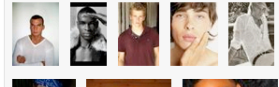


[Home](#) [Browse](#) [Search](#) [My Settings](#) [Alerts](#) [Help](#)

Quick Search Title, abstract, keywords
 ? search tips Journal/book title

815,329 articles found for: TITLE-ABS-KEY(model)
[Save Search](#)

 **Model of the Week: Dominique**  **Cole in a dress**  **Arriba Aruba!** 

Top Rankings  **Model Of The Week USA**  **Members - Contacted by an Agency** 

Models, models, models...

Modeling hierarchy

Model integration

Inspired models

Logical models

Multiscale
modeling

Model reduction

Goals in models

Model language

Empirical models

Model assumptions

Minimal models

Model use

Qualitative models

Functional models

Model nature

Model implementation

why models

- “I have been, and remain, entirely committed to the idea that modeling is the essence of science and the habitat of all epistemology.”

- Robert Rosen, Essays on
Life Itself

2. Qué es un modelo. Tipos.

MODELO (*M.Minsky*): Un modelo M para un sistema S y un experimento E , es cualquier cosa a la que se le puede aplicar E en orden a obtener respuestas a preguntas que hagamos sobre S .

MODELO: Es una representación simplificada de un sistema y está formado por un conjunto de variables y por un conjunto de relaciones entre ellas. Con el se pretende mejorar nuestra habilidad de entender, explicar, cambiar, preservar, predecir y posiblemente controlar el comportamiento del sistema representado.

MODELO: Actúa como el objeto real modelado en cuanto a la imitación de ciertas características, pero su uso evita experimentos reales que pueden ser caros, peligrosos, lentos o físicamente imposibles.

Un modelo es:

- La representación formal del sistema
- Las suposiciones que definen el contexto en el que el modelo es aplicado.

¿Predice el modelo los aspectos del comportamiento del sistema que nos interesan con suficiente exactitud para nuestra aplicación?

- El modelo sólo es válido en el contexto y bajo las suposiciones con las que ha sido desarrollado.
- La extrapolación del modelo fuera del contexto es muy peligrosa.
- Se debe verificar el modelo contra el sistema real siempre que sea posible.
- Existen muchos modelos para un mismo sistema, cada uno representa una vista diferente del sistema. Es importante seleccionar un buen nivel de abstracción.

CLASIFICACIÓN

☞ **FÍSICOS:** Caros, difíciles de construir y usar.

Estáticos: Maquetas,..

Dinámicos:

-Analógicos: Circuitos eléctricos

-Prototipos: Plantas piloto

☞ **MENTALES:** Heurísticos, intuitivos.

Son imprecisos y de difícil comunicación

☞ **MATEMÁTICOS:** (Cuantitativos):

Estáticos: No se considera la variable tiempo.

Dinámicos: El tiempo es una variable del sistema.

-Analíticos

-Numéricos

☞ **SIMBÓLICOS:**

Lingüísticos: Descripción de hechos

Cualitativos

Basados en reglas.

MODELOS MATEMÁTICOS (CUANTITATIVOS)

Traslación de las relaciones entre variables físicas a estructuras matemáticas.

Estático vs. Dinámico: Transitorios

Agrupados vs. Distribuidos: Descripción espacial

Determinísticos vs. Estocásticos: Aleatoriedad

Contínuos vs. Discretos: Muestreos o eventos

Lineal vs. No lineal: Comportamiento cualitativo

Caja Negra vs. Espacio de Estados: Comportamiento interno

Tiempo vs. Frecuencia: Escala de tiempo

MODELOS MATEMÁTICOS (CUANTITATIVOS)

Traslación de las relaciones entre variables físicas a estructuras matemáticas.

Estático vs. Dinámico: Transitorios

Agrupados vs. Distribuidos: Descripción espacial

Determinísticos vs. Estocásticos: Ruido

Contínuos vs. Discretos: Muestreos o eventos

Lineal vs. No lineal: Comportamiento cualitativo

Caja Negra vs. Espacio de Estados: Comportamiento interno

Tiempo vs. Frecuencia: Escala de tiempo

MODELOS MATEMÁTICOS (CUANTITATIVOS)

Ecuaciones que resultan de los diferentes modelos:

	Estático	Dinámico
Agrupados	AE	ODE
Distribuidos	PDE Elíptica	PDE Parabólica
Determinísticos	NLAE	ODEs/PDE
Estocásticos	AE y DE	ODEs estocásticas y DE
Contínuos	AE	ODE
Discretos	DE	DE
Lineal	LAE	LODE
No lineal	NLAE	NLODE

AE: Ecuaciones algebraicas. **LAE:** AEs lineales. **NLAE:** AEs no lineales.

ODE: Ecuaciones diferenciales ordinarias. **LODE:** ODEs lineales.

NLODE: ODES no lineales.

DE: Ecuaciones en diferencias.

PDE: Ecuaciones en derivadas parciales.

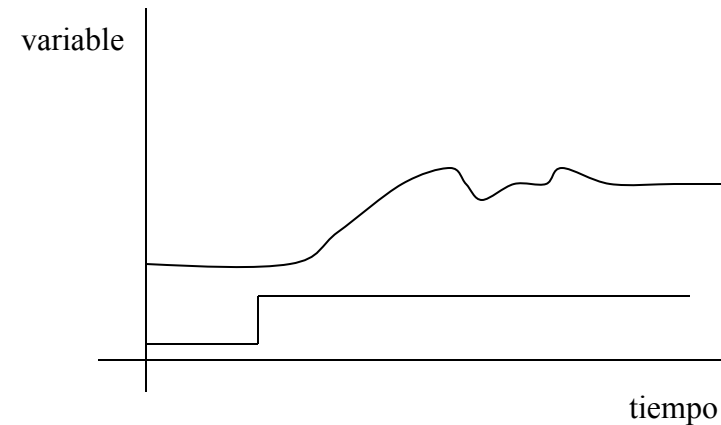
Estático vs. dinámico

Modelo estático:

Relaciona las variables en un estado de equilibrio

Modelo dinámico:

Relaciona las variables a lo largo del tiempo



Agrupado vs. distribuido

Agrupado: Considera que todas las fuerzas están aplicadas en el centro de gravedad y que el sistema se puede “reducir” a dicho punto. No se considera el espacio.

Distribuido: Se considera el espacio y por tanto el sistema hay que analizarlo descomponiendolo en elementos. Está distribuido en el espacio.

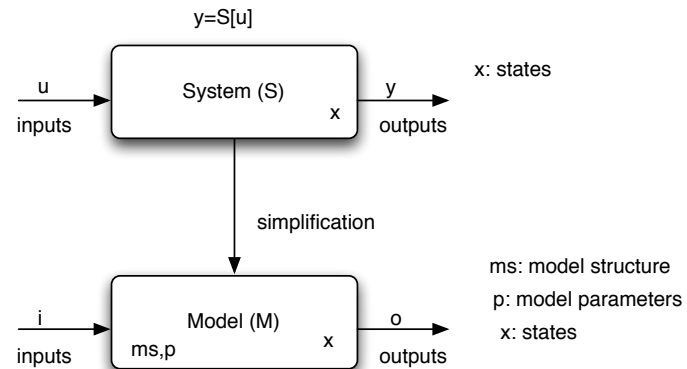
Caja negra vs. espacio de estados

Caja Negra: El modelo se ha hallado mediante identificación a través de unos datos empíricos. No se conoce el porqué.

Espacio de estados: El modelo está basado en un conocimiento del sistema, en leyes físicas y químicas que rigen su comportamiento..

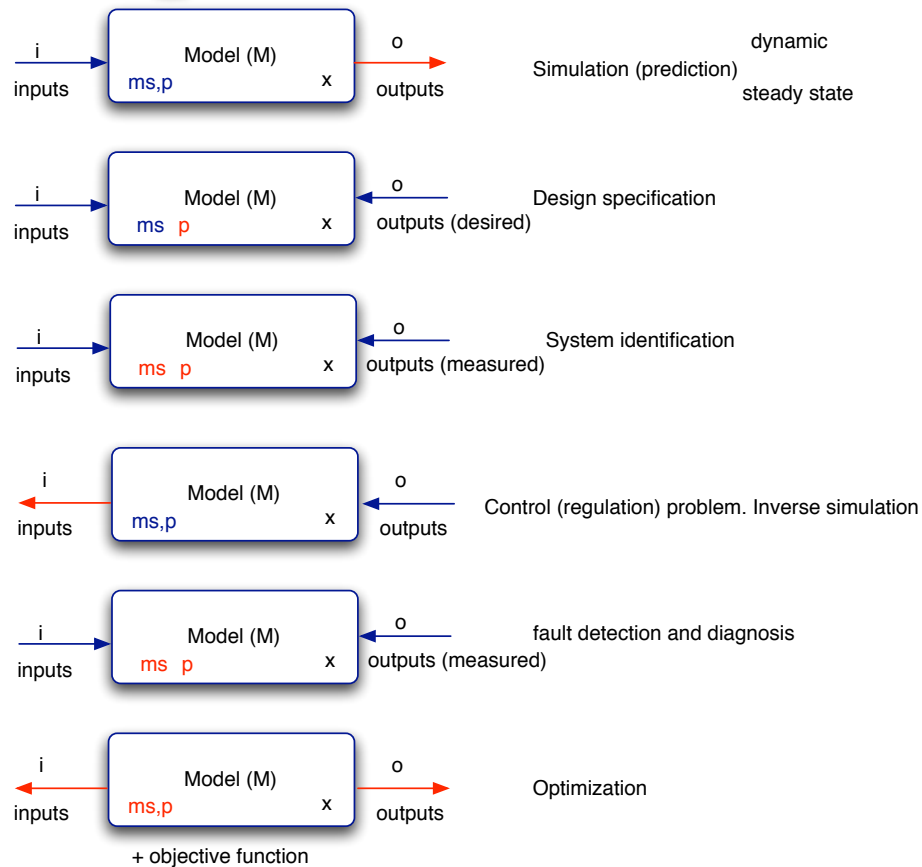
MODOS DE OPERACIÓN DE UN MODELO

THE MODELLING GOAL



RESULT
DATA

GOAL (use)



QUÉ DEBE TENER UN BUEN MODELO

PRECISIÓN

Ni mucha ni poca
Cuantitativa y cualitativa

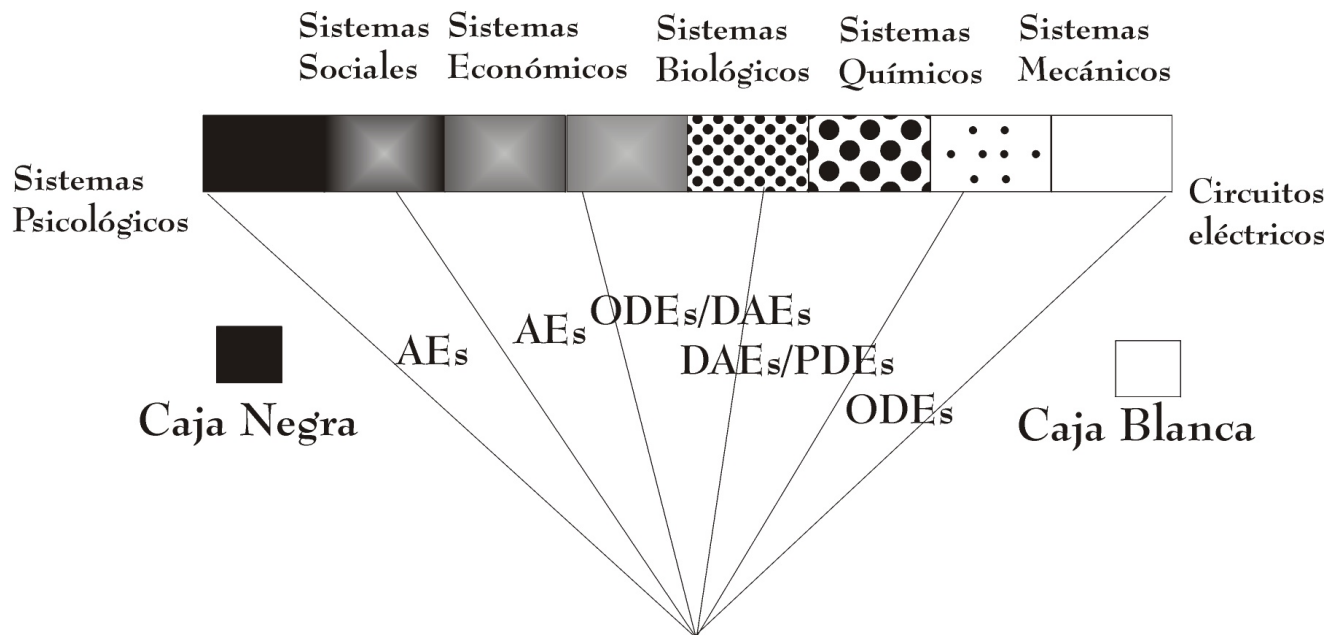
VALIDEZ

Rango de validez
Condiciones de operación
Condiciones transitorias
Propiedades internas

COMPLEJIDAD

Simple (macroscópico)
Detallado (microscópico)

ESPECTRO DEL MODELADO Y LA SIMULACIÓN



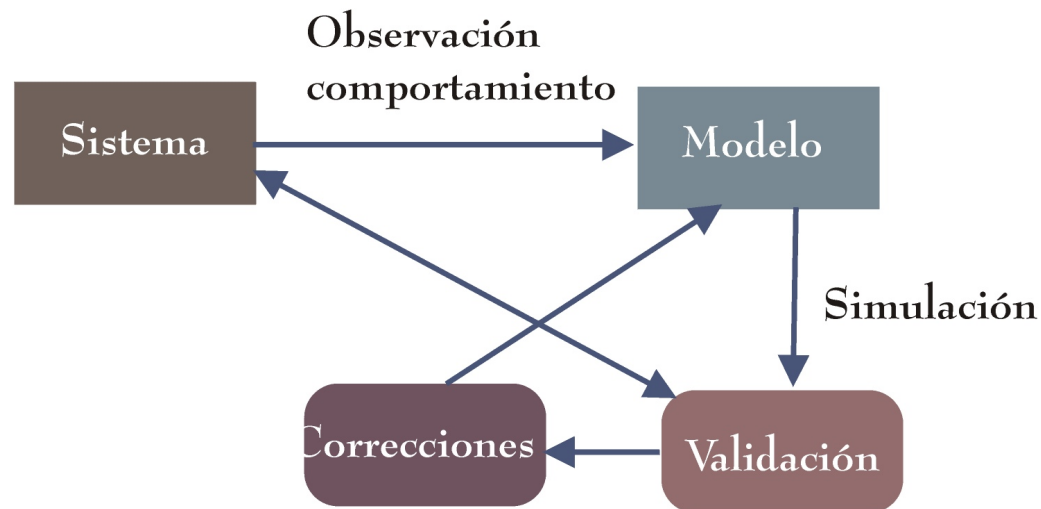
3. Qué es la simulación. Fases y tipos

DEFINICIÓN: (*g.Korn*): “Una simulación es un experimento realizado sobre un modelo.”

DEFINICIÓN: Es la representación de un sistema que intenta mantener las mismas características que el objeto simulado, descrito por el modelo.

DEFINICIÓN: Es la técnica de construir y ejecutar un modelo de un sistema real con el fin de estudiar su comportamiento sin intervenir en el ambiente del sistema real.

FASES EN LA SIMULACIÓN



TIPOS DE SIMULADORES

Régimen:

Estáticos (régimen permanente o estacionario)

Dinámicos (regimen transitorio)

Arquitectura:

Secuenciales-modulares

Orientados a ecuaciones

Modulares simultáneos

USO DE LOS SIMULADORES ESTÁTICOS.

- Resolución rigurosa de las ecuaciones de balance de materia y energía para el conjunto de operaciones unitarias de un proceso continuo.
- Proporciona datos para el dimensionamiento de equipos
- Reducción de la inversión por diseño más ajustado
- Mejora de la calidad
- Menos ensayos en planta piloto: Ahorro de tiempo y dinero
- Eliminación de cálculos repetitivos y errores
- Ensayo sin riesgo de nuevas ideas de operación
- Mejor entendimiento del proceso
- Escalado de procesos
- Operación fuera de diseño
- Optimización de planta y diseño
- Cuellos de botella, revamping, mejora en la producción

USO DE SIMULADORES DINÁMICOS

Operación:

- Respuesta de procesos continuos ante perturbaciones
- Ajuste de controladores
- Maniobras y desviaciones anormales en el proceso, para estudios de seguridad y de emisiones
- Análisis de operabilidad y riesgo
- Validación de procedimientos de emergencia
- Entrenamiento de operadores

Diseño:

- Sistema de control y controlabilidad
- Procedimientos de puesta en marcha y parada
- Procesos discontinuos