

APLICACIONES DEL LENGUAJE DE SIMULACION SIAL/72 EN INGENIERIA QUIMICA

Por P.J. Hernández Ariznavarreta. Dpto de Ingeniería Química de la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Complutense. L. Bengochea Martínez. Centro de Cálculo de la Universidad Complutense

1. INTRODUCCION

La simulación, que podemos definir como el estudio de un sistema mediante el manejo de su modelo matemático, resulta de gran interés en todas las ramas técnicas como en la Ingeniería Mecánica, de Telecomunicaciones y, también desde luego, en la Ingeniería Química.

Se puede decir que la simulación es aplicable a todos los campos de la Ingeniería Química desde la Investigación y Desarrollo hasta la operación industrial. A nivel de investigación es muy útil, por ejemplo, en el estudio de cinéticas y mecanismos de las reacciones. Si se dispone de curvas experimentales de las concentraciones de los reactantes iniciales, de los productos intermedios y de los productos finales, puede simularse cualquier mecanismo propuesto. Ajustando los parámetros del modelo pueden variarse las constantes de velocidad hasta que el resultado de la simulación coincida con los datos experimentales. (En el Ejemplo 2 que se presenta al final se muestra una aplicación sencilla del lenguaje SIAL a la simulación de modelos cinéticos).

También a nivel de diseño y operación la simulación permite el estudio de la puesta en marcha o paradas de plantas químicas así como de la estabilidad de sistemas en condiciones extremas que no se podrían estudiar de una manera suficiente en el sistema real.

2. DESARROLLO DE LOS PROGRAMAS DE SIMULACION

Los primeros intentos para la simulación de sistemas químicos se hicieron a comienzos de la década de los 50 empleando ordenadores analógicos ya que los lenguajes existentes para los digitales no estaban aún suficientemente desarrollados.

La simulación mediante el ordenador digital se hizo posible con la aparición de lenguajes de alto nivel, como el FORTRAN y el ALGOL, y en especial con los lenguajes de programación desarrollados específicamente para la simulación.

Los programas digitales de simulación se pueden dividir en tres categorías:



- Lenguajes de Simulación continua: como el MIDAS, PACTOLUS y SIAL/72 para sistemas continuos, es decir, descritos por ecuaciones diferenciales y algebraicas.
- Lenguajes Especificos para aplicaciones muy concretas como es el ASPEN dirigido hacia el cálculo de balances de materia y energía alrededor de procesos químicos complicados. Programas aplicables en otros campos ingenieriles incluyen el BLODIB y ECAP para el análisis y diseño de circuitos eléctricos y DYANA para estudios mecánicos.
- Lenguajes de Simulación discreta como el GPSS aplicables a sistemas caracterizados por la aparición de sucesos aislados en diferentes tiempos, como por ejemplo, en problemas de suministro de materias primas, etc.

3. LENGUAJE SIAL/72

El SIAL/72 es un lenguaje de simulación analógico-digital desarrollado inicialmente en la E.T.S.Ingeniería de Telecomunicaciones de Madrid en 1972. Más recientemente, en 1981, en el Departamento de Ingeniería Química de la Facultad de Químicas de Madrid se ha posibilitado la salida gráfica de los resultados a través del trazador de curvas CALCOMP 563.

El SIAL/72 está compuesto por diferentes subrutinas en FORTRAN IV estableciéndose la secuencia de operaciones en forma de bloques funcionales similares a los existentes en los ordenadores analógicos. En la Tabla I se indican algunos de los bloques constituyentes del SIAL/72.

TABLA I

BLOQUES DEL SIAL/72

<u>GENERADORES DE SEÑALES</u>	<u>BLOQUES FUNCIONALES</u>	<u>BLOQUES ARITMETICOS</u>	<u>BLOQUE LOGICOS</u>
Escalon	Func. trig.	Sumador	OR
Rampa	Exponencial	Multiplicador	AND
Dientes	Logaritmos	Potenciación	NOR
Sierra	Función	División	NAND
Onda cuad.	Gamma y	Raiz cuadr.	NOT
Sinusoide	de error	Valor abs.	Flip-Flop
Impulsos	Zona muerta	Signo, mod.	Comparador
Ruido	Histéresis	Máximo	Cuantific.
Retardo	Generación de func. arbitr.	Mínimo	
		Derivador	
		INTEGRADOR	

La descripción de todos los bloques del SIAL/72 así como las tarjetas de control necesarias para su empleo se encuentran en el manual de utilización que está disponible en este Centro.

Por tratarse de un lenguaje digital presenta la ventaja de no requerir cambio de escala como en los métodos analógicos, es fácil de manejar a la vez que es extremadamente sencillo de uso.

4. DESCRIPCION DE UN PROGRAMA EN SIAL/72

Todo programa SIAL está formado por las siguientes entidades:

- Título
- Descripción de bloques
- DATOS

La sentencia TITULO indica la clase de problema de que trata dada su relación con los precedentes, así como su título.

Su forma general es:

TITULO Ⓢ literal hasta 120 caracteres Ⓢ

Las sentencias de descripción de BLOQUES constan de las siguientes subentidades en este orden:

- Delimitador de Bloque (signo *). Indica que comienza un nuevo bloque.
- Número de bloque (Número entero, sin punto decimal).
- Código de Bloque. Uno de los 56 códigos posibles.
- Entradas y Parámetros. Las entradas son números enteros, sin punto decimal, en número de cero a cuatro. Los parámetros, también de cero a cuatro, son números con punto decimal o flotante.

Las entradas de un bloque indican las conexiones del mismo con los demás bloques del diagrama, como éstos están numerados, es suficiente especificar los números de los bloques de donde proceden las entradas de cada bloque para que el diagrama quede unívocamente determinado.

La sentencia DATOS comienza con esta palabra seguida en cualquier orden de los datos siguientes:

DELTA seguido de un número real (un valor) indica qué valor debe tomar el intervalo elemental de integración.

TPOMAX seguido de un valor, indica el tiempo final del problema.

INTIMP seguido de un valor, indica el intervalo de

impresión de los resultados.

IMPRM seguido de uno a dieciocho números enteros, indica cuáles son los bloques cuya salida impresa se desea obtener en los resultados.

RECT, TRAPZ, ADAMS para escoger entre uno de estos métodos de integración.

Con la palabra FIN termina la entrada de datos.

En cuanto a la Salida de Resultados en el Sial/72 se puede hacer tanto en forma numérica como gráfica.

La salida numérica, a su vez, puede presentarse en dos formatos diferentes: si el número de variables a imprimir es menor o igual que ocho, los resultados aparecen en forma de tabla de valores, mientras que si es mayor que ocho los resultados se escriben en filas, empezando con el tiempo y seguido por cuatro bloques en cada línea. En cualquier caso, antes de los resultados del problema se imprime el listado del mismo.

La salida gráfica de los resultados se puede hacer a través del PLOTTER mediante subprogramas en FORTRAN IV como se muestra en el Ejemplo 2.

5. EMPLEO DEL SIAL/72

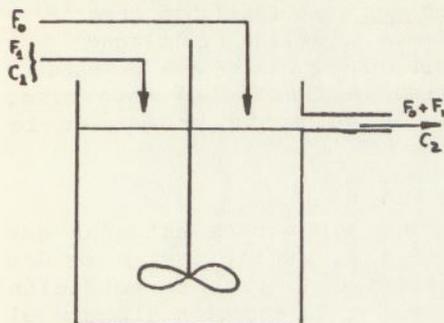
Etapa previa para la resolución de un problema con el SIAL/72 es la deducción de las ecuaciones representativas del modelo como si se tratase de la resolución analítica del problema. Esto incluye la especificación de las condiciones de contorno y todas las constantes numéricas, así como la conversión de todas las variables en unidades consistentes. Una vez realizada la descripción matemática del problema se construye un diagrama de bloques, mostrando todas las operaciones matemáticas y lógicas que se deben realizar así como el flujo de información. Usando este diagrama de bloques, se construye un programa que identifica los bloques que van a ser utilizados así como las entradas de cada uno.

Como muestra de las aplicaciones del SIAL/72 vamos a pasar revista a dos ejemplos muy sencillos que permitirán tener una idea de las posibilidades y sencillez de este lenguaje. (Para más detalles sobre dicho lenguaje se debe consultar el Manual de Uso del SIAL/72).

Ejemplo 1:

Una solución de 3 gr/l de un compuesto A y 10 m³/h de caudal se mezcla con un caudal de 20 m³/h de agua en un tanque con rebosadero de 100 m³ de capacidad. El tanque está agitado y se supone que la mezcla es instantánea. Si se da una reacción química irreversible de segundo orden con una constante $k=0.2$ l/g²h calcular la concentración a la salida en función del tiempo, si la

concentración de entrada pasa, para un tiempo de 1 hora, bruscamente de 5 gr/l a 20 gr/l?.



Mediante un balance del componente A se llega fácilmente a:

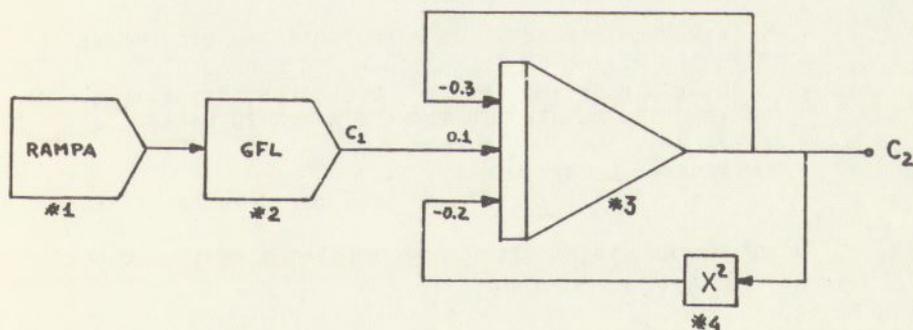
$$F_1 C_1 - (F_0 + F_1) C_2 - K C_2 V = V dC_2 / dt \quad [1]$$

y sustituyendo los valores numéricos se llega a:

$$\frac{dC_2}{dt} = 0.1 C_1 - 0.3 C_2 - 0.2 C_2^2$$

$$\text{y } C_2(0) = 1.0 \text{ gr/l} \quad [2]$$

Con lo que el diagrama de bloques representativo de dicho problema resulta ser:



y el listado del programa SIAL 72 correspondiente:

```
TITULO @ EJEMPLO SIAL/72 @ TANQUE
*1 RAMPA 0.
*2 GFL 1
    0.      5.
    1.      5.
    1.00001 20.
    50.     20.
*3 INTEGR 2 3 4 1. 0.1 -0.3 -0.2
*4 POTN 3 2.
DATOS DELTA 0.01 INTIMP 0.5 TPCMAX 10. IMPRIM 2 3 FIN
ALTO
```

Tras las fichas de control y el título, se ordenan las tarjetas de definición de bloques:

*1 RAMPA 0. define un generador de rampa, con parámetro 0., es decir comenzando en $t=0.$, con lo que su salida coincide con el valor del tiempo ya que la pendiente de la rampa es la unidad.

* 2 GFL 1

0. 5.
1. 5.
1.000001 20.
50. 20.

es un generador de funciones que interpola de forma lineal entre los valores x e y y siendo en este caso $x=t$ ya que utiliza como entrada la salida del bloque rampa que es el tiempo. Se puede

comprobar que tal y como está definida la función en este caso, corresponde a las condiciones de un salto brusco de la concentración de entrada.

* 3 INTEGR 2 3 4 1. 0.1 -0.3 -0.2

define un bloque integrador-sumador, que posee tres entradas que son la salidas de los bloques 2, 3 y 4, multiplicadas por los parámetros 0.1, -0.3 y -0.2. El parámetro 1. fija la condición inicial con lo que este bloque resuelve la ecuación diferencial (2).

* 4 POTN 3 2.

calcula el cuadrado de la entrada, salida del bloque 3.

La tarjeta de datos nos fija:

- el intervalo elemental de integración en 0.01 horas.
- el tiempo máximo de impresión en 10 horas.
- el intervalo de impresión en 0.5 horas; es decir que se imprimen los resultados desde 0 hasta 10 horas con saltos de 0.5 en 0.5 horas.
- los bloques a imprimir 2 y 3.
- el método de integración se toma por defecto el RECT.

La salida de los resultados se muestra a continuación:

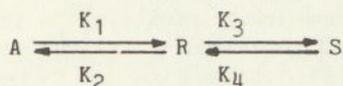
EJEMPLO STAL/72 TANQUE

ESPECIFICACION DE LAS SALIDAS DE LOS BLOQUES NUMERO

TIEMPO	2	3
0.0	5.0000E 00	1.0000E 00
5.0000E-01	5.0000E 00	1.0000E 00
1.0000E 00	5.0000E 00	1.0000E 00
1.5000E 00	2.0000E 01	1.6119E 00
2.0000E 00	2.0000E 01	2.0055E 00
2.5000E 00	2.0000E 01	2.2331E 00
3.0000E 00	2.0000E 01	2.3584E 00
3.5000E 00	2.0000E 01	2.4256E 00
4.0000E 00	2.0000E 01	2.4611E 00
4.5000E 00	2.0000E 01	2.4797E 00
5.0000E 00	2.0000E 01	2.4894E 00
5.5000E 00	2.0000E 01	2.4945E 00
6.0000E 00	2.0000E 01	2.4971E 00
6.5000E 00	2.0000E 01	2.4985E 00
7.0000E 00	2.0000E 01	2.4992E 00
7.5000E 00	2.0000E 01	2.4996E 00
8.0000E 00	2.0000E 01	2.4998E 00
8.5000E 00	2.0000E 01	2.4999E 00
9.0000E 00	2.0000E 01	2.4999E 00
9.5000E 00	2.0000E 01	2.4999E 00
1.0000E 01	2.0000E 01	2.4999E 00

Ejemplo 2

Calcular las curvas cinéticas (concentración-tiempo) para la reacción reversible de primer orden dada por:



para dos series de valores de las constantes:

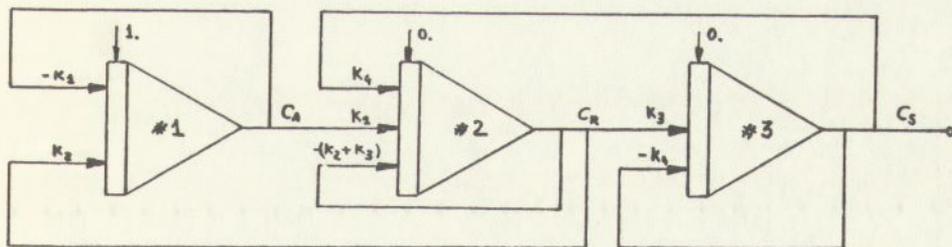
$$\begin{array}{llll} k_1 = 0.5 & k_2 = 0.2 & k_3 = 0.3 & k_4 = 0.4 \\ k_1 = 0.5 & k_2 = 0.0 & k_3 = 0.3 & k_4 = 0.0 \end{array}$$

Solución

Las ecuaciones cinéticas representativas de este proceso vienen dadas por:

$$\begin{aligned} \frac{dC_A}{dt} &= -k_1 C_A + k_2 C_R \\ \frac{dC_R}{dt} &= k_1 C_A - (k_2 + k_3) C_R + k_4 C_S \\ \frac{dC_S}{dt} &= k_3 C_R - k_4 C_S \end{aligned}$$

y el diagrama de bloques correspondiente será de la forma:



con lo que el programa SIAL correspondiente a los valores de la primera serie de constantes vendrá dado por:

```
TITULO  EJEMPLO 2      CINETICA QUIMICA
1  INTEGR 1 2 1.  -0.5  0.2
2  INTEGR 1 2 3  0.  0.5  -.5  0.4
3  INTEGR 2 3  0.  0.3. -0.4 m
DATOS DELTA 1.E-3 INTIMP 0.05 TPOMAX 5. IMPRIM 1 2 3 FIN
```

Con vistas al estudio de esta reacción para diferentes valores de las constantes de velocidad se ha construido el programa FORTRAN que se muestra a continuación que permite realizar cambios de parámetros en el SIAL/72 a la vez que representar los resultados por medio del PLOTTER.

Descripción del Programa

El programa FORTRAN consta de un programa principal y dos subrutinas.

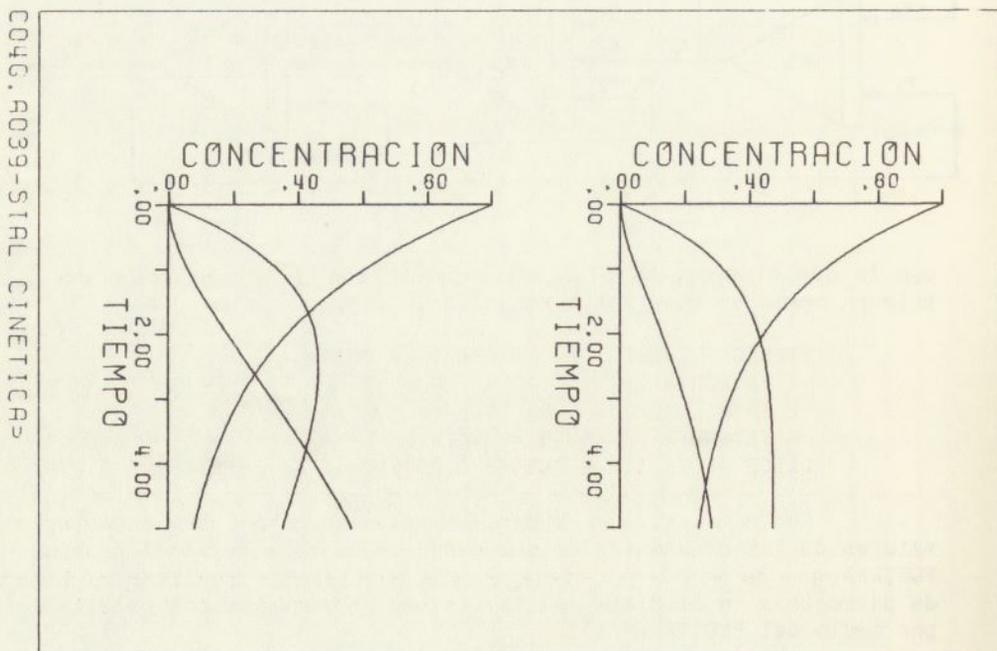
En el programa PRINCIPAL aparecen, además de la llamada al PLOTTER y a las otras dos subrutinas, llamadas a las subrutinas del SIAL (INICIA,PROBLE,EJEC).

La subrutina DIBUJO es la encargada de representar, a través del PLOTTER, los resultados del SIAL que le llegan por medio de una sentencia COMMON. En este caso realiza dos dibujos representando la salida de los tres bloques del programa SIAL correspondientes a C_A , C_R y C_S . En cuanto al número de puntos que constituyen el dibujo viene dado por $IDIB=TPOMAX/INTIMP+1$ cuyo valor máximo es 150.

La subrutina CAMBIO permite a través de una sentencia COMMON el cambio de parámetros (en este caso de constantes de velocidad) en el programa SIAL.

Resultados

Los resultados se obtienen tanto en forma numérica como gráfica mostrándose a continuación únicamente los resultados gráficos por ser los numéricos equivalentes a los del ejemplo anterior.



```

C ---- APLICACION DEL SIAL/72 EN CINETICA QUIMICA ----
      DATA  I / 0. /
      CALL  CUADRO (10., 15., "CO46-AO39-CINETICA QUIM.")
      CALL  INICIA
      CALL  PROBLE
      CALL  DIBUJO (I)
10    CALL  CAMBIO ($100)
      CALL  EJEC
      CALL  DIBUJO (I)
      GO TO 10
100   STOP
      END

```

```

C ---- DIBUJO DE LAS CURVAS CINETICAS CON EL PLOTTER ----
      SUBROUTINE DIBUJO (I)
      COMMON/DIB/TDIB(152),ZDIB(152,15),IDIB
      DIMENSION CON (150)
      I=I+1
      IF(1,2), I
      CALL  PLOT (30.,30.,999)
1     X=3.
      Y=9.
      GO TO 10
2     X=3.
      Y=2.
10    CALL  PLOT (X,Y,-3)
      CALL  AXIS (0.0., "CONCENTRACION",13,5.,90.,0.,0.2)
      CALL  AXIS (0.,0., "TIEMPO",-6,5.,0.,0.,1.0)
      DO 30 I=1,3
      DO 20 J=1,IDIB
20    CON (J) = ZDIB(J,I)
      CON (IDIB+1)=0
      CON (IDIB+)=0.2
      TDIB (IDIB+1)=0.
      TDIB (IDIB+2)=1.
      CALL  LINE (TDIB,CON,IDIB,1,0,0)
      CALL  PLOT (X,Y,3)
30    CONTINUE
      CALL  PLOT (-X, -Y, -3)
      IF(I.EQ.2) CALL PLOT (30.,30.,999)
      RETURN
      END

```

```

C ---- CAMBIO DE LOS PARAMETROS DEL PROGRAMA SIAL/72
C      EN ESTE CASO SON LAS CONSTANTES DE VELOCIDAD ----
      SUBROUTINE CAMBIO (*)
      COMMON NOUTIL (2250), PARAM(1250), NUL(3018)
      REAL K(10)
      READ (5,100,END=1) K
      WRITE (6,200) K
      PARAM(2) = -K(1)
      PARAM(3) = K(2)
      PARAM(5) = K(1)
      PARAM(6) = - (K(2)+K(3))
      PARAM(7) = K(4)
      PARAM(9) = K(3)

```



```
PARAM(10) = -K(4)
RETURN
1 RETURN 1
```

C

```
-----
100 FORMAT (10F8.5)
200 FORMAT (20X,"MODIFICACION DE LAS CONSTANTES DE
* VELOCIDAD"// 10 X, 10(SX,F8.5))
END
```

6. BIBLIOGRAFIA

1. ALFONSECA, M.; "SIAL/74: Lenguaje de simulación digital continua", Centro de Investigación UAM-IBI, Nov. 1974
2. FRANKS, R.G.E., SCHIESSE, W.E.; "The evolution of Digital Simulation Programs", C.E.P., 63, 68 (1967)
3. HITTNER, PH.M., GREENBERG, D.B.; "We can do process simulation: UCANII" Chem. Eng. Educ., 138, Aug. (1980)
4. HARNETT, R.T., SANSOM, F.S., WARSHAWSKY, L.M.; "MIDAS-An Analog Approach to Digital Computation", Simulation, 3, 17 (1964)
5. FAHIDY, T.Z., PERLMUTTER, D.D.; "The Application of the MIDAS Digital Simulator to the Study of Kinetic Alternatives in Chemical Reactor System", Simulation, 6, 192 (1966)

* * * * *