

Informe Técnico – Technical Report

DPTOIA-IT-2002-003

febrero, 2002

DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UNA TORRE DE SULFITACIÓN

Ana B. Gil González

Pastora I. Vega Cruz



Departamento de Informática y Automática

Universidad de Salamanca

Revisado por:

Dr. Eladio Sanz García

Dra. Belén Pérez Lancho

Aprobado en el Consejo de Departamento de 4 de Marzo de 2002

Información de los autores:

Dr. Pastora Isabel Vega Cruz: catedrática de universidad del área de Ingeniería de Sistemas y Automática en el Departamento de Informática y Automática.

E.T.S.I.S de Béjar

Avd. Fernando Ballesteros, 2 , 37700, Béjar, Salamanca

pvega@gugu.usal.es

Ana B. Gil González: estudiante de doctorado del departamento de Informática y Automática.

Facultad de Ciencias

Universidad de Salamanca

Plaza de la Merced S/N

37008, Salamanca

España

abg@gugu.usal.es

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por el proyecto de investigación DPI200-066-C02, financiado por el Plan Nacional de I+D del Ministerio de Ciencia y Tecnología.

Este documento puede ser libremente distribuido.

© 2002 Departamento de Informática y Automática - Universidad de Salamanca.

Resumen

Este informe recoge la metodología del diseño óptimo para procesos continuos con objeto de reducir los costes de construcción y de operación del sistema final mediante diseño integrado. La planta química de referencia está tomada de la industria azucarera (torre de sulfitación), se ha descrito inicialmente su modelo matemático no-lineal. Después una planta alternativa ha sido seleccionada para calcular de forma óptima las dimensiones de las unidades de proceso junto con el punto estacionario de operación.

Los diseños de plantas son realizados teniendo en cuenta objetivos económicos mediante la utilización de modelos no lineales. Distintas plantas han sido obtenidas para el caso particular de una torre de sulfitación, después de esto, el efecto de los diseños han sido analizados mediante una comparativa en los costes mencionados.

Abstract

This report shows a methodology for the optimal design of continuous processes in order to reduce the construction costs and the performance costs of the final systems within an Integrated Design framework. A reference chemical plant from the sugar industry (a sulfitation tower) has been described and a non-linear mathematical model is presented. After this, an alternative plant have been selected in order to get the optimal dimension of the process units together with a stationary operating point.

The plants designs are carried out taking into account economic objectives and using non-linear first principle models. Different plants have been obtained for the particular case of the sulfitation tower and, after this, the effect of the designs has been clearly analysed by comparing the above mentioned costs.

Tabla de Contenidos

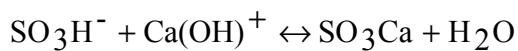
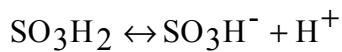
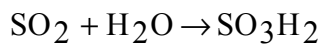
| | |
|--|----|
| DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UNA TORRE DE SULFITACIÓN | 1 |
| 1. Un sulfitador en lazo abierto | 1 |
| 1.1. Planteamiento | 1 |
| 1.1.1 Función De Coste | 4 |
| 1.2. Cálculo de los parámetros de diseño | 5 |
| 1.2.1 Cálculo Analítico | 5 |
| 1.2.2 Programas | 5 |
| 1.2.3 Resultados..... | 8 |
| 1.3. Simulación del depósito diseñado | 9 |
| 1.3.1 Programas | 9 |
| 1.3.2 Resultados..... | 12 |
| 2. Dos sulfitadores en serie y lazo abierto | 13 |
| 2.1. Planteamiento | 13 |
| 2.1.1 Función De Coste | 17 |
| 2.2. Cálculo de los parámetros de diseño | 18 |
| 2.2.1 Programas | 18 |
| 2.2.2 Resultados..... | 22 |
| 2.3. Simulación de la planta de sulfitación diseñada | 24 |
| 2.3.1 Programas | 24 |
| 2.3.2 Resultados..... | 28 |
| 2.3.3 Conclusiones de la simulación: | 30 |
| 3. Conclusiones del estudio realizado:..... | 30 |

1. Un sulfitador en lazo abierto

1.1. Planteamiento

Una disolución acuosa, a la que se supone una cierta cantidad de Ca(OH)^+ , lo cual le confiere un carácter básico, entra de forma continua al reactor o depósito de sulfitación por su parte superior. Al mismo tiempo en el sulfitador se introduce también anhídrido sulfuroso, SO_2 , a través de una válvula. Por la parte inferior del depósito se evacua la disolución resultante por rebose, mientras el gas no disuelto es desprendido y desalojado por la parte superior del tanque.

La reacción del gas, introducido mediante pequeñas burbujas en el depósito, produce con el agua ácido sulfuroso, el cual se disocia instantáneamente produciendo iones H^+ , reduciendo el pH de la disolución. Detallando las reacciones químicas producidas dentro del tanque (la primera de ellas homogénea y las otras dos heterogéneas):



Un esquema del proceso aparece de forma gráfica en la figura 1.

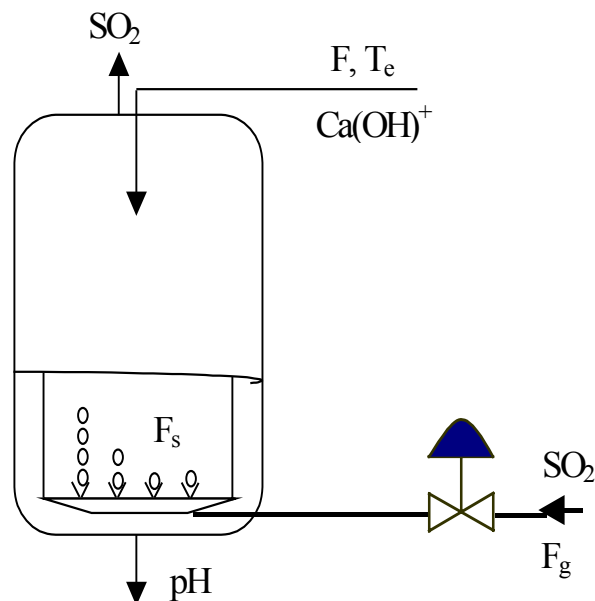


Fig. 1: Estructura de la planta

Para estudiar el proceso se ha desarrollado un modelo a partir de las ecuaciones de conservación de carga y masa en las reacciones que se producen gas-agua:

$$\tau \cdot \frac{dFs}{dt} = -Fs + k \cdot Fg \quad [1]$$

$$\tau_2 \cdot \frac{dX}{dt} = -X + [Ca(OH)^+]_i - k_2 \cdot Fs \quad [2]$$

$$[H^+] = \frac{X}{2} \cdot [-1 + \text{sign}(X) \cdot \sqrt{(1 + 4 \cdot Kw)/X^2}] \quad [3]$$

$$\text{pH} = -\text{Log}([H^+]) \quad [4]$$

$$\text{Donde: } \tau_2 = \frac{V}{Fe}, \quad k_2 = \frac{\alpha}{Fe}, \quad k = \frac{\alpha^2 \cdot [SO_3H_2]}{(1 - \alpha)}$$

$$X = [OH^-] \cdot [H^+], \quad Kw = [OH^-] \cdot [H^+]$$

Teniendo en cuenta las relaciones siguientes:

$$\alpha = (-keq + \sqrt{keq^2 + 4keqC})/2C$$

$$\frac{dC}{dt} = \frac{Fs - Fe \cdot C}{V}$$

Notación:

V: volumen del depósito del sulfitador

Fs: flujo de SO₂ disuelto en el agua (mol/segundo)

Fg: caudal de gas que entra en el sulfitador (mol/segundo)

Fe: Flujo de líquido entrante (litros/segundo)

k : constante de disociación del ácido sulfuroso

τ : constante de tiempo característico de la disolución

[Ca(OH)⁺]_i: concentración inicial de Ca(OH)⁺

[OH⁻]: concentración de los iones OH⁻

[H⁺]: concentración de los iones H⁺

K_w: constante de disociación del agua

K_{eq}: constante de equilibrio

C: concentración de SO₃H₂

La ecuación [1], relaciona el flujo de entrada de gas, F_g , con la velocidad de generación del ácido sulfuroso. En la ecuación [2], se relacionan las concentraciones de iones en el depósito.

Dado un punto de operación determinado por el caudal de entrada F_e , la temperatura y pH de entrada T_e y pH queremos obtener los parámetros de diseño que optimicen la estructura y funcionamiento del sulfitador en función de tamaños de los objetos del mismo minimizando el coste de explotación y al mismo tiempo que den un punto de operación estacionario, sujeto a un conjunto de restricciones que permitan se cumplan todas las condiciones físicas y de proceso.

Matemáticamente se puede expresar como un problema de Optimización No Lineal con restricciones. Fijamos una función de coste f , determinada como la suma de los cuadrados de la altura y los residuos de las soluciones de las ecuaciones del modelo en estado estacionario, multiplicados por unos pesos, que indican la importancia que se le da a un objetivo específico. Para una mejor interpretación de los residuos, las ecuaciones son normalizadas, dividiendo cada término por el mayor sumando de la ecuación:

$$f = [\beta \cdot h]^2 + [\Phi_1 \cdot r_1]^2 + [\Phi_2 \cdot r_2]^2 + [\Phi_3 \cdot r_3]^2 + [\Phi_4 \cdot r_4]^2$$

Donde:

r_1, r_2, r_3, r_4 : residuos de la solución del sistema de ecuaciones del modelo.

h : altura del líquido en el sulfitador.

$\beta, \phi_1, \phi_2, \phi_3, \phi_4$: pesos asociados

Se le da mayor importancia al ajuste de las ecuaciones, esto se traduce en asignar un mayor peso a los términos de los residuos, que a los objetivos económicos, debido a la alta no linealidad de las ecuaciones y a los resultantes problemas numéricos.

Minimizamos la función de coste:

$$\min_h f = \min_h ([\beta \cdot h]^2 + [\Phi_1 \cdot r_1]^2 + [\Phi_2 \cdot r_2]^2 + [\Phi_3 \cdot r_3]^2 + [\Phi_4 \cdot r_4]^2)$$

La función de coste a minimizar, está sujeta una serie de *restricciones*:

- Restricciones sobre el ajuste de las *ecuaciones del modelo*, indicadas por el vector de residuos incluido en la función objetivo.

$$r_1 = k \cdot F_g - F_s$$

$$r_2 = -X + [Ca(OH)^+]_i - k_2 \cdot F_s$$

$$r_3 = \alpha - (-keq + \sqrt{keq^2 + 4keqC})/2C$$

$$r_4 = (F_s - F_e \cdot C)$$

- Restricciones *de proceso*:

$$pH_s < 5.5$$

$$F_g < 0.3$$

1. Restricciones físicas que sitúan las variables en un rango razonable mediante unos límites superiores e inferiores de acotación.

$$0 < \alpha < 1 \quad 0 < K < 1$$

2. Imponemos relaciones entre la k del proceso y las dimensiones del sulfitador, del modo:

$$K = 0.09 \cdot h$$

1.1.1 Función De Coste

Elaborando la *función de coste* detallamos a continuación las operaciones realizadas:

- *Coefficientes de los residuos*: dividimos por el máximo valor esperado de los sumandos y así conseguimos normalizar las ecuaciones de manera que los residuos se encuentran dentro del rango (-1, 1).

$$r_1 = (1/10) \cdot [k \cdot F_g - F_s]$$

$$r_2 = (1/15) \cdot [-X + [Ca(OH)^+]_i - k_2 \cdot F_s]$$

$$r_3 = (1/5) \cdot [\alpha - (-k_{eq} + \sqrt{k_{eq}^2 + 4k_{eq}C}) / 2C]$$

$$r_4 = (1/200) \cdot [F_s - F_e \cdot C]$$

- Los *pesos asociados a los objetivos de optimización* también se normalizan. Las magnitudes de los objetivos diferentes (económicos, de control...) se normalizan por separado para compararlos equitativamente. En nuestro caso tenemos la altura como único objetivo económico.

$$\alpha = \frac{100}{1e + 6}$$

- El *vector de pesos* correspondiente al ajuste de las ecuaciones (asociados a los residuos), es el siguiente.

$$\phi = [1 \ 0.02 \ 2 \ 20]$$

1.2. Cálculo de los parámetros de diseño

1.2.1 Cálculo Analítico

Con todo el planteamiento descrito, no resulta demasiado complicado el realizar analíticamente las operaciones y comparar los resultados con los obtenidos mediante MATLAB. Esto resulta interesante además porque vemos las interdependencias de las variables y cómo afecta cualquier variación a los resultados.

Partiendo de la función de coste, minimizamos ésta respecto a la altura:

Los sumandos de la función de coste que tienen dependencias con la altura son además del objetivo, los relacionados con los residuos r_1 , r_2 y r_4 . Operando obtenemos la siguiente expresión:

$$\frac{\partial f}{\partial h} = 0 \Rightarrow h = \frac{(f_{i1} * F_s + f_{i2} * (CaOHe - X) * (alfa/Fe) + f_{i4} * Fe * C) * (0.09 * F_g)}{(alfah + (f_{i1} + f_{i2} * (alfa/Fe) + f_{i4}) * (0.09 * F_g)^2)}$$

1.2.2 Programas

En función de lo planteado, construimos un programa en MATLAB para diseñar los parámetros de la planta: el flujo de gas a introducir y la altura de nivel en el depósito. Dicho programa consta de dos subprogramas el principal Sulf.m y el de función Fulf.m. A continuación aparece un listado con ambos programas.

Aquí es importante hacer notar que en vez de lo que veníamos haciendo usualmente, partiendo de un punto inicial estacionario, no partimos de semejante punto sino de uno alejado del equilibrio a partir del cual la optimización nos dará el punto perteneciente al estacionario.

Sulf.m

```
%Programa principal para el calculo del volumen y flujo
%de gas SO2 aquí se hace la llamada a la función constr

%Modelo con un sulfitador
% Aquí se calculan los parámetros de diseño, minimizando el
% coste de construcción y operación

% flujo de entrada litros/segundo
Fe=11.05
% temperatura de entrada absoluta_kelvin
Te=328
% pH de entrada
pHe=8.5

% valores iniciales de las variables que se calculan
h0=15;%altura en dm
Fg0=0.00152;%flujo gas SO2 en mol/segundo
pHs0=5.7;
```

```
k0=0.090 %coeficiente de disolucion maximal
Fs0=k0*h0*Fg0;
C0=0.4; %concentracion en mol/litros
alfa0=0.45;

% Limites inferiores de las variables

vlb=[0. 0.01 0. 0.001 0. 0.];
% Limites superiores de las variables

vub=[100. 10. 14. 20. 1. 1.];

% Condiciones iniciales

y0 =[h0 Fg0 pHs0 C0 alfa0 Fs0];

%
% Llamada a la funcion constr
%
opciones(1)=1;
opciones(10)=10000000;

y=constr('fsulf',y0,opciones,vlb,vub);

disp('Resultados de la optimización')
disp('altura óptima')
h=y(1)
disp('flujo de gas óptimo')
Fg=y(2)
disp('pH a la salida')
pHs=y(3)
disp('alfa y concentración de sulfuroso a la salida')
C=y(4)
alfa=y(5)
Fs=y(6)
pause
%coloco esto como el modelo del sulfitador para tener kw y keq
Za=0.45344659; Ea=19010.7323; Rg=1.987;Zs=84415085.06;
Es=22.500;
Kw=Za*exp(-Ea/(Rg*Te));
Keq=Zs*exp(-Es/(Rg*Te));

%variables : volumen, concentraciones, parametros de la reaccion
s=h*10
disp('Volumen en dm3=litros')
V=h*s

%relación del modelo con dimensiones del sulfitador
k=0.09*h;

Fs=k*Fg;
alfa=(-Keq+sqrt(Keq*Keq+Keq*C))/(2*C)
k2=alfa/Fe
tau2=V/Fe

Ch=10*exp(-pHs);
Coh=Kw/Ch;
```

```

X=Coh-Ch;
CaOHe=Kw/10^(-pHe)
pause

%residuos

r1=(1/10)*(k*Fg-Fs)
r2=(1/15)*(CaOHe-X-(alfa*Fs/Fe))
r3=(1/5)*(alfa-(-Keq+sqrt(Keq*Keq+Keq*C))/(2*C))
r4=(1/200)*(k*Fg-Fe*C)

%pesos

alfah=100/1e+6;%%1.0000e-004
fi1=1;%%1/10=0.1
fi2=0.02;%%0.02/15=0.0013
fi3=2;%%2/5=0.4000
fi4=20;%%20/200=0.1000

%función a minimizar
f=(alfah*h)^2+(fi1*r1)^2+(fi2*r2)^2+(fi3*r3)^2+(fi4*r4)^2

```

Fsulf.m

```

function [f,g]=fsulf1(y)
h=y(1);
Fg=y(2);
pHs=y(3);
C=y(4);
alfa=y(5);
Fs=y(6);
% flujo de entrada litros/segundo
Fe=11.05;
% temperatura de entrada absoluta_kelvin
Te=328;
% pH de entrada
pHe=8.5;

%coloco esto como el modelo del sulfitador para tener kw
Za=0.45344659; Ea=19010.7323; Rg=1.987;Zs=84415085.06;
Es=22.500;
Kw=Za*exp(-Ea/(Rg*Te));
Keq=Zs*exp(-Es/(Rg*Te));
%variables : volumen, concentraciones, parametros de la reaccion

k=0.09*h;
Ch=10*exp(-pHs);
Coh=Kw/Ch;
X=Coh-Ch;
CaOHe=Kw/10^(-pHe);

%residuos

r1=(1/10)*(k*Fg-Fs)
r2=(1/15)*(CaOHe-X-(alfa*Fs/Fe))
r3=(1/5)*(alfa-(-Keq+sqrt(Keq*Keq+Keq*C))/(2*C))
r4=(1/200)*(k*Fg-Fe*C)

```

```
alfah=100/1e+6;%1.0000e-004
fi1=1;%1/10=0.1
fi2=0.02;%0.02/15=0.0013
fi3=2;%2/5=0.4000
fi4=20;%20/200=0.1000
%funcion a minimizar
f=(alfah*h)^2+(fi1*r1)^2+(fi2*r2)^2+(fi3*r3)^2+(fi4*r4)^2

g=[-1+alfa      -alfa
   -5.5+pHs -pHs
      -1+k      -k
      -0.3+Fg -Fg]
```

1.2.3 Resultados

La optimización converge con éxito, conteniendo 2 restricciones activas. El resultado de dicha optimización nos devuelve los siguientes valores:

Resultados de la optimización

altura óptima: $h = 11.1111$ dm

flujo de gas óptimo $F_g = 0.2218$ mol/segundo

Ph a la salida $pH_s = 5.4997$

Grado de disociación del sulfuroso : $\alpha = 0.2500$

Concentración de sulfuroso a la salida: $C = 0.0201$ mol/litro

Flujo de salida: $F_s = 0.2218$ mol/segundo

Superficie del sulfitador: $s = 111.1107$ dm²

Volumen del sulfitador: $V = 1.2346e+003$ litros

$k = 1.0000$

$k_2 = 0.0226$

$\tau_2 = 111.7247$ seg.

Los valores de los residuos asociados a las ecuaciones:

$$r1 = 0, r2 = 0.0024, r3 = 0, r4 = 1.5025e-007$$

El vector de residuos obtenidos indica el ajuste de las ecuaciones, por lo que los valores que toman las variables representan el punto de operación estacionario alcanzado para los valores mínimos de la altura.

Haciendo una comprobación, para verificar el carácter estacionario de la planta veamos el flujo de líquido saliente en litros. Sabemos que el entrante es de $Fe = 11.05$ litros/seg, y el saliente es de $F_s = 0.2218$ mol/seg con una concentración de $C = 0.0201$ mol/litro luego el flujo saliente en litros es de $F_s/C = 11.0515$ litros/seg muy próximo al entrante. Una vez más verificamos los resultados.

Los resultados obtenidos, satisfacen las restricciones de proceso que se imponen y todas las variables toman valores dentro de los límites fijados para los tamaños mínimos de las unidades de proceso.

Comparando con el resultado de sustituir los valores en la expresión analítica obtenida

$$h = \frac{(fi1 * Fs + fi2 * (CaOHe - X) * (alfa/Fe) + fi4 * Fe * C) * (0.09 * Fg)}{(alfah + (fi1 + fi2 * (alfa/Fe) + fi4) * (0.09 * Fg)^2)}$$

Obtenemos un altura $h_{analitico} = 10.9783$ dm.

El resultado obtenido en optimización $h_{optimiz} = 11.1111$ dm es muy similar al analítico y su diferencia puede ser achacable a efectos de redondeo del ordenador.

De manera que el resultado es satisfactorio también en este sentido.

1.3. Simulación del depósito diseñado

Con los resultados obtenidos, los parámetros de diseño del sulfitador, pasamos a verificar su funcionamiento en el conjunto de la planta mediante simulación. Para ello construimos un programa en un lenguaje específico ACSL. Consta a su vez de dos subprogramas, el principal Sulfita.csl y el archivo de comandos Sulfita.cmd. A continuación aparecen listados.

1.3.1 Programas

Sulfita.csl

```
PROGRAM sulfitador
double precision alfa
```

```
INITIAL
```

```
!-----Defino constantes del programa
```

```
constant Fg= 0.2218
constant Phs= 5.4997
```

```

    CONSTANT phe = 8.5 !---pH del agua a la entrada
!---flujo de agua (l/s)
    CONSTANT Fe = 11.05!---valor medio (l/s)
    constant Te = 55
    Tabs=Te+273
    !" parametros químicos "

    constant Za=0.45344659, Ea=19010.7323, Rg=1.987
    constant Zs=84415085.06, Es=22500

    !" coeficiente de disociación del agua "

    KW=Za*exp(-Ea/(Rg*Tabs))

    !" Coeficiente de ionización "

    Keq=Zs*EXP(-Es/(Rg*Tabs))

    !" valores iniciales del agua que esta en la planta "

    constant V= 1234.6
    constant h= 11.1111, s= 111.1107
    ConH=10**(-pHs)
    ConOH=KW/ConH
    Xi=ConOH-ConH
    raiz=sqrt(abs(1+4*KW/( Xi * Xi)))

    !" valores iniciales del agua que entra en la planta "

    Tau2=V/Fe
    CAOHe=KW/(10**(-pHe))           !" [CaOH+] = [OH-] "

    !" valores iniciales del SO2 que entra en la planta "

    constant K1= 1.0000!" Coeficiente de disolución maximal "
    constant Tau1 = 1.7 !" Tiempo característico de la disol "
    Fsi=K1*Fg           !" Flujo de Gas disuelto (mol/s) "
    Fs=Fsi

    !" cantidad [SO3H2]+[SO3H-] en el agua de la planta "
    C=Fsi/Fe !" Concentración estacionaria (mol/l) (dC/dt=0)"
    Ci=C

    alpha=(-Keq+sqrt(Keq*Keq+4*Keq*Ci))/(2*Ci)

END! fin del initial

DYNAMIC!-----" se simulan el sulfitador
DERIVATIVE
!----- " ecuaciones del sulfitador "

    !" ecuación de la disolución del SO2 en el agua "

    Fs=integ((-Fs+K1*Fg)/Tau1,Fsi)

    !" ecuación de la variación de cantidad X=[OH-]-[H+] "

    X=integ((-X+CAOHe)/Tau2-alpha*Fs/V,Xi)

```



```

alpha=(-Keq+sqrt(Keq*Keq+4*Keq*C))/(2*C)

!" ecuación de la variación de cantidad [SO3H2]+[SO3H-] "

C=integ(Fs/V-Fe*C/V,Ci)

!" Concentración de H+ "

raiz=sqrt(abs(1+4*KW/( X * X)))
ConH=X/2*(-1+sign(1.0,X)*raiz)

!" pH "

if (ConH.gt.0) pH=bound(0.,14.,-log10(ConH))

    END! fin del derivative
!---intervalo de comunicación
    cinterval cint=0.9
    constant tmax=300.
    TERMT(t.GE.tmax)

END! de Dynamic

END! fin del programa

```

Sulfito.cmd

```

set hvdprn=.t.
set title=' sulfitador optimo modelado'

prepar t,Fg,Ph,Te,Fe,h,C
output t,Fg,Ph,Te,Fe,h,C

s grdspl=.f.
s calplt=.f.
s strplt=.t.

procedure Ph
set title(41)='Ph en sulfitador vs. Time'
plot Ph/tag='(Ph)' /LO=0 /HI=14
end

procedure c
set title(41)='Conc en sulfitador vs. Time'
plot C/tag='(C moles/litro)' /LO=-1 /HI=1
end

procedure nivel
set title(41)='nivel en sulfitador vs. Time'
plot h /tag='(metros)' /LO=0 /HI=15
end

print /all /nciprn=10
end

```

1.3.2 Resultados

Obtenemos que se van produciendo una serie de datos en el tiempo que reiteran la obtención de un estacionario. Tomado estos valores en un instante cualquiera de tiempo (puesto que estamos en estacionario):

T 297.000000
FG 0.22180000
PHS 5.28400000
PH 4.99350000
TE 55.0000000
FE 11.0500000
H 11.1111000
C 0.02007240

Representando los resultados obtenidos en la simulación:

En la Fig 2 apreciamos como partiendo de un pH de 5.49970000 inicial dado por la optimización, que en la simulación a lo largo de 300 horas baja hasta alcanzar un valor de 4.99350000.

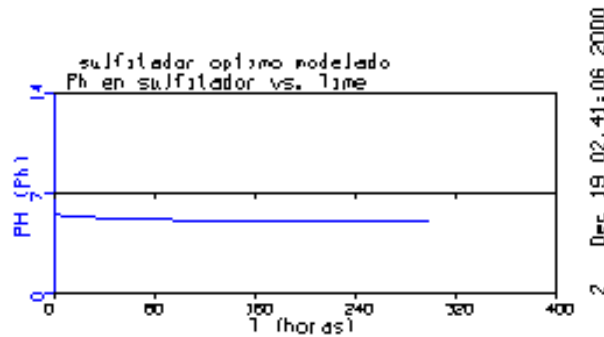


Fig.2: pH en el sulfitador

En la figura 3 representamos la concentración en el sulfitador que permanece constante a lo largo de todo el tiempo de simulación:

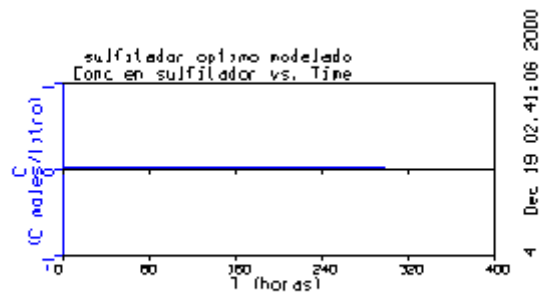


Figura 3: Concentración en el sulfitor

Y finalmente para verificar que el nivel de líquido en el sulfitor permanece estacionario a lo largo de la simulación, representamos en la figura 4 los valores obtenidos para h .

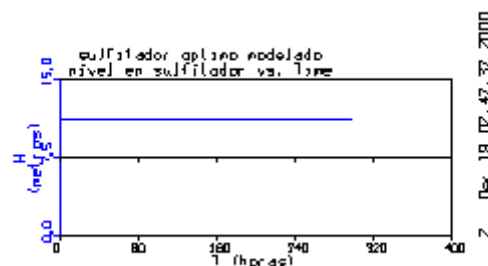


Fig 4: nivel de líquido en el sulfitor

Luego, vemos cómo realmente los valores obtenidos mediante el programa de optimización generan en simulación una planta que construida con las magnitudes y trabajando en los parámetros obtenidos opera con comportamiento estacionario.

2. Dos sulfitores en serie y lazo abierto

2.1. Planteamiento

En base a los procesos ya descritos que se producen en un sulfitor y manteniendo el planteamiento y técnicas ya explicadas en el anterior modelo, ahora unimos dos sulfitores en serie. Trabajan igualmente en lazo abierto. El esquema de nuestro sistema aparece en la siguiente figura:

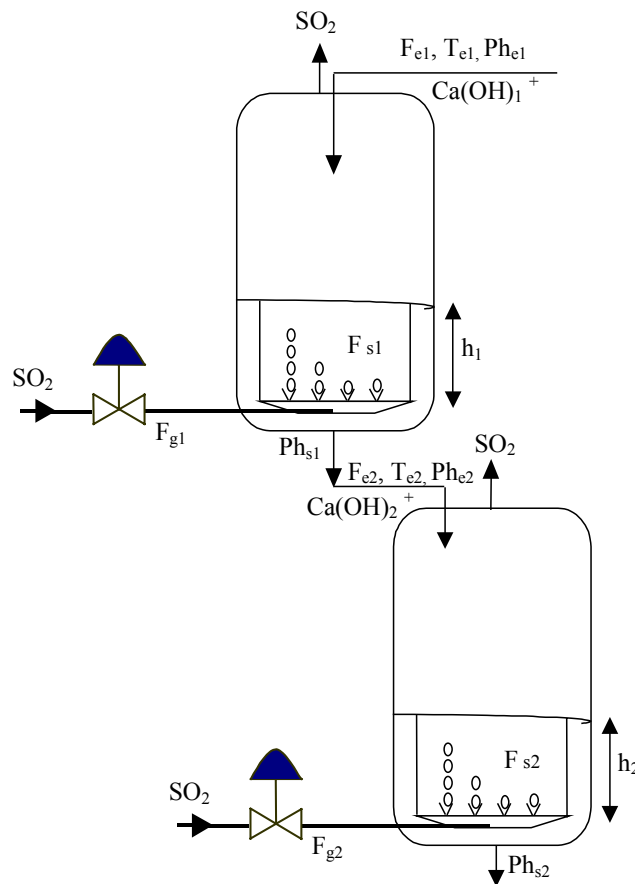


Fig. 5: Estructura de la planta

La conexión de los dos sulfitadores implica que el flujo que recibe como entrada el segundo de los sulfitadores corresponde al de salida del primero, con todas sus características: temperatura, nivel de pH...

En primer lugar supondremos que la temperatura permanece constante a lo largo de todo el proceso haciendo $T_{e1}=T_{e2}=T_e$, lo que implica que todos los parámetros químicos que teníamos relacionados con la temperatura, permanecerán iguales en los dos sulfitadores, K_{eq} , K_w ...

El caudal de que sale del primer sulfitador F_{s1} en unidades de mol/seg., con una concentración de C de SO_3H_2 moles/litro, será el flujo entrante al segundo sulfitador. Para acoplar unidades de modo que volvamos a manejar el modelo que estamos utilizando:

$$[F_{e2}] = \frac{F_{s1} \text{ mol/seg}}{C_1 \text{ mol/litro}} = F_{e2} \frac{\text{litro}}{\text{seg}}$$

Igualmente, el pH que sale del primer sulfitador será el de entrada al segundo, esto podemos expresarlo como:

$$Ph_{e2} = Ph_{s1}$$

Teniendo en cuenta las relaciones descritas entre los dos sulfitadores , el modelo del sistema que forman genera el modelo matemático que a continuación se detalla.

Atendiendo al primero de los sulfitadores, las ecuaciones del modelo son:

$$\tau_1 \cdot \frac{dFs1}{dt} = -Fs1 + ka1 \cdot Fg1 \quad [1]$$

$$\tau_{21} \cdot \frac{dX_1}{dt} = -X_1 + [Ca(OH)^+]_{i1} - k_{21} \cdot Fs1 \quad [2]$$

$$[H^+]_1 = \frac{X_1}{2} \cdot [-1 + \text{sign}(X_1) \cdot \sqrt{(1 + 4 \cdot Kw)/X_1^2}] \quad [3]$$

$$pH_1 = -\text{Log}([H^+]_1) \quad [4]$$

$$\text{Donde: } \tau_{21} = \frac{V_1}{Fe1}, \quad k_{21} = \frac{\alpha_1}{Fe1}, \quad ka1 = \frac{\alpha_1^2 \cdot [SO_3H_2]_1}{(1 - \alpha_1)}$$

$$X_1 = [OH^-]_1 \cdot [H^+]_1, \quad K_w = [OH^-]_1 \cdot [H^+]_1$$

Teniendo en cuenta las relaciones siguientes:

$$\alpha_1 = (-keq + \sqrt{keq^2 + 4keqC_1}) / 2C_1$$

$$\frac{dC_1}{dt} = \frac{Fs1 - Fe1 \cdot C_1}{V_1}$$

Atendiendo al segundo de los sulfitadores, el modelo concluiría añadiendo el resto de ecuaciones:

$$\tau_2 \cdot \frac{dFs2}{dt} = -Fs2 + ka2 \cdot Fg2 \quad [5]$$

$$\tau_{22} \cdot \frac{dX_2}{dt} = -X_2 + [Ca(OH)^+]_{i2} - k_{22} \cdot Fs2 \quad [6]$$

$$[H^+]_2 = \frac{X_2}{2} \cdot [-1 + \text{sign}(X_2) \cdot \sqrt{(1 + 4 \cdot Kw)/X_2^2}] \quad [7]$$

$$pH_2 = -\text{Log}([H^+]_2) \quad [8]$$

$$\text{Donde: } \tau_{22} = \frac{V_2}{Fe_2}, \quad k_{22} = \frac{\alpha_2}{Fe_2}, \quad ka_2 = \frac{\alpha_2^2 \cdot [SO_3H_2]_2}{(1 - \alpha_2)}$$

$$X_2 = [OH^-]_2 \cdot [H^+]_2, \quad K_w = [OH^-]_2 \cdot [H^+]_2$$

Teniendo en cuenta las relaciones siguientes:

$$\alpha_2 = (-keq + \sqrt{keq^2 + 4keqC_2}) / 2C_2$$

$$\frac{dC_2}{dt} = \frac{Fs_2 - Fe_2 \cdot C_2}{V_2}$$

Fijamos la función de coste f , determinada como la suma de los cuadrados de las alturas y los residuos de las soluciones de las ecuaciones del modelo en estado estacionario, multiplicados por los pesos, según ya describimos para el caso anterior.

$$f = [\beta_1 \cdot h_1]^2 + [\beta_2 \cdot h_2]^2 + [\Phi_1 \cdot r_1]^2 + [\Phi_2 \cdot r_2]^2 + [\Phi_3 \cdot r_3]^2 + [\Phi_4 \cdot r_4]^2 + [\Phi_5 \cdot r_5]^2 + [\Phi_6 \cdot r_6]^2 + [\Phi_7 \cdot r_7]^2 + [\Phi_8 \cdot r_8]^2$$

Donde:

$r_1, r_2, r_3, r_4, r_5, r_6, r_7, r_8$: residuos de la solución del sistema de ecuaciones del modelo.

h_1, h_2 : altura del líquido en los sulfitadores

$\beta_1, \beta_2, \Phi_1, \Phi_2, \Phi_3, \Phi_4, \Phi_5, \Phi_6, \Phi_7, \Phi_8$: pesos asociados

Se le da mayor importancia al ajuste de las ecuaciones, asignándole un mayor peso a los términos de los residuos, que a los objetivos económicos debido a la alta no linealidad de las ecuaciones y a los resultantes problemas numéricos.

Minimizamos la función de coste:

$$\min_{h_1, h_2} f = \min_{h_1, h_2} ([\beta_1 \cdot h_1]^2 + [\beta_2 \cdot h_2]^2 + \sum_{i=1}^8 [\Phi_i \cdot r_i]^2)$$

La función de coste a minimizar, está sujeta a una serie de *restricciones*:

- Restricciones sobre el ajuste de las *ecuaciones del modelo*, indicadas por el vector de residuos incluido en la función objetivo.

$$r_1 = ka_1 \cdot Fg_1 - Fs_1$$

$$r_2 = -X_1 + [Ca(OH)^+]_{i1} - k_{21} \cdot Fs_1$$

$$r_3 = \alpha_1 - (-keq + \sqrt{keq^2 + 4keqC_1}) / 2C_1$$

$$r_4 = (Fs_1 - Fe_1 \cdot C_1)$$

$$r_5 = ka_2 \cdot Fg_2 - Fs_2$$

$$r_6 = -X_2 + [Ca(OH)^+]_{i_2} - k_{22} \cdot Fs_2$$

$$r_7 = \alpha_2 - (-keq + \sqrt{keq^2 + 4keqC_2}) / 2C_2$$

$$r_8 = (Fs_2 - Fe_2 * C_2)$$

- Restricciones de proceso:

$$0 < Phs_2 < Ph_1 < 5.5$$

$$Fg_1, Fg_2 < 0.3$$

3. Restricciones físicas que sitúan las variables en un rango razonable mediante unos límites superiores e inferiores de acotación.

$$0 < \alpha_1 < 1 \quad 0 < \alpha_2 < 1$$

$$0 < ka_1 < 1 \quad 0 < ka_2 < 1$$

4. Imponemos relaciones entre la k del proceso y las dimensiones del sulfitor, del modo:

$$ka_1 = 0.09 * h_1$$

$$ka_2 = 0.09 * h_2$$

2.1.1 Función De Coste

En la *función de coste* realizamos idénticas operaciones que para el caso de un sulfitor:

- *Coefficientes de los residuos*: dividimos por el máximo valor esperado de los sumandos y así conseguimos normalizar las ecuaciones de manera que los residuos se encuentran dentro del rango (-1,1).
- Los *pesos asociados a los objetivos de optimización* también se normalizan. Las magnitudes de los objetivos diferentes (económicos, de control..) se normalizan separadamente para compararlos equitativamente. En nuestro caso tenemos ahora las alturas como único objetivo económico.

$$\text{alfah}_1 = \frac{100}{1e+6}$$

$$\text{alfah}_2 = \frac{150}{1e+6}$$

- El *vector de pesos* correspondiente al ajuste de las ecuaciones (asociados a los residuos), es el siguiente:

$$\phi = [1 \ 0.02 \ 2 \ 20 \ 10.02 \ 5 \ 10]$$

2.2. Cálculo de los parámetros de diseño

Ahora una vez establecido el modelo con el que actúa la planta de sulfitación, construimos en MATLAB un programa que nos dé los parámetros de diseño de dicha planta con respecto a la situación planificada. A continuación se listan los códigos del programa principal Sulf2.m y del programa función Fsulf2.m

2.2.1 Programas

Sulf2.m

```
%Programa principal para el calculo del volumen y flujo
%de gas SO2 aquí se hace la llamada a la función constr

%Modelo con dos sulfitador en serie
% Aquí se calculan los parametros de diseno, minimizando el
% coste de construccion y operacion

% flujo de entrada litros/segundo
Fel=11.05;
% temperatura de entrada absoluta_kelvin
Te=328;
% pH de entrada
pHe1=8.5

% valores iniciales de las variables que se calculan
h10=15;%altura en dm
Fg10=0.00152;%flujo gas SO2 en mol/segundo
pHs10=6.5;
h20=10;%altura en dm
Fg20=0.001;%flujo gas SO2 en mol/segundo
pHs20=5.5;

k10=0.090 %coeficiente de disolucion maximal
k20=0.090
Fs10=k10*h10*Fg10;
Fs20=k20*h20*Fg20;

%concentracion en mol/litros
C10=Fs10/Fel;
C20=Fs20/Fel;

%C10=0.4;
%C20=0.4;
alfa10=0.35;
alfa20=0.45;
%Fs10=0.002;
%Fs20=0.0002;
% Limites inferiores de las variables

v1b=[0. 0.01 0. 0.01 0. 0.001...
      0. 0.01 0. 0.001 0. 0.001];
% Limites superiores de las variables

vub=[100. 10. 14. 20. 1. 1....
      100. 10. 14. 20. 1. 1.];
```



```

% Condiciones iniciales

y0 =[h10 Fg10 pHs10 C10 alfa10 Fs10...
      h20 Fg20 pHs20 C20 alfa20 Fs20];

%
%      Llamada a la funcion fmincon(sustituye a constr)
%
opciones(1)=1;
opciones(10)=10000000;

y=constr('fsulf8',y0,opciones,vlb,vub);

disp('Resultados de la optimizacion')

disp('alturas óptimas')
h1=y(1)
h2=y(7)

disp('flujos de gas óptimos')
Fg1=y(2)
Fg2=y(8)

disp('pH a la salida')
pHs1=y(3)
pHs2=y(9)

disp('alfa y concentración1 de sulfuroso a la salida1')
C1=y(4)
C2=y(10)

alfa1=y(5)
alfa2=y(11)

Fs1=y(6)
Fs2=y(12)

pause
%coloco esto como el modelo del sulfitador para tener kw y keq
Za=0.45344659; Ea=19010.7323; Rg=1.987; Zs=84415085.06;
Es=22.500;
Kw=Za*exp(-Ea/(Rg*Te));
Keq=Zs*exp(-Es/(Rg*Te));

%variables : volumen, concentraciones, parametros de la reaccion
disp('Volumenes en dm3=litros')
s1=h1*10
V1=h1*s1
s2=h2*10
V2=h2*s2

%relacion del modelo con dimensiones del sulfitador
ka1=0.09*h1;
ka2=0.09*h2;

Fs1=ka1*Fg1;
Fs2=ka2*Fg2;

alfa1=(-Keq+sqrt(Keq*Keq+Keq*C1))/(2*C1)

```

```
alfa2=(-Keq+sqrt(Keq*Keq+Keq*C2))/(2*C2)

Fe2=Fs1/C1

k21=alfa1/Fe1
k22=alfa2/(Fe2)

tau21=V1/Fe1
tau22=V2/(Fe2)

Ch1=10*exp(-pHs1);
Coh1=Kw/Ch1;
X1=Coh1-Ch1;
CaOHe1=Kw/10^(-pHe1);

pHe2=pHs1;
Ch2=10*exp(-pHs2);
Coh2=Kw/Ch2;
X2=Coh2-Ch2;
CaOHe2=Kw/10^(-pHe2);

pause

%residuos

r1=(1/10)*(ka1*Fg1-Fs1)
r2=(1/15)*(CaOHe1-X1-(alfa1*Fs1/Fe1))
r3=(1/5)*(alfa1-(-Keq+sqrt(Keq*Keq+Keq*C1))/(2*C1))
r4=(1/200)*(ka1*Fg1-Fe1*C1)

r5=(1/10)*(ka2*Fg2-Fs2)
r6=(1/20)*(CaOHe2-X2-(alfa2*Fs2/Fe2))
r7=(1/15)*(alfa2-(-Keq+sqrt(Keq*Keq+Keq*C2))/(2*C2))
r8=(1/200)*(ka2*Fg2-Fe2*C2)

%pesos

alfah1=100/1e+6;%%1.0000e-004
fi1=1;%%1/10=0.1
fi2=0.02;%%0.02/15=0.0013
fi3=2;%%2/5=0.4000
fi4=20;%%20/200=0.1000

alfah2=150/1e+6;%%1.0000e-004
fi5=1;%%1/10=0.1
fi6=0.02;%%0.02/15=0.0013
fi7=5;%%2/5=0.4000
fi8=10;%%20/200=0.1000

%funcion a minimizar
f=(alfah1*h1)^2+(alfah2*h2)^2+(fi1*r1)^2+...
  (fi2*r2)^2+(fi3*r3)^2+(fi4*r4)^2+(fi5*r5)^2+...
  (fi6*r6)^2+(fi7*r7)^2+(fi8*r8)^2
```

Fsulf2.m

```
function [f,g]=fsulf8(y)
```

```

h1=y(1);
Fg1=y(2);
pHs1=y(3);
C1=y(4);
alfa1=y(5);
Fs1=y(6);
h2=y(7);
Fg2=y(8);
pHs2=y(9);
C2=y(10);
alfa2=y(11);
Fs2=y(12);

% flujo de entrada litros/segundo
Fe1=11.05;
%Fe2=Fs1/C1
% temperatura de entrada absoluta_kelvin Te1=Te2==Te
Te=328;
% pH de entrada
pHe1=8.5;
%pHe2=pHs1;
%coloco esto como el modelo del sulfitador para tener kw
Za=0.45344659; Ea=19010.7323; Rg=1.987; Zs=84415085.06;
Es=22.500;
Kw=Za*exp(-Ea/(Rg*Te));
Keq=Zs*exp(-Es/(Rg*Te));
%variables : volumen, concentraciones, parametros de la reaccion

ka1=0.09*h1
Ch1=10*exp(-pHs1);
Coh1=Kw/Ch1;
X1=Coh1-Ch1;
CaOHe1=Kw/10^(-pHe1);

Fe2=Fs1/C1;
ka2=0.09*h2
pHe2=pHs1;
Ch2=10*exp(-pHs2);
Coh2=Kw/Ch2;
X2=Coh2-Ch2;
CaOHe2=Kw/10^(-pHe2);

%residuos

r1=(1/10)*(ka1*Fg1-Fs1)
r2=(1/15)*(CaOHe1-X1-(alfa1*Fs1/Fe1))
r3=(1/5)*(alfa1-(-Keq+sqrt(Keq*Keq+Keq*C1))/(2*C1))
r4=(1/200)*(ka1*Fg1-Fe1*C1)

r5=(1/10)*(ka2*Fg2-Fs2)
r6=(1/15)*(CaOHe2-X2-(alfa2*Fs2/(Fe2)))
r7=(1/5)*(alfa2-(-Keq+sqrt(Keq*Keq+Keq*C2))/(2*C2))
r8=(1/200)*(ka2*Fg2-(Fe2)*C2)

%pesos

alfah1=100/1e+6; %%1.0000e-004
fil1=1; %1/10=0.1

```

```
fi2=0.02;%0.02/15=0.0013
fi3=2;%2/5=0.4000
fi4=20;%20/200=0.1000

alfah2=150/1e+6;%1.0000e-004
fi5=1;%1/10=0.1
fi6=0.02;%0.02/15=0.0013
fi7=5;%2/5=0.4000
fi8=10

%funcion a minimizar
f=(alfah1*h1)^2+(alfah2*h2)^2+(fi1*r1)^2+...
  (fi2*r2)^2+(fi3*r3)^2+(fi4*r4)^2+(fi5*r5)^2+...
  (fi6*r6)^2+(fi7*r7)^2+(fi8*r8)^2

g=[-1+alfa1 -alfa1
   -1+alfa2 -alfa2
   -pHs1+pHs2 -pHs1
   -5.5+pHs2 -pHs2
   -1+ka1 -ka1
   -1+ka2 -ka2
   -0.3+Fg1 -Fg1
   -0.3+Fg2 -Fg2]]
```

2.2.2 Resultados

La optimización converge con éxito. Restricciones activas: 4

alturas óptimas

$h1 = 9.9949$ $h2 = 9.9999$

flujos de gas óptimos

$Fg1 = 0.1262$ $Fg2 = 0.0138$

pH a las salidas

$pHs1 = 6.5000$ $pHs2 = 5.5000$

alfas y concentraciones de sulfuroso a las salidas

$C1 = 0.0103$ $C2 = 0.0010$
 $alfa1 = 0.2500$ $alfa2 = 0.2500$

flujos de líquido a las salidas

$$F_{s1} = 0.1135 \quad F_{s2} = 0.0124$$

Volúmenes en litros

$$s_1 = 99.9495 \quad V_1 = 998.9900$$

$$s_2 = 99.9989 \quad V_2 = 999.9780$$

Flujo de entrada al segundo sulfitor

$$F_{e2} = 11.0347$$

Otros parámetros

$$k_{a1} = 0.8995 \quad k_{a2} = 0.9000$$

$$k_{21} = 0.0226 \quad k_{22} = 0.0227$$

$$\tau_{21} = 90.4063 \quad \tau_{22} = 90.6215$$

Residuos

$$r_1 = 0 \quad r_2 = 8.3314e-004 \quad r_3 = 0 \quad r_4 = -7.8881e-007$$

$$r_5 = 0 \quad r_6 = 0.0020 \quad r_7 = 0 \quad r_8 = 6.9662e-006$$

$$f = 3.2560e-006$$

Flujos salientes en los sulfitadores

$$F_{s2}/C_2 = 12.4274 \text{ litros/seg}$$

$$F_{s1}/C_1 = 11.0347 \text{ litros/seg}$$

Vemos cómo aunque estos flujos son similares, no son exactamente iguales, tan solo el flujo que sale del primer sulfitor es casi idéntico al de entrada a la planta 11.05 litros/seg. Esto supone que el flujo no es estacionario en la planta, teniendo en cuenta que la salida es inferior a la entrada total, se produciría una acumulación de líquido en la planta. Pero hemos de tener en cuenta que los residuos no son exactamente iguales a cero. Veremos en simulación si esto afecta al funcionamiento del sistema de modo decisivo o se absorbe.

2.3. Simulación de la planta de sulfitación diseñada

A partir de la serie de datos obtenidos en la optimización, construimos la simulación de los dos sulfitadores en serie, mediante dos programas en ACSL, uno el principal y el segundo el fichero de comandos. Consideramos Tau_1 , el tiempo característico de la disolución el mismo para ambos sulfitadores.

Según lo visto a lo largo del problema, será necesario adaptar la simulación con los dos sulfitadores de manera que sea verdaderamente una simulación, esto es, que establezca una comunicación entre la dinámica de los dos sulfitadores de acuerdo con las magnitudes que los interconectan.

Tenemos obviamente que el pH de salida del primero de los sulfitadores es el de entrada al segundo. Incluiremos además la simulación de las alturas del líquido en los sulfitadores para validar el que el flujo en la planta de sulfitación es estacionario según planteamos y buscamos. Hasta ahora quedaban fijadas como constantes, que en caso de ser exactamente estacionario, no variarían pero siempre es mejor simular que se cumple que imponerlo, porque de no verificarse, falsearíamos los resultados.

Mediante la aplicación de un balance de masas la variación de alturas en los sulfitadores corresponde a la ecuación:

$$S \cdot \frac{dh}{dt} = q_i - q_o \rightarrow h = \frac{1}{S} \int (q_i - q_o) dt$$

Aplicado a los dos sulfitadores:

La altura del primer sulfitador corresponde a calcular:

$$h_1 = \frac{1}{S_1} \int (F_{e1} - F_{e2}) dt \text{ donde } F_{e2} = \frac{F_{s1}}{C_1}$$

La altura del segundo de los sulfitadores:

$$h_2 = \frac{1}{S_2} \int (F_{e2} - \frac{F_{s2}}{C_2}) dt$$

Con todo esto el listado de los programas de simulación cambia a la relación que sigue:

2.3.1 Programas

Listamos los programas utilizados para la simulación:

Sulfitador2.csl

```

PROGRAM dos sulfitador en serie
!--double precision alfa

INITIAL
!-----Defino constantes del programa

      constant Fg1= 0.1262
      constant Fg2= 0.0138
      constant Phs1= 6.5
      constant Phs2= 5.5

      CONSTANT phe1 = 8.5 !---pH del agua a la entrada
      !CONSTANT phe2 = 6.5=Phs1
!--flujo de agua (l/s)
      CONSTANT Fe1 = 11.05!---valor medio (l/s)
      !---CONSTANT Fe2 = 11.0460!---valor medio (l/s)
      constant Te = 55
      Tabs=Te+273
      !" parametros químicos "

      constant Za=0.45344659, Ea=19010.7323, Rg=1.987
      constant Zs=84415085.06, Es=22500

      !" coeficiente de disociación del agua "

      KW=Za*exp(-Ea/(Rg*Tabs))

      !" Coeficiente de ionización "

      Keq=Zs*EXP(-Es/(Rg*Tabs))

      !" valores iniciales del agua que esta en la planta "

      constant V1= 998.9900
      constant V2= 999.9780
      constant h01= 9.9949, s1= 99.9495
      constant h02= 9.9999, s2= 99.9989
      ConH1=10**(-pHs1)
      ConOH1=KW/ConH1
      Xi1=ConOH1-ConH1
      raiz1=sqrt(abs(1+4*KW/( Xi1 * Xi1)))

      ConH2=10**(-pHs2)
      ConOH2=KW/ConH2
      Xi2=ConOH2-ConH2
      raiz2=sqrt(abs(1+4*KW/( Xi2 * Xi2)))
      !" valores iniciales del agua que entra en la planta "

      Tau21=V1/Fe1
      CAOHe1=KW/(10**(-phe1))          !" [CaOH+] = [OH-] "

      !Fei2=Fs1/C1
      !Fe2=Fei2
      Tau22=V2/(Fs1/C1)
      CAOHe2=KW/(10**(-Phs1))
      !" valores iniciales del SO2 que entra en la planta "

      constant Ka1= 0.8995!" Coeficiente de disolución maximal "

```

```

constant Tau1 = 1.7 !" Tiempo característico de la disol "
Fsi1=Ka1*Fg1      !" Flujo de Gas disuelto (mol/s) "
Fs1=Fsi1

constant Ka2= 0.9000!" Coeficiente de disolución maximal "
!--constant Tau1 = 1.7 !" Tiempo característico de la disol
"

Fsi2=Ka2*Fg2      !" Flujo de Gas disuelto (mol/s) "
Fs2=Fsi2

!" cantidad [SO3H2]+[SO3H-] en el agua de la planta "
C1=Fsi1/Fel1 !" Concentración estacionaria (mol/l)
(dC/dt=0) "
Ci1=C1

C2=Fsi2/(Fs1/C1) !" Concentración estacionaria (mol/l)
(dC/dt=0) "
Ci2=C2

alpha1=(-Keq+sqrt(Keq*Keq+4*Keq*Ci1))/(2*Ci1)
alpha2=(-Keq+sqrt(Keq*Keq+4*Keq*Ci2))/(2*Ci2)

END! fin del initial

DYNAMIC!-----" se simulan el sulfitador
DERIVATIVE
!----- " ecuaciones del sulfitador "

!" ecuación de la disolución del SO2 en el agua "

Fs1=integ((-Fs1+Ka1*Fg1)/Tau1,Fsi1)
Fs2=integ((-Fs2+Ka2*Fg2)/Tau1,Fsi2)

!" ecuación de la variación de cantidad X=[OH-]-[H+] "

X1=integ((-X1+CAOHe1)/Tau21-alpha1*Fs1/V1,Xi1)
X2=integ((-X2+CAOHe2)/Tau22-alpha2*Fs2/V2,Xi2)
alpha1=(-Keq+sqrt(Keq*Keq+4*Keq*C1))/(2*C1)
alpha2=(-Keq+sqrt(Keq*Keq+4*Keq*C2))/(2*C2)
!" ecuación de la variación de cantidad [SO3H2]+[SO3H-] "

C1=integ(Fs1/V1-Fel1*C1/V1,Ci1)
C2=integ(Fs2/V2-(Fs1/C1)*C2/V2,Ci2)

!" Concentración de H+ "

raiz1=sqrt(abs(1+4*KW/( X1 * X1)))
ConH1=X1/2*(-1+sign(1.0,X1)*raiz1)

raiz2=sqrt(abs(1+4*KW/( X2 * X2)))
ConH2=X2/2*(-1+sign(1.0,X2)*raiz2)

h1=integ((Fel1-(Fs1/C1))/s1,h01)

h2=integ(((Fs1/C1)-(Fs2/C2))/s2,h02)

!" pH "

```



```

                if (ConH1.gt.0) pH1=bound(0.,14.,-log10(ConH1))
                if (ConH2.gt.0) pH2=bound(0.,14.,-log10(ConH2))

                END! fin del derivative
!---intervalo de comunicación
                cinterval cint=0.9
                constant tmax=400.
                TERMT(t.GE.tmax)

!algorithm ialg=5

END! de Dynamic

END! fin del programa

```

Sulfitador2.cmd

```

set hvdprn=.t.
set title=' sulfitador optimo modelado'

prepar t, Fg1, Ph1, Te1, Fe1, h1, C1, Fg2, Ph2, Te2, Fe2, h2, C2
output t, Fg1, Ph1, Te1, Fe1, h1, C1, Fg2, Ph2, Te2, Fe2, h2, C2

s grdspl=.f.
s calplt=.f.
s strplt=.t.

procedure Ph1
set title(41)='Ph en sulfitador1 vs. Time'
plot Ph1/tag='(Ph1)' /LO=0 /HI=14
end

procedure Ph2
set title(41)='Ph en sulfitador2 vs. Time'
plot Ph2/tag='(Ph2)' /LO=0 /HI=14
end

procedure c1
set title(41)='Conc en sulfitador1 vs. Time'
plot C1/tag='(C1 moles/litro)' /LO=-1 /HI=1
end

procedure c2
set title(41)='Conc en sulfitador2 vs. Time'
plot C2/tag='(C2 moles/litro)' /LO=-1 /HI=1
end

procedure nivel1
set title(41)='nivel en sulfitador1 vs. Time'
plot h1 /tag='(metros)' /LO=0 /HI=12
end

procedure nivel2
set title(41)='nivel en sulfitador2 vs. Time'
plot h2 /tag='(metros)' /LO=0 /HI=12
end

```

```
print /all /nciprn=10  
end
```

2.3.2 Resultados

Obtenemos entonces los resultados detallados a continuación, hemos aumentado el tiempo de simulación a 400 horas.

En el instante de tiempo correspondiente a $T = 400$ horas, tenemos los siguientes resultados en simulación:

Flujos de SO_3H_2 a las salidas del sulfitador:

FS1 0.11351700 FS2 0.01242000

Flujos de gas:

FG1 0.12620000 FG2 0.01380000

pH alcanzado en cada sulfitador:

PH1 7.09836000 PH2 5.02683000

Concentraciones obtenidas en cada sulfitador:

C1 0.01027300 C2 0.00112398

Alturas mantenidas en cada sulfitador:

H1 9.99490000 H2 9.99990000

Rango de variación de pH1 =[6.50000000 7.09836000] , Rango de variación de pH2=[5.50000000 5.02683000].

A continuación se representan gráficamente los resultados de la simulación. Los valores del pH en ambos sulfitadores se representan en las siguientes figuras:

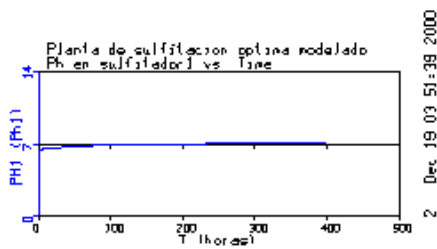


Figura 6: Ph en el primer sulfitador

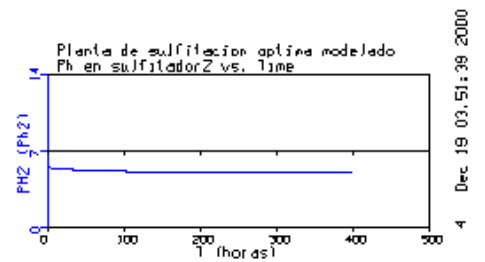


Figura 7: Ph en el segundo sulfitador

Ahora vemos cómo va variando el pH en ambos sulfitadores, y cómo llegan finalmente en el primer sulfitador a un estacionario en un valor ligeramente superior al que inicialmente dimos como estacionario por la optimización.

En cuanto al segundo sulfitador, el pH va descendiendo a lo largo de la simulación, esto se interpreta como una mejora en el resultado, debido a lo que se pretende es bajar al máximo el pH a la salida de planta.

Veamos ahora en qué ha revertido la modificación del código con respecto a las alturas en los sulfitadores:

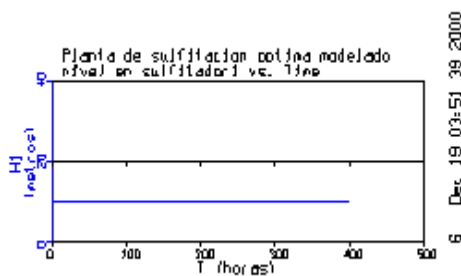


Figura 8: nivel en el primer sulfitador

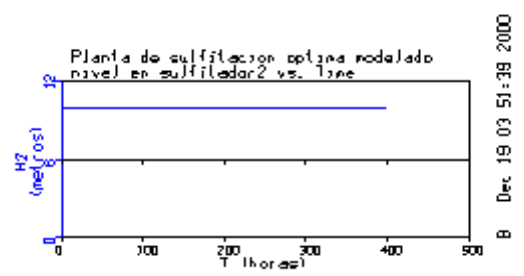


Figura 9: nivel en el segundo sulfitador

Valores de las concentraciones:

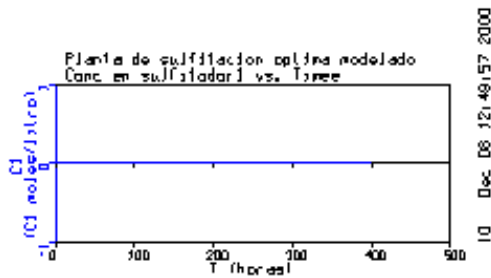


Figura 10: concentración en el primer sulfitor

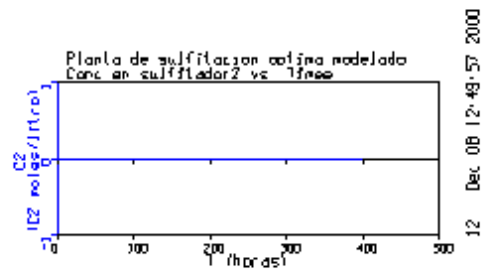


Figura 11: concentración en el segundo sulfitor

Flujos a la salida de los sulfitores:

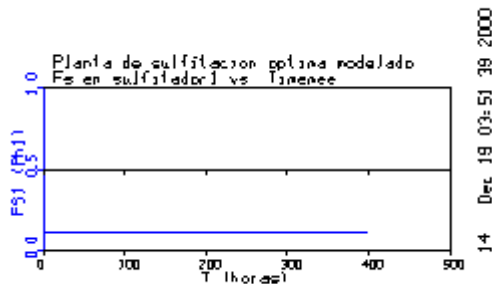


Figura 12: Fs en el primer sulfitor

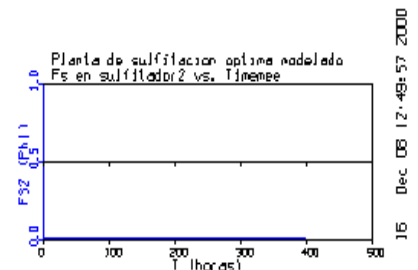


Figura 13: Fs segundo sulfitor

2.3.3 Conclusiones de la simulación:

El código en la versión aquí presentada está algo más completo, debido a que da cabida a procesos o magnitudes que en el comienzo del trabajo se consideraban constantes o no se consideraban, sin embargo aún queda bastante por modelar e incluir en la optimización y posterior simulación.

Por otro lado las alturas validan el flujo estacionario que buscábamos de manera probada, sin embargo los pHs, en el segundo de los sulfitores, no llega al estacionario en los tiempos dados, se supone que lleguen, pero también tenemos que considerar que en los cálculos los residuos aunque pequeños nos son nulos, lo que unido a la alta no linealidad del problema tratado, conduce a los resultados obtenidos.

El resto de las variables, concentraciones, flujos de gas a la salida... verifican correctamente el estado estacionario.

3. Conclusiones del estudio realizado:

De los datos obtenidos con la modificación de la estructura de la torre de sulfitación según diseño óptimo los volúmenes obtenidos en la segunda estructura (dos sulfitores en serie) son menores que los dados por un solo sulfitor. Lo mismo ocurre con los flujos de gas SO₂ que

hay que introducir en los tanques. El pH obtenido en la salida de las dos estructuras es similar, con un 5.4997 para la primera y 5.5 en la segunda (datos de la optimización).

Podemos ver de manera más clara dicho resultado en la siguiente tabla.

| | Estructura 1 | Estructura 2 |
|-------------------------|---------------|--------------|
| Volúmenes (litros) | V=1.2346e+003 | V1=998.9900 |
| | | V2=999.9780 |
| Flujos de gas (mol/seg) | Fg=0.2218 | Fg1=0.1262 |
| | | Fg2=0.0138 |

Tabla 1 :Resultados del diseño de las estructuras

De lo que concluimos que el coste de construcción dado por los tamaños de las unidades de la planta y los costes de operación, dados principalmente por los flujos de SO₂, son menores en la estructura constituida por los dos sulfitadores en serie.