

SIMULACIÓN DINÁMICA DE UN COLECTOR DE H₂ UTILIZANDO UNA LIBRERÍA DINÁMICA

Mar Valbuena Barrenechea

Dpto. De Ingeniería de Sistemas y Automática, C/Real de Burgos s/n, Valladolid, Universidad de Valladolid
mvalbuena@autom.uva.es

Daniel Sarabia Ortiz

Dpto. De Ingeniería de Sistemas y Automática, C/Real de Burgos s/n, Valladolid, Universidad de Valladolid
dsarabia@autom.uva.es

César de Prada Moraga

Dpto. De Ingeniería de Sistemas y Automática, C/Real de Burgos s/n, Valladolid, Universidad de Valladolid
prada@autom.uva.es

Resumen

Este trabajo aborda el problema de simulación dinámica de un colector de H₂ en una refinería, como primer paso para el desarrollo de una simulación dinámica de la red completa de H₂. Se pretenden estudiar los fenómenos de transporte de materia y energía de los colectores de H₂ desde el punto de vista de la presión, temperatura, peso molecular, etc., teniendo en cuenta la distribución espacial de los mismos. Para ello se usa una librería gráfica desarrollada en EcosimPro® que permite el estudio de diferentes estructuras.

Palabras Clave: Simulación dinámica, redes de hidrógeno, colocación ortogonal, colocación ortogonal en elementos finitos, diferencias finitas, volúmenes finitos, librería dinámica de componentes en EcosimPro®.

1 INTRODUCCIÓN

El presente trabajo se enmarca en un proyecto de investigación más amplio cuyo objetivo es el de desarrollar nuevos conocimientos en el campo del control y optimización de sistemas de gran escala en la industria de procesos y demostrar su aplicabilidad a escala industrial.

El interés por este tipo de sistemas ha ido creciendo progresivamente por su impacto en el funcionamiento global de un sistema o factoría, tanto económico como técnico, al igual que por el papel estratégico que a menudo desempeñan [8]. Entre ellos se encuentran las redes de distribución: de agua, de electricidad, de gas, de telecomunicaciones, etc.,

de cuya gestión eficaz pueden depender tanto la satisfacción de las demandas de los usuarios como la rentabilidad de su operación. En particular, las redes de distribución de vapor, gas, tratamiento de aguas, etc. de muchas industrias de procesos enlazan los centros de producción o almacenaje con las plantas donde se consumen dichos recursos a través de un sistema de distribución cuyas características habituales son su gran escala, la interacción entre los distintos elementos, la variabilidad de las demandas, la presencia de diversas restricciones de operación y el control de su funcionamiento a través de decisiones de diferente naturaleza.

La producción de hidrógeno en grandes cantidades sólo es factible hoy día a partir también de hidrocarburos en plantas cuyo elemento principal son los hornos de reformado. Desde ellas se distribuye a las diferentes plantas consumidoras a través de un sistema complejo de tuberías (colectores) de varios kilómetros de longitud, diferentes diámetros y trabajando a distintas presiones y purzas.

La Figura 1 muestra un esquema típico de una red, con sus diferentes colectores (de alta pureza C-H4, de media pureza C-H3 y de baja pureza C-BP) y con las principales plantas productoras de H₂, algunas dedicadas en exclusiva a producir H₂ (H3 y H4) y otras como P1 y P2 (unidades de platformados) cuya principal función es aumentar el octanaje de las gasolinas, pero que generan hidrógeno (de más baja pureza) como subproducto y que también es utilizado. Además, la figura muestra las plantas consumidoras representadas también por diferentes bloques (G1, G2, G3, etc.), y da una idea de la complejidad y de la amplia distribución espacial del proceso. Aunque las redes tienen varios kilómetros a lo largo de una refinería, su capacidad de almacenamiento es muy limitada, por lo que para garantizar el cumplimiento de las demandas

cambiantes de las plantas consumidoras se mantiene un exceso de hidrógeno en la red de distribución que acaba siendo enviado a la red de fuel-gas para su consumo en hornos y otros equipos mezclado con otros combustibles o, eventualmente, a la antorcha de la refinería. Sin embargo, al ser el hidrógeno un gas caro de producir, no es deseable una sobreproducción aunque ésta asegure la alimentación de las plantas consumidoras. Por otro lado un defecto de hidrógeno puede limitar la producción o la vida de los catalizadores de los reactores. Por ello, la gestión de la red debe atender simultáneamente a un nivel de control de presiones y caudales del sistema y a un nivel de optimización de las decisiones globales.

El tema de la optimización ha sido abordado mediante un enfoque basado en la determinación del estado de la red y en la optimización posterior de las decisiones, en el marco de un sistema de ayuda a la toma de decisiones [4] y [10]. Dicho enfoque se basa además en modelos estacionarios de la red de H₂, suponiendo mezclas ideales de gases y sin tener en cuenta la distribución espacial de la propia red. Sin embargo, dado que habitualmente el sistema de control de la red es descentralizado, con estructuras de control clásicas y compartido en parte los reguladores de las plantas consumidoras, puede no ser fácil la implementación de las recomendaciones globales del optimizador para el conjunto de la red tanto por las interacciones entre sus elementos como por las restricciones dinámicas de bajo nivel de caudales y presiones que no han sido tenidas en cuenta explícitamente en el nivel de optimización.

2 DESCRIPCIÓN DEL COLECTOR DE H₂

El colector de H₂ de alta pureza parte de la unidad productora H4 (en la parte izquierda de la Figura 1) y

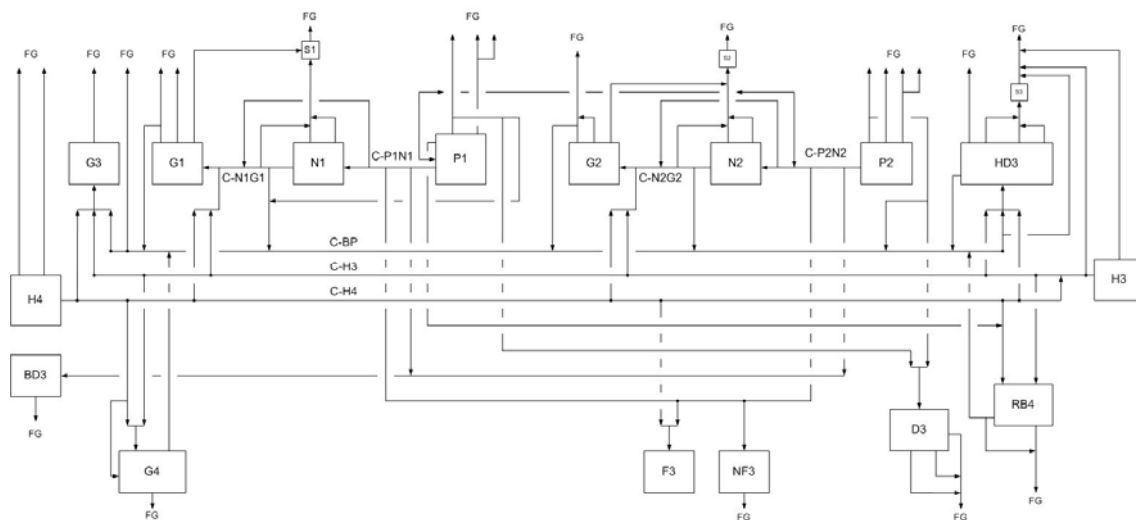


Figura 1. Esquema típico de una red de H₂ de una refinería

suministra H₂ a otra serie de unidades. Para conocer la dinámica de las variables (densidad, presión y temperatura) en función tanto del tiempo como de la coordenada longitudinal de la conducción, se plantean los correspondientes balances de materia, cantidad de movimiento y energía basados en una descripción macroscópica.

Además se supone que en la dirección de la coordenada radial no hay variación de densidad, presión y temperatura, es decir, se globaliza el modelo con respecto a esa coordenada.

A continuación se muestran las ecuaciones del modelo distribuido del colector. La ecuación (1) describe el balance de conservación de materia total cuando el fenómeno de transporte es sólo debido a la convección [1]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial m}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rv_r m) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} (v_\theta m) + \frac{\partial}{\partial z} (v_z m) \\ = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\rho \bar{D}_R r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{m}{\rho} \right) \right] \\ + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\rho \bar{D}_\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{m}{\rho} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\rho \bar{D}_z \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{m}{\rho} \right) \right] \\ + R \end{aligned} \quad (1)$$

Donde las variables m , v_r , v_θ , v_z , ρ , \bar{D}_R , \bar{D}_θ , \bar{D}_z , r , θ , z y t son la masa, componente de la velocidad en dirección r , componente de la velocidad en dirección θ , componente de la velocidad en dirección z , densidad del fluido, componente del coeficiente de dispersión en dirección r , componente del coeficiente de dispersión en dirección θ , componente del coeficiente de dispersión en dirección z , coordenada radial, coordenada angular, coordenada longitudinal y tiempo, respectivamente.

Las ecuaciones (2) y (3) muestran el balance de materia individual donde C_k es la composición del componente k (hidrógeno e impurezas):

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(mC_k)}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(rv_r mC_k) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}(v_\theta mC_k) \\ & + \frac{\partial}{\partial z}(v_z mC_k) \\ & = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\rho \tilde{D}_R r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{mC_k}{\rho} \right) \right] \\ & + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\rho \tilde{D}_\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{mC_k}{\rho} \right) \right] \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left[\rho \tilde{D}_z \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{mC_k}{\rho} \right) \right] + R \end{aligned} \quad (2)$$

$$\sum C_k = 1 \quad (3)$$

La ecuación (4) muestra el balance de la cantidad de movimiento:

$$\begin{aligned} & m \left(\frac{\partial v_z}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_z}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) \\ & = - \frac{\partial P}{\partial z} Vol \\ & + \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\tilde{\mu}_{zr} r \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\tilde{\mu}_{z\theta} \frac{\partial v_z}{\partial \theta} \right) \right. \\ & \left. + \frac{\partial}{\partial z} \left(\tilde{\mu}_{zz} \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) \right] + mg_z \end{aligned} \quad (4)$$

Donde P , $\tilde{\mu}_{zr}$, $\tilde{\mu}_{z\theta}$ y $\tilde{\mu}_{zz}$ se corresponden con la presión del fluido y con la viscosidad efectiva en coordenadas r , θ y z , respectivamente. Se considera que el fluido que circula por el interior de la tubería sufre pérdida de cantidad de movimiento debido al rozamiento. Entonces, se añade este término en el segundo miembro de la ecuación (4): $P_{roz} = -\rho \frac{\partial}{\partial z} v ||v||$.

La ecuación (5) muestra el correspondiente balance de energía, donde no se ha incluido el fenómeno de la disipación viscosa que es la conversión de la energía cinética en calor debida a la fricción interna al fluido ya que se puede considerar despreciable.

$$\begin{aligned} & mC_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v_r \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) \\ & = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\tilde{k}_R r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\tilde{k}_\theta \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left(\tilde{k}_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) + S_R \end{aligned} \quad (5)$$

Donde C_p , T , \tilde{k}_R , \tilde{k}_θ y \tilde{k}_z , son respectivamente la capacidad calorífica, la temperatura y el componente

de la conducción en las coordenadas r , θ y z . Se considera que a lo largo de la tubería existen pérdidas de calor hacia el exterior. Este término se introduce en el segundo miembro de la ecuación (5): $Q_{pérdidas} = -U(T - T_{ext})$, siendo U el coeficiente global de transmisión de calor.

Finalmente, se tiene la ecuación de los gases ideales:

$$PV = nRT \quad (6)$$

Se considera esta ecuación porque el gas que circula por el interior de los colectores no está a presiones ni temperaturas muy elevadas, donde aparece el volumen, V , el número de moles, n y la constante de los gases ideales, R .

3 MODELADO DEL COLECTOR DE H₂

Los métodos de aproximación analítica de la solución de una ecuación en derivadas parciales, proporcionan frecuentemente información útil acerca del comportamiento de la solución en valores críticos de la variable dependiente, pero tienden a ser más difíciles de aplicar que los métodos numéricos [5]. Los métodos numéricos son técnicas mediante las cuales es posible formular problemas matemáticos de tal forma que puedan resolverse usando operaciones aritméticas. Muchos de los métodos numéricos ya eran conocidos desde el siglo XIX. Sin embargo, su gran desarrollo y popularidad sucede de forma paralela al gran avance de los modernos ordenadores. Esto se debe a la estrategia común de todos los métodos numéricos, que consiste en transformar las ecuaciones diferenciales que gobiernan un problema en un sistema de ecuaciones algebraicas que van a depender de un número finito de incógnitas, que en la mayoría de los casos es de muchos miles siendo sólo posible su resolución con un ordenador [7].

El uso de modelos distribuidos, esto es, modelos con ecuaciones diferenciales que incluyen además derivadas parciales respecto a coordenadas espaciales (1) - (6) imposibilita la utilización de integradores convencionales para integrar el modelo. Los métodos de colocación ortogonal y de diferencias finitas son ampliamente usados para resolver numéricamente ecuaciones en derivadas parciales (PDEs), transformando las derivadas parciales en un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias (ODEs) discretizando el dominio espacial.

3.1 DIFERENCIAS FINITAS

El método de diferencias finitas es ampliamente usado para resolver numéricamente ecuaciones en derivadas parciales (PDEs), transformando las

derivadas parciales por una aproximación en un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias (ODEs) discretizando el dominio espacial. En este método, una derivada en un punto discreto, x_j , se evalúa usando la información sobre las variables en ese punto x_j (información local). Una de las grandes ventajas del método de diferencias finitas es la gran riqueza en teoría existente que ayuda a resolver diferentes problemas. Temas como la consistencia numérica, convergencia y estabilidad han sido profundamente estudiados. Además ofrece una considerable flexibilidad cuando se trabaja en discretización de mallas ya que se pueden escoger las dimensiones de tiempo y espacio y se trata de un método intuitivo y fácil de implementar. Existen algunas variantes en el método de diferencias finitas y son función de cómo se realiza la aproximación la ecuación diferencial en derivadas parciales [9]. Sin embargo, la diferencia finita central es a menudo la más exacta y es la utilizada en este trabajo.

3.2 COLOCACIÓN ORTOGONAL

El método de colocación ortogonal es una variante del método de residuos ponderados, donde los nodos de aproximación están dados por las raíces de polinomios ortogonales como los de Jacobi, Legendre y Hermite, entre otros. La aproximación polinomial se hace en todo el dominio. Esta técnica ofrece mayor precisión que otros métodos, ya que la ecuación de discretización para un nodo en particular involucra a todos los nodos comprendidos en el dominio. La elección de estos puntos de colocación permanece de alguna forma arbitraria hasta que aparece el trabajo [11], quienes establecen la elección de los puntos de colocación como las raíces de polinomios ortogonales apropiados. Existen algunas variantes que dependen en la forma de fijar la función de prueba y de seleccionar la ubicación de los nodos, como: Colocación simple con función Delta de Dirac, Subdominios, Momentos, Galerkin, Mínimos Cuadrados, etc. [3], [1].

3.3 COLOCACIÓN ORTOGONAL EN ELEMENTOS FINITOS

En el método de elementos finitos, el dominio se subdivide en un número definido de regiones pequeñas, donde cada una de ellas es única. Sobre cada elemento finito, las variables dependientes (temperatura, velocidad, concentración, etc.), se aproximan utilizando funciones conocidas. Estas funciones pueden ser lineales o no lineales (polinomios generalmente), dependiendo de los nodos empleados para definir los elementos finitos. Posteriormente, se integran las ecuaciones gobernantes en cada elemento finito y el conjunto de soluciones individuales que se obtienen son ensambladas sobre el dominio total. Como

consecuencia de estas operaciones, se obtiene un conjunto de ecuaciones algebraicas, el cual se resuelve para, así, conocer el valor de las variables dependientes en los nodos [3]. Este método es adecuado para problemas con geometrías irregulares. Por otro lado, en el método de colocación ortogonal en elementos finitos, la colocación ortogonal no se hace en todo el dominio, sino que se hace en cada uno de los elementos finitos en los que se ha dividido el dominio (de longitud igual o diferente). Posteriormente, los elementos finitos se acoplan siguiendo el principio de continuidad. Esta técnica es adecuada para problemas en los que se sabe o se sospecha que existen cambios abruptos en los valores de las variables dependientes [2].

3.4 VOLÚMENES FINITOS

El método de volúmenes finitos es un método alternativo a los de diferencias finitas y colocación ortogonal. Se considera una malla de discretización del espacio fluido. En torno a cada punto de esta malla se construye un volumen de control que no se traslapa con los de los puntos vecinos. De esta forma, el volumen total de fluido deberá ser igual a la suma de los volúmenes de control considerados. El conjunto de ecuaciones diferenciales de un modelo se integra sobre cada volumen de control, lo cual se traduce como una discretización de dicho conjunto de ecuaciones. Los métodos de volumen finito están estrechamente relacionados con los métodos de diferencias finitas [6]; frecuentemente el método de volúmenes finitos puede interpretarse directamente como una aproximación de diferencias finitas. Es intuitivo pensar que la precisión será tanto mayor cuanto menor sea el tamaño del volumen por lo que interesa dividir el dominio en el mayor número posible de trozos. El precio a pagar es que la matriz de coeficientes del sistema que hay que resolver posteriormente es de gran tamaño, por lo que el costo computacional de resolución puede elevarse enormemente si el número de nodos es demasiado elevado. El punto de compromiso se alcanza encontrando la malla con el menor número de nodos posible que proporcione una solución independiente de ésta, es decir, una malla en la que no varíe significativamente la solución si el espacio se reduce.

4 LIBRERÍA DE COMPONENTES EN ECOSIMPRO® PARA SISTEMAS DISTRIBUIDOS

La creación de una librería dinámica de componentes en EcosimPro® permite construir de forma sencilla distintos modelos. Los componentes de “Entrada”, “Salida”, “Aporte”, “Consumo” y “Tubería” contienen las ecuaciones descritas de (1) - (6)

discretizadas utilizando Colocación Ortogonal, Colocación Ortogonal en Elementos Finitos o Diferencias Finitas. Por otro lado, los componentes “Nodo_1a2” y “Nodo_2a1” contienen ecuaciones de continuidad. Los dibujos asociados a los componentes se muestran en la Figura 2:

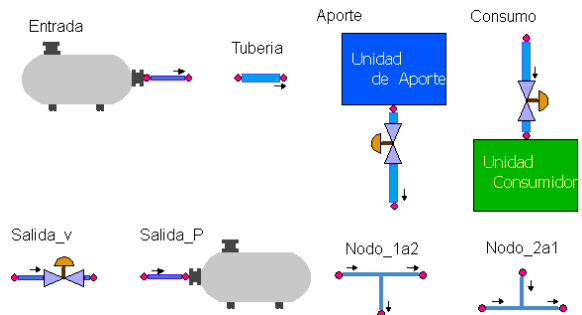


Figura 2. Librería de componentes en EcosimPro®

El componente de “Entrada” al colector procede de un depósito, luego las condiciones de contorno en ese punto serán la presión, la temperatura y la concentración del fluido. El componente de “Aporte” parte de una válvula, por lo que la velocidad, la temperatura y la concentración del fluido son condiciones de contorno. Por otro lado, el componente de “Consumo” finaliza con una válvula que se sitúa a la entrada de las unidades consumidoras y, por ello, en ese punto la velocidad es una condición de contorno. Por último, analizando el componente de “Salida”, se puede tener al final de la corriente una válvula o un depósito siendo la velocidad o la presión condición de contorno, respectivamente. Dependiendo de las condiciones de contorno que se escojan, el problema a resolver es diferente. Para tenerlo en cuenta se han incluido diferentes componentes.

Con esta librería de componentes se pueden realizar análisis precisos de transitorios. Además, presenta la ventaja de que se puede ampliar de forma rápida y sencilla con nuevos componentes que pudieran resultar necesarios para la simulación de sistemas

más complejos, por ejemplo, componentes de tipo de control como reguladores PID, etc.

5 EJEMPLO Y RESULTADOS

Se va a considerar el sistema de la Figura 3, que consiste en un colector formado por dos unidades de aporte y tres unidades consumidoras. Este ejemplo se va a resolver mediante los métodos de colocación ortogonal, colocación ortogonal en elementos finitos, diferencias finitas y volúmenes finitos. En la Tabla 1 se tiene el número de ecuaciones y variables que emplea cada método y en la Tabla 2 se muestra el número de nodos en que se ha dividido cada componente.

Tabla 1. Número de ecuaciones y variables

| | CO | CO en EF | DF | VF |
|---------|------|----------|------|------|
| Nº ec. | 929 | 1406 | 1397 | 807 |
| Nº var. | 1369 | 1720 | 1864 | 1101 |

Tabla 2. Número de nodos de cada componente

| | CO | CO en EF | DF | VF |
|---------------------|-------------|------------------------------------|-------------|-------------|
| Nº Nodos Interiores | 2 | 2 | 5 | 5 |
| Nº Nodos total | $N_{tot}=4$ | $N^{\circ} EF: 2$ $N_{tot} = 7$ | $N_{tot}=7$ | $N_{tot}=7$ |

Se ha querido realizar un salto en la composición del fluido de entrada al colector procedente de la unidad de “Entrada” para ver cómo afecta a la composición del fluido a lo largo del colector. Inicialmente, todas las composiciones de aporte son iguales (pureza del hidrógeno del 99.9%). Después, la composición de “Entrada” pasa a ser del 99.85% en pureza del hidrógeno. Para ver claramente los resultados, se representa en las gráficas el primer nodo de cada componente del colector principal (es decir, los primeros nodos de los componentes “Entrada”, “Tubería” y “Salida”).

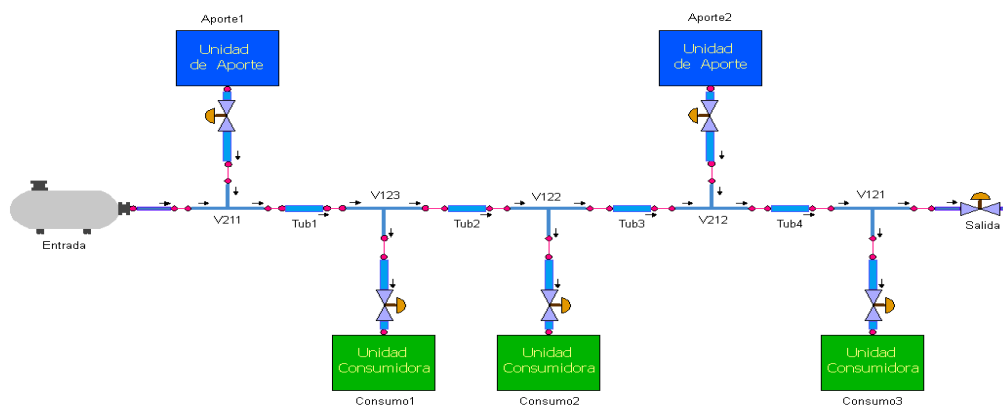


Figura 3. Ejemplo de un colector con dos unidades de aporte y tres unidades consumidoras

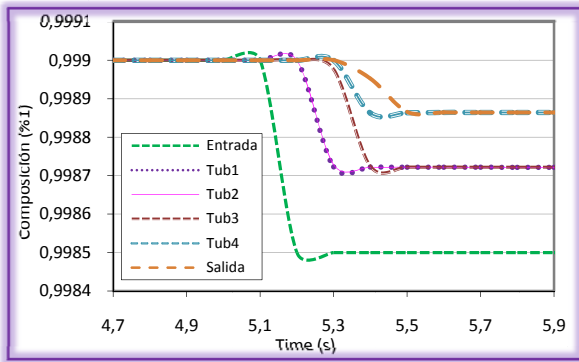


Figura 4. Composición del colector utilizando CO al variar la composición de “Entrada”

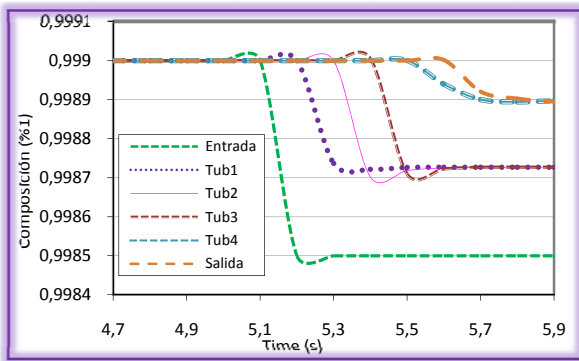


Figura 5. Composición del colector utilizando CO en EF al variar la composición de “Entrada”

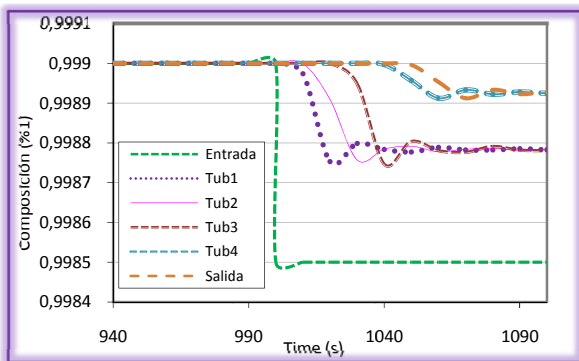


Figura 6. Composición del colector utilizando DF al variar la composición de “Entrada”

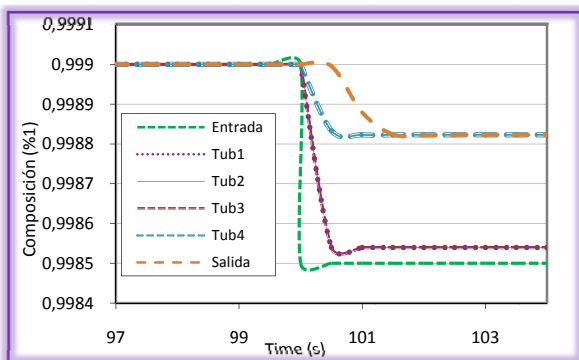


Figura 7. Composición del colector utilizando VF al variar la composición de “Entrada”

Tal y como muestran las figuras 4 – 7, al disminuir la composición del fluido de entrada al colector principal, disminuye la composición a lo largo del colector ya que esta variación se transmite de un componente a otro. Hay que destacar que la composición de los componentes “*Tubería1*”, “*Tubería2*” y “*Tubería3*” es la misma, pero diferente a la composición de “*Entrada*” ya que entre medias existe una corriente de aporte, “*Aporte1*” cuyo fluido posee una composición del 99.9% en pureza de H_2 . Lo mismo ocurre con la composición de los componentes “*Tubería2*” y “*Salida*”, que aunque entre ellos tienen la misma composición, ésta es diferente al resto de los componentes del colector principal puesto que entra desde “*Aporte2*” un fluido con 99.9% en pureza de H_2 . También se puede observar que la respuesta del modelo ante estos cambios es suave, de segundo orden, subamortiguada y con un pequeño tiempo de estabilización (excepto para el caso de diferencias finitas). Como era de esperar, existe un retardo en la respuesta del fluido a medida que éste avanza por el colector.

A continuación se hace otro salto en la composición, pero en este caso es en la composición de entrada al colector principal desde el componente “*Aporte1*” pasando de 99.9% a 99.86% y luego de 99.86% a 99.91%.

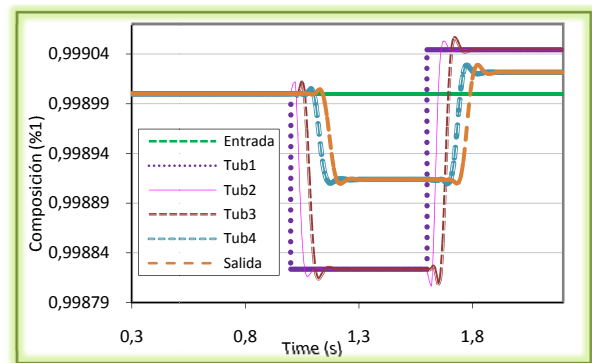


Figura 8. Composición del colector utilizando CO al variar la composición de “Aporte1”

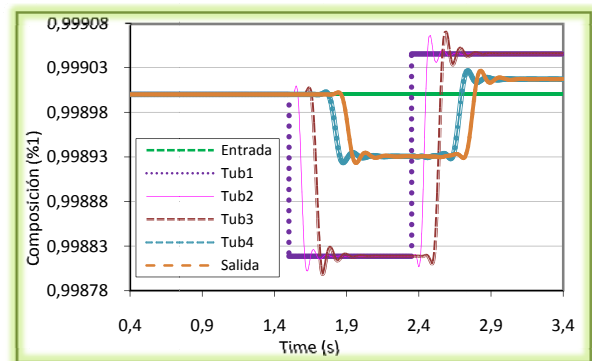


Figura 9. Composición del colector utilizando CO en EF al variar la composición de “Aporte1”

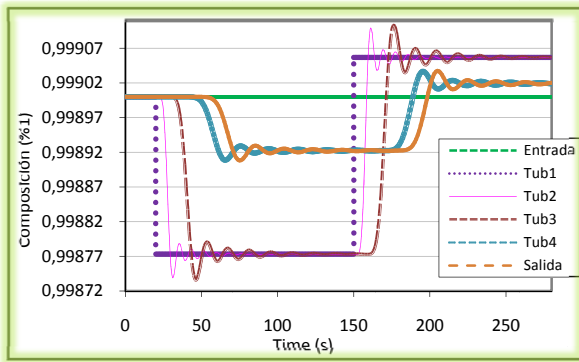


Figura 10. Composición del colector utilizando DF al variar la composición de “Aporte1”

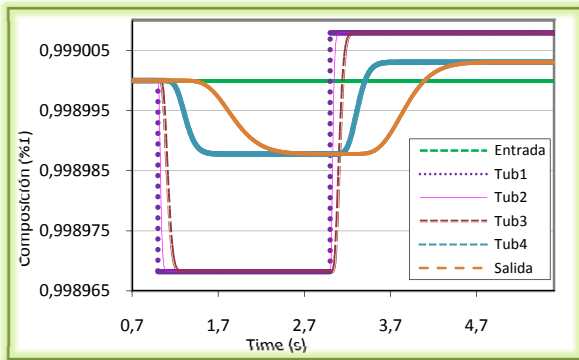


Figura 11. Composición del colector utilizando VF al variar la composición de “Aporte1”

En este caso, la composición del fluido en “Entrada” no interviene ya que el componente “Aporte1” se sitúa después, por lo que esta composición siempre tendrá el mismo valor. Las conclusiones a las que se llega son equivalentes a las del caso anterior en cuanto al tipo de respuesta que se obtiene y al valor de la composición a lo largo del colector.

Otro tipo de salto que se ha realizado es el cambio en la presión de entrada al colector desde el componente “Entrada”. Inicialmente, la presión de entrada al colector es de $1.8982 \cdot 10^6$ Pa y después pasa a valer $1.8907 \cdot 10^6$ Pa.

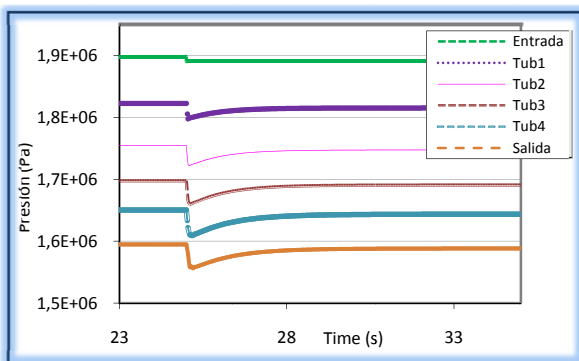


Figura 12. Presión del colector utilizando CO al variar la presión de “Entrada”

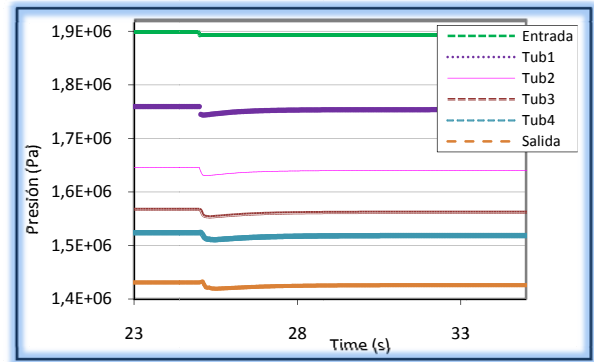


Figura 13. Presión del colector utilizando CO en EF al variar la presión de “Entrada”

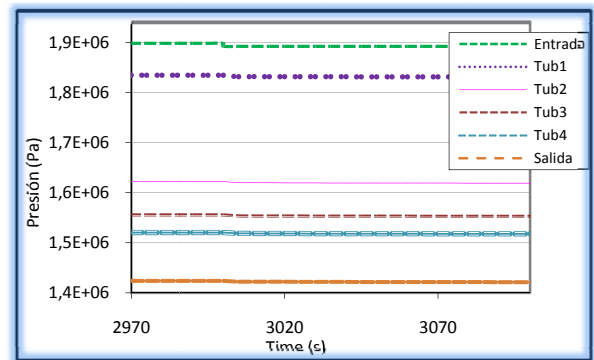


Figura 14. Presión del colector utilizando DF al variar la presión de “Entrada”

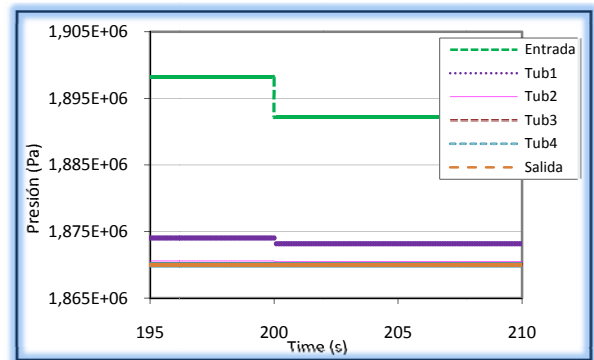


Figura 15. Presión del colector utilizando VF al variar la presión de “Entrada”

Tal y como muestran las figuras 12 – 15, una disminución en la presión de entrada provoca que la presión a lo largo del colector disminuya. Para el caso de colocación ortogonal y colocación ortogonal en elementos finitos, el tipo de respuesta que se obtiene es subamortiguada. La respuesta en todos los casos posee un tiempo pequeño de estabilización. También se han encontrado cambios notables en la densidad del fluido ya que al aumentar la presión, aumenta la masa y, para un volumen constante, aumenta la densidad, y viceversa. El resto de variables también cambian, pero su efecto no es tan evidente.

6 CONCLUSIONES

Se ha creado una librería gráfica de componentes dinámicos que permite construir de forma fácil sistemas de tuberías. De esta forma, se puede estudiar la dinámica de un fluido que circula en diferentes sistemas. Se trata de una herramienta muy útil que en un futuro trabajo se ampliará con componentes de control.

Los resultados obtenidos en las simulaciones son coherentes con las leyes físico-químicas formuladas.

En la simulación, se han encontrado obstáculos a la hora de la inicialización del problema, pero que se resuelven de forma satisfactoria. No obstante, se está trabajando para que la resolución de estos problemas de inicialización se realice de forma automática.

Por último, se han encontrado muchas referencias bibliográficas que explican los métodos de integración que en este trabajo se utilizan. Generalmente utilizan el ejemplo de una barra que se calienta en un extremo y aplican estos métodos para resolver la ecuación de conducción de calor. Otros utilizan la ecuación de movimiento en caso particulares como lechos porosos, lechos catalíticos, etc. Sin embargo, no se ha encontrado prácticamente ninguna referencia que combine las ecuaciones de conservación de masa, conservación de movimiento y conducción de calor, que son las que se emplean en este trabajo.

Agradecimientos

Los autores desean agradecer a Repsol-YPF y a la refinería de Petronor en Bilbao por su ayuda y colaboración así como al Ministerio de Ciencia y Tecnología y a la Junta de Castilla y León por la financiación a través de los proyectos Operación Óptima de Plantas de Proceso, CICYT (ref. DPI2006-13593) y Gestión Óptima de Plantas Complejas (ref. GR85) respectivamente.

Referencias

- [1] Ames, William F.. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*. Second Edition, Academic Press, Inc (1977).
- [2] Carey, G. F., Finlayson, B. A.. *Orthogonal collocation on finite elements*. Department of Chemical Engineering. University of Washington. Seattle, WA 98195, U.S.A. Chemical Engineering Science. 1975, Vol. 30, pp. 587-596. Pergamon Press.
- [3] Finlayson, Bruce A.. *Nonlinear Analysis in Chemical Engineering*. McGraw Hill, New York (1980).
- [4] Gómez, E., Sarabia, D., Méndez, C.A., Prada, C., Cerdá, J., Sola, J.M., Unzueta, E. *Optimal management of hydrogen supply and consumption networks of refinery operations*. *European Symposium on Computer Aided Process Engineering, ESCAPE 18*, Lyon, France (2008).
- [5] González, A. y Hernández. *Comparación de métodos analíticos y numéricos para la solución del lanzamiento vertical de una bola en el aire*. *Lat. Am. J. Phys. Educ.* Vol. 2, No. 2, May 2008.
- [6] Randall J. Leveque. *Finite-Volume Methods for Hyperbolic Problems*. Cambridge Texts in Applied Mathematics. Cambridge University Press, 2004.
- [7] Oñate, E. *Límites de los métodos numéricos*. Publicación CIMNE N°-191, Septiembre 2000.
- [8] Prada, C., (2004). *El futuro del control de procesos*, Revista Iberoamericana de automática e informática industrial. CEA-IFAC, Vol. 4 (1), pp. 5-20.
- [9] Ramírez R., Jhon Jairo, Vanegas G., Carlos Andrés, Villegas R., Andrés Mauricio. *Método de Diferencias Finitas para la Solución de Ecuaciones en Derivadas Parciales*. Universidad Eafit, Medellín, Colombia, 2006.
- [10] Sarabia, D., Cristea, S., Gómez, E., Gutierrez, G., Méndez, C.A., Sola, J.M., Prada, C. *Data reconciliation and optimal management of hydrogen networks of a real refinery*, accepted in ADCHEM, Istanbul, Turkey, 2009.
- [11] Villadsen, J. V., Stewart, W. E.. *Solution of boundary-value problems by orthogonal collocation*. Chemical Engineering Department, University of Wisconsin, Madison, WI, U.S.A. Chemical Engineering Science, 1967, Vol. 22, pp. 1483-1501. Pergamon Press.