

# CAPITULO VI

## INTRODUCCIÓN A LAS CARACTERÍSTICAS DE UN SIMULADOR MODULAR SECUENCIAL

Por  
**Nicolás José Scenna**

### VI.1. ESTRUCTURA DE UN SIMULADOR MODULAR SECUENCIAL EN ESTADO ESTACIONARIO

Para comprender el desempeño de un simulador modular secuencial es necesario estudiar la estructura y la arquitectura del mismo. Básicamente podríamos diferenciar en principio tres funciones o secciones perfectamente diferenciadas:

- 1) *La lógica central o lógica general del simulador.*
- 2) *Sección encargada de la estimación de las propiedades fisicoquímicas.*
- 3) *La biblioteca de módulos de equipos, es decir cada uno de los módulos que representan el comportamiento de válvulas, intercambiadores, sistema de destilación, sumadores, divisores, flash, compresores, etc.*

La primer sección, es decir la lógica general o central o de administración, a su vez comprende principalmente las siguientes subsecciones:

- *La sección de entrada*
- *La sección de salida de resultados*
- *La lógica general de administración*

*La lógica general de administración propiamente dicha* es la que está encargada de administrar los distintos procesos que deben ejecutarse para lograr la simulación de un proceso dado. Es decir que deberá procesar el diagrama de flujos, decidir si puede resolverse en una secuencia lineal o si existen ciclos, seleccionar sobre cuáles variables deberá iterarse, determinar en función de las corrientes de corte el orden en el cual serán resueltos los equipos, etc. Esto es, deberá manipular un banco de algoritmos como los descritos en el Capítulo IV que permitan, dado el DFI de la planta, realizar el rasgado, particionado y ordenamiento o secuencia de

---

**Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos**

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

resolución.

Por otra parte, al finalizar el proceso iterativo de acuerdo al criterio de convergencia definido por el usuario, procederá a detener el proceso de simulación, retener los resultados, es decir almacenar en el lugar correspondiente todos los valores convergidos de las corrientes del proceso, los valores y parámetros internos de los equipos, por ejemplo los perfiles internos de torres, composiciones, caudales, temperatura y presiones de cada etapa, etc. Si no se lograra convergencia luego de una cantidad de iteraciones previamente estipulada, la lógica central del simulador detendrá el proceso iterativo e informará al usuario, por medio del mensaje de error que corresponda. Otro mensaje de error que podría requerirse es el referido a equipos que por ejemplo, en una simulación dada, no pueden ser calculados dado que en función del tope de iteraciones interno fijado en su programa no han convergido, o por ejemplo los métodos de estimación de propiedades fisicoquímicas no logran convergencia al estimar una dada propiedad durante la ejecución de una simulación, etc.

También, para facilitar la tarea del usuario, existirá un sistema de almacenamiento de información (por ejemplo un Administrador de Base de Datos), en el cual pueden almacenarse resultados de las diversas simulaciones para una misma planta, a los efectos de facilitar la presentación en forma gráfica de los resultados obtenidos, por comparación entre las distintas alternativas simuladas, si fuera necesario.

Por último esta lógica general de administración, que es el verdadero cerebro del simulador, podrá o no tener en cuenta interacciones con otros utilitarios o con otros programas. En efecto, el resultado de una simulación como sabemos, es por lo general el balance de materia y energía, es decir el valor de todas las variables asociadas a corrientes y parámetros intrínsecos de la planta como ser los servicios en los intercambiadores, las columnas de destilación, etc. Ahora bien, si durante la secuencia de tareas tendientes a obtener la ingeniería básica se necesitara efectuar el diseño de los intercambiadores (u otros equipos), se podría interactuar con el programa de diseño correspondiente, suponiendo que éste sea de alguna manera compatible con el lenguaje utilizado y la forma de almacenar los datos que dispone el simulador. En general, los simuladores comerciales disponibles tienden cada vez más a incorporar programas específicos de cálculo (intercambiadores, internos de torres, cañerías, etc) a los efectos de facilitar la integración de tareas (simulación y pre-diseño) por ejemplo.

Esta problemática, la de la integración de diversas herramientas computacionales en las distintas facetas de un emprendimiento ingenieril (ya sea en el aspecto de diseño o producción) es un campo de activa investigación. Las grandes áreas informáticas aplicadas a procesos productivos (CAM-Computer Aided Manufacturing) o CAD (Computer Aided Design) tienden cada vez más a utilizar herramientas compatibles para las distintas tareas encaradas. El área de los *sistemas*

*de información* aplicados a plantas de proceso trata de dar una respuesta adecuada a esta problemática, siendo enorme el esfuerzo de investigación y desarrollo que se vuelca a este problema actualmente.

Aquí, conceptualmente, sólo nos importa recordar que las tareas propias de la simulación de procesos (ver capítulo II) son una pequeña parte del problema global, al igual que las herramientas utilizadas (simuladores, programas individuales, etc). La compatibilidad de un simulador (su interacción con otros programas tales como herramientas de síntesis de procesos, planillas de cálculo, programas de diseño de intercambiadores, tanques, piping, etc), es un aspecto crucial para evaluar la herramienta computacional bajo el punto de vista de su utilidad en el uso cotidiano en las actividades ingenieriles.

*En cuanto al sistema de entrada/salida de datos*, es una parte fundamental de todo simulador de uso general. En efecto, deberá caracterizarse por su flexibilidad y amigabilidad al usuario. En este campo mucho se ha ganado con la introducción en el mercado de productos tales como el sistema windows, que permite disponer de un menú de ventanas sumamente cómodo para la introducción de datos y la interacción general usuario-simulador. Por otra parte, los sistemas gráficos han permitido una fácil implementación de los programas de carga de datos, reemplazando los primitivos ficheros por sistemas estructurados de entrada que, en general, permiten la opción gráfica, es decir, presentar esquemáticamente el flowsheet de la planta remarcando el equipo acerca del cual se introducen los datos requeridos.

Estas ventajas también se notan en la fase de presentación de resultados. En efecto, la potencialidad que brindan los entornos o ambientes mencionados facilitan enormemente la presentación de curvas y gráficas y el acceso a la información específica necesaria (parámetros de equipos, datos fisicoquímicos, etc).

Por último, es conveniente destacar que los sistemas de ingreso de datos se programan de tal manera de facilitar a un usuario inexperto, o poco conocedor del tema, un fácil uso del sistema. Más aún, se tratan de chequear al máximo las inconsistencias o errores en la introducción de datos, a los efectos de minimizar el tiempo gastado inútilmente al emprender tareas de simulación. De esta manera, la sumatoria de fracciones molares distintas de la unidad, las temperaturas absolutas negativas, valores inconsistentes dentro del contexto del problema, grados de libertad violados al especificar parámetros de equipos, etc., son inmediatamente notificados al usuario por medio de un sistema de validación que emite mensajes de error o advertencia.

### ***Sistema de Estimación de Propiedades Fisicoquímicas***

En un simulador de procesos de alcance general, el sistema de estimación de propiedades fisicoquímicas es prioritario. Dado que se deberán simular diversos

---

## **Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos**

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

tipos de mezclas, de comportamiento ideal y no ideal, sistemas bifásicos y/o trifásicos, potencial presencia de electrólitos y/o sólidos, constantes de equilibrio en reacciones químicas, etc; resulta indispensable disponer de un banco de modelos para la estimación de un número importante de propiedades fisicoquímicas en todas las situaciones mencionadas. En efecto, debido a que los cálculos ingenieriles involucran diversas propiedades tales como conductividades térmicas, capacidades caloríficas, viscosidad, densidad, difusividad, constantes de equilibrio, etc.; tanto para sustancias puras como para mezclas de diversa índole, se comprende la magnitud de la tarea si se pretende contar con un sistema adecuado. Por lo general los simuladores comerciales siempre disponen de la opción de permitir al usuario incorporar sus propias correlaciones ante el caso de ausencia de métodos adecuados para el cálculo de alguna propiedad en un caso particular.

Por ejemplo, si se pretende confeccionar un programa computacional que calcule un intercambiador de calor para dos fluidos (agua-alcohol), los métodos más apropiados para la estimación de las propiedades fisicoquímicas, al igual que los datos necesarios, están definidos. Sin embargo, si pretendemos hacerlo más general, deberá existir asociado un banco de datos que permita estimar las propiedades fisicoquímicas necesarias para una inmensa variedad de fluidos. Esto implica un banco de modelos de estimación y uno de parámetros para utilizarlos, no solo para componentes puros, sino para mezclas, que obviamente, son potencialmente un número muy grande.

La confección de un sistema como el descrito es sumamente laboriosa, e implica no sólo la programación de los distintos métodos existentes, ya que debe además contemplarse la interacción con los diversos programas de cálculo de equipos (módulos), la incorporación de parámetros y el uso independiente de los mismos por programas de cálculo de equipos específicos provistos por el usuario, la generación de curvas de variación de la propiedad calculada con respecto a variables de interés como ser temperatura, presión y composiciones; con la posibilidad de presentar los resultados gráficamente, según diversos parámetros de interés, etc.

A continuación se indicarán brevemente los principios generales sobre los que se sustentan la mayoría de los métodos de estimación de propiedades incorporados a los simuladores de propósito general, en particular la constante de equilibrio y la entalpía de mezclas multicomponentes.

#### *Constante de equilibrio en mezclas no ideales*

En general se utiliza en el modelado de problemas que involucran equilibrio líquido-vapor el concepto de relación (o constante) de equilibrio, según la siguiente expresión:

$$K_i = y_i / x_i \quad (1)$$

Donde  $i$  indica cada componente en la mezcla, esto es,  $i = 1, 2, \dots, NC$ . Esta ecuación

---

### **Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos**

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

puede extenderse al equilibrio líquido-líquido, conociéndose como coeficiente de reparto.

Para expresar  $K_i$  en función de parámetros termodinámicos, debemos recurrir a las relaciones clásicas de dicha disciplina. En lo que sigue se expondrán someramente algunas relaciones básicas, suponiendo que el lector posee una formación adecuada en el tema.

En una mezcla multicomponente, la energía libre de Gibbs se define como una función del tipo:

$$G = G(T, P, n_1, n_2, \dots, n_{NC})$$

Luego, el diferencial total de G es:

$$dG = (\partial G/\partial T)_{P,n_i} dT + (\partial G/\partial P)_{T,n_i} dP + \sum_i^{NC} (\partial G/\partial n_i)_{P,T,n_{j \neq i}} dn_i \quad (2)$$

De la termodinámica clásica, cada derivada parcial de la expresión anterior puede demostrarse que son iguales a otras funciones termodinámicas de interés:

$$(\partial G/\partial T)_{P,n_i} = S; \quad (\partial G/\partial P)_{T,n_i} = V; \quad (\partial G/\partial n_i)_{P,T,n_{j \neq i}} = \mu_i$$

que substituyendo en (2) nos da:

$$dG = -S dT + V dP + \sum_i^{NC} (\mu_i dn_i) \quad (3)$$

En un sistema en equilibrio, el diferencial de la ecuación anterior se anula.

Por otra parte, si consideramos en un sistema cerrado en equilibrio con dos fases, a presión y temperatura constantes, el planteo para cada fase, de la ecuación anterior; y considerando que para ambas fases debemos igualar a cero la expresión obtenida (equilibrio), es fácil demostrar a partir de dicha igualdad que (en un sistema en equilibrio) debe cumplirse:

$$\mu_i^V = \mu_i^L \quad (4)$$

Donde los supraíndices indican fase vapor y líquida respectivamente.

El problema es cómo calcular  $\mu_i$ . Para un gas ideal puede demostrarse que:

$$\mu_i = R T \ln (P) + f_i(T) \quad (5)$$

donde  $f_i(T)$  es una función de la temperatura.

Para contemplar mezclas multicomponentes reales, (Lewis, 1901) introdujo el concepto de fugacidad, o presión modificada, definida como:

$$f_i = f_T(T) \exp (\mu_i / RT) \quad (6)$$

donde  $f_T$  está relacionada con  $f_i(T)$  de la expresión (5).

A partir de estas ecuaciones puede demostrarse que también debe cumplirse en el equilibrio la siguiente expresión:

$$f_i^L = f_i^V \quad (7)$$

Dado que la fugacidad está íntimamente relacionada con la presión, a través de las desviaciones del comportamiento de la mezcla respecto del ideal, se introducen coeficientes de fugacidad, que por ejemplo para la fase líquida se expresa:

$$f_i^{(L)} = \phi_i^{(L)} x_i P \quad (8)$$

y para la fase vapor:

$$f_i^{(V)} = \phi_i^{(V)} y_i P \quad (9)$$

Por otra parte, para representar la desviación de la actividad (que es la relación entre la fugacidad  $f_i$  de una mezcla y su fugacidad en cierto estado estándar, por ejemplo la fugacidad de la especie pura  $f_i^0$  a la misma presión y temperatura) de una mezcla con respecto a su comportamiento ideal, se introducen los llamados coeficientes de actividad ( $\gamma_i$ ) según:

$$a_i^L = \gamma_i^L x_i \quad (10)$$

$$a_i^V = \gamma_i^V y_i \quad (11)$$

$$a_i = f_i / f_i^0 \quad (12)$$

De las ecuaciones (8) (9) (10) (11) (12) y (1) pueden obtenerse expresiones diversas para la constante de equilibrio en mezclas multicomponentes ( $K_i$ ). Una de las más utilizadas es aquella que surge de tomar ( $y_i$ ) de la ecuación (9) y  $x_i$  de la ecuación (10), según:

$$K_i = \frac{\gamma_i^L f_{i,L}^0}{\phi_i^V P}$$

mientras que si se utilizan las ecuaciones (8) y (9) se obtiene:

$$K_i = \frac{\phi_i^L}{\phi_i^V} \quad (13)$$

Cualquiera sea la expresión utilizada, el problema radica en calcular los respectivos coeficientes, que en mezclas multicomponentes no ideales son función, en el caso más general, de la temperatura, la presión y las composición de la mezcla, tanto en el vapor como en el líquido.

En el capítulo VII se analizarán algunos de los métodos más conocidos para estimar los coeficientes respectivos, con vistas al cálculo de la constante de equilibrio. No obstante, con lo planteado hasta aquí es fácil observar que para el desarrollo de cualquier simulador genérico, debemos encontrar algoritmos que permitan, dados unos pocos parámetros y datos de los componentes puros, calcular los valores correspondientes a la constante de equilibrio en la mezcla, dadas la temperatura, presión y composición de la misma. Si no se dispusiera de esta herramienta, para cada caso en particular, debería plantearse un modelo específico, lo cual implicaría de hecho la imposibilidad de un alcance genérico.

**Entalpía de mezclas no ideales**

Al igual que para la constante de equilibrio, para la entalpía debemos encontrar modelos de cálculo apropiados y suficientemente generales. Dado que el problema radica, al igual que en el caso anterior, en el cálculo asociado a las mezclas no ideales, la determinación de los coeficientes de fugacidad y actividad resulta nuevamente un paso obligado. En efecto, para un gas ideal se tiene:

$$H_v^0 = \int_{T_0}^T C_{p_v}^0 dT \quad (14)$$

Para una mezcla multicomponente se recurre a la conocida ley de aditividades

$$H_v = \sum_{i=1}^{NC} y_i H_{iv}^0 + (H_v - H_v^0) \quad (15)$$

donde el último factor de calcula según:

$$\begin{aligned} H_v - H_v^0 &= P_v - RT - \int_{\infty}^v [P - T (\partial P / \partial T)_v] dv \\ &= - R T^2 (\partial \ln f_v / \partial T)_P \end{aligned} \quad (16)$$

donde aparece la corrección que introduce la fugacidad.

Las expresiones anteriores pueden calcularse fácilmente si se disponen de ecuaciones de estado (P-V-T) para la evaluación de las derivadas parciales e integraciones indicadas. Dado que algunas ecuaciones de estado también describen adecuadamente la fase líquida, pueden emplearse expresiones similares a las anteriores para el cálculo de la entalpía en la fase líquida. En este caso sin embargo deben introducirse los factores que tengan en cuenta la corrección por presión, cambios de fase, etc. En efecto, para el caso de la fase líquida tenemos:

$$\begin{aligned}
 H_L = & H_v^0 + (P_{vs}) - R T - \int_{\infty}^{v_{vs}} [(P - T (\partial P / \partial T)_v)] dv - \\
 & - T (\partial P / \partial T)_s (v_{vs} - v_{Ls}) + (P_{vL} - P_{vLs}) - \int_{v_{Ls}}^{v_L} [P - T (\partial P / \partial T)_v] dv
 \end{aligned}
 \tag{17}$$

donde el primer término es la entalpía del gas ideal a presión cero, el segundo, tercer y cuarto término conforman la expresión que toma en cuenta la corrección de presión desde cero hasta la presión de vapor de saturación (equilibrio líquido-vapor), el quinto término tiene en cuenta el calor latente de vaporización, y por último los restantes términos tienen en cuenta la corrección por presión en la fase líquida, desde la presión de saturación hasta la presión de la mezcla.

Las ecuaciones (16) y (17) son útiles cuando se dispone de una ecuación de estado, en especial aquellas explícitas en la presión  $P = f(V, T)$ , de tal forma de facilitar los cálculos de las integrales expresadas, que se realizan reemplazando las expresiones analíticas correspondientes y resolviendo las integrales y derivadas resultantes. Por otra parte, cuando la fase líquida no puede representarse adecuadamente por los métodos anteriores, o bien cuando se disponen de los valores de los coeficientes de actividad, es útil recurrir a las relaciones que a partir de la termodinámica clásica relacionan las propiedades molares parciales de exceso y los coeficientes de actividad o fugacidad. En efecto, podemos escribir para la entalpía de exceso molar parcial:

$$\overline{H}_i^L - H_i^L = \overline{H}_i^{L,E} = - R T^2 (\partial \ln \gamma_i^L / \partial T)_{P, x_i}
 \tag{18}$$

en donde el segmento sobre la entalpía molar ( $H_i^L$ ) indica propiedad parcial, y el supraíndice L,E implica propiedad de exceso, o desviación con respecto al comportamiento ideal.

Por lo tanto, a partir de las ecuaciones (16) (17) y (18) se puede escribir:

$$\begin{aligned}
 HL = & \sum_i^{NC} x_i ( H_{vi}^0 - R T^2 (\partial \ln (f_i^L) / \partial T)_P - \\
 & - R T^2 (\partial \ln (\gamma_i^L) / \partial T)_{P, x_i} )
 \end{aligned}
 \tag{19}$$

A partir de la expresión anterior se desprende que para el cálculo de las entalpías en la fase líquida debemos calcular los coeficientes de fugacidad (corrección por presión) y los coeficientes de actividad, por lo que pueden combinarse modelos PVT con aquellos que estiman los coeficientes de actividad. Por otra parte, en general resulta evidente que la misma información para el cálculo de las constantes de equilibrio es la necesaria para el cálculo de las entalpías, por lo que seleccionando un método de estimación para una es lógico utilizarlo para la otra, y las restantes propiedades necesarias. Esto es conveniente tanto desde el punto de vista del ahorro de tiempo de cómputo como para la coherencia en los resultados obtenidos.

En el Capítulo VIII se mencionarán algunos métodos para la estimación de las propiedades necesarias para calcular la entalpía, tales como la capacidad calorífica, actividades y fugacidades, etc., al igual que otras propiedades de interés, tales como conductividad, viscosidad, etc.; aunque solo desde un punto de vista introductorio; dejando al lector interesado la inquietud de consultar otras obras, recomendadas al final de los Capítulos VII y VIII.

En síntesis, todo simulador genérico, tanto para simulación dinámica como estacionaria, necesita un banco de datos (parámetros fundamentales de las sustancias puras y de interacción entre pares binarios por ejemplo) y un banco de modelos (para estimar las distintas propiedades, por ejemplo coeficientes de fugacidad y actividad, etc.). Estos dos elementos son fundamentales, y no debe desestimárselos, como generalmente sucede al encarar el estudio o desarrollo de modelos de simulación. Esto se debe a que generalmente existe en el estudiante una tendencia a interpretar “el modelo”, a partir de las ecuaciones de transporte de cantidad de movimiento, materia y energía; olvidando que se escriben en términos de entalpías, por ejemplo, que luego implican un “nuevo modelo” para su cálculo. Por último, al trabajar en equipos de contacto, por ejemplo líquido-vapor, aparece el concepto de equilibrio o bien de transferencia de materia, lo cual nuevamente impone el cálculo o estimación de propiedades tales como los coeficientes de transporte, las constantes de equilibrio, etc. En definitiva, tarde o temprano los resultados estarán fuertemente condicionados por tales estimaciones.

#### ***Biblioteca de Módulos de Equipos en un Simulador Modular Secuencial.***

Como hemos visto, a través de la simulación de procesos por computadora se resuelven los balances de materia y energía de una planta dada. En toda instalación industrial la materia prima que ingresa (corrientes de entrada en el simulador) sufre gran cantidad de transformaciones hasta alcanzar los productos deseados (corrientes de salida). Los equipos de proceso (intercambiadores de calor, torres de separación, reactores, etc.) son los responsables de las transformaciones y constituyen “la maquinaria” de la planta industrial.

En un simulador de procesos, con los módulos representativos de los equipos y fisicoquímica asociada a los mismos, se tiende a reproducir la operación real de la

planta, generando las transformaciones necesarias para alcanzar el producto deseado. La adecuada selección de las variables especificadas y de los parámetros de funcionamiento para los módulos; sus modos de cálculo y la fisicoquímica correspondiente son los responsables de la convergencia o no del sistema y del tiempo de cómputo total utilizado; y además, del grado de aproximación de los resultados provistos por el simulador al comportamiento de la planta real. Debe notarse al respecto que si bien la mayoría de los simuladores comerciales existentes poseen cierto grado de selección “automático” para algunas de las variables arriba mencionadas, (por ejemplo un sistema experto que recomienda métodos de cálculo de propiedades fisicoquímicas para una mezcla dada), *la responsabilidad de las hipótesis adoptadas, los niveles de cálculo seleccionados, y la interpretación de los resultados, será siempre una tarea exclusiva del operador del simulador, es decir el ingeniero de procesos.*

En este capítulo se analizarán los distintos pasos genéricos a seguir en la construcción de módulos de simulación de equipos en simuladores modulares secuenciales. Este conocimiento es importante para conocer los detalles de la metodología con la cual se programan los módulos de los simuladores existentes, y es básico para encarar la tarea de desarrollo de un módulo en especial. Esto último, como se ha visto, es un problema normal y bastante frecuente al encarar la simulación de procesos químicos, dado que como se ha remarcado anteriormente, la biblioteca de módulos es siempre limitada frente a la realidad y diversidad de los procesos químicos reales. Por ejemplo, los reactores, a menos que sólo baste con simularlos a un nivel elemental, siempre caerán en esta categoría, ya que son muy específicos. Además, los módulos apropiados ante cada problema en particular sólo podrán seleccionarse, con criterio y adecuadamente, si se tiene un cabal dominio de las hipótesis subyacentes en los mismos y sus implicancias.

#### ***Desarrollo de Módulos Generales para un Simulador Modular.***

En general, los ítemes a tener en cuenta para abordar el desarrollo de módulos de simulación con el objeto de utilizarlos acoplados a la estructura de un simulador de procesos de propósitos generales son los siguientes:

- *Esquema de funcionamiento de un módulo generalizado:*  
Se deben considerar las posibles variantes acerca de los distintos tipos de datos conocidos (corrientes de entrada, salidas, etc.), los grados de libertad, parámetros, filosofía de cálculo, relación con el sistema general, etc.
- *Interrelación módulo de equipo-base de datos:*  
Aquí analizaremos la descripción de la estructura general de conexión (intercambio de datos) entre el módulo de simulación (equipo) y el sistema de almacenamiento de datos del simulador (constantes fisicoquímicas, parámetros de equipos, sistema de entrada-salida, etc).

- *Selección de parámetros de equipos:*

En este punto se describe la estructuración del módulo de acuerdo a las necesidades de la operación a simular. Esto es, definir los grados de libertad del sistema, los parámetros a fijar según los mismos, etc.

- *Niveles de cálculo:*

En este punto se identifica la rigurosidad del cálculo que se desea (grados de simplificación).-

- *Interrelación módulo de equipo-fisicoquímica:*

Describe el esquema que relaciona los módulos de equipos con los programas de estimación de propiedades fisicoquímicas.

El diagrama de intercambio de información entre los módulos (que representan la operación de los distintos equipos) y el sistema o lógica central del simulador poseen una estructura general como se muestra en la Figura 1.a. En ésta se observa que las entradas al módulo consisten en los parámetros del equipo (que se describirán posteriormente), las variables de retención interna (por ejemplo: los perfiles de caudales, concentraciones y temperaturas de una torre de destilación para ser utilizados como variables de inicialización) y las corrientes de entrada al equipo. Además, deben incluirse en la salida los resultados del cálculo (por ej. calor total intercambiado en un intercambiador de calor) junto a las corrientes de salida del módulo, que a su vez serán datos de entrada para el próximo equipo en la secuencia de resolución.

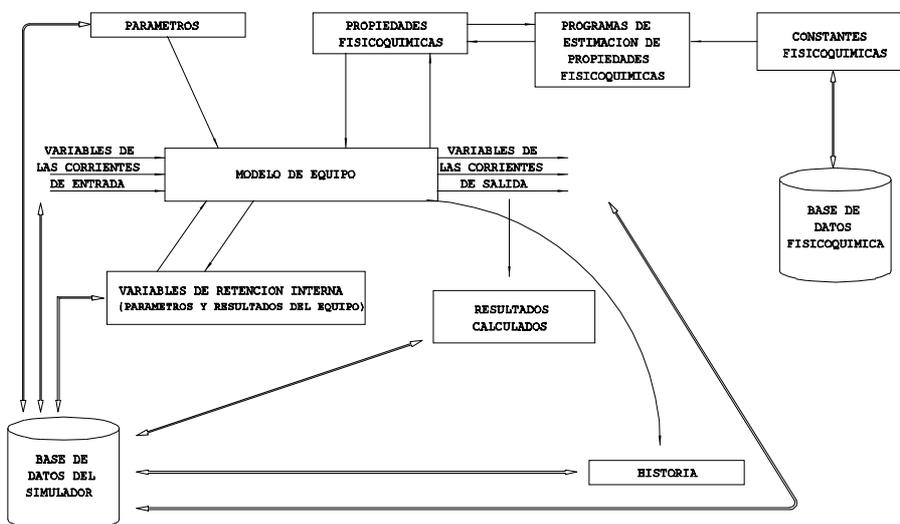


Figura VI.1.a: Arquitectura típica de un simulador genérico, modular secuencial.

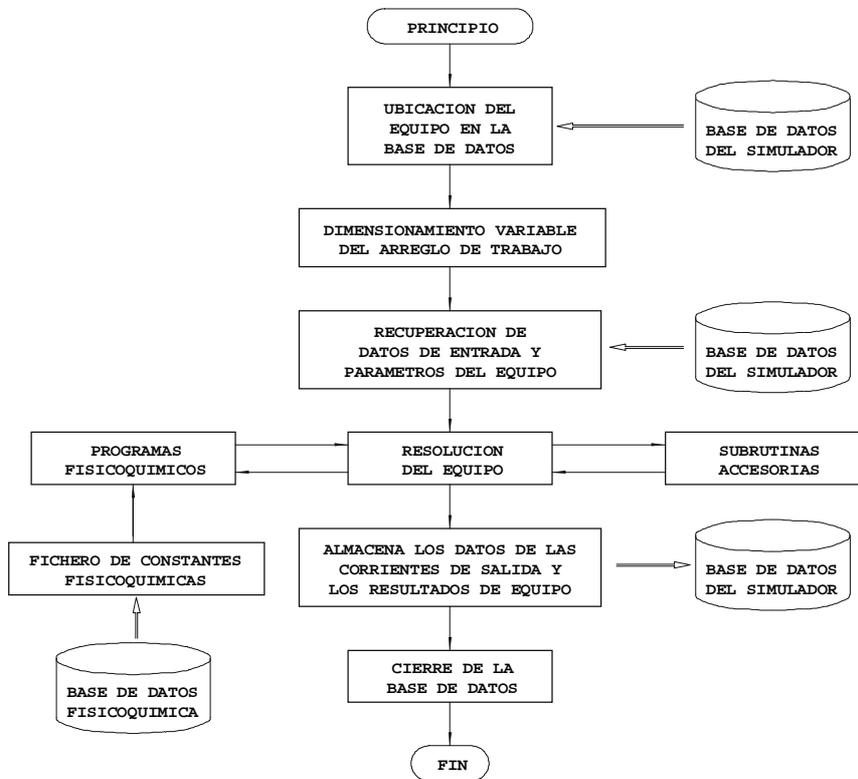


Figura VI.1.b: Esquema de cálculo de cada módulo o equipo del simulador

Este esquema tradicional responde a la simulación clásica modular, secuencial en estado estacionario. Dado que los modelos planteados para cada operación unitaria son independientes del sistema fisicoquímico a emplearse, es posible lograr generalidad y flexibilidad de programación para los módulos de equipos, solo teniendo en cuenta una forma apropiada de interacción entre las secciones que deben realizar cálculos fisicoquímicos y las encargadas de resolver los balances y relaciones funcionales propiamente dichas.

Un punto importante en la nueva generación de simuladores orientados al manejo de grandes cantidades de información es la administración y almacenamiento de la misma. En general debe definirse algún tipo de administrador de base de datos para lograr una integración entre los módulos de la lógica central, de ejecución, programas fisicoquímicos, entrada/salida de información, y el almacenamiento de los datos en sí. Las relaciones estructurales pueden consultarse en los manuales que

se proveen con cada simulador comercial. En la Figura 1.b se observa un esquema general de funcionamiento en el que se indica el flujo de información al resolver un equipo o módulo.

## **VI.2 MODELADO DE EQUIPOS PARA SIMULACIÓN DE PROCESOS. PROGRAMACIÓN DE MÓDULOS DE SIMULACIÓN.**

Según vimos, la resolución de un módulo de simulación de un equipo en particular significa obtener como resultados las variables de salida (y ciertos parámetros operacionales si corresponde) a partir de las variables de entrada, parámetros de funcionamiento y fisicoquímica auxiliar; en el caso de la filosofía modular secuencial pura. También mencionamos que existe la posibilidad de contemplar módulos en los cuales se relaja la orientación de las corrientes especificadas, si la arquitectura del simulador permite considerarlos en su estrategia de cálculo.

En este punto desarrollaremos una noción acerca de la tarea de lograr la estructuración de los módulos a través de un ejemplo sencillo; a los efectos de poder enfrentar con éxito la construcción de módulos específicos si fuera necesario. En próximos capítulos se profundizará en este punto.

En primer lugar conviene destacar que los módulos de simulación de equipos presentan tres características fundamentales. *El tipo o clase*, esto es la operación unitaria que representa, *la topología del mismo*, es decir la cantidad de entradas y salidas, variantes operativas, variables adoptadas de salida, etc; esto es diferentes *variantes* del mismo equipo, y por último *la rigurosidad de cálculo*, que implica los distintos conjuntos de hipótesis que definen el *nivel de exactitud* de los resultados provistos.

En general, los simuladores comerciales presentan una adecuada descripción de los módulos que contienen y una indicación de los métodos de cálculo que se utilizan en los manuales correspondientes. A continuación se desarrollará un ejemplo para vislumbrar los principales puntos a tener en cuenta en el desarrollo de un módulo de simulación.

### ***Ejemplo: módulo simplificado de intercambio de calor***

En la Figura 2 se esquematiza un módulo particular de intercambio de calor. Los parámetros de operación serán  $U$  (coeficiente global de intercambio) y  $A$  (área total de transferencia). Las variables de entrada serán los datos de los fluidos que ingresan por carcasa y tubos respectivamente (caudales, temperaturas, presiones, entalpías, composiciones de todos los componentes y/o estado de agregación), ya que suponemos una filosofía modular secuencial, que impone como vimos la especificación de las corrientes de entrada al módulo. Especificadas las variables anteriores, debería procederse a un análisis de los grados de libertad del sistema y a la determinación de una especificación de las restantes variables a los efectos de obtener una secuencia acíclica. Aquí se plantearán los balances correspondientes

adoptando una especificación dada (el factor UA) para obtener un sistema compatible, sin entrar en el análisis de todas las variantes posibles de considerar.

Por otra parte, los programas de estimación de propiedades fisicoquímicas deben contemplar el cálculo de la capacidad calorífica de ambos fluidos ( $C_p$ ) por algún método adecuado de estimación en función de los componentes a tratar (Capítulos VII y VIII).

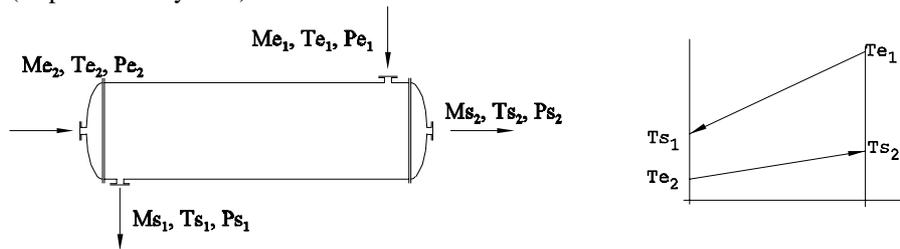


Figura VI.2

Como sabemos, para la confección del modelo se requiere plantear las relaciones básicas que gobiernan los fenómenos de transferencia. Esto es, los balances de materia, energía y cantidad de movimiento, al igual que las relaciones funcionales del equipo.

Es conveniente comentar en este punto algunos aspectos importantes a tener en cuenta al desarrollar el modelo matemático representativo de un módulo de simulación de un equipo en particular. Dado que según conocemos, existen diversos niveles de rigurosidad con los cuales puede ser encarado el modelado, debe mantenerse coherencia entre el grado de detalle o rigurosidad deseado y las hipótesis a adoptarse al plantear los distintos balances o relaciones funcionales del equipo. Es importante mencionar además que los modelos rigurosos implican un consumo de horas/hombre para su desarrollo y tiempo de computación mucho más elevado que los modelos simplificados. Este factor (el esfuerzo que el usuario esté dispuesto a invertir en la simulación), ha de tenerse en cuenta en la selección de los modelos para una tarea de simulación.

Un conjunto de hipótesis que define un módulo de simulación simplificado para el equipo bajo análisis es el siguiente:

- Se contempla únicamente transferencia de energía entre dos fluidos sin cambio de fases.
- Se supone que el valor ( $U A$ ) es suficiente como para alcanzar las temperaturas de salida especificadas.
- Se considera  $U$  constante. Además no se calcula su valor ya que se lo supone un dato conocido.
- Se asumen conocidas  $Me_1$ ,  $Me_2$ , ( $U A$ ),  $Te_1$ ,  $Te_2$ . El programa de cálculo fisicoquímico auxiliar proveerá los datos de  $C_{p1}$  y  $C_{p2}$  en función de las

---

### Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

- composiciones, temperatura y presión.
- La diferencia promedio de temperaturas se calcula como un promedio aritmético.
- No se considera caída de presión en ambos fluidos.
- No se considera la influencia de la geometría en el intercambio.
- Sistema adiabático.

Debe notarse que si se introducen las dependencias para el cálculo de los coeficientes peliculares aparecen nuevas funcionalidades, por lo que en este caso lo más apropiado sería como mencionamos más arriba, aplicar un método adecuado para la asignación de variables a los efectos de lograr secuencias acíclicas o de mínimo esfuerzo de cómputo.

### ***Balance de materia***

Se ha supuesto que los flujos másicos de ingreso a tubos y carcaza son iguales a sus respectivas salidas (no existe acumulación). En forma de ecuaciones se traduce como:

$$Me_1 = Ms_1 \quad (20)$$

$$Me_2 = Ms_2 \quad (21)$$

donde  $Me_i$ : caudal másico de entrada;  $Ms_i$ : caudal másico de salida.

### ***Balance de energía***

Se ha asumido que todo el flujo de calor que pierde el fluido del lado carcaza (tubos) se transfiere al fluido del lado de tubos (carcaza). Esta suposición requiere adoptar hipótesis tales como considerar despreciables mecanismos de aporte de calor por radiación, considerar nulas las pérdidas a través de las paredes (equipo aislado totalmente) etc. En términos de ecuaciones lo expresado tiene la forma:

$$Me_1 Cp_1 (Te_1 - Ts_1) = Me_2 Cp_2 (Ts_2 - Te_2) = Q \quad (22)$$

### ***Balance de cantidad de movimiento***

Este balance tiene en cuenta fundamentalmente la pérdida de presión de los fluidos por razonamiento, efectos viscosos, etc. En este ejemplo simplificado se ha

supuesto que la presión de descarga es igual a la de entrada para ambos fluidos:

$$Pe_1 = Ps_1 \quad (23)$$

$$Pe_2 = Ps_2 \quad (24)$$

### ***Relaciones fisicoquímicas***

Dado que existen numerosas variantes para el cálculo de las variables fisicoquímicas de interés, según se detalla en los capítulos VII y VIII, se supone que el usuario ha seleccionado la metodología apropiada. Consecuentemente, las ecuaciones a utilizar y los parámetros correspondientes se suponen dados para enfrentar la tarea del modelado. En este sentido se supone a los programas fisicoquímicos como auxiliares del programa/modelo del equipo.

Debido a las simplificaciones introducidas, solamente será necesario el cálculo de la capacidad calorífica de los fluidos, que en forma funcional se puede expresar como:

$$C_p = C_p(T, P, X_1 \dots X_{NC}) \quad (25)$$

$X_{i=1 \dots NC}$  composición de cada componente (i) en la mezcla de NC componentes.

### ***Relaciones funcionales del Equipo***

Este tipo de ecuaciones son características de cada operación unitaria involucrada y las simplificaciones introducidas en el modelado. En nuestro caso la ecuación de transferencia de energía simplificada es:

$$Q = U A [(Te_1 - Ts_2) + (Ts_1 - Te_2)] / 2 \quad (26)$$

Pueden existir además, dentro de las relaciones funcionales, ecuaciones de cálculo de parámetros característicos. En el ejemplo se ha supuesto que el usuario provee el valor del coeficiente de intercambio térmico U; pero en otro nivel de rigurosidad éste puede ser calculado a través de las relaciones funcionales comunes de la bibliografía (Kern y otros -ver bibliografía recomendada al final del capítulo-). Sin embargo, esta situación como ya comentamos complica el análisis del ejemplo e implica un mayor esfuerzo de cálculo, al igual que si se requieren cálculos de pérdida de carga.

En función de las ecuaciones anteriores, puede fácilmente demostrarse que las mismas conforman un sistema cíclico, ya que deberá iterarse para lograr la solución del sistema, esto es, deben calcularse, adoptando un procedimiento iterativo, los valores de las variables desconocidas,  $(T_{s1}, T_{s2}, Q)$ . Por ejemplo, si se supone un valor inicial para  $T_{s1}$ , mediante la ecuación (22) se calcula  $Q$ . A partir de este valor y la ecuación (22) se calcula  $T_{s2}$ . Se utiliza la ecuación (26) a los efectos de chequear el valor obtenido de  $T_{s1}$ , para verificar si se satisface el error permitido al compararlo con el valor supuesto. Si el error es mayor al tolerado, se propone mediante algún método de convergencia una nueva estimación de  $T_{s1}$ , y se itera hasta satisfacer dicho criterio (ver métodos iterativos, Capítulo III, y rasgado y particionado de sistemas de ecuaciones, Capítulo IV).

Se puede notar que la cantidad de módulos posibles de definir es un conjunto muy grande debido a la combinación de simplificaciones que pueden adoptarse, de acuerdo a los parámetros seleccionados, etc. En la mayoría de los simuladores convencionales existe una gran cantidad de módulos que por su utilización en la mayoría de los procesos químicos, constituyen un conjunto mínimo. Además, se contempla la opción para la incorporación de módulos propios del usuario para cubrir la falta de equipos particulares que no estén contemplados en la librería del simulador.

#### ***Modos de Cálculo - Niveles en el modelado de equipos***

En la sección anterior se ha detallado el procedimiento de cálculo para un módulo de un intercambiador de carcaza y tubo con algunas hipótesis simplificadoras. En este caso el tipo de módulo se puede definir como un intercambiador de calor sin cambio de fase ya que en las ecuaciones planteadas (y simplificadas) no se contempla el cambio de fase en ninguna corriente. Una variante sería el abarcar condensadores o hervidores parciales, por ejemplo.

Para analizar distintos tipos de niveles de cálculo, supongamos en este caso el estudio de una instalación que ya está definida constructivamente y se pretende utilizar un simulador para el estudio de la performance del equipo de intercambio calórico. En este ejemplo, como se trata de una instalación conocida, están perfectamente determinados no solamente el área de transferencia sino las características geométricas del equipo. Se conocerán el número de tubos, material, cantidad de pasos, diámetros de tubos y carcaza, cantidad de baffles, etc.

Estos datos son innecesarios si utilizamos como módulo de simulación el desarrollado en la sección anterior. Pero con ellos se puede modelar el equipo de forma mucho más rigurosa determinando los coeficientes globales de transferencia; pérdidas de carga, etc., a través de las características de los fluidos y sus regímenes de flujo. Obviamente, las ecuaciones a utilizar serán más complejas que las descritas, (ver Kern, 1950) o (Bell Delaware, 1963). En definitiva, los distintos niveles de cálculo o versiones de equipos según sea la topología considerada, definirán

diferentes módulos de simulación para un mismo equipo (en este caso intercambiador de calor), por lo cual el usuario deberá optar entre ellos según sea el objetivo de su simulación.

### **VI.3 BREVE DESCRIPCIÓN DE LOS DISTINTOS MÓDULOS DE EQUIPOS PRESENTES EN UN SIMULADOR MODULAR DE PROCESOS QUÍMICOS.**

En esta sección se describirán algunos de los equipos estándares que poseen la mayoría de los sistemas de simulación comerciales y/o académicos.

En general, las distintas operaciones unitarias de transferencia de calor, materia y cantidad de movimiento, definirán diversos módulos de equipos: bombas, compresores, torres, equipos de separación flash, turbinas, reactores etc.

A continuación se mencionarán brevemente los distintos módulos y sus características principales. Esta enumeración sólo debe considerarse indicativa, ya que no representa un listado completo de las opciones posibles; además, como mencionamos en secciones anteriores, éstas abarcan un número muy grande. Por otra parte, los manuales de los simuladores comerciales disponen de una descripción de los módulos que poseen, y una explicación del método de resolución adoptado para los mismos.

#### ***Equipos Divisores de Corrientes.***

Constituye el equipo de mayor facilidad de resolución ya que no existen relaciones de equilibrio ni transferencia. Simula la división de una cañería (ducto) en varias y la variable de diseño será la relación de caudales de corrientes de salida a corriente de entrada.

En general, las composiciones, temperaturas, etc, de las corrientes de salida son iguales a las de entrada. Si se considera caída de presión, el modelo deberá contemplar la verificación de ciertos parámetros de salida (por ejemplo la fase), para lo cual el cálculo resulta más complejo.

#### ***Equipos Sumadores o Mezcladores***

Estos son muy comunes dentro de cualquier simulador de procesos y constituye uno de los módulos elementales. Representan la operación de conexión de cañerías cuyos fluidos pueden tener distintas composiciones, temperaturas y estados de agregación por lo cual debe contemplarse para su modelado las ecuaciones representativas del equilibrio entre fases, además del balance de materiales. También debe contemplarse si existe la posibilidad de reacciones químicas, etc.

Nuevamente, si se considera la caída de presión, el cálculo se complica, involucrando relaciones similares a las que se utilizan para resolver un módulo de evaporación flash.

### ***Equipos de Intercambio Calórico***

Como se ha mencionado anteriormente, un típico módulo es el que representa a los intercambiadores de calor con dos entradas y dos salidas que simula la operación convencional de un equipo de intercambio. Un conjunto de parámetros característicos está representado por el parámetro (UA) como se ha detallado anteriormente.

Además, las ecuaciones de balance, las relaciones funcionales y las relaciones fisicoquímicas pueden contemplar cambios totales (o parciales) de fases en alguna o ambas corrientes. De esta manera se contemplan operaciones tales como hervidores o condensadores totales o parciales, etc.

### ***Intercambiadores rigurosos con geometría dada.***

Este nivel de equipo estima el comportamiento de los fluidos con mayor rigurosidad que los anteriores y consecuentemente sus ecuaciones de balance y relaciones funcionales serán mucho más complejas.

Los modelos rigurosos de los intercambiadores de calor incluyen la determinación del coeficiente global de transferencia (U) calculando las resistencias a la transferencia debido a los coeficientes peliculares, materiales de los tubos, y la distribución y régimen de flujo de los fluidos circulantes. Además se tiene en cuenta la configuración y geometría del equipo en el cálculo del factor de configuración  $F_T$ .

También puede incluirse el cálculo de la pérdida de carga en la carcasa y los tubos respectivamente.

### ***Equipo de Contacto Directo entre fases***

Estos equipos son de mayor importancia en un sistema de simulación. Involucran todas las operaciones de separación por contacto directo como ser líquido-líquido (extracción), gas-líquido (destilación, absorción, strippers, etc.).

Dentro de los niveles posibles de cálculo de equipos con etapa de transferencia entre fases existen gran variedad de métodos que poseen mayor o menor rigurosidad en el cálculo de los mismos.

A manera de ejemplo puede citarse -entre los denominados "short-cut" o métodos simplificados (globales) para operaciones de destilación- al de (Fenske, 1932) para la determinación (especificada la separación o tarea) del número mínimo de etapas; al de (Underwood, 1948), para la determinación de mínimo reflujo, entre otros. Los parámetros necesarios a ser especificados para el cálculo serán sencillos (por ej.: número de bandejas teóricas). La combinación de los métodos de Fenske, Underwood y Winn permiten representar una instalación de separación completa. En general será necesario especificar la separación de los componentes clave liviano y pesado, el tipo de condensador (total o parcial) y hervidor de fondo. Como resultados se obtendrán la condiciones de las corrientes de salida, reflujo internos y la ubicación óptima de la bandeja de alimentación.

Estos métodos simplificados son de gran utilidad para la *resolución aproximada* de sistemas ideales o casi ideales (ej. ciertas mezclas de hidrocarburos). Su utilización no se recomienda en mezclas no ideales, o en configuraciones con un número significativo de entradas/salidas, en las cuales los errores de cálculo resultan significativos. Salvo para aproximaciones muy groseras, o limitaciones en tiempo de cómputo no superables, estos métodos deben utilizarse para inicializar otros más rigurosos, o para evaluar cotas en una estrategia de búsqueda del óptimo, según vimos en la sección II.3.2

Para operaciones de absorción, stripping y desorción se puede citar el método simplificado de Edmister. Este método se basa en la definición de los factores efectivos de absorción y stripping. Su teoría es correcta para dos etapas de equilibrio, y aproximada para un número mayor. El campo de aplicación (componentes en la mezcla) es similar al del método de Fenske. Su ventaja radica en que no existe necesidad de definir la separación entre los componentes claves, y por lo tanto su estrategia de resolución utiliza como variables de diseño el número de platos, el reflujo interno y la ubicación de la alimentación; lo cual aproxima su funcionamiento al modo tradicional de simulación secuencial.

Métodos más complejos pueden involucrar cálculos plato a plato o matriciales, tales como los propuestos por Tomich o Naphtali-Sandholm (1971) que producen como resultado no sólo el conjunto de corrientes de salida sino además los perfiles internos de la columna (ver Capítulo X). El primer método es semiriguroso, y resulta de gran utilidad para la resolución de sistemas multicomponentes cuyo comportamiento sea del tipo ideal o levemente no ideal. Permite la definición de cualquier número de alimentaciones y/o extracciones y el tipo de condensador y/o hervidor. El fundamento de su estrategia de resolución se basa en la obtención de correcciones simultáneas de caudales y temperaturas en cada plato a través del cálculo y regeneración de un jacobiano que contempla la incidencia de los errores en los balances de materia y energía simultáneamente. El método no incluye correcciones en los balances por desviaciones del comportamiento ideal y por lo tanto puede no converger en sistemas altamente no ideales.

Entre los métodos rigurosos que permiten resolver sistemas multicomponentes altamente no ideales pueden mencionarse, entre otros, los propuestos por Boston y Sullivan (1974) y el propuesto por Naphtali-Sandholm (1971). Alguno de estos métodos serán descritos en detalle en el capítulo X, correspondiente al modelado de equipos de separación de mezclas multicomponentes múltiple etapas en contracorriente; como un ejemplo del tratamiento matemático complejo que debe adoptarse al pretender modelar “rigurosamente” estos procesos de separación.

En general, los métodos incorporados a los simuladores se basan en propuestas académicas que han sido modificadas en varios aspectos cuyos detalles en general se destacan en los manuales correspondientes o bien en la bibliografía

específica.

### **Reactores**

Estos equipos, muy comunes en instalaciones de plantas químicas, son los más dificultosos de resolver en forma rigurosa.

El principal inconveniente radica en que las reacciones químicas poseen cinéticas y estequiometría específicas y muy diversas de acuerdo al sistema a simular, resultando por lo tanto imposible la generación de modelos que contemplen todas las posibilidades.

El modelo más simplificado (y común en todos los simuladores) es el de "caja negra", en el cual definiendo la estequiometría de la reacción, seleccionando un componente clave y especificando la conversión final y la temperatura del producto, se obtendrán las condiciones completas de la corriente de salida.

Otro modelo más específico será la simulación de reactores tanques agitados (o flujo pistón) pudiendo seleccionarse cinéticas convencionales de primer o segundo orden, por ejemplo.

Debe remarcarse que para el cálculo de sistemas reaccionantes en equilibrio no solamente habrá de contemplarse ecuaciones de balance; relaciones funcionales y relaciones fisicoquímicas, sino que habrá de incorporarse además, parámetros de la reacción como ser las relaciones estequiométricas específicas para cada caso. En general, los módulos de reacción, debido a su especificidad, serán provistos por el usuario, que incorporará sus propios datos del sistema reaccionante y/o ecuaciones particulares que representen correctamente el sistema a simular; si se pretenden resultados muy ajustados al comportamiento real en las diversas condiciones de operación de la planta.

En el Capítulo XVIII se desarrolla un ejemplo específico para la simulación dinámica de un biodigestor para el tratamiento de efluentes líquidos, detallándose las distintas hipótesis adoptadas y el sistema de ecuaciones resultante para el modelo.

### **Equipos de separación flash**

Los equipos de separación flash simulan la evaporación súbita de una (o varias corrientes). El caso típico es el flujo a través de una restricción, cuya caída de presión en forma adiabática provoca una vaporización parcial, debido a lo cual en un tanque posterior puede lograrse la separación en las fases líquido y vapor respectivamente. Una situación más compleja puede contemplar dos fases líquidas y una vapor.

Estos equipos resultan muy importantes desde el punto de vista práctico y conceptual. En efecto, todo simulador debe calcular en cada etapa de simulación el estado de agregación de las corrientes (por ejemplo a la salida de un nodo sumador de varias corrientes), a partir de su composición global y su contenido energético y la presión del sistema. Todos estos cálculos tienen íntima relación con la metodología

de resolución de las ecuaciones de un flash.

Por otra parte, conceptualmente, este módulo resulta básico para la comprensión de los modelos de separación más complicados. Por ejemplo, un sistema de separación múltiple etapa multicomponente en contracorriente puede asimilarse de hecho a una sucesión de equipos flash conectados entre sí de acuerdo a cierta topología. Procediendo de esta manera, una columna de destilación por ejemplo, podría resolverse secuencialmente, etapa a etapa. Esta es precisamente la metodología utilizada por los métodos etapa a etapa propuestos para la simulación de tales sistemas, aunque no resulta efectiva para problemas que involucran mezclas no ideales o un gran número de etapas y/o alimentaciones, debido a problemas de convergencia.

También las operaciones de intercambio calórico para sistemas con cambio de fases en mezclas multicomponentes están vinculadas con el cálculo de equipos flash.

En general, existen numerosas variantes para la simulación de estos equipos. Esto es común a otros módulos de simulación, ya que son numerosas las variables que pueden ser fijadas en función de los grados de libertad del sistema. En el Capítulo IX se analizará en detalle este punto.

### ***Bombas y Válvulas***

El módulo simplificado de ambos equipos es similar. En una bomba, la variable de diseño será la presión de descarga, lo mismo que en la válvula, no contemplándose los cambios entálpicos de las corrientes por motivo de la variación de presión. Para ambos casos, versiones más rigurosas implican cálculos más complicados.

Por ejemplo, para bombas existen modelos que adicionan el trabajo desarrollado a la entalpía de la corriente de salida y el cálculo posterior de una subrutina o subprograma correspondiente al módulo de un flash proveerá la temperatura y fase en la descarga. Otros modelos más rigurosos contemplarán el tipo de bomba a utilizar (rotativas, alternativas, etc) y necesitarán la provisión de las curvas características de funcionamiento para calcular las variables de las corrientes de salida. El mismo cuadro puede presentarse para las válvulas, por ejemplo incorporando características propias del tipo y condición del fluido y el flujo, etc.

### ***Compresores y Expansores***

Estos equipos en la generalidad de los casos representan evoluciones de compresión y expansión politrópica. En las versiones simplificadas se requerirá como variable especificada la presión de descarga, con la cual mediante algoritmos iterativos se logra el cálculo de las propiedades de las corrientes de salida y el trabajo necesario a proveer (compresores) o entregado (expansores).

De la misma forma que en el apartado anterior, versiones más rigurosas

requerirán especificación del tipo de equipo a utilizar (centrífugo, alternativo, etc) y las curvas características provistas por los fabricantes de los mismos, que pueden ser incorporadas mediante facilidades propias que brindan los distintos simuladores comerciales.

### ***Otros Equipos***

En el listado anterior, si bien se han mencionado los equipos más comunes, no se han agotado todos los módulos que pueden existir en un simulador comercial. Entre ellos se puede citar hornos de procesos, equipos de separación sólido-líquido, o sólido-gas, transporte de sólidos, ciclones, electrolitos, etc.

Sin embargo, dada la cantidad de posibilidades y alternativas potenciales de ser simuladas al contemplar la gama de procesos químicos en general, es fácilmente comprensible que es imposible disponer de una biblioteca general de módulos que los contemple a todos. Es por ello que todo simulador de procesos modular debe contemplar la posibilidad que el usuario incorpore sus propios módulos. Lo que obliga a su vez a saber cómo desarrollarlos.

Existe abundante bibliografía a la cual se puede recurrir para una descripción detallada de las ecuaciones y métodos de cálculo y convergencia de los principales métodos numéricos e hipótesis asumidas al construir los módulos más generales, propios de un simulador convencional. Obviamente, la referencia obligada resulta el manual del simulador a utilizar, en el cual generalmente se explicitan (aunque a veces muy someramente) las hipótesis asumidas y el método numérico empleado en la solución, citando además, bibliografía complementaria, que resulta conveniente el usuario analice con atención. Se remarca nuevamente la importancia de conocer todos los detalles acerca del modelo utilizado, a los efectos de poder interpretar correctamente los resultados en cada situación a simular.

### ***Equipos Especiales o Controladores***

La interpretación tradicional de la herramienta de simulación (modular secuencial) es la reproducción del funcionamiento de un equipo seleccionando como variable de diseño los parámetros característicos de su funcionamiento; tomando como datos los valores de las corrientes de entrada y obteniendo como resultado las variables de las corrientes de salida.

Sin embargo, a veces nos interesa fijar algunas variables en valores conocidos durante la simulación. En ciertos simuladores (en particular los que siguen la filosofía modular secuencial pura) existen equipos "controladores" cuya operación será necesaria para mantener a ciertas variables elegidas en los valores deseados. En modo simulación esta "operación de control" puede ser reproducida en función de los siguientes procedimientos:

- Módulos de equipos controlados a través de una/s especificación/es

de salida fija.

- Módulos especiales o controladores "Feed-back".
- Módulos especiales o controladores "Feed-forward".

No debe confundirse esta estrategia de simulación con una operación de control real de la planta a simularse. El control de un proceso (ya sea real o en simulación) sólo tiene sentido cuando existan variables evolucionando en el tiempo (ver Capítulos XIV al XVIII).

El uso de estas opciones está generalmente explicitada en los manuales de cada simulador.

### ***Módulos de equipos con especificación de salida fija***

En este caso se consigue el efecto de mantener una variable en el valor deseado utilizando módulos de equipos programados para tal fin. Esto se logra habiendo desarrollado el modelo incorporando precisamente la información de la variable especificada (que se desea fijar en un valor) como una ecuación más; que define precisamente esa asignación. Por ejemplo, un nodo divisor puede ser programado de tal forma que asigne a una de sus salidas un valor de caudal (o composición para uno de los componentes de la mezcla) en un valor dado. Para ello deberá obviamente calcularse (en función de los grados de libertad), la relación de partición entre corrientes (variable resultado del equipo en este caso) para cumplir con la especificación deseada. En este divisor la variable especificada será el caudal de una de las corrientes de salida, y el resultado de la operación del mismo será el coeficiente de partición definido como el cociente: caudal de la corriente de salida/caudal de la corriente de entrada. Estos módulos deben ser utilizados cuidadosamente para evitar configuraciones en las cuales se violen los grados de libertad totales del sistema (diagrama de flujo de la planta completa), o bien cuando se especifican valores incoherentes.

Debe remarcarse que los equipos "controlados" a través de este procedimiento pueden generalizarse a través de la programación de módulos que operan en forma inversa a la definición convencional en simulación secuencial pura, que supone conocidas las entradas y se calculan todas las salidas. En otras palabras, se diseñan módulos en los cuales en lugar de seleccionar como un conjunto de entrada las "corrientes físicas convencionales" de ingreso al mismo, se proveen como datos valores de algunas variables (corrientes) de salida; reorientando los módulos y el sentido de información de las corrientes asociadas a ellos, respetando lógicamente los grados de libertad del sistema. Esto es, se flexibiliza el orden secuencial de tal manera de poder especificar valores a cualquier variable o parámetro de equipo, según los datos que se dispongan.

Esta forma de operar está incorporada en algunos de los simuladores comerciales, brindando al usuario una mayor flexibilidad, según discutimos

anteriormente, bajo otro enfoque.

### ***Módulos controladores "feedback"***

Los algoritmos de controladores feedback (o por retroalimentación) en un simulador estacionario modular secuencial son "equipos" cuyo objetivo es operar sobre un parámetro o variable de la corriente denominada manipulada en función de otro parámetro o variable de la corriente llamada variable controlada. En realidad no se trata de un módulo que representa un equipo de planta equivalente a una operación unitaria sino que impone en la operación de simulación un "control" para forzar la convergencia hacia el valor especificado. Debe remarcarse en este caso que la analogía lingüística no debe llevarnos a confusión respecto del uso de un módulo de este tipo en simulación estacionaria, y el funcionamiento de un controlador en un proceso real.

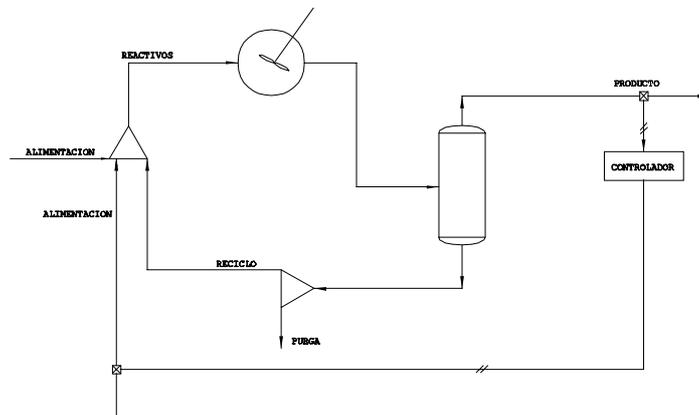


Figura VI.3: Esquema de un módulo controlador. Se "controla" la composición de un componente en el producto manipulando el caudal de una de las corrientes que ingresa al reactor.

Un ejemplo puede observarse en la Figura VI.3. El sistema está compuesto por un mezclador (sumador), un reactor y un tanque flash y se desea controlar la concentración de un producto en la corriente de salida del flash a través de la cantidad de uno de los reactivos que ingresan al sistema.

La lógica del módulo controlador es la siguiente:

- Se resuelve el mezclador; reactor y posteriormente el equipo flash, hasta lograr convergencia en el ciclo correspondiente.
- Luego el controlador compara el valor de la variable controlada con su consigna y modifica la variable manipulada para reiniciar el cálculo hasta

alcanzar la convergencia, según la especificación dada.

Obviamente, el sistema o lógica central del simulador deberá coordinar estos cálculos introduciéndolos en la secuencia general de resolución de la planta completa. Debe remarcarse que por esta vía se introducen nuevos ciclos de iteración a los mencionados en la sección IV.3.1.

#### ***Módulos Controladores Feed-forward***

Estos equipos se utilizan para fijar un parámetro de operación aguas abajo en la secuencia de resolución de acuerdo con el valor que tomó una variable seleccionada. Su modo de operación es similar al módulo “controlador” feed-back, desde el punto de vista conceptual.

### **VI.4 ASPECTOS BÁSICOS A TENER EN CUENTA EN EL USO DE UN SIMULADOR DE PROCESOS MODULAR SECUENCIAL EN ESTADO ESTACIONARIO.**

En esta sección se pretende someramente destacar algunos aspectos que necesariamente deben considerarse para el efectivo uso de los programas de simulación. En efecto, un simulador comercial es una herramienta muy importante que permite, bien utilizada, grandes ventajas; logrando resultados muy efectivos con relativamente poco esfuerzo. Sin embargo, dependerá en gran medida del grado de conocimiento del usuario, el utilizar efectivamente la gran cantidad de información y oportunidades que brinda la herramienta. Más aún, interpretaciones equivocadas implicarán un serio riesgo, y diseños o conclusiones totalmente inadecuados.

Si por ejemplo se supone el problema de simular una planta nueva, que involucra mezclas con sustancias para las cuales se cuenta relativamente con muy pocos datos fisicoquímicos (falta de datos experimentales y/o datos en la bibliografía) es evidente que las propiedades serán estimadas a través de correlaciones generalizadas cuyo margen de error puede ser considerable y por lo tanto la incertidumbre en los cálculos es difícil de estimar. Resulta evidente que, independientemente de utilizar modelos muy rigurosos para la simulación (pese al esfuerzo y tiempo computacional involucrado) los resultados serán igualmente poco confiables debido a la utilización de datos fisicoquímicos dudosos con un grado de precisión imposible de cuantificar.

Consecuentemente, la premisa de utilización de métodos de cálculo rigurosos trae aparejada la necesidad de acoplarlos a sistemas fisicoquímicos confiables y de errores de cálculo relativamente bajos. De lo contrario la exactitud ganada por el algoritmo se pierde en la estimación de las propiedades.

Otro punto a tener en cuenta es la etapa del proyecto en la cual se utilice el simulador. Por ejemplo, durante la etapa de síntesis y análisis del diagrama de flujo de información, donde se necesita evaluar distintas alternativas de funcionamiento

de una instalación para seleccionar la opción óptima, generalmente las precisiones son pocas y los datos disponibles escasos. Además, será necesario realizar una gran cantidad de simulaciones para comparar alternativas diversas. Consecuentemente, los modelos simplificados o semirigurosos son los más indicados, ya que involucran un bajo tiempo de cálculo y permiten una comparación medianamente confiable como un criterio preliminar de selección de alternativas. Aquí estamos preocupados en valores relativos (comparaciones) y no en valores absolutos (diseño definitivo).

Una vez seleccionado el proceso, la etapa siguiente exige la resolución del balance de materia y energía, para ser utilizados en el posterior diseño de los equipos y su costeo, etc. Por lo tanto, en esta etapa será necesario adoptar opciones de cálculo lo más rigurosas posibles, y proveerse de los datos necesarios para su ejecución. Es decir, que en general durante la tarea del diseño se utilizarán progresivamente variantes más complejas, a medida que la disponibilidad de datos y la marcha del proyecto (por ejemplo factibilidad económica) lo exija, y no al revés.

Hasta aquí, sólo se han discutido aspectos que hacen a la conveniencia de utilizar versiones de cálculo de distinto grado de exactitud, y su relación con los algoritmos de estimación de propiedades fisicoquímicas seleccionados. No obstante, existen muchos otros aspectos a ser tenidos en cuenta. Entre ellos, se pueden mencionar:

***Una adecuada selección de los módulos de equipos correspondientes al DFI.***

Como sabemos, el DFI es el esquema que reemplaza a la planta real (como hemos visto por ejemplo en el proceso de desalación, Figura V.4). Esta situación puede presentarse muy a menudo por ejemplo un termosifón en una torre de destilación, la necesidad de contemplar parámetros particulares del condensador y/o hervidor en una torre de destilación, etc. En la Figura 4 se indica el esquema del DFI para el caso de una torre de destilación con un hervidor y condensador total del cual se desea conocer la performance, por lo que debe utilizarse una versión rigurosa de cálculo de intercambiadores de calor con cambio de fase, supuesto que no está incorporada obviamente en el (los) modelo(s) (módulo(s)) de torres de destilación disponibles en la biblioteca de módulos en el simulador.

En este caso, el módulo seleccionado para simular el intercambio de calor (condensador y hervidor) deberá corresponderse con las necesidades de la simulación. Obviamente, para la columna de destilación necesitamos adoptar un módulo del tipo absorbedor, con corrientes en el tope y fondo de entrada/salida según se indica en la Figura 4.

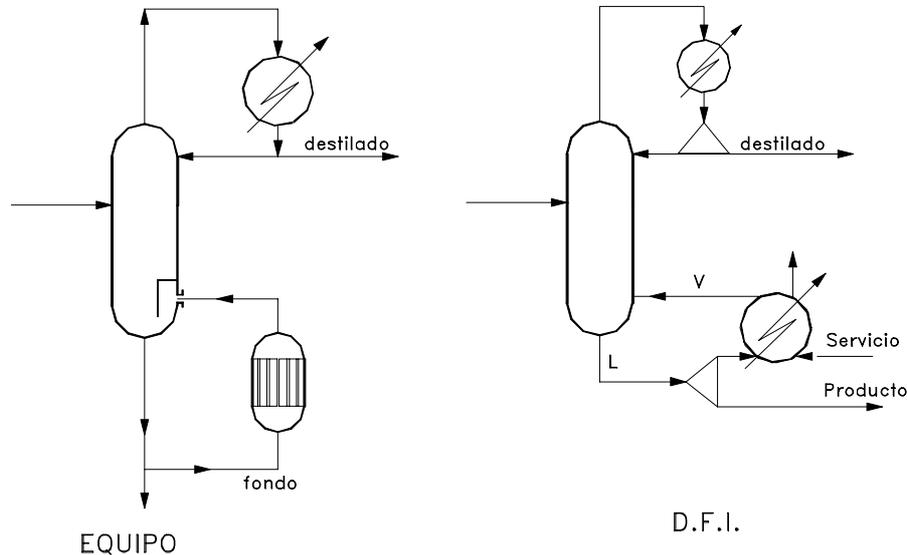


Figura VI.4: “DFI de una torre de destilación con hervidor y condensador específicos”

**Una adecuada consideración de los parámetros de equipos.**

En este punto debe tenerse en cuenta la coherencia y consistencia de los datos provistos y las opciones de cálculo seleccionadas. Por ejemplo, no es lo mismo el número de etapas teóricas que las reales y considerar o no la eficiencia de separación de las etapas en equipos de contacto. Más aún, deberá optarse por considerar la eficiencia constante, o bien calcularla por algún método de estimación, o tener acceso a datos reales de planta, o bien de la bibliografía; asumiendo un valor global o bien para cada componente y cada plato se asignará el valor correspondiente.

Otro punto es la especificación de variables en cada equipo, por ejemplo una pureza dada y un reflujo menor al mínimo para una columna de destilación. En general, las especificaciones deben realizarse teniendo en cuenta la coherencia con los objetivos del equipo/módulo en particular, pero también contemplando los grados de libertad de la planta en su globalidad.

**Selección de los métodos de estimación de propiedades fisicoquímicas**

Este no es un tema menor. En efecto, la composición, temperatura y presión de la mezcla, al igual que la presencia de sólidos, electrolitos o bien la existencia de varias fases, son datos cruciales a considerar. Por ejemplo, existen métodos de estimación o algoritmos de cálculo de equipos que no consideran (por las hipótesis implícitas en su desarrollo) la presencia de reacciones químicas o bien la existencia de más de una fase. Más aún, no chequean, durante el cálculo, la potencial presencia

de las mismas, para enviar un mensaje de advertencia al usuario. Esto puede, según el caso, conducir a resultados equivocados.

Además, ya se analizará con más detalle en los Capítulos VII y VIII que para mezclas no ideales, o cuando existen ciertos componentes específicos en la mezcla, no todas las correlaciones son aplicables.

### ***Uso de módulos controladores***

Muy frecuentemente se incorporan al DFI (al simular en estado estacionario una planta dada), para "reproducir" algún controlador existente (o para fijar una variable), los "equipos controladores" disponibles en la biblioteca de módulos de la mayoría de los simuladores. Este "control perfecto" debe entenderse desde el punto de vista conceptual para no cometer errores, según ya discutimos anteriormente. Más aún, deben contemplarse los grados de libertad al especificar ciertas variables. Si bien los simuladores comerciales generalmente a nivel de módulos específicos chequean las sobre o sub-especificaciones, no necesariamente se lo hace con la planta completa.

### ***Interpretación de los resultados***

Debe tenerse sumo cuidado en la interpretación de los resultados según las versiones de cálculo utilizadas. Es claro que las versiones simplificadas están sujetas a grandes errores según el caso. Por ejemplo el uso de los algoritmos propuestos por Fenske, Gilliland y Anderwood en el caso de una torre de destilación azeotrópica. Sin embargo, las versiones rigurosas no significan "exactitud" absoluta. Además, debe considerarse que siempre subsisten un número importante de hipótesis. Por ejemplo, la presión en las columnas de destilación se asume generalmente constante. Esto es, no se considera la hidráulica, la geometría del plato y/o relleno, caídas de presión, etc. (ver capítulo X y XV).

La interpretación de los resultados también exige ubicación respecto a los objetivos. En efecto, los simuladores están orientados, principalmente, a resolver los balances de materia y energía, y con cierto alcance, los de cantidad de movimiento. Por lo tanto, los aspectos funcionales y geométricos, o de diseño, son por lo general escasamente considerados. Por ejemplo, la salida de un expansor y/o compresor estará caracterizada por una temperatura o un título pero nada se expresa respecto de los materiales utilizados, sus limitaciones, o bien la "lógica" o factibilidad de la operación en función del entorno, etc. En los cálculos de torres de destilación se puede variar su reflujo, obteniéndose resultados, pero debe además tenerse en cuenta el diámetro o el factor de capacidad para completar el análisis, ya que generalmente, en función de los niveles de rigurosidad disponibles en los simuladores comerciales, no entra en los cálculos.

En definitiva, existen numerosos aspectos a tener en cuenta en la tarea de simulación de procesos. Algunos, sólo mencionados aquí a modo de ilustración, serán ampliados convenientemente en los capítulos correspondientes. Muchos otros, la

mayoría, sólo podrán ser contemplados por el usuario ante cada problema, utilizando su criterio ingenieril.

Finalmente, una última reflexión. El simulador una vez incorporados los datos, genera rápidamente resultados (en segundos, o por lo menos en un lapso que no supera horas de trabajo, según la complejidad del problema). En consecuencia, en poco tiempo de trabajo se generará una gran cantidad de información que deberá procesarse. Además, la información que se obtiene es crucial, ya que implica el basamento para el posterior diseño de los equipos, la selección de una alternativa para el proceso, etc. La responsabilidad de la interpretación de los datos es del ingeniero de procesos, no del simulador. Este no se equivoca, solo resuelve el sistema de ecuaciones correspondientes. Una vez dados los datos solo existen dos posibilidades, o converge o no. *El primero es el caso deseado, obviamente. Pero también el de más cuidado!. Ahora el responsable de los resultados, y de su correcta interpretación, es Ud.!*

#### **BIBLIOGRAFIA CITADA**

- ▶ Edmister, W. C., "Absorption and Stripping Factor Functions for Distillation Calculation by Manual Digital-Computer Methods", AICHE Journal, Vol. 3, N° 2, p. 165.
- ▶ Evans L, V. Advances in Process Flowsheeting Systems", Foundations of Computer Aided Chemical Process Design, Vol. I, pág. 425.
- ▶ Fenske MR, "Fractionation of Straight", Run Pennsylvania, Gasoline. Ind. Eng. Chem., Vol. 24, p. 482 (1932).
- ▶ Kern, D., "Process Heat Transfer" Mc. Graw Hill Book Company, NY 1950.
- ▶ Naphtali, L., and D.P. Sandholm, "Multicomponent Separation Calculation by Linearization", AICHE Journal, Vol. 17, N°1, January 1971, p. 148.
- ▶ Tomich, J. F. "A New Simulation Method for Equilibrium Stage Process", AICHE Journal, Vol. 16 N°2, p. 229, March 1970.
- ▶ Underwood, "Fractional Distillation of Multicomponent Mixtures", Chem. Eng. Prog. , 44, p. 603 (1948).
- ▶ Winn F., W., "Latest Advances in Superfractionation", Petroleum Refiner, Vol. 39, N° 6, June 1960, p. 139.

#### **BIBLIOGRAFIA RECOMENDADA**

- ▶ Mathematical Modeling in Chemical Engineering, R.G.E. Franks, John Wiley and Sons Inc. NY - 1965.
- ▶ Modeling and Simulation in Chemical Engineering, RGE Franks - John Wiley and Sons Inc. NY 1972.
- ▶ "Fundamentals Principles of Heat Transfer", S. Whitaker, Pergamon Press, Inc. NY, 1977.
- ▶ Graph Theory in Modern Engineering, Henley, W., Academic Press, N.Y,

---

### **Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos**

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

1973.

- ▶ Cerro R. L., Arri L. E., Chiovetta M. G. y Perez G., “Curso Latinoamericano de diseño de procesos por computadora”, Parte I (tomo I): Simulación de procesos por computadora”; Agosto de 1978, INTEC, Sta. Fe, Argentina.
- ▶ Cerro R. L., Arri L. E., Chiovetta M. G. y Perez G., “Curso Latinoamericano de diseño de procesos por computadora”, Parte I (tomo II): Simulación de procesos por computadora”; Agosto de 1978, INTEC, Sta. Fe, Argentina.
- ▶ Westerberg A.W., Hutchison H. P., Motard R.L., and Winter P., “Process Flowsheeting”, Cambridge University Press, 1979.