

CAPÍTULO V

SIMULACIÓN DE PROCESOS QUÍMICOS

Por
Nicolás José Scenna

V.1 INTRODUCCIÓN

En los capítulos anteriores anticipamos que la simulación de procesos químicos está naturalmente vinculada al cálculo de los balances de materia, energía y eventualmente cantidad de movimiento; de un proceso cuya estructura, y los datos preliminares de los equipos que lo componen, son conocidos.

Además, en función del ciclo iterativo que definimos como constituyente básico de la actividad de diseño de un proceso químico, también comentamos que los simuladores de procesos son la herramienta más importante, junto a las técnicas de optimización, en la etapa de análisis. Esto es, luego de haberse generado diversas alternativas estructurales viables para un proceso dado, (flowsheets o diagramas de flujo), deberán evaluarse cada una de ellas. Ello implica el cálculo de los respectivos balances, los servicios auxiliares, etc. Con estos datos, que abarcan las propiedades de todas las corrientes del proceso, ya sean extensivas o intensivas (temperatura, presión, composiciones, estado de agregación) estamos en condición de obtener un costo estimativo, además de otros datos importantes, tales como las emisiones al medio ambiente, etc. Ello nos dará una base para discriminar entre diversas opciones posibles competitivas, o bien para verificar la performance de un diseño ya decidido, en sus etapas más finas, como ser control, confiabilidad, viabilidad de la puesta en marcha y parada, etc.

Adentrarnos en el área de la simulación de procesos en Ingeniería Química nos impone recurrir someramente a la historia de la simulación, su definición y las áreas que abarca. En los primeros pasos, la simulación de procesos se basaba principalmente en circuitos analógicos, utilizando los fenómenos de analogía. En efecto, la teoría de sistemas nos muestra que diversos principios físicos tienen asociados modelos matemáticos equivalentes o isomórficos. Por ejemplo, ciertos circuitos eléctricos, circuitos hidráulicos, procesos de transferencia tanto de materia como energía y cantidad de movimiento, son descritos por el mismo conjunto de ecuaciones diferenciales. Consecuentemente, podría resultar conveniente analizar (simular analógicamente) el comportamiento de un sistema (proceso químico) observando la evolución de las variables "equivalentes" en un circuito eléctrico (cuyo modelo es equivalente -isomorfo- al proceso estudiado), ya que son fácilmente medibles.

Posteriormente, a partir del uso masivo de la computadora digital, y de la

Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - 81999

revolución que implica la informática en todos los campos de la ingeniería, se evoluciona lentamente de la simulación analógica a la digital, habiendo prácticamente desaparecido la primera en muchas aplicaciones.

En este libro, nuestro objetivo es desarrollar los conocimientos básicos necesarios para comprender, operar, y si es necesario desarrollar los componentes estructurales básicos correspondientes a distintos tipos de simuladores de procesos químicos. Como es conocido, la computadora se utiliza para cálculos ingenieriles hace sólo unas pocas décadas. En particular, una computadora se caracteriza simplemente por el hecho de realizar cálculos velozmente luego de ser programada. Almacena, manipula y da acceso rápido a enorme cantidad de información, permitiendo además realizar manipulaciones simbólicas. Independientemente de la forma en que esto es logrado, lo importante en nuestro caso es comprender las consecuencias; es decir, las implicancias de este fenómeno en el campo de la Ingeniería.

Si bien en 1946 se desarrolla la primer computadora electrónica operativa (la ENIAC en la Universidad de Pensilvania), recién en 1951 se presenta la primera computadora comercial. A partir de esta década se incorpora a la mayoría de las universidades de los países desarrollados un centro de cómputos.

Un hecho relevante es la aparición de los microprocesadores a partir de la década de los setenta, cuya consecuencia inmediata resultó ser la masificación de las computadoras, al introducirse comercialmente en los ochenta las computadoras personales (-personal computers- PC). Este hecho produce una revolución "informática", en el sentido de tener acceso prácticamente a bajo costo; tanto los profesionales como los estudiantes y docentes, a una computadora relativamente eficiente, hecho que anteriormente solo estaba permitido a pocas personas con acceso a centros de cómputos, cuyo costo de mantenimiento era elevado. En la actualidad los sistemas multimedia, las supercomputadoras y las "autopistas informáticas" nos hablan del avance logrado.

Como consecuencia de estos sucesos, se comienza a cubrir la brecha entre los métodos precomputadora y los algoritmos numéricos programados aplicados a la ingeniería química; como da testimonio, por ejemplo, el libro de Lapidus (1962). En el año 1974 aparece el primer simulador de procesos químicos, (el FLOWTRAN). A partir de allí se ha generado una sucesión de acontecimientos que permiten en la actualidad la existencia de varios y eficientes simuladores comerciales como por ejemplo SPEED UP, ASPEN PLUS, PRO II, HYSYM, HYSYS, CHEMCAD, y otros.

En las secciones siguientes se bosquejarán los principales aspectos descriptivos de un simulador apto para la simulación de procesos químicos "en general", como lo son los simuladores comerciales anteriormente mencionados. Se pondrá énfasis principalmente en aspectos genéricos y estructurales, y no en los principios de programación ni lenguajes específicos para el desarrollo del software correspondiente, por considerarse dicha tarea fuera del alcance y objetivos de esta obra. No obstante, se abordarán todos los aspectos conceptuales que deben tenerse en

Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - 81999

cuenta para un exitoso desarrollo, tanto de un simulador en general (tarea harto compleja y consumidora de tiempo), como de un equipo o proceso en particular.

V.2 CLASIFICACIÓN DE LOS MÉTODOS DE SIMULACIÓN

Podemos considerar a la tarea de simulación como aquella en la cual proponemos ciertos valores de entrada al simulador o programa de simulación para obtener ciertos resultados o valores de salida, tales que *estiman* el comportamiento del sistema real bajo esas condiciones.

Las herramientas de simulación pueden clasificarse según diversos criterios, por ejemplo, según el tipo de procesos (batch o continuo), si involucra el tiempo (estacionario o dinámico -incluye a los equipos batch-), si maneja variables estocásticas o determinísticas, variables cuantitativas o cualitativas, etc.

A continuación se expondrán brevemente las características de los distintos tipos de herramientas de simulación generalmente utilizadas.

Simulación cualitativa y cuantitativa

Una de las principales diferenciaciones a realizar al analizar el enorme campo que abarca la simulación de procesos es la que nos ocupa en este apartado.

La simulación cualitativa tiene por objeto principalmente el estudio de las relaciones causales y las tendencias temporales cualitativas de un sistema, como así también la propagación de perturbaciones a través de un proceso dado. Llamamos valores cualitativos de una variable, a diferencia del valor numérico (cuantitativo), a su signo; ya sea absoluto, o bien con relación a un valor dado o de referencia. Por lo tanto, en general se trabaja con valores tales como (+, -, 0). Son varios los campos de aplicación de la simulación cualitativa, como ser análisis de tendencias, supervisión y diagnóstico de fallas, análisis e interpretación de alarmas, control estadístico de procesos, etc.

La simulación cuantitativa, en cambio, es aquella que describe numéricamente el comportamiento de un proceso, a través de un modelo matemático del mismo. Para ello se procede a la resolución de los balances de materia, energía y cantidad de movimiento, junto a las ecuaciones de restricción que imponen aspectos funcionales y operacionales del sistema. Es a esta variante a la cual nos abocaremos en este y los próximos capítulos. La simulación cuantitativa abarca principalmente la simulación en estado *estacionario* y *la simulación en estado dinámico*.

Simulación estacionaria y dinámica.

La simulación en estado estacionario implica resolver los balances de un sistema no involucrando la variable temporal, por lo que el sistema de ecuaciones que se genera es algebraico; si el modelo analizado se basa en parámetros concentrados. Esta última definición implica que se toman las variables espaciales de un sistema representadas por valores promediados, como por ejemplo la concentración y temperatura en un reactor tanque agitado. Si por el contrario se

desea estudiar o reflejar en el modelo las variaciones de las variables de interés con las coordenadas espaciales (modelos a parámetros distribuidos); entonces deberá utilizarse un sistema de ecuaciones diferenciales a derivadas parciales (según el número de coordenadas espaciales consideradas). Un ejemplo puede ser la variación radial de la composición en un plato en una columna de destilación, la variación de las propiedades con la longitud y el radio en un reactor tubular, etc. Por lo general, en simuladores comerciales (no específicos) se utilizan modelos a parámetros concentrados y serán principalmente los analizados en esta obra.

Por otra parte, y como su nombre lo indica, la simulación dinámica plantea los balances en su dependencia con el tiempo, ya sea para representar el comportamiento de equipos batch, o bien para analizar la evolución que se manifiesta en el transiente entre dos estados estacionarios para un equipo o una planta completa. En este caso, el modelo matemático estará constituido por un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias cuya variable diferencial es el tiempo, en el caso de modelos a parámetros concentrados. En caso contrario, se deberá resolver un sistema de ecuaciones diferenciales a derivadas parciales, abarcando tanto las coordenadas espaciales como la temporal (parámetros distribuidos).

En este texto se pondrá énfasis tanto en la simulación de procesos en estado estacionario (Capítulos V al XII) como dinámico (Capítulos XIV al XVIII). Es importante destacar que se prevé una evolución muy importante en el campo de la simulación dinámica durante la próxima década, extendiéndose las áreas en las cuales se la utiliza normalmente. Dentro de este contexto se desarrollarán varios ejemplos de aplicación, profundizando en procesos de separación de mezclas multicomponentes por contacto en múltiples etapas en contracorriente o en procesos específicos como ser biorreactores, evaporación múltiple efecto, etc.. Se discutirá también la simulación de procesos batch (Capítulo XIX), ya que éstos representan una porción importante del campo de aplicación de la ingeniería química.

Desde el punto de vista de los fenómenos o sistemas que se estudian, la simulación puede también clasificarse en *determinística o estocástica*.

Como modelo determinístico consideramos aquél en el cual las ecuaciones dependen de parámetros y variables conocidas con certeza, es decir que no existe incertidumbre ni leyes de probabilidades asociadas a las mismas. En cambio en un modelo estocástico, como su nombre lo indica, ciertas variables estarán sujetas a incertidumbre, que podrá ser expresada por funciones de distribución de probabilidad. En este caso, por lo tanto, también los resultados del modelo estarán asociados a una ley de probabilidad. En esta obra estudiaremos únicamente los modelos determinísticos, dejando de lado los procesos estocásticos y la simulación de los mismos.

Por último, también debe mencionarse *la simulación de eventos discretos*, en la cual existen variables de interés que no tienen un comportamiento continuo. Existen numerosos procesos que sólo pueden simularse desde este punto de vista. Por

Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - 81999

ejemplo, la simulación o diseño de plantas batch multiproducto o multipropósito, o ambas simultáneamente, poseen características que imponen un modelo discreto para contemplar ciertos eventos de interés. Desde este punto de vista, como se verá en el Capítulo XIX, se deberán utilizar modelos especiales para tratar funciones semicontinuas y en presencia de eventos discretos.

V.3 SIMULADORES DE PROCESOS QUÍMICOS COMPLEJOS

Debe diferenciarse la noción de un simulador general de procesos químicos de un programa de simulación de equipos o unidades operacionales aisladas. En efecto, mientras que para estas últimas sólo se requiere el modelo del equipo y un sistema de entrada/salida de datos para comunicarse eficientemente con el usuario, programar un simulador de uso general implica varios problemas adicionales.

En primer lugar deberá contemplarse una biblioteca de módulos individuales para poder simular distintas operaciones o equipos de proceso. Deberá programarse la forma de interacción de los equipos de acuerdo al flowsheet de la planta; además de la metodología de ingreso de los datos, tanto de la estructura (flowsheet) como de cada unidad individual. Obviamente, dependerá del tipo de estructura del flowsheet (con reciclos, lineal, etc) la complejidad matemática para resolver los balances correspondientes, ya que por lo general deberá recurrirse a métodos iterativos. El orden y la secuencia de cálculo dependerá de cada caso en particular, y será un nuevo aspecto a tener en cuenta en la programación del simulador. En resumen, deberán utilizarse métodos numéricos para la resolución de sistemas de ecuaciones no lineales tanto algebraicas como diferenciales (Capítulos III, IV y XIII), como así también técnicas de rasgado, particionado y ordenamiento (Capítulo IV).

Por otra parte, los aspectos vinculados a los cálculos de estimación de propiedades fisicoquímicas son bastante diferentes si se plantea el problema de un equipo dado procesando una mezcla determinada o bien un sistema generalizado capaz de simular diversos procesos de separación (por ejemplo mezclas ideales, no ideales, etc.). En este caso, deberá contarse con un sistema de estimación de propiedades generalizado, lo cual implica un problema de una magnitud muy importante. En efecto, deberá tener aptitud para calcular las propiedades fisicoquímicas y termodinámicas (viscosidad, densidad, capacidades caloríficas, entalpías, constantes de equilibrio, etc.) tanto para sustancias puras como para mezclas. Particularmente dificultoso resulta el cálculo de propiedades tales como coeficientes de difusividad en mezclas líquidas, o bien las constantes de equilibrio en mezclas no ideales o en presencias de electrolitos, por ejemplo. Una introducción a los métodos de estimación de varias propiedades fisicoquímicas se desarrolla en los Capítulos VII y VIII.

En definitiva, son numerosos los aspectos instrumentales y metodológicos que deben superarse al diseñar un simulador de propósitos generales. Dentro de este contexto, resulta muy importante comprender esta problemática para lograr un

conocimiento más profundo de la forma de operar de los principales simuladores comerciales comúnmente utilizados para la simulación de procesos químicos. Baste con mencionar que el diseño e implementación definitiva desde los primeros esbozos hasta la versión de uso comercial de un simulador típico es una tarea que involucra varios cientos de miles de horas hombre, y es además una tarea continua ya que los sistemas comerciales están incorporando constantemente nuevos métodos de resolución, o de estimación de propiedades, etc., generando nuevas versiones periódicamente.

En los puntos siguientes se tratará de describir brevemente los principales aspectos estructurales vinculados a la arquitectura de un sistema típico de simulación de procesos químicos, en forma muy general.

V.3.1 Simuladores de procesos en estado estacionario modulares secuenciales vs. Simuladores globales.

Los simuladores de procesos pueden dividirse en los siguientes tipos según la filosofía bajo la cual se plantea el modelo matemático que representa el proceso a simular:

- *simuladores globales u orientados a ecuaciones*
- *simuladores secuenciales modulares*
- *simuladores híbridos o modular secuencial-simultáneo*

Bajo el enfoque de la *simulación global u orientada a ecuaciones*, se plantea el modelo matemático que representa al proceso construyendo un gran sistema de ecuaciones algebraicas que representa a todo el conjunto o planta a simular. De esta forma el problema se traduce en resolver un gran sistema de ecuaciones algebraicas, por lo general altamente no lineales. Como ejemplo puede citarse que en problemas típicos de simulación de columnas de destilación por métodos rigurosos el sistema de ecuaciones puede llegar a contener más de mil variables. De ello se desprende la magnitud del sistema que represente el modelo de una planta completa típica.

En la década del 70, cuando se generan los primeros simuladores, no existían los medios apropiados (principalmente hardware) para la resolución numérica de sistemas de ecuaciones de gran dimensión. Es por ello que los primeros simuladores comerciales adoptaron principalmente la arquitectura modular, en detrimento de la global.

El principal problema asociado a la filosofía de resolución global u orientada a ecuaciones es la convergencia del sistema y la consistencia de las soluciones que se encuentran. En efecto, los sistemas altamente no lineales como los que corresponden a modelos de plantas químicas pueden, por ejemplo, producir múltiples soluciones (un ejemplo será discutido en el Capítulo X, pero

baste con recordar el caso de los reactores adiabáticos con reacciones exotérmicas). Además, la solución numérica para grandes sistemas, según vimos, exige inicializaciones apropiadas, es decir próximas a un entorno de la solución, de lo contrario pueden presentarse serios inconvenientes.

Históricamente, estas dificultades han sido la causa que ha limitado el desarrollo de este tipo de simuladores en forma masiva. Una de las críticas fundamentales para la operabilidad de los mismos que se realizaba a menudo por parte de usuarios no entrenados, era la imposibilidad de identificar los sectores de la planta en correspondencia con el sistema de ecuaciones que lo representa, dado que una vez que se hubo armado el sistema total, éste está integrado y se pierde la correspondencia biunívoca entre el equipo y el subsistema de ecuaciones que lo representa. De esta manera, si existieran inconvenientes durante la simulación, resulta difícil asignar el problema a un sector específico de la planta, o bien inicializar convenientemente. Las principales características (virtudes y defectos históricamente remarcados) se resumen en la Tabla 1.

Una ventaja importante es que puede lograrse una velocidad de convergencia cuadrática, esto es, mayor que en los simuladores secuenciales, como se verá más adelante. Además, dado que el sistema se plantea orientado a ecuaciones, es posible fácilmente incorporar las expresiones de restricción para definir problemas de optimización en forma directa, ya que solo basta con plantear las restricciones y la función de optimización. Esta flexibilidad es imposible en los simuladores secuenciales modulares, debido a que los módulos están orientados y definidos en forma rígida, según lo discutido en el capítulo anterior; esto es, resulta imposible agregar restricciones y/o variables, además de la expresión analítica de la función de optimización, debiéndose proceder tipo “caja negra”, según se analizará en el Capítulo XII.

Los simuladores *modulares secuenciales* se basan, según adelantamos en el capítulo anterior, en módulos de simulación independientes que siguen aproximadamente la misma filosofía que las operaciones unitarias, es decir, cada equipo: bomba, válvula, intercambiadores, etc.; son modelados a través de modelos específicos para los mismos y además, el sentido de la información coincide con el “flujo físico” en la planta. En esta filosofía se tiene como ventaja el hecho que cada sistema de ecuaciones es resuelto con una metodología que resulta adecuada para el mismo, ya que es posible analizar bajo todas las circunstancias posibles, el comportamiento del método de resolución propuesto, esto es sistemas ideales, no ideales, topología diversas del equipo, distintas variantes, etc. Algunos ejemplos, tales como columnas de destilación, equipos de evaporación flash e intercambiadores de calor se analizarán en los Capítulos VI, IX y X por ejemplo. Dado que se puede analizar específicamente la performance de los distintos métodos de resolución es factible lograr un modelo robusto y eficiente para cada módulo específico.

**PRINCIPALES CARACTERÍSTICAS DE LOS SIMULADORES
GLOBALES U ORIENTADOS A ECUACIONES**

- Cada equipo se representa por las ecuaciones que lo modelan. El modelo es la integración de todos los subsistemas.
- Desaparece la distinción entre variables de proceso y parámetros operativos, por lo tanto se simplifican los problemas de diseño.
- Resolución simultánea del sistema de ecuaciones algebraicas (no lineares) resultante.
- Mayor velocidad de convergencia.
- Necesita una mejor inicialización (mejor cuanto mayor sea el problema a resolver).
- A mayor complejidad, menor confiabilidad en los resultados y más problemas de convergencia (soluciones sin sentido físico).
- Más difícil de usar por "no especialistas".

TABLA 1

Conceptualmente, bajo esta filosofía, para cada módulo de simulación (equipos) deberá plantearse su modelo matemático. Obviamente, para encarar la solución de cualquier sistema de ecuaciones deben diferenciarse los valores conocidos y los que deben calcularse, todo esto teniendo en cuenta los grados de libertad; es decir, la compatibilidad entre el número de ecuaciones y de incógnitas, a fin de obtener un sistema con solución única. Los métodos para ello son los ya analizados en el capítulo anterior. El enfoque en la teoría secuencial modular por definición supone que se *conocen (especifican) las variables de las corrientes de entrada*, o sea las alimentaciones a los equipos, mientras que deben calcularse las corrientes de salida y los correspondientes parámetros de operación si correspondiera. Esto según comentamos, impone cierta rigidez que sacrifica, según sea el caso, la posibilidad de encontrar asignaciones tales que minimicen el tiempo de

cómputo (secuencias acíclicas de resolución del sistema de ecuaciones asociado). Sin embargo esto resulta conveniente desde otro punto de vista, ya que de esta manera se impone una dirección al flujo de información entre módulos. Por otra parte, según ya vimos para el análisis de los grados de libertad, las combinaciones posibles de especificación de variables son enormes, incrementándose en forma dramática la cantidad de módulos a disponer si se quisiera cubrir todas las posibilidades.

Por ejemplo, en los intercambiadores de calor en contracorriente si se suponen conocidas las corrientes de entrada, (esto es la presión, la temperatura, la composición y el estado de fase, - vapor, líquido o mezcla-); dado que para calcular las corrientes de salida el sistema de ecuaciones correspondientes queda determinado sólo cuando se asignan ciertos parámetros de equipo, será necesario que el usuario los asigne como datos. Según se verá en el próximo capítulo, una opción simplificada de cálculo implica la necesidad de fijar como parámetros de equipo el factor $(U A)$, (producto del coeficiente global de transferencia y el área de intercambio).

En general, fijada la orientación en el cálculo (esto es dadas las entradas calcular las salidas del equipo), lograr que el sistema de ecuaciones sea compatible y tenga tantas incógnitas como ecuaciones no implica necesariamente una única opción, ya que debemos analizar las variables o parámetros de operación del equipo. En efecto, en la mayoría de los casos existirán varias combinaciones de valores posibles, es decir, existirán varias posibilidades de asignación de parámetros de equipos. Además, existen variantes para cada módulo que tienen en cuenta varios factores, como ser topología, -por ejemplo el número de entradas y salidas a una torre de destilación, o si hay condensadores parciales o totales-, o bien el nivel de las hipótesis realizadas (si se considera hidráulica de platos o no, pérdidas de calor al ambiente, etc).

Resumiendo, en un simulador modular se define cada módulo por un sistema de ecuaciones independiente que se resuelve de la manera óptima, subordinados sin embargo a las limitaciones que ha impuesto la especificación de variables seleccionada. Esto implica una ventaja en el sentido que se podrían utilizar progresivamente distintos niveles de cálculo dependiendo de la etapa del proyecto en la que se realiza la simulación, o bien en función de los datos disponibles hasta el momento, aprovechando el conocimiento que proviene de la experiencia y análisis del método de convergencia para cada caso en particular. No obstante, uno de los problemas que se originan es la conexión de los módulos según el proceso a simular y las rigideces que ello impone.

La representación del diagrama de flujo (flowsheet) del proceso se traduce a un diagrama similar, llamado *diagrama de flujo de información (DFI)*. Este diagrama matemáticamente es un dígrafo, en el cual los nodos son los módulos de equipos conectados uno a uno a través de las corrientes que los vinculan, las cuales se representan como arcos dirigidos. Estas corrientes de información por lo general coinciden con las corrientes físicas de la planta, pero no necesariamente en todos los casos. Lo mismo sucede con los equipos (nodos del dígrafo). En algunas

oportunidades, será necesario representar un equipo real de la planta mediante la conexión de varios módulos disponibles en la biblioteca de módulos del simulador.

Por ejemplo, en la Figura V.1 se muestra un esquema de un proceso genérico y su traducción al diagrama de flujo de información, que resulta más útil para el manejo de la información, según vimos en el capítulo anterior.

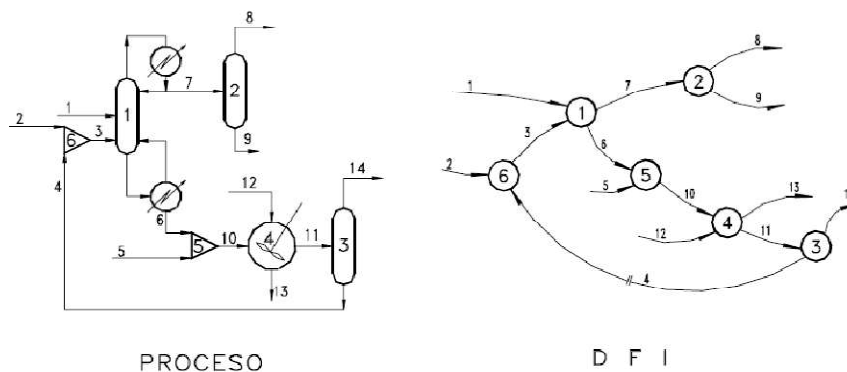


Figura V.1 “Flowsheet y DFI asociado”

En la Figura V.2 se muestra un proceso típico de desalación de aguas de mar por métodos evaporativos. El objetivo del proceso, según ya comentamos, es lograr agua potable para uso humano, agrícola o industrial. Es muy usado en zonas que no poseen fuentes de agua dulce disponibles fácilmente, según lo explicado brevemente en el Capítulo II.

Muy sucintamente recordaremos aquí ciertas características del proceso mencionando que contiene una serie de etapas conectadas entre sí, con un gradiente de presiones en el sentido de circulación de la salmuera. Esto es necesario para facilitar la comprensión del “armado” del DFI, en este caso en particular cuando se utiliza un simulador modular secuencial.

La caída de presión entre etapas permite la vaporización parcial de la corriente, cuyos vapores son utilizados para precalentar la salmuera de alimentación, a través de la batería de intercambiadores precalentadores de la alimentación. La energía externa es adicionada en el intercambiador principal, en el cual se logra la máxima temperatura de la salmuera, lista para entrar en el tren de vaporizaciones (flasheo) sucesivas. El condensado producido es el producto, el cual se colecta en las bandejas indicadas en el esquema, fluyendo también a través de las etapas (y vaporizándose) parcialmente por flasheo hasta llegar a la última etapa como producto. Las corrientes de vapor originadas se adicionan a las provenientes del flasheo de la salmuera, para formar la corriente de vapor utilizable en el precalentador de la alimentación. En este caso, resulta poco probable encontrar en la biblioteca de módulos de un simulador comercial etapas de evaporación como las

indicadas en el esquema. Por lo tanto, deberá pensarse una forma de "modelar" el proceso tratando de reproducir el comportamiento del mismo recurriendo a los módulos disponibles. Si esto no fuera posible, deberá recurrirse a la programación de un simulador específico.

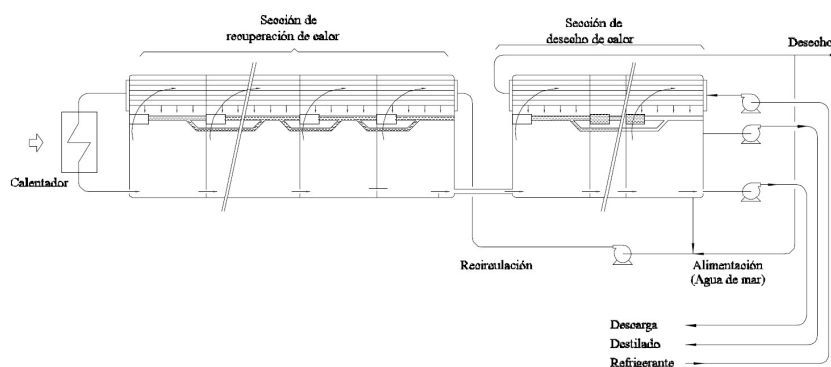


Figura V.2: Esquema de un sistema de destilación por Evaporación Múltiple Flash (EMF).

En este caso, para un estudio preliminar, es posible modelar cada etapa según lo indicado en la Figura V.3. Esto es, interpretar cada etapa de flasheo como la combinación de un equipo flash para la salmuera, un equipo flash para la corriente de condensado, un intercambiador de calor y nodos sumadores y divisores, además de equipos auxiliares (bombas por ejemplo). De esta manera, se pueden conectar los módulos mencionados en un diagrama de flujo que permitirá (dentro de cierta aproximación) calcular los balances de materia y energía de la planta real, según se indica en la Figura V.4. En este ejemplo se pretende mostrar el armado del DFI a partir de los módulos de equipos individuales, la relación entre un DFI y el flowsheet de la planta y las hipótesis subyacentes en su confección.

El problema que se plantea ahora es calcular todas las corrientes y parámetros de la planta, solucionando uno a uno los módulos en una secuencia lógica tal, que aún existiendo reciclos pueda obtenerse la solución deseada. Para ello debe utilizarse un método iterativo apropiado, definiendo corrientes de corte a través del rasgado del diagrama de flujo, según se ha visto en el Capítulo IV. Como definimos, las corrientes de corte son aquellas cuyos valores deben ser supuestos inicialmente por el usuario a los efectos de generar una serie; cuyos términos se obtengan iteración a iteración resolviendo toda la planta uno a uno los módulos, en una secuencia ordenada y acíclica. El criterio de convergencia

estará cumplido cuando la diferencia entre los valores de dos iteraciones sucesivas es menor que un error mínimo adoptado por el usuario. En este caso se concluirá que se satisface el balance de materia y energía de la planta, con lo cual la simulación habrá terminado. Para el caso del proceso EMF se indica un posible conjunto de corrientes de corte en la Figura. V.4.

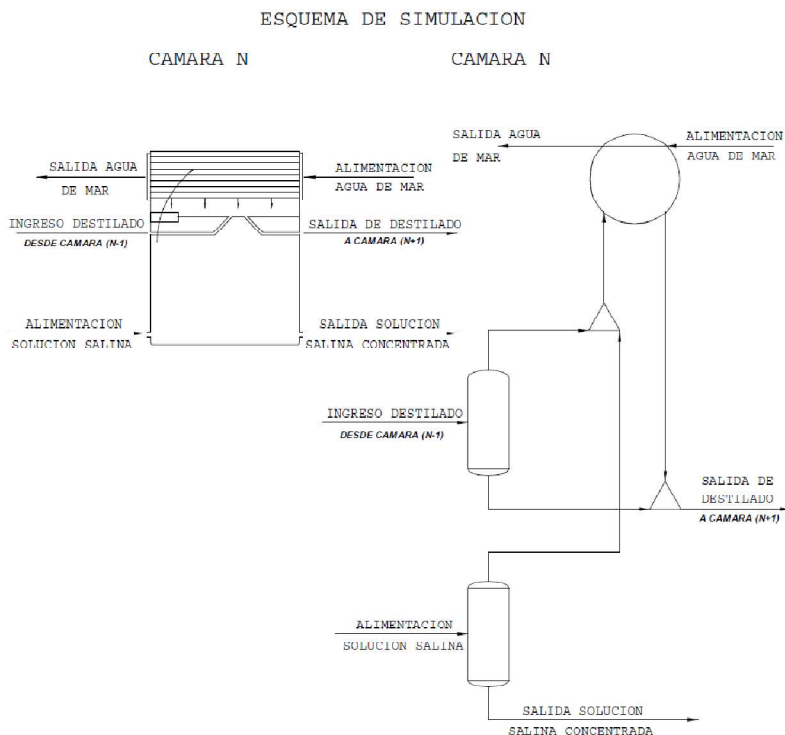


Figura V.3. Módulos asociados a cada etapa del EMF.
Construcción del DFI asociado al EMF.

Como ya discutimos, no existe un solo conjunto de corrientes de corte, como el lector puede verificar analizando el DFI.

En síntesis, dado que en la filosofía modular, por definición los módulos resultan orientados, al construirse el diagrama de flujos del sistema, si éste contiene reciclos será necesario disponer de un procedimiento de cálculo iterativo para resolver los balances del proceso completo. Volviendo al DFI de la Figura V.4, es evidente que debe adoptarse un criterio iterativo, ya que conociendo sólo las corrientes de entrada a la planta existen varios módulos que no pueden calcularse sin adoptar valores supuestos para ciertas corrientes. Para determinarlas (Capítulo IV) se definen las operaciones de rasgado, particionado y ordenamiento. Como sabemos, la primera identifica las corrientes que necesariamente deberán ser

supuestas por el usuario, para declararlas como variables de iteración. Mediante el particionado y ordenamiento se transforma la secuencia cíclica en una acíclica o lineal, por lo que se determina la secuencia ordenada de equipos para el procedimiento iterativo de resolución.

Esto significa, sin embargo, introducir para cada corriente así definida un orden de convergencia menor al cuadrático que caracteriza a los globales. Para el caso que nos ocupa, resolver el equipo EMF en forma simultánea significa obtener un único sistema que vincule a todas las variables. Esto es muy sencillo y puede realizarse por una metodología equivalente a la utilizada para equipos de separación múltiple etapa, según veremos en los Capítulos X y XVIII.

Desde el punto de vista del análisis numérico, se puede concluir que bajo el procedimiento de la filosofía modular secuencial se introducen tres niveles característicos de iteración, a diferencia de los simuladores orientados a ecuaciones donde existe sólo uno.

En efecto, en general se debe iterar al nivel de cálculos fisicoquímicos, de módulos de equipos, y por último, a nivel del DFI o flowsheet de la planta completa. Más aún, para problemas en los cuales se defina la optimización de alguna performance del proceso expresada según una función objetivo y las variables de optimización correspondientes, se introduce un nuevo nivel de iteración, por sobre el nivel correspondiente al DFI, según se profundizará en el Capítulo XII.

En la Tabla 2 se resumen las características principales históricamente remarcadas como específicas para los simuladores modulares secuenciales. Un paso adelante, para relajar la rigidez que impone la orientación fija, es contemplar para cada módulo todos los grados de libertad posibles. En efecto, a diferencia de la filosofía modular secuencial pura, en la cual existe una rígida estructura de los módulos, puede utilizarse un relajamiento al criterio de orientación. A modo de ejemplo, como se verá en el Capítulo IX, existen varias alternativas de asignación de parámetros y variables para un equipo flash. En efecto, no sólo es posible plantear el problema suponiendo conocida la alimentación. Además, puede asumirse conocida una de las corrientes de salida; debiéndose calcular por lo tanto las dos corrientes restantes y los parámetros operativos que surjan como grados de libertad del sistema, a fin de obtener un conjunto de ecuaciones compatible. De la misma manera puede procederse para todas las combinaciones posibles.

Esto involucra un gran trabajo de programación, ya que como comentamos anteriormente, implica aumentar drásticamente la biblioteca de módulos disponibles, pero con la ventaja de recuperar flexibilidad a la hora de plantearnos el problema de encontrar una secuencia acíclica para la resolución del DFI.

Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - 81999

SIMULADORES MODULAR SECUENCIALES Y SUS CARACTERÍSTICAS HISTÓRICAMENTE REMARCABLES

- Biblioteca de módulos (equipos)
- Flowsheet: Equivale a un grafo orientado o digrafo
- Orden de resolución fijo (iteraciones)
- Tres niveles de iteración (se incorpora otro si se desea optimizar)
 1. Cálculos fisicoquímicos.
 2. Módulos en sí (ej. flash, columna, etc).
 3. Variables de iteración (reciclos).
 4. Optimización

Características Relevantes:

- Modelos individuales resueltos eficientemente.
- Fácilmente comprendido por ingenieros "no especialistas en simulación".
- Métodos de convergencia robustos (Sustitución Directa, Wegstein, etc).
- La información ingresada por el usuario (relacionable con equipos o corrientes) resulta fácilmente chequeable e interpretable.
- Los problemas de diseño (selección de parámetros) son más difíciles de resolver.
- Se incrementa la dificultad cuando se plantea un problema de optimización (funcionan como cajas negras).
- Poco versátiles, pero muy flexibles, muy confiables y bastante robustos.

TABLA 2. Principales Características de los Simuladores Modulares Secuenciales.

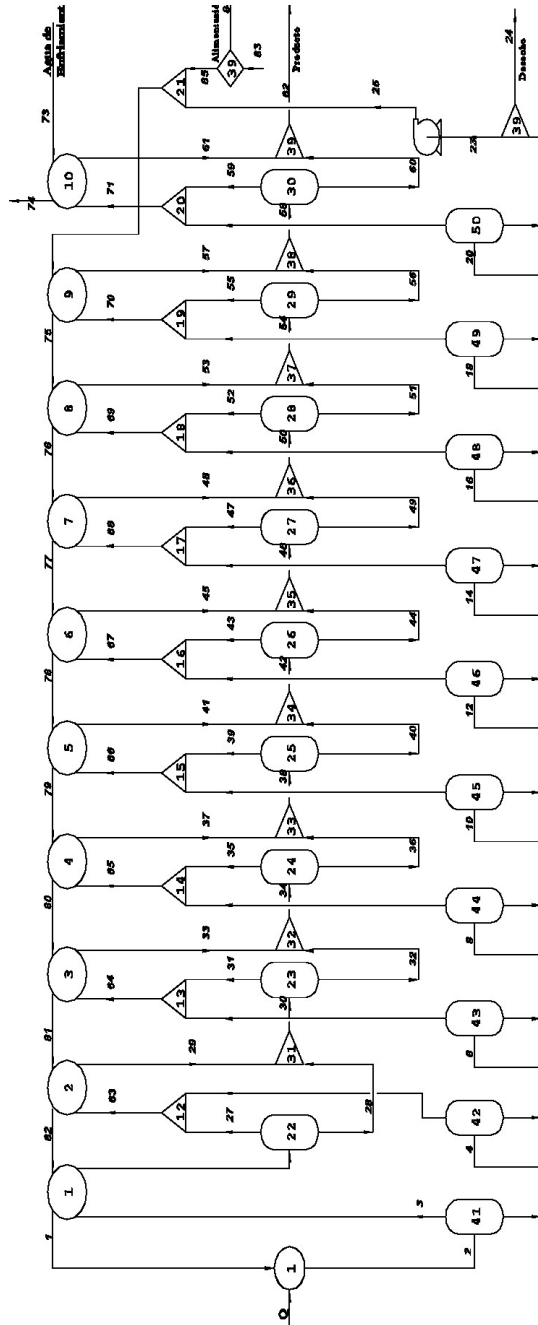


Figura V.4: Diagrama de flujo de un proceso de desalación por evaporación múltiple flash.

Dado que este planteo puede realizarse para todos los módulos, se observa que rápidamente puede crecer el "conjunto" de los mismos incrementándose en forma significativa la "biblioteca" de módulos disponibles. Esto produce un efecto inmediato en el armado del DFI, ya que el mismo, disponiéndose de nuevos módulos con nuevas orientaciones (no sólo las rígidamente impuestas por la filosofía modular secuencial pura); puede armarse ahora con nuevos grados de libertad. La primer consecuencia de esta estrategia es la necesidad de una menor cantidad de corrientes de corte, ya que se poseen más posibilidades de orientación de los módulos. El resultado es que se ha introducido un grado de flexibilización, relajando la orientación secuencial, pero manteniendo la filosofía modular. En la Figura V.5 se observa el DFI correspondiente al proceso EMF (Figura V.4) permitiendo múltiples orientaciones a los módulos. Obsérvese cómo se reduce el número de corrientes de corte al disponerse de nuevas orientaciones para los módulos (tomado de Montagna y col., 1991).

La estrategia de contemplar los grados de libertad posibles en la orientación de los módulos para mejorar la performance y flexibilidad del simulador basado en una óptica modular secuencial es utilizada por algunos simuladores comerciales para disminuir el tiempo de cómputo al reducir el número de corrientes iteradoras.

A esta altura, nos falta mencionar la tercera opción mencionada al principio de esta sección, los simuladores basados en una estrategia *híbrida* con respecto a las filosofías ya analizadas. En efecto, es posible plantear el desarrollo de simuladores combinando la estrategia modular y la orientada a ecuaciones de forma tal de aprovechar los aspectos positivos de ambas metodologías lo máximo posible. Para ello se selecciona un grupo de variables sobre las cuales se procederá según la filosofía global, esto es, se las resolverá simultáneamente, mientras que para el resto se mantiene la filosofía modular, es decir, se trata de encontrar una secuencia acíclica, que provea por su cálculo, en cada iteración, los valores de las variables a resolverse simultáneamente. Es por ello que a esta filosofía también se la conoce como two-tear o de dos niveles jerárquicos, ya que se trabaja en uno con las variables tratadas simultáneamente, y en el otro secuencialmente. Otro nombre con el que se conoce este enfoque es modular secuencial-simultáneo.

Enfocando el tema desde una perspectiva histórica, a diferencia de los simuladores globales, la filosofía modular ha sido la más desarrollada, y por ello en la actualidad la mayoría de los simuladores comerciales responden a esta metodología de trabajo. Se utilizan tanto la variante secuencial pura como métodos relajados en cuanto a la orientación de los módulos, dotándolos de mayor flexibilidad.

En este punto, resulta conveniente remarcar nuevamente, como se lo ha indicado más arriba, que esta situación ha sido una consecuencia de las limitaciones históricas en el desarrollo y potencialidades de software y hardware disponibles para resolver un sistema muy complicado de ecuaciones algebraicas, además de los recursos limitados en lenguajes de programación para construir una estructura flexible y eficiente para el modelado.

Debe aclararse, no obstante, que a la luz de las nuevas disponibilidades en hardware y software, hoy en día esta división podría relativizarse y en un futuro muy probablemente sea irrelevante.

En efecto, con el advenimiento de nuevos paradigmas de programación (que, a diferencia de los lenguajes procedurales, hacen posible el manipuleo de información simbólica, recursividad, programación orientada a objetos, etc); se logra fácilmente generar algoritmos que cumplan respecto del armado de un sistema de ecuaciones global; la misma tarea lógica que debe realizarse en un simulador secuencial para administrar los módulos parciales que representan la planta completa.

En otras palabras, es posible, tomando como dato el diagrama de flujo del proceso, diagramar una “interfaz inteligente o lógica”, que “arme” el sistema de ecuaciones correspondientes a los equipos seleccionados y de alguna forma considere las interconexiones entre los mismos, a través de la identificación de las corrientes de entrada - salida como variables de conexión; elaborando de esta manera, a partir de los subsistemas, la gran matriz que representa el sistema global de ecuaciones de toda la planta. Consecuentemente, este sistema lógico (generación del sistema de ecuaciones que representa la planta completa), sería la interfaz hacia el usuario; presentaría a éste los equipos en un formalismo o lenguaje natural (como un simulador modular), mientras que hacia el simulador los traduciría en un único sistema de ecuaciones a ser resuelto. En este caso existiría una especie de banco o biblioteca de “módulos conteniendo subsistemas de ecuaciones de balance genéricas”, y no módulos de equipos (ver Henning, G., Leone, H., Stephanopoulos, Geo., 1990).

Además, la inicialización (el otro gran problema) podría resolverse con la misma estrategia. En efecto, las estimaciones correspondientes (por ejemplo, respecto a caudales, presiones y temperatura asociadas al tope y fondo de una columna de destilación, bombas o a intercambiadores, etc), pueden ser volcadas en forma conveniente a la inicialización del sistema global, a través de la interfaz inteligente, que presentaría al usuario “equipos” o variables con su “interpretación” física, pero hacia el simulador los traduciría en el lenguaje matemático, esto es, las variables correspondientes en el sistema global de ecuaciones asociado a la planta completa.

En definitiva, la performance del sistema en cuanto a la amigabilidad, transparencia y flexibilidad hacia el usuario, sería indistinguible respecto de uno modular. La diferencia radicaría en la estructura asociada al problema matemático y en la estrategia de resolución del sistema de ecuaciones de gran dimensión, que como sabemos tiene una velocidad de convergencia cuadrática contra una menor del sistema modular. Debe balancearse entonces velocidad de convergencia vs. robustez

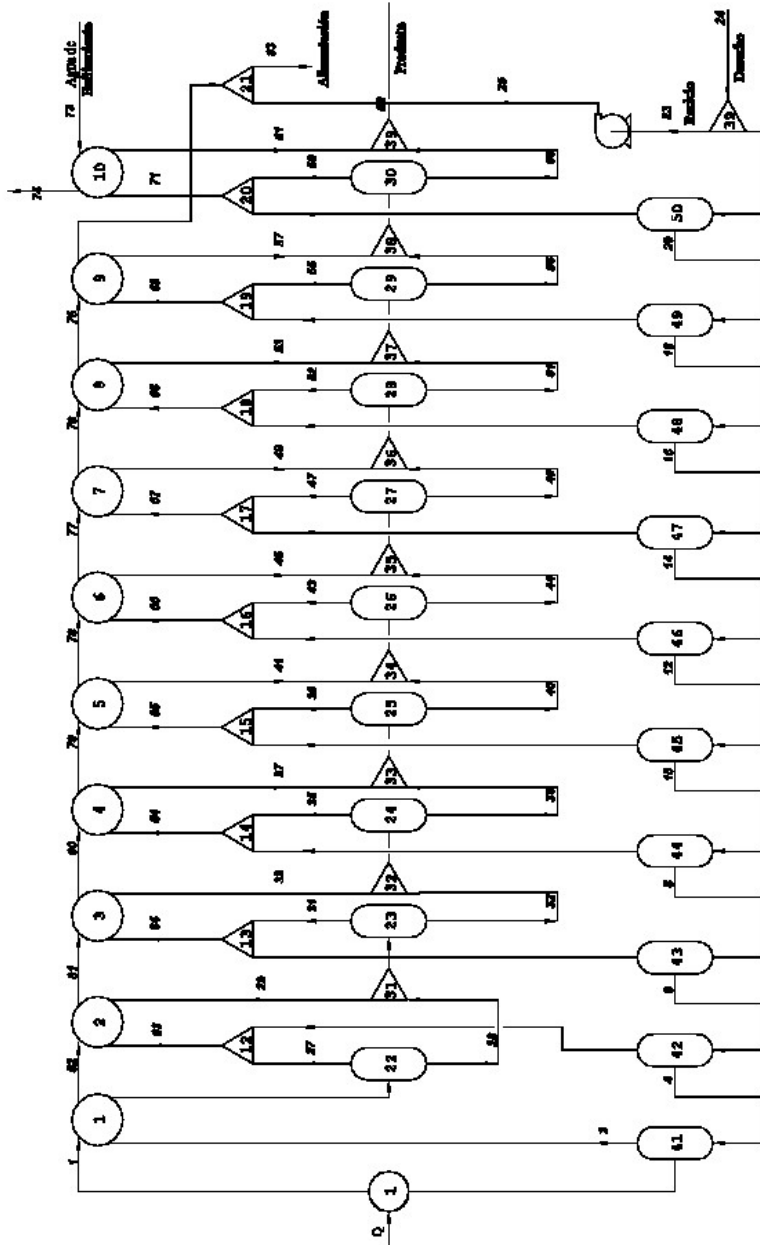


Figura V.6: Diagrama de flujo de información de un sistema EMF de 10 etapas. Según la orientación lógica dada, no existe la necesidad de utilizar corrientes de corte ya que se logró una secuencia acíclica utilizando módulos de orientación diversa.

al resolver sistemas de ecuaciones de elevada dimensión, para optar entre una filosofía u otra. A medida que evolucionan los algoritmos y el software correspondiente para la solución de grandes sistemas de ecuaciones, mayor es la facilidad con que puede implementarse esta nueva filosofía en el diseño de simuladores de uso general. Más aún, existe en nuestros días una diversidad de productos comerciales que parcialmente llevan a la práctica los principios aquí discutidos. En efecto, uno de los condicionantes es la relativa necesidad de utilizar un criterio orientado a ecuaciones al enfrentar la simulación dinámica de plantas completas. Dado que los nuevos simuladores tienden a dotar al usuario de la facilidad de simular la planta *tanto en estado estacionario como dinámico*, es conveniente para el desarrollo de estos simuladores, migrar a la filosofía global.

En este libro no tenemos como objetivo específico el análisis de la evolución histórica ni las tendencias evolutivas de los aspectos correspondientes a la simulación de procesos y las filosofías y estrategias para la implementación de los sistemas informáticos que le dan soporte. Además, este mismo punto podría plantearse para los sistemas de síntesis de procesos, diseño, interacción con sistemas gráficos para la generación de documentación, la simulación cualitativa, simulación dinámica, sistemas de control, etc., haciendo imposible la recopilación en un espacio acotado como el que disponemos.

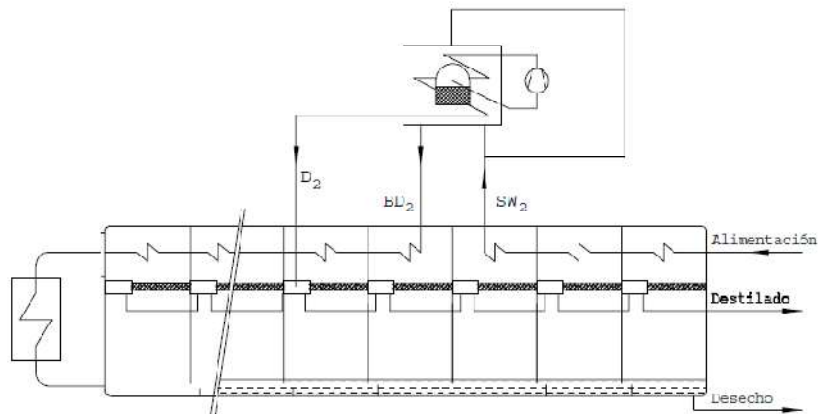
Con la introducción realizada, resultará claro al lector que en un futuro, debido al progreso del software y hardware, los modelos estarán basados progresivamente en la filosofía global u orientada a ecuaciones. Esto permitirá además mayor flexibilidad en el planteo de problemas muy diversos, como ser simulación estacionaria y dinámica, optimización, etc; todos ellos factibles de resolverse con una única herramienta, que conceptualmente, debiera llamarse de modelado de procesos más que de simulación de los mismos. Con ello se estaría enfatizando su versatilidad para ser utilizada en diversas tareas propias de la ingeniería de procesos (según vimos en el Capítulo I y II) y no específicamente simulación, en el sentido clásicamente aceptado por definición. Esto por otra parte, obliga al usuario a conocer cada vez más los detalles, tanto matemáticos como estructurales, así como también, la implementación de modelos específicos, ya que en una filosofía orientada a ecuaciones, solo implica agregar un paquete de ecuaciones adicionales a las contenidas en la "biblioteca" de módulos-ecuaciones del simulador.

PROBLEMAS PROPUESTOS

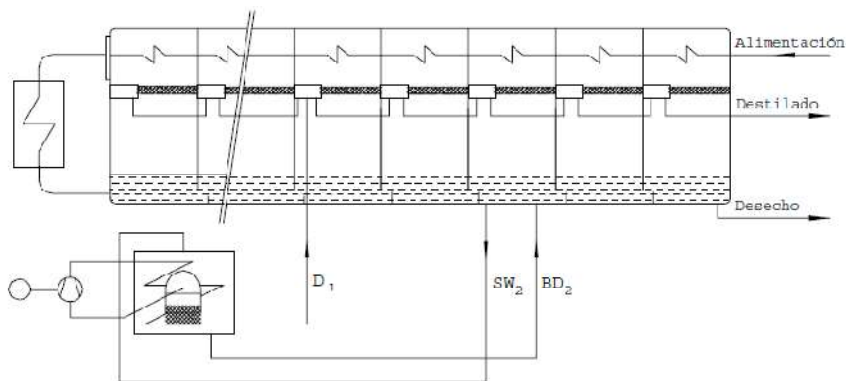
- P1) Sea el procedo de desalación de aguas de mar indicado en la Figura V.4. Como analizamos en el capítulo IV, los criterios para identificar el conjunto de corrientes de corte no involucran en general una consideración de las características físicas de las corrientes, por lo que algunas pueden ser más convenientes que otras, pese a contener el mismo número de variables; por ejemplo por ser fácilmente estimadas, con relación a otras. Por otra parte,

también puede suceder que una corriente tenga menor número de variables que otra, por lo cual se supone que resulta conveniente (menor esfuerzo de cómputo). Desde este punto de vista, considerar el conjunto de corrientes de corte indicado en la figura en relación con el siguiente: (3,63,64,65,66,67, 68,69,70).Cuál es más conveniente?.Cuál es el motivo?

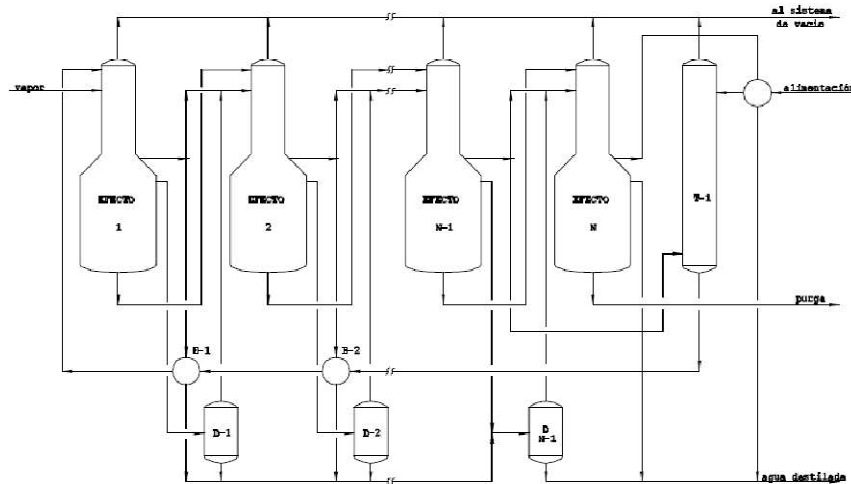
Existe en el diagrama un conjunto de corrientes de corte más convenientes?



P2-a) Integración en paralelo de un sistema por Compresión de Vapor (CV) a un sistema EMF. El agua de mar es extraída de uno de los calentadores de las etapas de flasheo para alimentarlo al equipo CV y luego devolverlo al sistema EMF.



P2-b) Integración en paralelo CV-EMF.El agua de mar se extrae de las cajas de flasheo del EMF. La descarga del CV se ubica en la misma caja. El destilado se deposita en el conducto colector correspondiente.



P2-c) Proceso de desalinización de aguas de mar por evaporación múltiple efecto.

- P2) Dados los siguientes procesos, según lo indican las respectivas Figuras, obtener el conjunto de corrientes de corte y la secuencia de resolución, modelando el sistema en función de módulos elementales contenidos en un simulador comercial (por ejemplo bombas, válvulas, intercambiadores de calor, flash, compresor, etc.). Caso P2-c). Evaporación Múltiple Efecto. Caso P2-a) y P2-b). Procesos híbridos de desalación combinando el evaporador EMF y el basado en compresión de vapor (CV).
- P3) Un simulador estacionario, puede ser utilizado para graficar la relación entre dos variables del equipo o planta a simular, por ejemplo el calor consumido vs. la temperatura del agua de alimentación en el proceso de la Figura V.2??.
Y para graficar la curva de evolución de la temperatura de la salmuera en la primer cámara ante la perturbación del calor introducido?
- P4) Debido a qué motivo comienza a incrementarse en el mercado la oferta de simuladores orientados a ecuaciones?.
- P5) Escriba un diagrama de flujo en bloques para secuenciar las tareas que debería seguir un programa que simule un complejo químico dados los equipos y corrientes (DFI) y los datos correspondientes a las corrientes de entrada a la planta y los pertenecientes a los parámetros de operación de cada equipo.
- P6) Debido a qué motivo un simulador comercial, si bien puede calcular un conjunto de corrientes de corte, permite también al usuario definir un conjunto propio?
- P7)Cuál es la idea detrás de los simuladores híbridos o de dos niveles

Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - 81999

jerárquicos?.

- P8) Explique el motivo por el cual puede encontrar múltiples soluciones cuando usa un simulador en estado estacionario. Qué condiciones debe tener el sistema de ecuaciones correspondientes al modelo?.
- Nota: Recuerde el caso de los reactores adiabáticos y sus múltiples estados estacionarios.
- P9) Explique la causa por la cual el DFI no necesariamente debe coincidir con la planta real.
- P10) Qué tipo de modelos debería utilizar en los casos en los cuales los valores de las corrientes de entrada a la planta tienen asociados leyes de probabilidad?. Y si varían en el tiempo?. Puede ser utilizado un simulador estacionario para simular el comportamiento de una planta batch?.

BIBLIOGRAFÍA CITADA O RECOMENDADA

- 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.
- Henning, G., Leone, H., Stephanopoulos, Geo.; MODEL.LA. A MODELing LAnguage for Process Engineering. Part I: The formal framework; Computers and Chemical Engineering, 14, 8, 1990.
- Henning, G., Leone, H., Stephanopoulos, Geo.; MODEL.LA. A MODELing LAnguage for Process Engineering. Part II: Multifaceted Modeling of Processing Systems; Computers and Chemical Engineering, 14, 8, 1990.
- Westerberg A.W., Hutchison H. P., Motard R.L., and Winter P., “Process Flowsheeting”, Cambridge University Press, 1979.