

CAPÍTULO XIX

MÉTODOS, ESTRUCTURAS Y MODELOS PARA LA SIMULACIÓN DE PROCESOS BATCH

Por
Enrique Salomone

XIX.1 INTRODUCCIÓN

La simulación por computadoras ha sido largamente usada en el diseño, optimización y análisis de performance de procesos continuos. A medida que esta tecnología se hizo madura, fue incorporada en herramientas comerciales de uso extendido.

Sin embargo, para los procesos discontinuos el estado del arte es completamente diferente. Mientras que existe numerosa bibliografía atendiendo al problema de la simulación de etapas batch individuales, la simulación de procesos completos todavía se encuentra en un nivel de desarrollo mucho más incipiente.

La principal dificultad radica en la complejidad que introducen las relaciones entre las etapas habida cuenta de las características tan particulares que presentan los procesos batch desde el punto de vista de los estados no estacionarios, discontinuidades del flujo de material, las distintas políticas de operación posibles, etc.

En este capítulo se presenta una discusión introductoria acerca de los principales enfoques desarrollados hasta el momento para abordar problemas que requieren de la simulación de un proceso discontinuo.

En primer lugar, se caracterizan los procesos discontinuos introduciendo las definiciones y conceptos más importantes, luego se desarrollan modelos matemáticos de un proceso discontinuo en forma general, ilustrando su relación con modelos mecanicistas (basados en los primeros principios o ecuaciones de balance) de etapas batch individuales.

Por último se abordará el problema de la simulación, analizando las características de las distintas estrategias desde el punto de vista de su utilización para simular procesos batch.

XIX.2 EL ROL DE LOS PROCESOS BATCH EN LA INDUSTRIA QUÍMICA

El procesamiento discontinuo o batch es el modo de operación más antiguo que conoce la industria de procesos. Analizando el desarrollo de la ingeniería química de los últimos 30 años se puede concluir que el mayor esfuerzo se ha centrado en la

Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

transformación de los “viejos” procesos batch en modernos procesos continuos. Con esta perspectiva parece sorprendente encontrar hoy que una alta proporción del volumen de producción de sustancias químicas (y una proporción aún mayor si se analiza la participación económica) se realiza en plantas batch. Además, no hay evidencias de que esta tendencia decline (Parakrama, 1985, Rippin, 1993).

Existen productos para los cuales no es posible desarrollar procesos continuos confiables. En otros casos este desarrollo exige una demanda de tiempo y recursos prohibitiva. Sin embargo, muchos más productos que podrían ser manufacturados en plantas continuas se procesan de hecho en plantas batch por motivos económicos.

La producción batch se lleva a cabo usualmente en equipos relativamente estandarizados que pueden ser adaptados fácilmente y si es necesario reconfigurados para producir otros productos diferentes. Esto es particularmente útil para productos que se fabrican en pequeñas cantidades como los farmacéuticos, agroquímicos y otros químicos finos para los cuales la demanda anual puede ser satisfecha en unos pocos días o unas pocas batchadas en una planta existente.

Debido a la flexibilidad de los arreglos de producción, éstos procesos pueden absorber las fluctuaciones o cambios rápidos en la demanda que son características de estos productos. De esta manera se evitan las dificultades asociadas con el dimensionamiento de una planta dedicada innecesariamente pequeña.

Una de las tendencias más claras de la industria química es el creciente interés por los productos químicos finos, de alto valor agregado y alto contenido tecnológico. A este mercado se han agregado en los últimos años productos de origen bioquímico que se destacan por su corto ciclo de vida.

Otra característica de este sector es su estrecha relación con la innovación tecnológica y la habilidad para producir rápidamente cantidades comercializables de productos muy novedosos. Los procesos batch ofrecen una facilidad relativa para pasar de datos experimentales de escalas piloto a diseños industriales de manera más rápida y confiable.

Todos estos factores han movilizad el interés por el desarrollo de técnicas eficientes para el diseño, planificación y operación de plantas químicas batch. Al igual que con los procesos continuos, la simulación es una herramienta importante para asistir en estos problemas.

XIX.3 APLICACIÓN DE LA SIMULACIÓN EN LA INGENIERÍA DE PROCESOS BATCH

La simulación de un proceso puede ser usada en distintos problemas que tienen distintos niveles de complejidad. Estos problemas pueden ser ordenados en una estructura jerárquica como se esquematiza en la figura 1.

El nivel más bajo de complejidad consiste en el uso de la simulación para la predicción de las condiciones operativas del proceso. En este nivel la simulación se aproxima al comportamiento de las fenómenos físicos que ocurren en el proceso y

actúa como un emulador del proceso. Típicas respuestas de estas simulaciones son: conversión final en una reacción, rango de presiones de trabajo, recuperación obtenida en una etapa de purificación, etc.

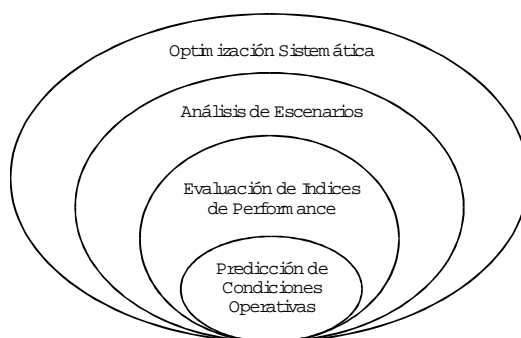


Figura XIX.1: Aplicación de la simulación de procesos.

Con un nivel de complejidad mayor se puede ubicar al uso de la simulación como herramienta de evaluación de índices de performance. Aquí no solamente interesa emular la física del proceso sino evaluar los resultados del mismo en términos de algún índice adecuado. Típicamente se puede usar simulaciones para evaluar la productividad, los tiempos de respuesta, el consumo de recursos, los costos asociados a la producción, rendimientos, etc.

Un paso más en complejidad lo constituye el análisis de distintos escenarios. Este tipo de problema incluye a los anteriores y agrega la tarea de identificar y agrupar variables "clave" que tienen impacto en el índice de performance, manejándolas como datos de entrada. De esta manera, el simulador del proceso se transforma en una función implícita de dichas variables que da por resultado el índice de performance correspondiente al escenario actual.

Las variables clave pueden ser "parámetros variables" externos al proceso o bien "variables manipulables" internas del proceso. En este último caso, dichas variables constituyen grados de libertad que pueden usarse para mejorar la performance y se denominan variables de decisión. Para encontrar "el mejor" valor de las variables de decisión valiéndose de la simulación es necesario agregar un nuevo nivel de complejidad: la optimización. El algoritmo de optimización comanda la generación de nuevos valores para las variables de decisión y la función objetivo a optimizar es el índice de performance provisto por el simulador.

XIX.4 CARACTERÍSTICAS DE LOS PROCESOS BATCH

Los procesos de la industria química pueden ser clasificados en continuos o batch. En un proceso continuo, los materiales pasan a través de unidades

especializadas de procesamiento para terminar convertidos en productos finales. Cada una de estas unidades opera en estado estacionario y realiza una función de procesamiento dedicado. Tanto los ingresos de materiales como la salida de productos son flujos continuos de materiales.

Un proceso batch, en cambio, consiste en una secuencia de pasos que deben ser realizados en un orden definido. La culminación de esta secuencia de pasos produce una cantidad finita de producto final. Esta cantidad finita es lo que se denomina *batch*. Si la cantidad requerida de producto es mayor que esta cantidad, la secuencia debe ser repetida. Los procesos batch son esencialmente discontinuos y los materiales se procesan por lotes. En general cada unidad opera en estado no estacionario.

Existen dos tipos básicos de unidades en un proceso de esta naturaleza:

- Unidades batch
- Unidades semicontinuas

Una unidad batch propiamente dicha consiste en un recipiente donde los materiales a procesar son cargados, sometidos a algún tipo de procesamiento y luego descargados. Es decir que básicamente son unidades de contención con alguna capacidad de procesamiento. El caso más simple lo constituyen las *unidades de almacenamiento* donde los materiales no sufren ninguna transformación sino que son sencillamente alojados durante algún tiempo. En el otro extremo están las unidades donde varias tareas se conforman en una única unidad de contención. Un ejemplo clásico de este tipo de unidad es el reactor agitado y encamisado, donde un mismo recipiente de contención puede realizar las tareas de mezclado de reactivos, calentamiento, reacción y enfriamiento. En general, una *unidad batch de procesamiento* tendrá asociado un tiempo de procesamiento necesario para llevar a cabo la tarea.

Una *unidad semicontinua* es un equipo continuo que opera en forma intermitente transfiriendo el material entre dos unidades batch. Ejemplos de este tipo de unidad son las bombas y transportadores. Algunas unidades semicontinuas, además de transferir el material producen algún tipo de procesamiento. Este es el caso de filtros, mezcladores estáticos, intercambiadores de calor, centrífugas, etc. Es común también encontrar trenes de varias unidades semicontinuas en serie operando entre dos unidades batch.

En la figura 2, se representa un proceso batch típico donde pueden observarse los tipos de unidades anteriormente mencionados.

Una planta batch puede ser usada para fabricar un único producto. Ejemplos de este tipo de plantas pueden ser encontrados en la industria farmoquímica, en la síntesis de intermediarios y algunos productos de fermentación y reciben el nombre de *monoproducto*. En estas plantas, la secuencia de tareas se repite una y otra vez en forma cíclica formando una *campana* de producción.

Es más difundido todavía el uso de instalaciones batch para la fabricación de varios productos. En este caso se pueden distinguir dos arreglos distintos: las plantas

multiproducto y las plantas multipropósito.

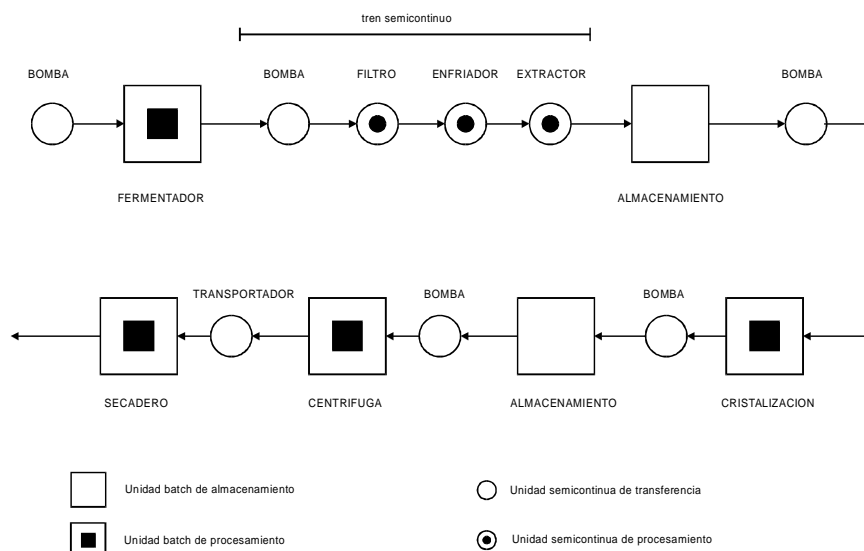


Figura XIX.2: Un típico proceso batch.

En una planta multiproducto, todos los productos siguen la misma secuencia de procesamiento a través de las mismas unidades. Su aplicación está centrada en la producción de familias de productos. Por ejemplo: producción de pinturas, polímeros de distinto grado, etc. Normalmente, estas plantas operan en campañas monoproducción, es decir, se procesan varios ciclos de un producto (una campaña), se acondicionan las unidades para el siguiente producto y se procesan varios ciclos de dicho producto, y así sucesivamente.

La planta multipropósito por otra parte, consiste en una batería de unidades que son asignadas para procesar un producto determinado y una vez finalizada la producción de éste pueden ser reasignadas para otro producto en una secuencia diferente. A diferencia de las plantas multiproducto, cada producto sigue una receta de fabricación diferente y en distintos momentos puede incluso ser procesado en diferentes unidades. Estas plantas son las más flexibles y su operación está basada en *órdenes de producción* que van definiendo los arreglos productivos. Esto requiere un importante esfuerzo de planificación, cronogramación de tareas y asignación de recursos.

Cualquiera sea el tipo de planta, toda vez que la cantidad de producto obtenido al finalizar una secuencia es insuficiente, dicha secuencia se repite cíclicamente hasta cumplimentar la cantidad requerida. La manera en que estos ciclos son conducidos da lugar a dos modos distintos.

En el primer modo una batchada debe ser procesada completamente antes de

que la nueva bachada pueda empezar a ser procesada. Esto se conoce como operación *sin solapamiento de bachadas*. En consecuencia en todo momento hay una única bachada siendo procesada y por lo tanto una única etapa ocupada.

En el segundo modo, llamado *con solapamiento de bachadas*, se permite que una etapa que ya está desocupada comience a operar con una nueva bachada antes que la anterior finalice su procesamiento. De esta manera habrá más de una bachada procesándose y por lo tanto más de una unidad operando simultáneamente. Esta diferencia en la forma de operación se ilustra en la figura 3.

Como se puede apreciar en el diagrama de Gantt (a), la bachada #1 es procesada secuencialmente en las unidades 1, 2 y 3. La bachada #2 comienza a procesarse en la unidad 1 sólo cuando la unidad 3 terminó de procesar la bachada #1. Nótese que en todo momento mientras una bachada esta siendo procesada en una unidad, las demás unidades permanecen ociosas.

En el diagrama (b) correspondiente al modo de operación con solapamiento de bachadas se puede observar que la bachada #2 comienza a procesarse en la unidad 1 mientras la bachada #1 esta siendo procesada por la unidad 2.

Cuando una secuencia de operaciones se repite en forma cíclica aparece el concepto de *tiempo de ciclado*, que se define como el tiempo transcurrido entre la finalización de dos bachadas consecutivas. Este tiempo en general será distinto del *tiempo total de procesamiento* de una bachada, esto es, del tiempo transcurrido desde que se empieza a procesar una bachada hasta que culmina su procesamiento.

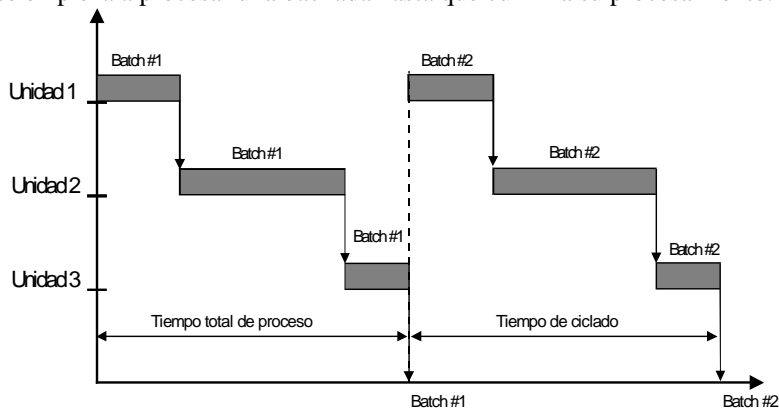


Figura XIX.3a. Modo de operación sin solapamiento de bachadas

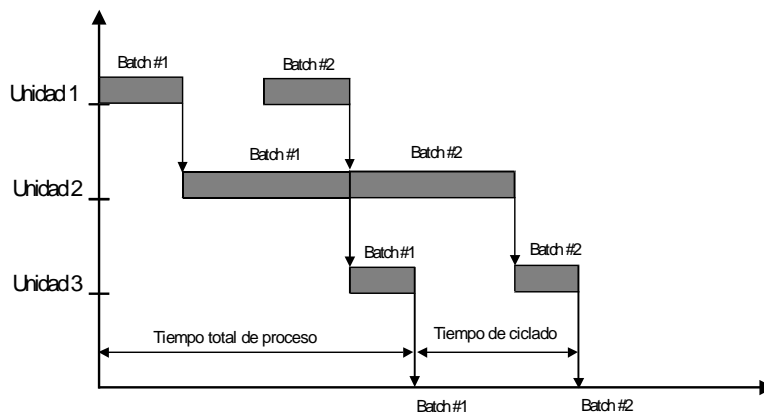


Figura XIX.3b: Modo de operación con solapamiento de batches

El tiempo de ciclado depende del modo de solapamiento de batches y de la política de transferencia de batches entre etapas. Existen tres reglas de transferencia que determinan la manera en que una batch es transferida desde una etapa donde ya finalizó su procesamiento a la que le sigue en la secuencia.

1. *Tiempo de espera nulo*

Una etapa que opera bajo esta regla de transferencia, una vez finalizado su procesamiento debe transferir inmediatamente el material a la etapa siguiente. No se permite demora entre la finalización del procesamiento y el comienzo del procesamiento en la etapa posterior. Esto indica claramente que no existe almacenamiento intermedio entre estas etapas y que obliga a la etapa posterior a estar desocupada cuando se finaliza el procesamiento en la etapa anterior. Esta regla se conoce como *ZW* (del inglés: zero wait).

2. *Sin almacenamiento intermedio*

En este caso tampoco existe capacidad de almacenamiento intermedio entre las etapas en cuestión pero se permite que la etapa anterior retenga el material después de finalizar el procesamiento hasta que se desocupe la etapa siguiente y el material pueda ser transferido. Es decir que la misma unidad de procesamiento sirve de almacenamiento temporal. De esta manera los tiempos de inicio de estas etapas pueden desincronizarse. Esta regla se conoce como *NIS* (del inglés: non intermediate storage).

3. *Con almacenamiento intermedio*

Esta regla implica la existencia de una capacidad de almacenamiento entre las etapas en cuestión. Cuando una etapa termina su procesamiento, el material es transferido a una unidad de almacenamiento y queda libre para volver a operar. Por

su parte, cuando la etapa siguiente esta lista para operar toma el material de la unidad de almacenamiento.

La introducción de almacenamiento intermedio permite desincronizar los tiempos de inicio de ambas etapas y desacoplar los tamaños de batchada y por ende el ritmo de ciclado. Por ejemplo una etapa puede estar procesando una batchada de 100 kg cada 1 hora transfiriendo el material producido a la unidad de almacenamiento. La etapa siguiente puede estar procesando 10 kg cada 0.1 hora (ciclado 10 veces mas rápido con una carga 10 veces menor) y aún así no habrá acumulación a largo plazo en la unidad de almacenamiento intermedio.

La introducción de una unidad de almacenamiento divide al proceso en subprocesos que en general tendrán distintos tamaños de batchada y tiempo de ciclado. La capacidad de dicho almacenamiento introduce una subclasificación de esta regla de transferencia:

- a) *Almacenamiento ilimitado*: esto supone la existencia de una capacidad de almacenamiento lo suficientemente grande como para que los subprocesos ‘aguas arriba’ y ‘aguas abajo’ estén completamente desacoplados. Cada subproceso puede trabajar con su propio tamaño de batchada y tiempo de ciclado sin restricciones. Esta política producirá acumulación de material del orden del tamaño de una campaña.
- b) *Almacenamiento sin acumulación a largo plazo*: aquí también se supone la existencia de una capacidad de almacenamiento como para que cada subproceso pueda trabajar con su propio tamaño de batchada y tiempo de ciclado pero restringido a que ambos operen con la misma ‘velocidad de producción’ promedio. Esto es, la relación tamaño de batchada / tiempo de ciclado debe ser la misma en los dos subprocesos. Esta condición elimina la posibilidad de acumulación en el largo plazo y la capacidad requerida será del orden del tamaño de batchada.
- c) *Almacenamiento limitado*: en este caso, la capacidad de almacenamiento intermedio es menor que la necesaria para el caso anterior, lo que implica que el tamaño de batchada y tiempo de ciclado de ambos subprocesos además de cumplir la condición de igual velocidad de producción promedio, deberá cumplir restricciones de sincronización de manera de no sobrepasar en ningún momento la capacidad de almacenamiento disponible.

XIX.5 MODELOS DE TIEMPOS Y FACTORES DE REQUERIMIENTO

La descripción mas sencilla de un proceso batch es la receta de procesamiento. En ella se enumeran ordenadamente la secuencia de *tareas* que deben realizarse para obtener el producto final. Algunas de estas tareas pueden agruparse para ser llevadas a cabo en la misma *unidad* batch. Finalmente una *etapa* batch esta

Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

constituida por una o varias unidades batch operando en paralelo.

Las relaciones entre los tamaños de las unidades y los tiempos de procesamiento se pueden establecer con una descripción analítica que se describe a continuación.

El tamaño del lote o bachada, B_i se define como la cantidad de producto final i obtenido al completar la secuencia de tareas. Surge inmediatamente que las tareas intermedias tendrán tamaños de carga diferentes de B_i , de acuerdo a los balances y rendimientos materiales de cada una.

Para cada producto i en cada etapa j , es posible definir un *factor de tamaño*

$$V_{ij} = S_{ij} B_i \quad i = 1, 2, \dots, I \quad j = 1, 2, \dots, J \quad (1)$$

S_{ij} como la capacidad V_{ij} de dicha etapa necesaria para procesar la cantidad B_i del producto i :

$$V_j = \max_i \{V_{ij}\} \quad j = 1, 2, \dots, J \quad (2)$$

El tamaño para la etapa j debe ser tal que:

Además, cada producto i tiene asociado un tiempo de procesamiento p_{ij} en cada etapa j .

Análogamente, cada unidad semicontinua k , se caracteriza por una *velocidad de procesamiento* R_k , y un *factor de carga* D_{ik} , de manera que el *tiempo de operación* para procesar el lote B_i en esa unidad se expresa:

$$\theta_k = \frac{D_{ik} B_i}{R_k} \quad k = 1, 2, \dots, K \quad (3)$$

Análogamente a los factores de tamaño y carga, que definen los requerimientos de capacidad de procesamiento por unidad de producto producido, también se pueden definir factores de requerimientos de materias primas, energía eléctrica, vapor y otros servicios como consumos específicos.

El tiempo que una unidad batch j esta ocupada procesando el producto i depende tanto de su tiempo de procesamiento p_{ij} como de los tiempos de operación de las unidades semicontinuas que la cargan y descargan:

$$T_{ij} = \theta_{ic} + p_{ij} + \theta_{id} \quad (4)$$

donde la unidad semicontinua c es la que opera cargando la unidad batch j y la unidad semicontinua d la que la descarga. La unidad batch j que comienza a procesar una bachada del producto i no estará lista para procesar una nueva bachada hasta que

transcurra un el tiempo T_{ij} . Por esta razón este tiempo se conoce como el tiempo de ciclado mínimo de la etapa j para producir el producto i .

Para disminuir el tiempo de una etapa, se suelen disponer mas de una unidad en paralelo operando desfasadamente. Esto es, dos o más equipos asignados a la misma etapa, comienzan su operación alternativamente a tiempos diferentes. Si m_j es el número de unidades iguales que operan en paralelo en la etapa j , el tiempo de ciclado mínimo viene dado por la siguiente expresión:

$$T_{ij} = \frac{\theta_{ic} + p_{ij} + \theta_{id}}{m_j} \quad (5)$$

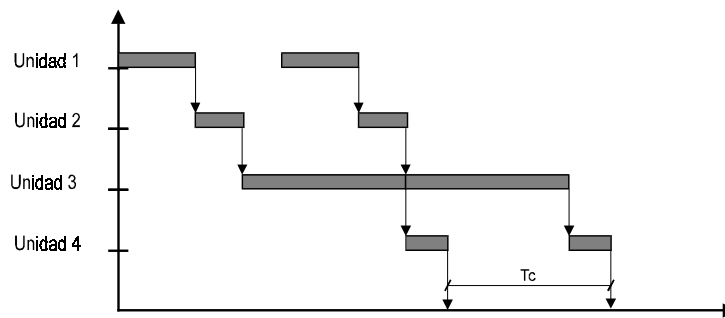


Figura XIX.4a: Operación sin unidades en paralelo

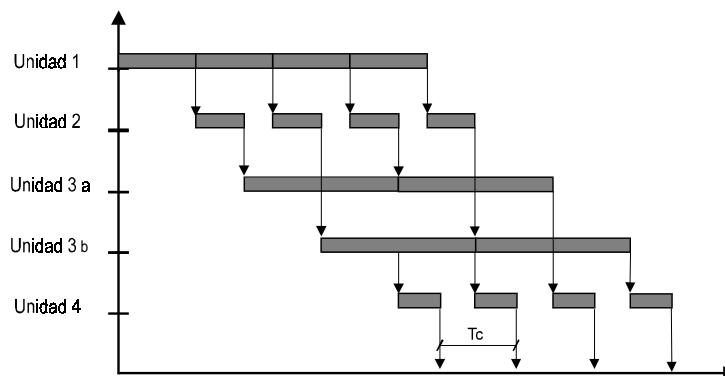


Figura XIX.4.b: Operación con unidades en paralelo

Este situación se ilustra en la figura 4. En el diagrama (b) la etapa 3 de

procesamiento se realiza usando 2 unidades (unidades 3a y 3b) operando en paralelo y fuera de fase. De esta manera las bachadas que finalizan su procesamiento en la unidad 2 se procesan alternativamente en las unidades 3a y 3b.

Así como existe este tiempo para cada etapa j , también se puede definir un tiempo de ciclado mínimo del producto i para el proceso, T_{c_i} . Este tiempo dependerá del modo de solapamiento con que opera el proceso y de las reglas de transferencia de las bachadas entre las etapas. Como se dijo anteriormente, la existencia de capacidad de almacenamiento intermedio permite que cada subprocesso adopte su propio tiempo de ciclado y por lo tanto desde el punto de vista del cálculo del tiempo de ciclado se consideran como procesos independientes. Esta situación se ilustra en la figura 5.

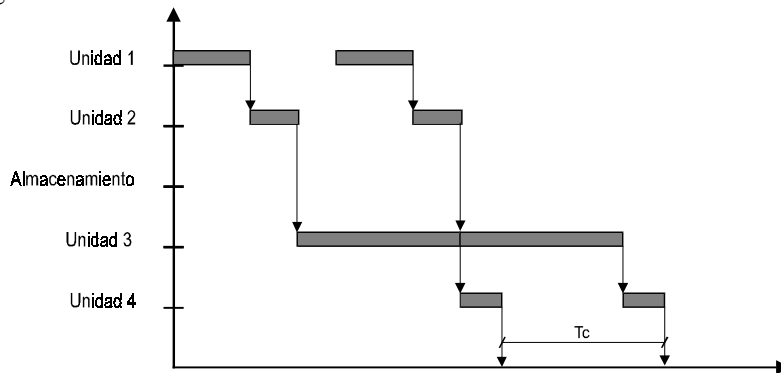


Figura XIX.5a: Operación sin almacenamiento intermedio

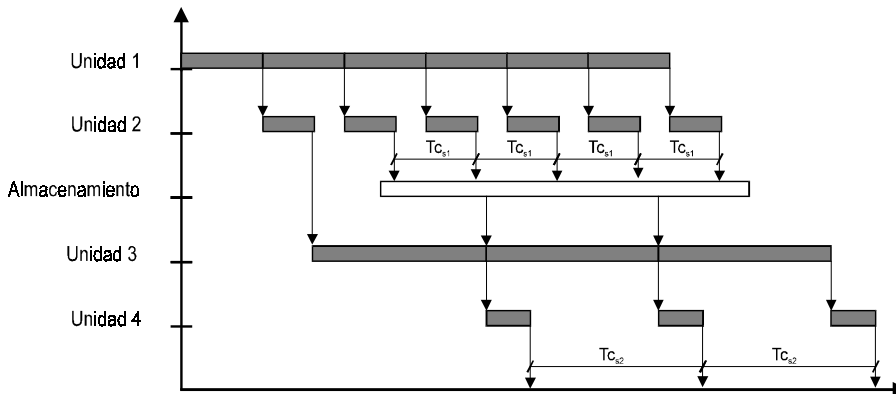


Figura XIX.5b: Operación con almacenamiento intermedio

En el diagrama (b) se puede apreciar que cuando la segunda bachada finaliza su procesamiento en la unidad 2, es transferida a almacenamiento. Cuando la unidad

3 termina de procesar la primer bachada, acepta una nueva carga proveniente del almacenamiento.

Para un subproceso cuyas etapas transfieren con reglas ZW o NIS, sin solapamiento de bachadas, el tiempo de ciclado mínimo coincide con el tiempo de residencia de una bachada en dicho subproceso y por lo tanto es igual a la suma de los tiempos de procesamiento de todas las etapas batch:

$$Tc_i = \sum_{j=1}^J T_{ij} \quad (6)$$

Para un subproceso cuyas etapas transfieren con reglas ZW o NIS, con solapamiento de bachadas, el tiempo de ciclado mínimo queda determinado por la etapa de procesamiento más larga:

$$Tc_i = \max_{j \in J, k \in K} \{ T_{ij} ; \theta_k \} \quad (7)$$

El conjunto de ecuaciones (1)-(7) presentado constituye un modelo matemático sencillo de un proceso batch. Dicho modelo posee un grado de abstracción tal que las etapas son simplemente descritas por un factor de tamaño y un tiempo de procesamiento constantes.

Un modelo de esta naturaleza es útil para decidir aspectos estructurales como la asignación de tareas a equipos, coordinación de los ciclos de operación y la provisión de almacenamiento intermedio y/o duplicación de unidades en paralelo en una etapa. No obstante para describir el comportamiento de los procesos que se llevan a cabo en cada etapa es necesario incrementar el grado de detalle de la descripción, modelando a los fenómenos físicos que se producen en cada etapa. Normalmente, estos modelos mas detallados se derivan de los primeros principios, explicitando los balances de materia y energía, los equilibrios termodinámicos, las cinéticas y los fenómenos de transporte.

XIX.6 MODELO DE ETAPAS INDIVIDUALES BASADOS EN LOS PRIMEROS PRINCIPIOS

Se presentarán a modo de ejemplo dos modelos de etapas individuales: uno para una etapa batch y otro para una etapa semicontinua. El propósito de estos ejemplos es ilustrar la modelación de estas etapas desde el punto de vista de primeros principios y mostrar su relación con el modelo anterior.

Ejemplo 1: modelo de una fermentación fed-batch

En una fermentación operada de manera fed-batch, el sustrato (materia prima de la fermentación) va siendo agregado a medida que la fermentación progresa. Esto

da lugar a varias políticas de agregado de dicho sustrato. En este ejemplo se considera que el sustrato es agregado de manera de mantener constante la concentración del mismo en el fermentador. Este modo de operación implica que el volumen de fermentación cambia con el tiempo.

Se considera que el crecimiento del microorganismo es descrito por una cinética de tipo Contois y es función de la concentración de sustrato s y de biomasa x (equivalente a un modelo Monod pero donde la constante de saturación es una función lineal de la concentración de biomasa). Sea la velocidad específica de crecimiento μ [1/hr]:

$$\mu(s, x) = \frac{(\mu_m s)}{(s + K_1 x)}$$

El producto es formado a una velocidad específica θ [kg producto/kg biomasa-hr] determinada por una cinética de inhibición por sustrato:

$$\theta(s) = \frac{\theta_m}{\left(1 + \frac{K_p}{s} + \frac{s}{K_i}\right)}$$

El consumo de sustrato debido al crecimiento del microorganismo y la formación de producto es proporcional a las correspondientes velocidades a través de rendimientos constantes: Y_x e Y_p . El mantenimiento de las células también requiere un consumo de sustrato que es tenido en cuenta por una demanda específica constante M_x .

Se considera además que el producto se degrada con una cinética de primer orden, cuya constante de decaimiento es D .

El sustrato se agrega al fermentador con una velocidad F (variable en el tiempo), y se considera que la agitación se suministra de manera de mantener un valor constante de potencia por volumen PPV , de manera que el consumo de energía eléctrica cambia durante la operación a medida que cambia el volumen.

Con estas consideraciones el modelo dinámico para la fermentación fed-batch se resume en las siguientes ecuaciones. (San y Stephanopoulos, 1989)

balance de materia para el microorganismo:

$$\frac{dx}{dt} = \mu(s, x) x - F \frac{x}{V}$$

balance de materia para el sustrato:

$$\frac{ds}{dt} = \frac{F}{V} (s_0 - s) - \theta(s) \frac{x}{Y_p} - \mu(s, x) \frac{x}{X_p} - M_x x$$

balance de materia para el producto:

$$\frac{dP}{dt} = \theta(s) x - K P - F \frac{P}{V}$$

acumulación de volumen:

$$\frac{dV}{dt} = F$$

x	concentración de biomasa [kg/m ³]
s	concentración de sustrato [kg/m ³]
P	concentración de producto [kg/m ³]
V	volumen de la bachada [m ³]
F	caudal de alimentación de sustrato [m ³ /hr]
s_0	concentración de sustrato alimentado [kg/m ³]
E	consumo de energía eléctrica [kW-hr]
PPV	potencia de agitación por volumen [kW/m ³]

El consumo de sustrato C [kg] puede ser calculado integrando:

$$\frac{dC}{dt} = F s_0$$

y el consumo de vapor H [kg de vapor] para esterilización de la alimentación, viene expresado por:

$$H = \frac{\rho_l V_{final} c_{p_l} \Delta T_l}{\lambda^v}$$

donde:

ρ_l	densidad de la alimentación [kg/m ³]
c_{p_l}	calor específico de la alimentación [kcal/kg °C]
ΔT_l	diferencia de temperaturas durante la esterilización [°C]
λ^v	calor de vaporización del vapor [kcal /kg]

Las relaciones entre este modelo y el modelo de tiempos y factores de requerimiento son las siguientes:

tamaño de bachada producido:	$B = V(t_f) P(t_f)$
factor de tamaño:	$S_{fer} = V(t_f) / B$
tiempo de procesamiento:	$p_{fer} = t_f$
consumo específico de energía:	$u_e = E(t_f) / B$
consumo específico de vapor:	$u_v = H / B$
consumo específico de sustrato:	$u_{mp} = C(t_f) / B$
(donde t_f es el tiempo final de la fermentación)	

Ejemplo 2: modelo de una extracción líquido-líquido semicontinua

Se considera un extractor líquido-líquido que opera en contracorriente, contactando una corriente de alimentación con una de solvente. El balance global de materia se puede expresar:

$$F x_{\epsilon} + S y_{\epsilon} = F x_{out} + S y_{out}$$

F	caudal de alimentación [m ³ / hr]
S	caudal de solvente [m ³ / hr]
x	concentración de soluto en alimentación [kmol soluto / m ³]
y	concentración de soluto en solvente [kmol soluto / m ³]

el extractor tiene N etapas teóricas de equilibrio y en cada etapa las composiciones de equilibrio están relacionadas a través de un coeficiente de distribución m , que se supone constante:

$$y = m x$$

Si se considera el caudal de ambas corrientes constante a lo largo de las etapas, se puede obtener una expresión analítica que relaciona las composiciones de entrada y salida (Belter et al.,1988):

$$x_{out} = \frac{E-1}{E^{N+1} - 1} x_{\epsilon}$$

donde E es el coeficiente de extracción definido como sigue:

$$E = \frac{m S}{F}$$

la capacidad del extractor queda definida por el caudal volumétrico total:

$$R_{ex} = S + F$$

El consumo de energía eléctrica se puede estimar aproximando la demanda de potencia del extractor como función de la capacidad:

$$P [kW] \approx 2 R_{ex}^{1/2}$$

Considerando que el extractor opera durante un tiempo θ , las relaciones entre este modelo y el modelo de tiempos y factores de requerimiento son las siguientes:

tamaño de bachada producido:	$B = S y_{out} M_i \theta$
factor de carga:	$D_{ex} = R_{ex} \theta / B$
tiempo de procesamiento:	$\theta_{ex} = \theta$
consumo específico de energía:	$u_e = P \theta / B$
consumo específico de solvente:	$u_{mp} = S \rho_s \theta / B$

donde:

M_i es el peso molecular del soluto [kg/kmol]

ρ_s es la densidad del solvente [kg/m³]

Un aspecto importante de cualquier modelo es que sólo refleja en forma precisa aquello que es relevante a la actividad para lo cual es desarrollado. En el caso del modelo de tiempos y factores de requerimiento, el énfasis está puesto en la descripción del proceso a nivel de las relaciones entre las etapas. La información relativa a los procesos físicos que ocurren en cada etapa es encapsulada en los factores de requerimiento. En estos ejemplos se ilustra como se vinculan modelos de etapas individuales, desarrollados teniendo en cuenta los fenómenos físicos que se llevan a cabo en cada etapa con los factores de requerimiento en los que está basado el modelo del proceso explicado anteriormente. Es decir, cómo utilizar módulos de simulación de operaciones batch para implementar modelos del proceso completo.

Si bien el desarrollo de modelos matemáticos con el grado de detalle apropiado al problema es fundamental para efectuar simulaciones, el marco o sistema en el cual dichos modelos son organizados y resueltos también constituye un aspecto clave. En las secciones siguientes analizaremos las características más importantes de los distintos enfoques que se han desarrollado.

XIX.7 LOS SISTEMAS DE SIMULACIÓN

En su definición más amplia, la simulación de un proceso consiste en la resolución por computadora de un modelo matemático que describe su comportamiento a través de variables que determinan su estado. En base a las características de dichas variables de estado es posible clasificar a los sistemas de simulación en dos tipos claramente diferenciados:

- Simulación de un sistema continuo
- Simulación de un sistema discreto

Simulación de sistemas continuos

En un sistema continuo, las actividades del sistema provocan cambios graduales de las variables de estado. Cuando se modelan matemáticamente, dichas variables son controladas por funciones continuas. Típicamente, las variables de dichos sistemas siguen trayectorias continuas en el caso de procesos no estacionarios o adoptan un valor estacionario.

Generalmente un simulador de esta naturaleza es diseñado para representar procesos con estructuras fijas, que involucran flujos continuos de material, y cuyas unidades se describen mediante ecuaciones algebraicas y diferenciales. Están organizados en forma de sub-modelos o módulos: las ecuaciones de diseño y balance de materia y energía que representan cada unidad del proceso se reúnen en módulos separados que se ejecutan en una secuencia especificada como pasos de cálculo a lo largo del diagrama de flujo del proceso. Un módulo de proceso puede representarse como se muestra en la figura 6.

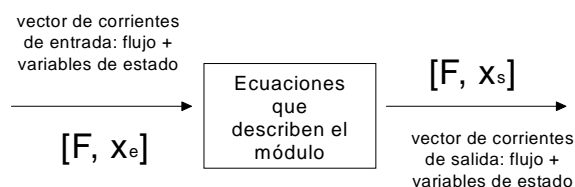


Figura XIX.6: Un módulo de proceso.

Cuando aparecen reciclos de material, no es posible resolver la secuencia de unidades en forma directa y se recurre a técnicas de rasgado del ciclo de corrientes y a métodos de convergencia. Esta situación se esquematiza en la figura 7.

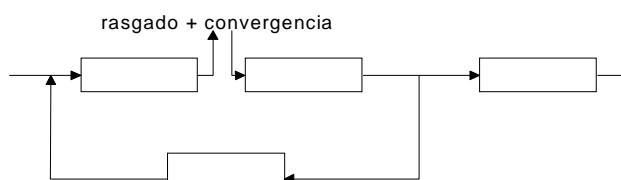


Figura XIX.7: Proceso con reciclos

Este tipo de estrategia de simulación ha sido extensivamente usado para estudiar el estado estacionario y el comportamiento dinámico (transientes entre estados estacionarios) en procesos químicos continuos. Es importante observar que en estos simuladores, el tiempo como variable física carece de relevancia y sólo interesan las diferencias de tiempo. Por ejemplo, el tiempo transcurrido entre dos estados estacionarios durante un transiente o el tiempo de residencia medio del material en una unidad. Dado que las variables de estado varían en forma continua, no existe un instante que pueda particularizarse y distinguirse del inmediato anterior o posterior en algo más que una cuestión de grado. Es decir, no existe el concepto de "evento".

En resumen, un simulador que utiliza modelos continuos posee la siguientes características:

- Las variables de estado son continuas.
- Las unidades fundamentales son subprocesos que se organizan generalmente en forma modular, con cada módulo representando una unidad del proceso.
- La estructura del proceso es invariable.
- La secuencia de cálculo está determinada por el flujo de materiales y se conoce a priori.
- Cada módulo resuelve las ecuaciones algebraicas y diferenciales que relacionan las variables de estado en las corrientes de entrada y salida.

Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

- El tiempo no constituye una variable fundamental y no existe el concepto de evento.

Simulación de sistemas discretos

En un sistema discreto, las actividades del sistema provocan cambios discretos del valor de las variables de estado. Típicamente, estos cambios se producen en instantes particulares de tiempo denominados *eventos*. Una descripción del estado de un sistema de esta naturaleza incluye además de los valores de las variables, los posibles cronogramas de eventos.

Un modelo de un sistema de eventos discretos se construye en base a tres elementos:

- las variables de estado
- los eventos que cambian dichas variables
- la relación entre los eventos

La relación entre eventos puede esquematizarse como se muestra en la Figura 8:

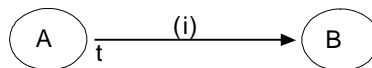


Figura XIX.8: Relación entre eventos

El esquema anterior indica que cada vez que ocurre el evento **A**, si la condición **(i)** es verdadera, el evento **B** se cronograma para que ocurra **t** minutos más tarde.

De esta manera, el sistema es representado a través de una red de eventos relacionados. En todo momento existe una lista de eventos cronogramados. La ocurrencia de un evento cambia el valor de las variables de estado y modifica la lista de eventos futuros. Esto es comandado por un algoritmo principal de cronogramación de eventos, según se esquematiza en la Figura 9.

Este tipo de simuladores ha sido largamente utilizado para investigar los efectos de distintas reglas de cronogramación ("scheduling") sobre la capacidad de las colas e inventarios en aplicaciones tales como sistemas de manufactura, sistemas de tráfico, redes de comunicación, etc. Usualmente estos sistemas tienen comportamientos estocásticos y la información de entrada está compuesta por distribuciones temporales y los resultados de la simulación son valores promedio.

En resumen, un simulador de eventos discretos posee la siguientes características:

- Las unidades fundamentales son "eventos" que se encuentran cronogramados en una lista ("schedule").
- La ocurrencia de un evento cambia las variables de estado en forma discreta

y puede alterar la lista de eventos futuros.

- La estructura del sistema es variable y la secuencia de cálculo no está determinada a priori.
- Son especialmente diseñados para manejar información estocástica en forma de distribuciones de entrada y resultados promedio.
- El comportamiento del sistema entre dos eventos es ignorado.

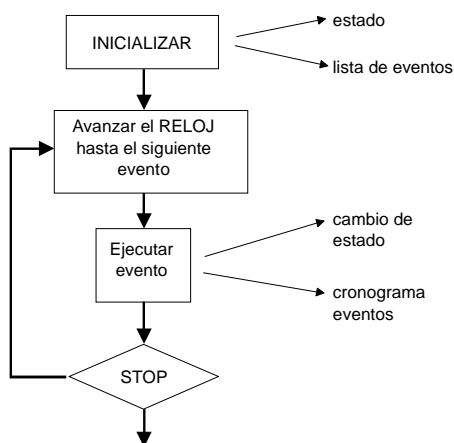


Figura XIX.9: Algoritmo principal de una simulación de eventos discretos.

XIX.8 CARACTERIZACIÓN DE UN PROCESO QUÍMICO DISCONTINUO (DESDE EL PUNTO DE VISTA DE LOS SISTEMAS DE SIMULACIÓN)

En la sección anterior se discutieron las características más importantes de dos sistemas o estrategias de simulación. Aquí nos proponemos ubicar a los procesos químicos discontinuos en el marco de dichas características.

En un proceso discontinuo o batch existirán en general etapas que operan de manera discontinua y otras en forma semicontinua. La operación del proceso está gobernada por un cronograma de actividades/tareas ("schedule") que define los eventos de inicio y finalización de cada tarea y el orden en que se ejecutan. Por esta razón, en un proceso discontinuo típico, la idea de eventos cronogramados es muy familiar. De hecho la descripción más sencilla de un proceso batch consiste justamente en una "receta" que lista las tareas a realizar, especifica el orden en que dichas tareas se realizan y se detallan los tiempos de procesamiento ó las condiciones que dan por terminada cada tarea. Cada inicio o finalización de una tarea está claramente asociada a un momento en el tiempo y el concepto de evento surge naturalmente. Además, en estos procesos existen variables de estado continuas que en cada evento sufren cambios discretos y variables naturalmente discretas.

Sin embargo, entre eventos (típicamente durante una tarea) se llevan a cabo

procesos continuos no estacionarios. Es decir, existen variables de estado que evolucionan según una trayectoria continua y que es importante tener en cuenta. Desde este punto de vista, la naturaleza de un proceso químico discontinuo requiere tanto el concepto de eventos discretos como el de trayectorias continuas. Esta naturaleza dual discreta/continua de las operaciones batch fue muy claramente descrita por Joglekar y Reklaitis (1984).

XIX.9 SIMULACIÓN CONTINUA-DISCRETA COMBINADA

La simulación Continua-Discreta combinada es una técnica que combina las características de ambos sistemas. Este tipo de simulación requiere de la solución de una *secuencia* de problemas de valor inicial, cada uno de ellos descriptos por un conjunto de ecuaciones diferenciales algebraicas no lineales con variables continuas. Esta secuencia está delimitada por eventos instantáneos que ocasionan algún tipo de cambio discreto al problema que esta siendo resuelto. Estos cambios pueden ser tanto en el valor de las variables o en la *forma funcional del modelo matemático continuo*.

Como consecuencia de esto, el dominio temporal de interés es particionado en subdominios continuos. Los límites de estos intervalos (definidos por el cronograma de eventos) pueden ser *explícitos* (ocurren en un momento pre-establecido) o bien estar *implícitamente* especificados a través de condiciones en las variables del modelo. Básicamente, la estructura de un simulador de este tipo se representa en la figura 10.

Luego de efectuada la inicialización, que consiste en el establecimiento de la lista ordenada de eventos cronogramados (calendario de eventos), se establece el vector de variables de estado y el conjunto de ecuaciones algebraico-diferenciales correspondientes al período continuo en cuestión, procediéndose a la integración del sistema resultante hasta la detección del próximo evento. Una vez detectado el evento, el control se transfiere a un bloque de procesamiento de eventos que producirá una revisión del vector de estado y el conjunto de ecuaciones seguido de una actualización del calendario de eventos. Luego se re-inicializa el nuevo sistema continuo a integrar y se procede hasta la detección del próximo evento.

Una cuestión que surge claramente de este esquema, es la complejidad que introducen las interacciones entre las variables continuas y los eventos discretos. Estas interacciones son fundamentalmente de tres tipos:

- Un evento discreto puede causar un cambio discreto en el valor de una variable de estado continua.
- Un evento discreto puede causar que la relación que gobierna una variable de estado continua cambie.
- Una variable de estado continua alcanza un umbral que produce que un evento discreto ocurra o sea cronogramado (evento de estado).

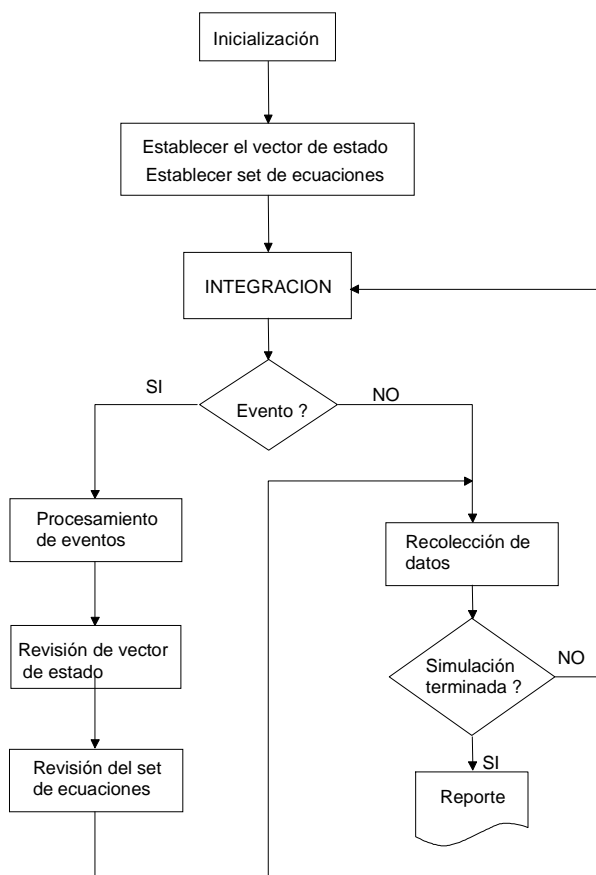


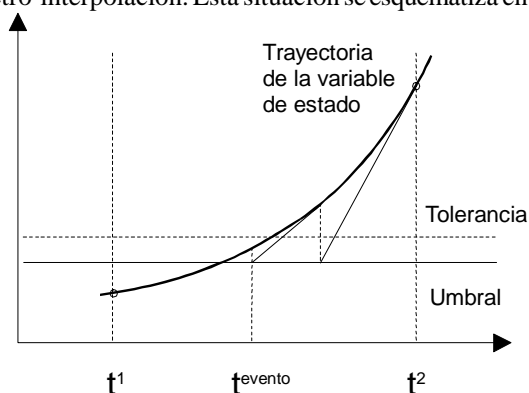
Figura XIX.10: Simulación continua-discreta combinada

El primer tipo de interacción introduce la necesidad de que el método de integración usado para calcular la trayectoria de una variable continua soporte las discontinuidades que introducen los eventos.

Las interacciones del segundo tipo obligan a que las librerías que contienen el conjunto de ecuaciones que describen cada proceso sean dinámicas y durante la ejecución de la simulación puedan cambiar y/o modificar dichas ecuaciones. Esto implica que luego de producido un evento de esta naturaleza, el conjunto de

ecuaciones diferenciales y algebraicas que está siendo integrado sea modificado, y el método de integración re-inicializado apropiadamente para continuar la simulación.

Las interacciones del tercer tipo introducen un tipo de evento particular conocido como "evento de estado". A diferencia de los "eventos de tiempo" cuyo momento de ocurrencia es conocido a priori y surge del cronograma establecido, el momento en que se produce un evento de estado no es conocido hasta que la variables de estado alcanza el umbral exigido (por ejemplo: el evento "fin de la reacción" se produce cuando la conversión alcanza el valor especificado). Debido a que el valor actual de la variable de estado surge de la integración de su derivada temporal, la detección del momento en que alcanza el umbral exigido suele requerir técnicas adicionales de retro-interpolación. Esta situación se esquematiza en la siguiente figura:



En el instante t_1 , la variable de estado aun no ha llegado al valor umbral requerido. El integrador avanza un nuevo paso, por ejemplo hasta el instante t_2 . Allí se detecta que el valor de la variable de estado ha sobrepasado el valor requerido. En esta circunstancia, el tiempo en el que la variable alcanza el umbral (t_{evento}) deberá encontrarse interpolando la trayectoria de la variable entre los tiempos t_1 y t_2 .

El enfoque de simulaciones Continua/Discreta Combinada es el que la literatura concierne a la simulación de procesos batch ha usado con mayor frecuencia. Entre los trabajos más significativos que abordan el problema de la simulación de procesos batch con técnicas de continuas-discretas combinadas, pueden citarse:

DISCON	Fruit, Reklaitis y Woods (1974)
BOSS/BATCHES	Joglekar y Reklaitis (1984)
UNIBATCH	Czulek (1988)
gPROMS	Barton y Pantelides (1994)

En estos trabajos se presentan prototipos de simuladores para procesos discontinuos y se discuten los detalles de implementación de la simulación combinada.

Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Mientras que el enfoque de simulaciones discreta-continua combinadas es el más adecuado para representar procesos discontinuos en general, el problema se complica enormemente cuando se desea representar rigurosamente operaciones unitarias de con modelos mecanicistas. Normalmente este tipo de descripciones requieren un considerable esfuerzo de modelación, programación, puesta a punto de los métodos, etc. Esta situación se exagera por la necesidad de re-establecer el modelo durante la simulación.

Por esta razón se justifica un análisis que permita simplificar la implementación de un modelo de simulación aprovechando características particulares de algunos procesos batch y del tipo de problema para el cual la simulación va a ser usada.

XIX.10 SIMULACIONES DINÁMICAS DESACOPLADAS

En el caso de plantas batch monoproducto y multiproducto, donde la estructura del proceso esta fija, (la secuencia de etapas de procesamiento se realiza cíclicamente en las unidades previamente asignadas) es posible simplificar el problema de la simulación mediante una estrategia que recurre a simulaciones dinámicas de cada una de las etapas en forma desacoplada (SDD).

Para estos casos el modelo analítico de tiempos y factores de requerimiento constituye una representación exacta del proceso toda vez que dichos factores de requerimiento y los tiempos de procesamiento adopten valores actualizados. Una discusión mas detallada de los fundamentos de esta estrategia se presenta en Salomone e Iribarren, 1992, donde se demuestra que para varias de las operaciones habituales de los procesos químicos, toda la información fisicoquímica y operacional de cada etapa queda encapsulada en dichos factores. Dicho de otra forma, toda vez que se da un valor determinado a los parámetros fisicoquímicos y a las variables operativas, es posible reconstruir un modelo analítico tal como el presentado anteriormente.

Desde este punto de vista, se pueden definir módulos individuales para cada etapa que realicen simulaciones "caso base" que no dependen de la escala del proceso y no necesitan estar coordinados entre ellos más allá de los propiedades intensivas del material que pasa de una etapa a la otra.

La información relevante de entrada está constituida por: condiciones iniciales, especificaciones de producto y parámetros intensivos. El criterio de terminación para la simulación es la satisfacción de las especificaciones de la etapa y por lo tanto el tiempo de procesamiento es un resultado.

La información relevante de salida está constituida por los factores de requerimiento y los tiempos de procesamiento. Eventualmente, si fuese necesario se puede agregar como salidas del módulo factores intensivos de consumo de recursos, por ejemplo, consumo de vapor por kg de producto.

Una discusión más amplia del enfoque SDD y su aplicación al problema de optimización del diseño de un proceso batch se presenta en Salomone et al., 1994 y una aplicación de dicha metodología al análisis de performance de un proceso batch

fermentativo se presenta en Salomone et al., 1996.

De esta manera, la simulación rigurosa de las operaciones (normalmente una tarea de gran demanda computacional) es usada en un rol de actualización de parámetros de un modelo analítico más simple. Este enfoque tiene similitud con el enfoque "two tier" (o de niveles jerárquicos) utilizado en simulación de procesos continuos. En dicho enfoque, las simulaciones proveen las constantes de una aproximación cuadrática del modelo, actualizándolas cada vez que resulte necesario. Sin embargo, el modelo analítico usado por el enfoque SDD no es una aproximación arbitraria sino que responde a una descripción física exacta del proceso.

Esta descomposición del modelo en dos niveles de distinta complejidad aporta varias ventajas:

- El modelo analítico contiene toda la información referente a la "escala" del proceso y a los aspectos de coordinación de las etapas acorde a las políticas de operación.
- Al mantener el modelo tradicional formalmente intacto (las simulaciones sólo actualizan sus factores) es esperable que los métodos y técnicas actuales que trabajan con dicho modelo puedan ser extendidas para involucrar descripciones más rigurosas de las operaciones.
- Debido a que las simulaciones pueden hacerse para un "caso base", el esquema resulta muy práctico para problemas de diseño, ampliación de capacidad, remodelación del proceso, etc., porque el modelo analítico "es" un modelo de escalado.
- Toda la información referente a las políticas de operación y transferencias de barchadas interviene sólo en el modelo analítico a modo de restricciones adicionales. Esto hace que no sea necesario reescribir el modelo de simulación cuando se estudian cambios en dichas políticas.

PROBLEMAS PROPUESTOS

- P1) Considere un proceso compuesto por 4 etapas de procesamiento batch, cuyos tiempos de procesamiento son : $p_j : \{5,2,7,3\}$. Considere además que los tiempos de carga y descarga son los mismos para todas las etapas $\theta_c = \theta_d = 0.2$. Calcule el tiempo total de proceso y el tiempo de ciclado considerando un modo de operación sin solapamiento de barchadas.
- P2) Idem problema anterior considerando modo de operación con solapamiento de barchadas.
- P3) Para el proceso descrito en el problema anterior, identifique la etapa con el tiempo de ciclado mínimo limitante. Calcule el tiempo de ciclado del proceso si se asignan en dicha etapa, 2 unidades trabajando en paralelo y fuera de fase.

BIBLIOGRAFÍA CITADA

- ▶ Barton P.I. , C.C. Pantelides, "Modeling of Combined Discrete/Continuous Processes" AIChE Journal, Vol. 40, No. 6, pp 966-978, 1994.
- ▶ Belter, P.A., E.L Cussler, W.S. Hu, "Bioseparations: Downstream Processing for Biotechnology, Wiley Interscience Publication, 1988.
- ▶ Czulek A.J. "An Experimental Simulator for Batch Chemical Processes", Comput.Chem.Engng., Vol 12., No.2/3, pp 253-259, 1988.
- ▶ Fruit, W., G.V. Reklaitis and J.M.Woods "Simulation of Multiproduct Batch Chemical Processes", The Chem. Eng. J., 8, pp 199-211, 1974.
- ▶ Joglekar G.S and G.V. Reklaitis "A Simulator for Batch and Semi-Continuous Processes", Comput. Chem. Engng., Vol 8, No. 6, pp 315-327, 1984.
- ▶ Parakrama R., "Improving batch chemical processes." The Chemical Engineer, pp 24-25, September 1985.
- ▶ Salomone H.E., O.A.Iribarren "Posynomial modeling of batch plants. A procedure to include process decision variables", Comp. & Chem. Eng., Vol 16, Nro 3, pp 173-184, 1992.
- ▶ Salomone, H.E., J.M. Montagna and O.A. Iribarren "Dynamic Simulations in the Design of Batch Processes", Comput. Chem. Engng., Vol.18, 191-204, 1994.
- ▶ Salomone, H.E., J.M. Montagna and O.A. Iribarren "Performance Analysis of Fermentation Batch Processes by Decoupled Dinamic Simulations", Process Biochemistry., Vol.30, No.1, 47-61, 1996.
- ▶ San K. and G. Stephanopoulos "Optimization of a fed batch Penicillin Fermentation: A Case of Singular Optimal Control with State Constraints", Biotech. & Bioengng., Vol 34, pp 72-78, (1989).
- ▶ Rippin, D.W.T. "Batch Process System Engineering: A Retrospective and Prospective Review", Comput. Chem. Engng., Vol 17, S1-S536, 1993.

BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA

- ▶ Barrera M.D. and L.B. Evans "Optimal Design and Operation of Batch

Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

- Processes" Chem. Engng. Commun., Vol 82, 45, 1989.
- ▶ Barton P.I. , R. J. Allgor, M. D. Barrera, and L. B. Evans, "Optimal Batch Process Development", Computers and Chemical Engineering, 20(6/7):885-896, (1996)
 - ▶ Reklaitis, G.V. "Progress and Issues in Computer Aided Batch Process Design", Proc. FOCAPD '89 (Siirola et al., Eds.) CACHÉ-Elsevier, 1990.
 - ▶ Rippin D.W.T "Simulation of Single- and Multiproduct Batch Chemical Plants for Optimal Design and Operation", Comput. Chem. Engng., Vol 7, No. 3, pp 137-156, 1983