
MODELADO, SIMULACIÓN Y OPTIMIZACIÓN DE
PROCESOS QUÍMICOS

Autor-Editor:

Dr. Nicolás José SCENNA

AUTORES

Dr. Pío Antonio Aguirre

Dra. Sonia Judith Benz

Dr. Omar Juan Chiotti

Dr. H. José Espinosa

Ing. Marta Beatriz Ferrero

Dr. Jorge Marcelo Montagna

Ing. Miguel C. Mussati

Ing. Gustavo Alberto Pérez

Ing. Jorge Rodríguez

Dr. Héctor Enrique Salomone

Dr. Alejandro S. M. Santa Cruz

Dr. Enrique Eduardo Tarifa

Dr. Jorge Vega

A la memoria de mi padre.

*A mi esposa Adriana, un agradecimiento
por su permanente apoyo.*

A mis maestros, colegas y alumnos.

AGRADECIMIENTOS:

- A la Universidad Tecnológica Nacional y a la Facultad Regional Rosario, que apoyaron a través de sus autoridades, con su permanente aliento, la concreción de esta obra.

- A los demás autores, que colaboraron desinteresadamente y con gran entusiasmo.

- A Silvina Antille, Beatriz Gómez y Carlos Ruiz, todos ellos de INGAR, sin cuya colaboración en el mecanografiado y la confección de los gráficos esta obra no hubiese podido concretarse. Un infinito agradecimiento por su colaboración y paciencia.

- A los becarios y demás integrantes del GIAIQ, Dto. de Ing. Qca. de la UTN-FRR, por su colaboración y comentarios, y en especial a Miguel Muñoz, Gastón Cassaro y Verónica Ponzetti.

- A Alejandro Santa Cruz y Sonia Benz, por su gran ayuda en el ordenamiento final de texto, ecuaciones y figuras, además de la supervisión del contenido.

SOBRE LOS AUTORES

Dr. Pío Antonio Aguirre

Ingeniero Químico de la Facultad de Ing. Química, Universidad Nacional del Litoral.
Doctor en Ingeniería Química de la Universidad Nacional de Litoral-Santa Fe.
Investigador Adjunto de CONICET en INGAR, Instituto de Desarrollo y Diseño.
Profesor Adjunto en la Facultad de Ing. Química, Universidad Nacional del Litoral.

Dra. Sonia Judith Benz

Ingeniera Química de la Facultad Regional Rosario, Universidad Tecnológica Nacional.
Doctora en Ingeniería Química de la Universidad Nacional del Litoral-Santa Fe.
Profesor Adjunto, en la Facultad Regional Rosario, Universidad Tecnológica Nacional.

Dr. Omar Juan Chiotti

Ingeniero Químico de la Facultad Regional Villa María, Universidad Tecnológica Nacional.
Doctor en Ingeniería Química en la Universidad Nacional de Litoral-Santa Fe.
Investigador Asistente de CONICET en INGAR, Instituto de Desarrollo y Diseño.
Profesor Adjunto en la Facultad Regional Santa Fe, Universidad Tecnológica Nacional.

Dr. H. José Espinosa

Ingeniero Químico de la Facultad Regional Córdoba, Universidad Tecnológica Nacional.
Doctor en Ingeniería Química de la Universidad Nacional del Litoral-Santa Fe.
Investigador asistente de CONICET en INGAR, Instituto de Desarrollo y Diseño.

Ing. Marta Beatriz Ferrero

Ingeniera Química de la Facultad Regional Villa María, Universidad Tecnológica Nacional.
Jefe Trabajos Prácticos de la Cátedra Investigación Operativa II de la Carrera en Sistema de Información-Facultad Regional Santa Fe, Universidad Tecnológica Nacional.

Dr. Jorge Marcelo Montagna

Licenciado en Matemática Aplicada de la Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral.
Doctor en Tecnología Química de la Universidad Nacional del Litoral-Santa Fe.
Investigador Adjunto del CONICET en INGAR, Instituto de Desarrollo y Diseño.
Profesor Adjunto en la Facultad Regional Santa Fe, Universidad Tecnológica Nacional.
Profesor Titular en ICES-Sunchales.

Ing. Miguel Mussati

Ingeniero Químico de la Facultad Regional Villa María, Universidad Tecnológica Nacional.
Becario de Perfeccionamiento de CONICET en INGAR, Instituto de Desarrollo y Diseño.

Ing. Gustavo Alberto Pérez

Ingeniero Químico de la Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral.
Investigador Independiente de CONICET en INGAR, Instituto de Desarrollo y Diseño.
Profesor Titular en la Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral.

Ing. Jorge Rodríguez

Ingeniero Químico de la Facultad Regional Rosario, Universidad Tecnológica Nacional.
Profesor Titular en la Facultad Regional Rosario, Universidad Tecnológica Nacional.

Dr. Héctor Enrique Salomone

Ingeniero Químico de la Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral
Doctor en Ingeniería Química en la Universidad Nacional del Litoral-Santa Fe
Investigador Asistente de CONICET en INGAR, Instituto de Desarrollo y Diseño.
Profesor Adjunto en la Facultad Regional Santa Fe, Universidad Tecnológica Nacional.

Dr. Alejandro Santiago M. Santa Cruz

Licenciado en Física de la Facultad de Ciencias Exactas e Ingeniería, Universidad Nacional de Rosario

Doctor en Tecnología Química en la Universidad Nacional del Litoral-Santa Fe.
Profesor Adjunto en la Facultad Regional Rosario, Universidad Tecnológica Nacional.

Dr. Nicolás José Scenna

Ingeniero Químico de la Facultad Regional Rosario, Universidad Tecnológica Nacional.
Doctor en Ingeniería Química de la Universidad Nacional del Litoral - Santa Fe.
Investigador Adjunto de CONICET en INGAR, Instituto de Desarrollo y Diseño.
Profesor Titular de la Facultad Regional Rosario, Universidad Tecnológica Nacional.

Dr. Enrique Eduardo Tarifa

Ingeniero Químico de la Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de Jujuy (UNJu).
Doctor en Ingeniería Química de la Universidad Nacional del Litoral - Santa Fe.
Profesor Adjunto en la Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de Jujuy
Investigador de CONICET en la Universidad Nacional de Jujuy (UNJu).

Dr. Jorge Vega

Ingeniero Electricista, Universidad Nacional de la Plata.
Doctor en Tecnología Química, Universidad Nacional del Litoral-Santa Fe.
Investigador Asistente de CONICET en INTEC, Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química
Profesor Adjunto en la Facultad Regional Santa Fe, Universidad Tecnológica Nacional.

PROLOGO

El propósito de esta obra es brindar una introducción al modelado, simulación y optimización de procesos químicos. Esta idea, que ha madurado desde hace tiempo, se cataliza por la necesidad de disponer de bibliografía básica actualizada con relación al nuevo programa de la carrera de ingeniería química implementado recientemente en la Universidad Tecnológica Nacional.

El contenido y configuración del libro se han diagramado poniendo énfasis en la simulación de procesos químicos tanto estacionarios como dinámicos, al mismo tiempo que se introduce al lector en áreas fundamentales para afrontar la tarea del diseño y modelado integral de procesos químicos. Por otra parte, además de los modelos de equipos más convencionales o clásicos se incorporan ejemplos específicos en varios campos, enfoque que no es habitual en este tipo de obras, tratando en nuestro caso de advertir al lector acerca de la necesidad de comprender los fundamentos del modelado de procesos, ya que probablemente, y pese a la cantidad de simuladores comerciales de propósitos generales existentes o por desarrollarse, en su carrera profesional deberá enfrentarse a la tarea de implementar “su” propio prototipo de modelo, aunque más no sea de equipos muy particulares del proceso a analizar.

Al realizar una obra de este tipo desde el comienzo se tropieza con un problema trascendente. Qué áreas enfatizar durante su desarrollo?. Es sabido que en la disciplina de simulación convergen diversas corrientes del saber, como el análisis de los métodos numéricos para la solución de ecuaciones tanto algebraicas como diferenciales, el modelado de procesos, operaciones unitarias y fenómenos de transporte, estimación de propiedades fisicoquímicas, etc.

Además de los fundamentos, resulta claro que el área informática está íntimamente relacionada con la implementación de los programas específicos de simulación, y en particular, con los grandes sistemas de simulación de procesos químicos en general.

El campo de los sistemas de información aplicados a la ingeniería de procesos ha crecido enormemente en esta última década. Actualmente, el problema principal radica en la compatibilidad de todas las herramientas generadas (para las más diversas aplicaciones y en los entornos más disímiles), para crear un sistema versátil, eficiente, y capaz de integrar tanto las herramientas de diseño y simulación como las de finanzas, mantenimiento, control, supervisión del proceso, bases de datos de clientes, stocks, etc. Sin duda, esta es una tarea muy compleja que si bien evolucionará lentamente, proveerá en un futuro cercano una herramienta informática muy

poderosa para el manejo de procesos tanto en la etapa de diseño como en la de operación (tiempo real).

Dentro de este contexto, cada ítem mencionado más arriba puede por sí solo justificar un volumen independiente. El objetivo y aspiración principal es plantear una síntesis adecuada que logre introducir al alumno de grado a toda la temática expuesta, pero enfatizando en el tema central del libro, cual es el modelado y simulación de procesos químicos.

Esta obra está fundamentalmente dedicada a la carrera de grado, aunque se encuentra en el volumen suficiente material de interés para un curso de posgrado, al menos en los aspectos introductorios de varios tópicos esenciales dentro del contexto del modelado y la simulación de procesos químicos.

En función de lo expuesto, se pretende lograr con esta contribución, una obra que abarque aspectos aunque sea un nivel introductorio de temas muy importantes en el área de la simulación en ingeniería química; no suficientemente abordados al presente por otros textos, por ejemplo procesos biológicos específicos y el tratamiento de procesos batch, ya que la industria farmacológica, de alimentos, químicos en general, y otras muchas, tendrán próximamente un protagonismo importante en nuestra región.

Abarcar la temática de simulación de procesos en un libro de carácter general como el presente, sin antes reflexionar claramente acerca del origen del diagrama a analizar, es decir el porqué de la estructura a simular de tal forma de lograr la transformación deseada partiendo de las materias primas para llegar a los productos, es conceptualmente cuestionable. En efecto, si bien todavía hoy debemos considerar a la tarea de generar un flowsheet general a partir de la idea básica más un arte que una metodología sistemática (y por lo tanto implementable en un algoritmo computacional), no puede evitarse una introducción a la síntesis de procesos, a los efectos de familiarizar al lector con metodologías que permiten generar diagramas o estructuras para lograr un proceso óptimo. Al respecto, conviene resaltar que en general el alumno se forma en nuestros ámbitos universitarios considerando al diagrama de flujos del proceso como una suerte de estructura “que nos viene dada” y que se debe adoptar como tal. En este libro, se resalta a la etapa de simulación como una más dentro del ciclo de actividades secuenciales para el diseño del proceso, y no como *la herramienta* para el diseño.

Desde el punto de vista de las tendencias, se puede vislumbrar -a juzgar por los trabajos publicados recientemente- que el futuro de la simulación (o al menos las grandes avenidas del

desarrollo en la próxima década) pasa por la simulación dinámica, y en segundo término, por la simulación cualitativa, es decir, simulación de tendencias y propagaciones de perturbaciones en el proceso. De ambos campos se deriva una gran actividad para el ingeniero de procesos dedicado al control, a la supervisión de procesos, a la diagnosis de fallas, a la optimización en tiempo real, etc. Paralelamente, la flexibilidad de los futuros simuladores permitirá muy fácilmente al usuario incorporar sus propios modelos. Siempre existirá la necesidad de los mismos. Basta mencionar que en cada proceso se dispondrá muy probablemente de un equipo específico (por ejemplo el reactor) cuyas características serán siempre particulares, y por lo tanto no disponible como un programa “encapsulado o enlatado” en un simulador comercial.

Además, en simulación dinámica, para lograr resultados muy aproximados a la realidad (por ejemplo al simular políticas de arranque o parada, modos de falla del equipo, etc), se deberán utilizar modelos en los cuales muchas características de diseño del equipo sean contempladas. Estos modelos pueden o no estar disponibles en un simulador de uso general. Por lo tanto, nuevamente llegamos a la conclusión que frecuentemente será necesario modelar nuestros propios equipos e incorporarlos al simulador. Luego, será indispensable conocer conceptualmente cómo hacerlo, y con qué herramientas debemos enfrentar la tarea. En este punto, es importante lograr que el alumno extraiga conclusiones acerca de la siguiente reflexión: *No es lo mismo ser un excelente operador de un simulador comercial (conocer todas las opciones disponibles, cómo imprimir resultados, cómo ingresar en forma rápida los datos, etc.) que conocer cómo programar módulos para el mismo, qué métodos fisicoquímicos utilizar para cada problema, cuándo se podrían esperar múltiples estados estacionarios en la simulación de torres de destilación, etc.*; y para esto, resulta indispensable una adecuada formación teórica, que es uno de los objetivos de esta obra.

ESTRUCTURA Y CONTENIDO

Estructuralmente, el presente volumen está compuesto por veintinueve capítulos, cada uno de ellos diagramado en forma independiente, con una individualidad temática para que cada tema pueda ser consultado específicamente. Sin embargo, están ordenados secuencialmente de tal manera de facilitar a quien lo desee una introducción autodidáctica al *modelado*, *optimización* y *simulación* de procesos químicos.

Para un curso específico de simulación de procesos los dos primeros capítulos podrían ser obviados, comenzando directamente con la introducción a los métodos numéricos para resolver sistemas de ecuaciones no lineales. También puede considerarse o no la simulación dinámica y en tiempo real (Capítulos XIII al XVIII, y XXI), o la incorporación o no de elementos de optimización en estado estacionario (Capítulos XI y XII). Por último, para lograr una breve introducción conceptual al problema global del modelado de procesos químicos, es recomendable cubrir todos los capítulos.

Dentro de este contexto, el Capítulo I contiene una breve introducción a las diversas herramientas y métodos para el modelado de procesos; mientras que en el Capítulo II se brinda una somera introducción a la síntesis de procesos químicos. Se plantean los conceptos asociados a la generación de un flowsheet o diagrama de flujos. Para ello se introduce el concepto de optimización, tanto teniendo en cuenta variables operacionales como estructurales. Seguidamente, una vez logrado (o propuesto) el diagrama de flujos, se introducen los objetivos que persigue la tarea de simulación del proceso. Por otra parte, se muestra la importancia de la simulación estacionaria o dinámica en las distintas etapas de la concreción de un proyecto de planta química, a los efectos de fijar ideas acerca del uso común de las herramientas informáticas, y en especial los diversos tipos de simuladores, en la tarea del ingeniero químico.

En el Capítulo III se desarrolla una introducción a los métodos numéricos para la solución de sistemas de ecuaciones algebraicas, enfatizando los sistemas no lineales, y los métodos más comunes utilizados en la solución de modelos en ingeniería química.

En el Capítulo IV se discuten los aspectos específicos para la solución de sistemas de ecuaciones no lineales de elevada dimensión y poco densos (matriz de coeficientes rara). También se desarrollan someramente los conceptos de particionado, rasgado y ordenamiento, a los efectos de introducir al lector a los métodos y técnicas iterativas utilizadas en los simuladores, ya sea globales o modulares secuenciales.

En el Capítulo V se presenta una introducción al concepto de simulación de procesos,

haciendo hincapié en los procesos químicos. Se plantean los aspectos y definiciones conceptuales, como así también una clasificación de los simuladores, destacando las diversas filosofías o arquitecturas para el diseño de los mismos.

En el Capítulo VI se presentan algunas ideas acerca de los componentes básicos de un simulador de procesos químicos, enfatizando los simuladores modulares secuenciales. También se destacan los aspectos del modelado de los equipos que representan las distintas operaciones unitarias, tomando un ejemplo sencillo que facilita la comprensión conceptual.

En los Capítulos VII y VIII se introduce brevemente el problema de la estimación de propiedades fisicoquímicas. Se destaca la importancia de lograr un criterio para seleccionar el método adecuado de estimación para lograr resultados apropiados. Se hace hincapié en los principales métodos para la estimación de la constante de equilibrio y entalpías en mezclas multicomponentes.

En el Capítulo IX se desarrolla el modelo de simulación para un equipo de separación por evaporación flash. Se analizan diversas opciones de operación, tales como sistemas adiabáticos, isotérmicos, equilibrio líquido-vapor, líquido-líquido y líquido-líquido-vapor. Se destaca además, la íntima relación que existe entre el modelado de este equipo y los cálculos de temperatura de burbuja y rocío, y por último, la determinación de las fases presentes dadas las composiciones, la temperatura y la presión asociadas a una mezcla.

En el Capítulo X se analizarán algunos de los métodos que se han propuesto para la simulación en estado estacionario de equipos de separación multicomponente en múltiples etapas, en contracorriente. Se enfatizan los métodos semi-rigurosos y rigurosos, por ser los más utilizados y convenientes para la mayoría de los casos prácticos. Se discuten algunas características de los problemas de separación de mezclas no ideales, por ejemplo la posibilidad de obtener múltiples soluciones.

En el Capítulo XI se introducen los principios elementales para la optimización de funciones, de una variable y multivariable, sin o con restricciones, ya sean éstas de igualdad o desigualdad, lineales o no lineales. Se destaca además la necesidad de plantear el problema de diseño desde un punto de vista de la optimización, y su relación con la simulación estacionaria de procesos.

En el Capítulo XII se explica brevemente la aplicación de métodos numéricos para incorporar al modelo de simulación estacionaria (ya sea modular secuencial o global) una función objetivo a optimizar, especificando determinadas variables de optimización. Se enfatizan los simuladores modulares secuenciales.

En el Capítulo XIII se realiza una introducción a los métodos numéricos clásicos

disponibles para resolver sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias, enfatizando además el problema de los sistemas stiff.

En el Capítulo XIV se describe el modelado de equipos sencillos y se comentan brevemente los aspectos relacionados a la construcción de simuladores dinámicos. Se analiza también el módulo para la simulación de un equipo flash, ya tratado desde el punto de vista estacionario en el Capítulo IX.

En el Capítulo XV se desarrollan modelos dinámicos para operaciones unitarias típicas de separación de mezclas multicomponentes, por ejemplo una torre de destilación, con el objeto de compararlos con los métodos similares para simulación estacionaria discutidos en el capítulo X. Se discuten algunas aplicaciones del modelo.

En el Capítulo XVI se analizan someramente algunas aplicaciones de la simulación dinámica al control de procesos, destacándose nociones elementales acerca de la simulación de sistemas a lazo abierto o cerrado, sistemas simples de control, etc.

En el Capítulo XVII se analizan módulos de simulación dinámica para sistemas específicos. Aquí se destaca la importancia de adquirir habilidad para modelar diversos problemas, debido a la imposibilidad de lograr, a través de un simulador de propósito general, la cobertura de todos los casos. Se trata de demostrar, a través de los ejemplos, que ya sea por el tipo de operación o simular, o bien, por la rigurosidad y el grado de detalle necesarios, existirá siempre la potencial necesidad de desarrollar modelos propios.

En el Capítulo XVIII se analiza otro caso específico, en el cual resulta evidente la necesidad planteada en el capítulo anterior. En efecto el problema de lograr un simulador apropiado para los reactores biológicos en general está lejos (al igual que cualquier reactor) de poder ser generalizado en forma sencilla y eficaz.

En el Capítulo XIX se explica brevemente la simulación de procesos batch y la problemática asociada para tratar plantas multiproducto y multipropósito, las cuales poseen características bien distintas a los procesos continuos. Por último, se plantea el problema de la simulación de procesos semicontinuos y se introduce al lector en el campo de la simulación discreta.

En el Capítulo XX se discuten algunos aspectos asociados a la medición y estimación de parámetros en un proceso, el problema del ruido en las mediciones y su tratamiento, así como también el problema de la reconciliación de datos en plantas de proceso.

Por último, en el Capítulo XXI se introduce al concepto de simulación dinámica en tiempo real. Se comentan los aspectos específicos a tener en cuenta para diseñar estos simuladores, y se ejemplifican por medio de la construcción de un prototipo para un proceso

simple de pasteurización de leche.

MODELADO, SIMULACIÓN Y OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS QUÍMICOS

ÍNDICE TEMÁTICO

CAPITULO I: "INTRODUCCIÓN A LOS MÉTODOS INFORMÁTICOS APLICADOS AL MODELADO EN INGENIERÍA"

I.1.	INTRODUCCIÓN	1
I.2.	EVOLUCIÓN HISTÓRICA	3
I.3.	MÉTODOS NUMÉRICOS COMO HERRAMIENTA PARA EL MODELADO DE PROCESOS EN INGENIERÍA QUÍMICA	5
I.4.	MODELOS "NO CONVENCIONALES"	9
I.5.	SISTEMAS DE GERENCIAMIENTO DE INFORMACIÓN	22
I.6.	PARADIGMAS INFORMÁTICOS	25
	PROBLEMAS PROPUESTOS	27
	BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA	28

CAPITULO II: "INTRODUCCIÓN AL DISEÑO DE PROCESOS QUÍMICOS. BREVES NOCIONES"

II.1.	INTRODUCCIÓN	29
II.2.	ETAPAS EN LA TAREA DE DISEÑO	33
II.3.	LA TAREA DE SÍNTESIS DE PROCESOS QUÍMICOS	36
II.3.1.	Síntesis de la red de intercambiadores	43
II.3.2.	Síntesis de sistemas de separación	52
II.4.	EJ.: BREVE NOCIÓN DE TÉCNICA DE SÍNTESIS APLICADAS A UN PROCESO DE DESALACIÓN DE AGUAS DE MAR	62
II.5.	ETAPAS EN LA INGENIERÍA DE PROCESOS	75

PROBLEMAS PROPUESTOS	78
BIBLIOGRAFÍA CITADA O RECOMENDADA	79
CAPITULO III: “REVISIÓN DE MÉTODOS NUMÉRICOS APLICABLES EN SIMULACIÓN DE PROCESOS EN ESTADO ESTACIONARIO”	
III.1. CONCEPTOS BÁSICOS	83
III.2. MÉTODOS BÁSICOS. DISCUSIÓN DE LA CONVERGENCIA	84
III.3. PRINCIPALES MÉTODOS	85
III.3.1. El método de Bisección	85
III.3.2. Métodos de Newton-Raphson. Usos de la Derivadas de la Función	89
III.3.3. Sustitución directa o Aproximación Sucesivas	91
III.3.4. Procedimiento de Wegstein	93
III.3.5. Uso de Fracciones Continuas	95
III.4. SOLUCIÓN DE SISTEMAS DE ECUACIONES LINEALES SIMULTANEAS	98
III.4.1. Planteo del Problema. Teoremas Básicos	98
III.4.2. Métodos Directos	100
III.4.3. Métodos Iterativos	106
PROBLEMAS PROPUESTOS	109
BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA	114
CAPITULO IV:” SISTEMAS DE ECUACIONES DE GRAN DIMENSIÓN Y POCO DENSOS”	
IV.1. INTRODUCCIÓN	117
IV.2. RESOLUCIÓN NUMÉRICA DE SISTEMAS DE ECUACIONES NO LINEALES	117
IV.2.1. Métodos de Newton-Raphson. linealización	118
IV.2.2. Matrices tridiagonales. Método de Thomas	125
IV.2.3. Extensión del método de Thomas a matrices tridiagonales en Bloque	128

X

IV.2.4.	Método de sustitución directa o aproximaciones sucesivas	130
IV.3.	ANÁLISIS ESTRUCTURAL DE SISTEMAS DE ELEVADA DIMENSIÓN	135
IV.3.1.	Algoritmo de Steward para la determinación del conjunto de salida	136
IV.3.2.	Especificaciones de Variables y Grados de Libertad de un Sistema de Ecuaciones	140
IV.3.3.	Algoritmos para selección de Variables a Especificar	144
IV.3. 4.	Sistemas cíclicos	155
IV.4.	ALGORITMOS DE PARTICIONADO, RASGADO Y ORDENAMIENTO. ARQUITECTURA MODULAR SECUENCIAL	159
IV.5.	MÉTODO DE PARTICIONADO DE NORMAN (1965)	164
IV.6.	ALGORITMO DE PARTICIONADO DE KEHAM Y SHACHAM	166
IV.7.	RASGADO DEL DIAGRAMA DE FLUJOS O GRAFO	170
V.8.	ALGORITMO DE BARKELEY Y MOTARD (1972)	172
IV.9.	ETAPA DE ORDENAMIENTO	177
	PROBLEMAS PROPUESTOS	186
	BIBLIOGRAFÍA CITADA	189
	BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA	189
CAPITULO V: “SIMULACIÓN DE PROCESOS QUÍMICOS”		
V.1.	INTRODUCCIÓN	191
V.2.	CLASIFICACIÓN DE LOS MÉTODOS DE SIMULACIÓN	193
V.3.	SIMULADORES DE PROCESOS QUÍMICOS COMPLEJOS	195
V.3.1.	Simuladores de procesos en estado estacionario modulares secuenciales vs. Simuladores globales	196
	PROBLEMAS PROPUESTOS	209
	BIBLIOGRAFÍA CITADA O RECOMENDADA	212

CAPITULO VI: " INTRODUCCIÓN A LAS CARACTERÍSTICAS DE UN SIMULADOR MODULAR SECUENCIAL"

VI.1.	ESTRUCTURA DE UN SIMULADOR MODULAR SECUENCIAL EN ESTADO ESTACIONARIO	213
VI.2.	MODELADO DE EQUIPOS PARA SIMULACIÓN DE PROCESOS. PROGRAMACIÓN DE MÓDULOS DE SIMULACIÓN	226
VI.3.	BREVE DESCRIPCIÓN DE LOS DISTINTOS MÓDULOS DE EQUIPOS PRESENTES EN UN SIMULADOR MODULAR DE PROCESOS QUÍMICOS	231
VI.4.	ASPECTOS BÁSICOS A TENER EN CUENTA EN EL USO DE UN SIMULADOR DE PROCESOS MODULAR SECUENCIAL EN ESTADO ESTACIONARIO	239
	BIBLIOGRAFÍA CITADA	243
	BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA	243

CAPITULO VII: " PROPIEDADES TERMODINÁMICA DE EQUILIBRIO"

VII.1.	INTRODUCCIÓN	245
VII.1.1.	Sistemas termodinámicos	247
VII.1.2.	Equilibrio líquido-vapor	248
VII.2.	CORRELACIONES PARA LA ESTIMACIÓN DE LA PRESIÓN DE VAPOR	249
VII.2.1.	Ecuación de Antoine	250
VII.2.2.	Ecuación de Miller modificada	250
VII.2.3.	Ecuación de Wagner	250
VII.2.4.	Ecuación de Frost-Kalkwarf-Thodos	251
VII.2.5.	Ecuación de Lee y Kesler	251
VII.2. 6.	Ecuación de Gómez-Nieto y Thodos	252

VII.2.7.	Estimación de presión de vapor de cortes de petróleo	259
VII.3.	EQUILIBRIO LIQUIDO-VAPOR EN SISTEMAS SEMI-IDEALES	259
VII.3.1.	Propiedades termodinámicas de mezclas ideales a bajas presiones	259
VII.3.2.	Propiedades termodinámicas de mezclas ideales a presiones bajas a moderadas	260
VII.4.	EQUILIBRIO DE FASES EN SISTEMAS NO IDEALES	264
VII.4.1.	Teoría de soluciones regulares y correlaciones de Chao-Seader y Grayson-Streed	267
VII.4.2.	Ecuaciones que describen coeficientes de actividad de la fase líquida	273
VII.4.3.	Ecuación de Margules	274
VII.4.4.	Ecuación de Van Laar	275
VII.4.5.	Ecuación de Wilson	278
VII.4.6.	Ecuación NRTL	281
VII.4.7.	Ecuación UNIQUAC	285
VII.4.8.	El método UNIFAC	288
VII.4.9.	Uso de datos experimentales para calcular constantes	293
VII.4.9.1.	Coefficientes de actividad a partir del azeótropo	293
VII.4.9.2.	Coefficientes de actividad a partir de los datos de la curva de equilibrio líquido-vapor	293
VII.4.9.3.	Coefficientes de actividad a partir de la discrepancia de energía libre	294
VII.4.9.4.	Coefficientes de actividad a dilución infinita	295
VII.4.9.5.	Correlación de Pierotti, Deal y Derr para estimar coeficientes de actividad a dilución infinita	296
VII.5.	EQUILIBRIO LIQUIDO-VAPOR A ALTAS PRESIONES	296
VII.5.1.	Modelos para la fase vapor a presiones altas	297
VII.5.2.	Fenómenos críticos en las mezclas a altas presiones	298
VII.6.	SELECCIÓN DEL MÉTODO PARA LA PREDICCIÓN DE PROPIEDADES DEL EQUILIBRIO LIQUIDO-VAPOR	301

BIBLIOGRAFÍA CITADA O RECOMENDADA	302
CAPITULO VIII: “ ESTIMACIÓN DE PROPIEDADES TERMODINÁMICA”	
VIII.1. INTRODUCCIÓN	303
VIII.1.1. Entalpías de exceso	303
VIII.2. MÉTODOS PARA LA ESTIMACIÓN DEL CALOR LATENTE DE VAPORIZACIÓN	304
VIII.2.1. Correlaciones para calor latente de vaporización basadas en la ecuación de Clausius-Clapeyron	305
VIII. 2.2. Correlaciones para calor latente de vaporización basadas en la ley de estados correspondientes	308
VIII.2.3. Correlación de Pitzer modificada	308
VIII.2.4. Correlación de Riedel	309
VIII.2.5. Influencia de la temperatura en el calor latente de vaporización	311
VIII.2.6. Calor latente de vaporización de mezclas de líquidos	315
VIII.3. MÉTODOS PARA LA ESTIMACIÓN DE LA CAPACIDAD CALORÍFICA	316
VIII.3.1. Capacidad calorífica de gases ideales	316
VIII.3.2. Capacidad calorífica de mezclas de gases ideales	321
VIII.3.3. Capacidad calorífica de líquidos puros	321
VIII.3.3.1. Método de Rowlinson	322
VIII.3.3.2. Método de Missenard	322
VIII.3.3.3. Capacidad calorífica de mezclas de líquidos	323
VIII.4. DENSIDADES DE LÍQUIDOS	324
VIII.4.1. Densidades de líquidos puros	324
VIII.4.1.1. Densidad en el punto normal de ebullición	324
VIII.4.1.2. Correlación de Hankinson y Thomson	325
VIII.4.1.3. Método de Rackett modificado	327

VIII.4.2.	Densidades de mezclas de líquidos	328
VIII.5.	ESTIMACIÓN DE PROPIEDADES TERMODINÁMICA DE TRANSPORTE	329
VIII.5.1.	Viscosidad	330
VIII.5.1.1.	Viscosidad de gases	330
VIII.5.1.2.	Viscosidad de líquidos	332
VIII.5.2.	Conductividad térmica de gases a baja presión	336
VIII.5.3.	Conductividad térmica de mezclas de gases a baja presión	338
VIII.5.4.	Conductividad térmica de líquidos	339
VIII.5.5.	Coefficientes de difusión	341
	BIBLIOGRAFÍA	343
CAPITULO IX: “ MODULO PARA LA SIMULACIÓN DE EVAPORADORES FLASH”		
IX.1.	INTRODUCCIÓN	345
IX.2.	FLASH ISOTÉRMICO	349
IX.3.	FLASH ADIABÁTICO	355
IX.4.	FLASH A FRACCIÓN DE VAPORIZACIÓN DADA	358
IX.5.	OTRAS ESPECIFICACIONES PARA EL EQUIPO FLASH	359
IX.6.	OTRAS APLICACIONES DE LOS ALGORITMOS PARA SIMULACIÓN DE EVAPORADORES FLASH	362
IX.6.1.	Separadores líquido-líquido	362
IX.6.2.	Temperatura de burbuja	364
IX.6.3.	Temperatura de rocío	366
	PROBLEMAS PROPUESTOS	369
	BIBLIOGRAFÍA CITADA	372
	BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA	372
CAPITULO X: ”MODELADO DE EQUIPOS DE SEPARACIÓN MULTICOMPONENTES EN CASCADAS CONTRACORRIENTE MÚLTIPLE ETAPA”		

X.1.	INTRODUCCIÓN	373
X.2.	MÉTODOS DE RESOLUCIÓN APROXIMADOS	379
X.3.	MÉTODOS ETAPA A ETAPA	380
X.4.	MÉTODOS DE RESOLUCIÓN MATRICIALES (SEMI-RIGUROSOS)	382
X.5.	MÉTODOS RIGUROSOS DE RESOLUCIÓN SIMULTANEA	392
X.5.1.	Sistema de Ecuaciones	393
X.5.2.	Estructura del jacobiano	401
X.5.3.	Procedimiento numérico de resolución	406
X.5.4.	Opciones estructurales	414
X.6.	MÉTODOS JERÁRQUICOS CON DOS NIVELES DE ITERACIÓN (INSIDE-OUT)	423
X.7.	MÉTODOS DE RELAJACIÓN	426
X.8.	MÚLTIPLES SOLUCIONES EN EQUIPOS DE SEPARACIÓN MULTICOMPONENTE MÚLTIPLE ETAPA	426
	PROBLEMAS PROPUESTOS	431
	BIBLIOGRAFÍA CITADA	432
	BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA	434
 CAPITULO XI: “ OPTIMIZACIÓN ”		
XI.1.	INTRODUCCIÓN	435
XI.2.	FORMULACIÓN DEL MODELO	435
XI.2.1.	EJEMPLO: Planificación de Producción de una Refinería	438
XI.2.1.1.	Modelado del Ejemplo	439
XI.3.	TEORÍA Y ALGORITMOS DE OPTIMIZACIÓN	441
XI.3.1.	Programación Lineal	441
XI.3.1.1.	Representación y Solución Gráfica de LP	442
XI.3.1.2.	El algoritmo SIMPLEX	446
XI.3.2.	Programación no lineal	448

XI.3.2.1. Teoría clásica de la programación no lineal	449
XI.3.2.1.1. Programas matemáticos no condicionados	449
XI.3.2.1.2. Programas matemáticos condicionados por igualdades	452
XI.3.2.1.3. Problemas condicionados por desigualdades	454
XI.3.2.2. Algoritmos para resolver NLP	456
XI.3.2.2.1. Algoritmos para NLP Univariables sin Restricciones	456
XI.3.2.2.2. Algoritmos para NLP sin Restricciones Multivariables	461
XI.3.2.2.3. Algoritmos para NLP con restricciones	475
EJERCICIOS PROPUESTOS	489
BIBLIOGRAFIA	492
APÉNDICE	493

CAPITULO XII: “OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS POR COMPUTADORA”

XII.1. INTRODUCCIÓN	497
XII.2. EJEMPLOS	500
XII.2.1. Diseño de un absorbedor	500
XII.2.2. Diseño de una planta completa	501
XII.2.3. Un problema de optimización con óptimos locales	501
XII.3. SIMULACIÓN DE PROCESOS POR COMPUTADORA Y SU RELACIÓN CON OPTIMIZACIÓN. DISTINTOS ENFOQUES	502
XII.3.1. Enfoque modular secuencial	503
XII.3.2. Enfoque global	505
XII.3.3. Enfoque modular simultáneo	507
XII.4. OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS CON EL ENFOQUE MODULAR SECUENCIAL	508
XII.4.1. Métodos de caja negra	509
XII.4.2. Métodos de camino no factible	512
XII.4.3. Métodos de camino factible	518

XII.4.4.	Métodos híbridos	520
XII.4.5.	Métodos siguiendo el flujo lógico de información	521
XII.5.	OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS CON EL ENFOQUE GLOBAL	523
XII.6.	OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS CON EL ENFOQUE MODULAR SIMULTANEO	525
	EJERCICIOS	531
	BIBLIOGRAFÍA	532

CAPITULO XIII: “MÉTODOS NUMÉRICOS, APROXIMACIÓN PARA LA SOLUCIÓN DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS”

XIII.1.	INTRODUCCIÓN	535
XIII.2.	ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS DE ORDEN N	535
XIII.3.	SOLUCIÓN DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS DE 1er. ORDEN	536
XIII.4.	APROXIMACIÓN A LA SOLUCIÓN MEDIANTE EXPANSIÓN EN SERIES DE TAYLOR	538
XIII.5.	MÉTODOS EXPLÍCITOS DE RESOLUCIÓN DE EDOS	542
XIII.5.1.	Método de Euler	542
XIII.5.2.	Métodos de Runge-Kutta	547
XIII.6.	MÉTODOS DE MÚLTIPLE PASO	558
XIII.7.	MÉTODOS PREDICTORES-CORRECTORES	561
XIII.8.	SISTEMAS DE ECUACIONES DIFERENCIALES	563
	PROBLEMAS PROPUESTOS	565
	BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA	568

CAPITULO XIV: “SIMULACIÓN DINÁMICA DE EQUIPOS DE PROCESOS ELEMENTALES”

XIV.1.	INTRODUCCIÓN	571
XIV.2.	SIMULACIÓN DINÁMICA DE EQUIPOS SENCILLOS DE PROCESO	573

XIV.3.	MODELO PARA LA SIMULACIÓN DINÁMICA DE UN SEPARADOR FLASH	591
	PROBLEMAS PROPUESTOS	599
	BIBLIOGRAFÍA CITADA O RECOMENDADA	601
CAPITULO XV: " SIMULACIÓN DINÁMICA DE EQUIPOS DE SEPARACIÓN MÚLTIPLE ETAPA EN CONTRACORRIENTE"		
XV.1.	INTRODUCCIÓN	603
XV.2.	MODELO PARA SISTEMAS DE SEPARACIÓN MÚLTIPLE-ETAPA MULTICOMPONENTE EN CONTRACORRIENTE	606
XV. 2.1.	Sistema de Ecuaciones del Modelo	610
XV.2.2 .	Procedimientos de cálculo	616
XV.3.	EJEMPLOS DE APLICACIONES ESPECIFICAS.	622
XV.4.	DESTILACIÓN BATCH	627
	BIBLIOGRAFÍA CITADA	637
	BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA	639
	PROBLEMAS PROPUESTOS	640
CAPITULO XVI:" INTRODUCCIÓN AL CONTROL DE PROCESOS. SISTEMAS DE CONTROL TÍPICOS Y UTILIDAD DE LOS SIMULADORES DINÁMICOS "		
XVI.1.	INTRODUCCIÓN	643
XVI.2.	NOCIONES BÁSICAS SOBRE CONTROL DE PROCESOS	646
XVI.2.1.	Modelado matemático	647
XVI.2.2.	Estructuras utilizadas en control clásico	650
XVI.2.3.	Ajuste de los controladores Clásicos	653
XVI.3.	NOCIONES BÁSICAS SOBRE ALGORITMOS DE CONTROL AVANZADO	655
XVI.3.1.	Control por realimentación de estados	657
XVI.3.2.	Control óptimo	658

XVI.3.3. Linealización global exacta de sistemas no lineales	661
XVI.3.4. Otras estructuras de control avanzado	662
XVI.4. SIMULACIÓN NUMÉRICA DE LOS PROCESOS CONTROLADOS	663
XVI.4.1. Estructuras típicas utilizadas en los simuladores dinámicos	665
XVI.4.2. UN EJEMPLO SIMULADO DE UN SISTEMA DE CONTROL DE NIVELES	666
PROBLEMAS PROPUESTOS	670
BIBLIOGRAFÍA CITADA	670
CAPITULO XVII “ SIMULACIÓN DINÁMICA DE EQUIPOS ESPECÍFICOS”	
XVII.1. INTRODUCCIÓN	673
XVII.2. EVAPORADOR DE PROPANO	673
XVII.2.1. Descripción del proceso	673
XVII.2.2. Construcción del modelo	674
XVII.2.3. Resolución del modelo	678
XVII.3. DESALADOR POR EVAPORACIÓN MÚLTIPLE FLASH	680
XVII.3.1. Descripción del proceso	680
XVII.3.2. Construcción del modelo	681
XVII.3.3. Resolución del modelo	687
XVII.4. REACTOR PRODUCTOR DE SULFOLENO	690
XVII.4.1. Descripción del proceso	690
XVII.4.2. Construcción del Modelo	692
XVII.4.3. Resolución del Modelo	695
BIBLIOGRAFÍA CITADA	696
CAPITULO XVIII: “MODELADO DEL PROCESO DE DIGESTIÓN ANAERÓBICA EN REACTORES SIMPLES “	
XVIII.1. INTRODUCCIÓN	697

XX

XVIII.2. MODELADO DE LOS PROCESOS FUNDAMENTALES EN REACTORES BIOLÓGICOS SIMPLES	702
XVIII.2.1. Evolución histórica	702
XVIII.2.2. Modelado de un biodigestor anaeróbico tanque agitado ideal con microorganismos suspendidos	704
XVIII.2.2.1. Sistema de ecuaciones del modelo	707
XVIII.2.2.2. Esquema de cálculo	718
XVIII.3. MODELO DE REACTOR TANQUE AGITADO CONTINUO NO IDEAL	732
XVIII.3.1. Modelo de reactores tanques agitados en serie con recirculación externa	733
XVIII.4. INTRODUCCIÓN AL MODELADO DE REACTORES CON BIOFILM	735
BIBLIOGRAFÍA CITADA	738

CAPITULO XIX: “ MÉTODOS, ESTRUCTURAS Y MODELOS PARA LA SIMULACIÓN DE PROCESOS BATCH ”

XIX.1. INTRODUCCIÓN	741
XIX.2. EL ROL DE LOS PROCESOS BATCH EN LA INDUSTRIA QUÍMICA	741
XIX.3. APLICACIÓN DE LA SIMULACIÓN EN LA INGENIERÍA DE PROCESOS BATCH	742
XIX.4. CARACTERÍSTICAS DE LOS PROCESOS BATCH	744
XIX.5. MODELOS DE TIEMPOS Y FACTORES DE REQUERIMIENTOS	748
XIX.6. MODELOS DE ETAPAS INDIVIDUALES BASADOS EN LOS PRIMEROS PRINCIPIOS	752
XIX.7. LOS SISTEMAS DE SIMULACIÓN	756
XIX.8. CARACTERIZACIÓN DE UN PROCESO QUÍMICO DISCONTINUO (DESDE EL PUNTO DE VISTA DE LOS SISTEMAS DE SIMULACIÓN)	759
XIX.9. SIMULACIÓN CONTINUA-DISCRETA COMBINADA	760
XIX.10. SIMULACIÓN DINÁMICA DESACOPLADA	763
PROBLEMAS PROPUESTOS	764

	BIBLIOGRAFÍA CITADA	765
	BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA	766
CAPITULO XX: “MEDICIÓN Y ESTIMACIÓN EN PROCESOS CONTROLADOS”		
XX.1.	INTRODUCCIÓN	767
XX.2.	MEDICIÓN DE VARIABLES DE PROCESO	768
XX.2.1.	Mediciones “en línea” y “de línea”	769
XX.2.2.	Nociones básicas sobre transmisión de mediciones	771
XX.2.3.	Ruidos típicos de medición	774
XX.2.4.	Simulación numérica de la mediciones	775
XX.3.	ESTIMACIÓN DE VARIABLES DE PROCESO NO MEDIBLES.	776
XX.3.1.	Observadores	778
XX.3.2.	Un estimador lineal óptimo: el filtro de Kalman	781
XX.4.	MÉTODOS NUMÉRICOS DE ESTIMACIÓN PARA PROBLEMAS “MAL CONDICIONADOS”	784
XX.4.1.	Técnicas determinísticas de inversión numérica	785
XX.4.2.	Técnicas estocásticas de inversión numérica	787
XX.4.3.	Ejemplos Simulados	788
	PROBLEMAS PROPUESTOS	792
	BIBLIOGRAFÍA CITADA	793
CAPITULO XXI: “SIMULACIÓN DINÁMICA EN TIEMPO REAL”		
XXI.1.	INTRODUCCIÓN	795
XIX.2.	CARACTERÍSTICAS GENERALES DE UN SIMULADOR EN TIEMPO REAL	797
XXI.3.	CONSTRUCCIÓN DE UN SIMULADOR DE TIEMPO REAL	801
XXI.3.1.	Tiempo real	801
XXI.3.2.	Ruidos y Fallas	803

XXI.4. PASTEURIZADOR HTST.1.0	808
XXI.4.1. Descripción del proceso	808
XXI.4.2. Propiedades fisicoquímicas	811
XXI.5. MODELO DEL PROCESO	813
XXI.6. EL SIMULADOR HTST 1.0	814
XXI.6.1. Introducción	814
XXI.6.2. La interfaz	814
XXI.6.3. Aplicaciones	817
PROBLEMAS PROPUESTOS	824
BIBLIOGRAFÍA	825