

Simulación y análisis de un segmento de proceso.

Parte I: Planteamiento del problema.

Daniel Bogoya M., I.Q., M.I.S.

Profesor Titular Universidad Nacional de Colombia

Aquí se presenta el primero de una serie de trabajos encaminados a ilustrar las características y potencialidades de la simulación matemática de un segmento de proceso químico en estado estable, aplicada en microcomputadores digitales, con miras al análisis y diseño de procesos. La serie consiste en: formular un problema de estructura básica, para resolverlo a la luz de las técnicas modular secuencial y modular simultánea; analizar los efectos de aceleración de convergencia y de inicialización de los procesos de cálculo numérico iterativo; y analizar el comportamiento de las variables de operación del segmento.

INTRODUCCION

A Para los fines de la serie de trabajos planteada, se entiende la simulación matemática de procesos químicos en estado estable como una de las categorías del laboratorio de la investigación operacional, encaminada a realizar "experimentos abstractos". Justamente son experimentos abstractos porque corresponden a soluciones numéricas de modelos matemáticos previamente válidos, en una especie de nomenclatura paralela con los experimentos usuales que se adelantan concreta y materialmente en los laboratorios ya familiares de física, química y biología.

La comprensión de la simulación como disciplina

experimental requiere, entonces, ubicarse en el universo abstracto de las matemáticas para, a posteriori, "asociar" los resultados de la solución numérica con los que tendrían realmente las variables de salida de un proceso que, bajo el mismo condicionamiento simulado para las variables de entrada, hubiera tenido suceso físico.

De lo anterior se desprende que la simulación aquí tratada comprende dos entidades claramente distinguibles: modelo matemático y secuencia algorítmica de solución. El modelo matemático, visto como un conjunto de ecuaciones relacionadas me-

diante la significación de cada una de sus variables, es el producto de la actividad del modelamiento: equivale a comprender el proceso que quiera representarse y escribirlo en lenguaje matemático. La secuencia algorítmica de solución, vista como un orden lógico de soluciones secuenciales de ecuación, donde el resultado de las precedentes se emplean como datos de las sucesoras, es el producto de aplicar técnicas ya sistemáticas que garantizan la obtención de alguna solución.

En consecuencia, la proximidad entre los valores simulados y los reales dependerá esencialmente del grado de comprensión que sobre el proceso a simular tenga el modelista; y de la manera como lo represente mediante ecuaciones. Una vez que el proceso está escrito matemáticamente en ecuaciones, y agotados sus grados de libertad con base en la selección de algún conjunto de variables de entrada, tendrá soluciones determinadas y únicas. La "calidad" de los resultados depende de la modelación del proceso y no de la solución del modelo; y la "velocidad" de los resultados depende de las técnicas de solución y del grado de complejidad del modelo del proceso.

A continuación, y teniendo como mira inmediata una de sus aplicaciones, se desarrolla sucintamente la relación entre simulación y diseño; en seguida, se plantea el problema que quiere resolverse; luego se dan las características del sistema de simulación diseñado e implementado para resolver el problema planteado; y finalmente, se presentan las conclusiones y el enlace con el próximo trabajo de la serie aquí indicada.

DISEÑO Y SIMULACION

El diseño de un proceso químico ha venido adquiriendo cada vez características más técnicas que artísticas, gracias al desarrollo combinado de varios factores: primero, la penetración masiva de microcomputadores también en el campo de la ingeniería química; segundo, el continuo perfeccionamiento de modelos matemáticos y de parámetros ajustados experimentalmente con la ayuda de la estadística, lo cual permite acercarse suficientemen-

te al comportamiento real de los componentes que se transforman dentro de un proceso químico; tercero, la necesidad de proponer alternativas previamente evaluadas, con alto nivel de reproducibilidad y confianza, sujetas a criterios predeterminados de optimización, con mínimas tolerancias; y cuarto, el propósito de lograr universalidad y legitimidad en torno de metodologías y criterios.

Ahora bien, esta modernización de la actividad del diseño de procesos, donde se manifiesta variadamente el vector de optimalidad, tiene un "fuerte" entronque con la simulación. En efecto, la simulación matemática digital, vía microcomputador (como evolución reciente de la calculadora y de la regla de cálculo de bolsillo, de tan solo dos a tres décadas atrás), es la herramienta de cálculo que permite resolver estructurada y sistemáticamente múltiples balances de materia y energía, para así proceder mediante "análisis" a inclinar la balanza de las alternativas: optar por aquella que satisfaga las restricciones de optimalidad previamente dadas.

Gracias a la simulación, la base "más o menos" olfativa del experto se ha transformado en la de "precisión" resolutiva de balances, de materia y energía, para seleccionar el "mejor" diagrama de flujo y las "mejores" condiciones de operación de un proceso químico.

Aquí el concepto de "mejor" también es categóricamente particular, ya que cada actor, como protagonista del análisis y el diseño, percibe las condiciones de optimalidad únicamente desde "su" microuniverso. Desde luego, el paso a la precisión ha venido acompañado de una mediana concertación de intereses y expectativas para homogenizar criterios de costo, beneficio, velocidad, calidad y oportunidad, entre otros.

En el diagrama 1, tomado de Westerberg (79) y adecuado para el propósito de este trabajo, donde se esquematizan las etapas adelantadas en el diseño de procesos, se refuerza la relación existente entre la simulación y las demás actividades. Allí se observa que a la simulación compete realizar principalmente balances de materia y energía y, con base en índices de tamaño y costo, el dimensionamiento y la estima-

ción económica; mientras que al diseñador compete analizar para reorganizar estructuras o parámetros de operación y finalmente seleccionar algún diagrama de flujo.

Por supuesto, el diseñador llegará con mayor certeza al "mejor" diagrama, en la medida de la significancia,

confiabilidad y suficiencia de los resultados que la simulación entrega cada vez que debe calcular un diagrama de flujo. No obstante, y de cualquier manera, el diseño final sigue siendo responsabilidad única del "decisor" que diseña y no de la simulación que como herramienta simplemente entrega cantidades abundantes de información, cada vez que se requiera.

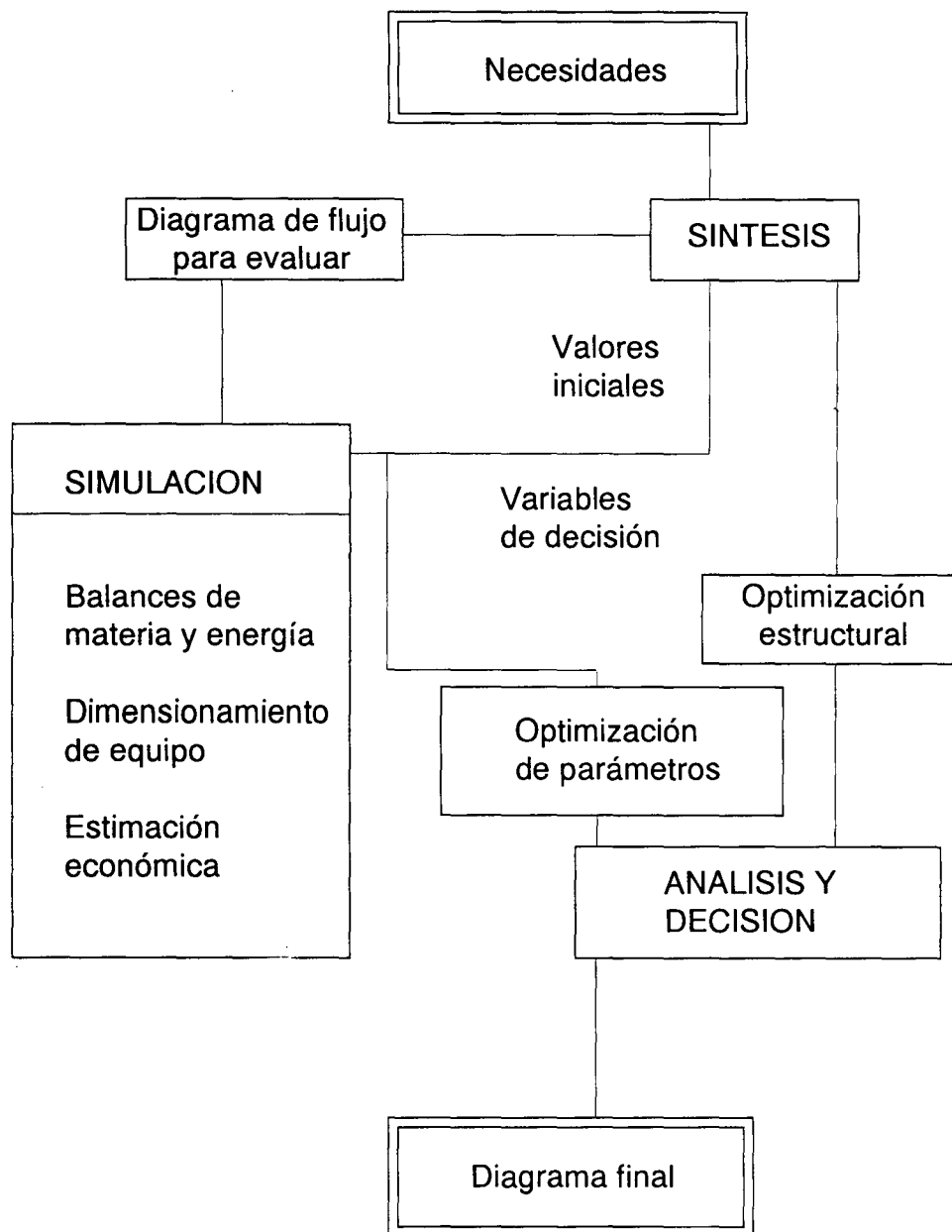


Diagrama 1
Etapas del diseño de procesos químicos
(no se incluyen análisis de seguridad ni impacto ambiental)

PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

Con base en la relación ya presentada entre simulación y diseño, y con miras a realizar balances de materia y energía en estado estable, se propone trabajar con un segmento de proceso básico, conformado por un mezclador, un reactor químico y un vaporizador instantáneo, desde donde se recircula la corriente líquida hasta el mezclador. La estructura se ilustra en el diagrama 2.

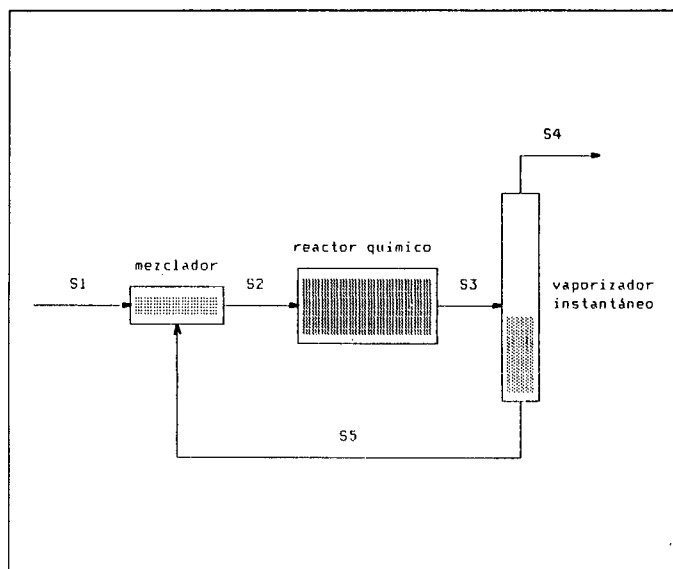


Diagrama 2
Estructura del segmento de proceso

Ahora bien, con el propósito de presentar no un cálculo complejo sino una metodología de trabajo y la estructura de sistemas de simulación, que permitan su eslabonamiento con la actividad de análisis y diseño, se aclara que se opta por modelos y sistemas sencillos. Así, las características del segmento, para componentes A y B, y los modelos matemáticos, en forma estándar, contemplados para los balances de materia son:

Para el mezclador:

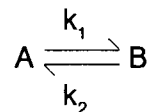
$$AS1 + AS5 - AS2 = 0 \quad (1)$$

$$BS1 + BS5 - BS2 = 0 \quad (2)$$

Para el reactor químico:

ecuación química, para un caso típico de

isomerización:



ecuación cinética:

$$(\delta C_A / \delta t) - k_2 C_B + k_1 C_A = 0$$

tiempo de residencia:

$$t_r - [V_r d / (AS2 + BS2)] = 0 \quad (3)$$

ecuaciones integradas de balance:

$$\{[(k_1 AS2 - k_2 BS2) / (k_1 + k_2)] \exp [-(k_1 + k_2) t_r] + [(k_2 / k_1 + k_2)] [AS2 + BS2] - AS3\} = 0 \quad (4)$$

$$AS3 + BS3 - AS2 - BS2 = 0 \quad (5)$$

Para el vaporizador instantáneo:

presión de vapor, con ecuaciones tipo Antoine, por ejemplo:

$$P_A^\circ - f_A(T) = 0 \quad (6)$$

$$P_B^\circ - f_B(T) = 0 \quad (7)$$

ecuaciones auxiliares de composición:

$$X_A - [(P - P_B^\circ) / (P_A^\circ - P_B^\circ)] = 0 \quad (8)$$

$$Y_A - [(P_A^\circ X_A) / P] = 0 \quad (9)$$

ecuación auxiliar de caudal de fase vapor:

$$V - \{[AS3 - (X_A (AS3 + BS3))]\} / (Y_A - X_A) \quad (10)$$

ecuaciones de balance:

$$AS4 - Y_A V = 0 \quad (11)$$

$$BS4 - (1 - Y_A) V = 0 \quad (12)$$

$$AS5 + AS4 - AS3 = 0 \quad (13)$$

$$BS5 + BS4 - BS3 = 0 \quad (14)$$

Los modelos matemáticos planteados, sin considerar la ecuación diferencial cinética ni C_A ni C_B contienen catorce ecuaciones, linealmente independientes, y veinticuatro variables: es decir, diez grados de libertad. La presencia de esta varianza no nula, o la no determinación del segmento, permiten explorar un campo sumamente rico de posibilidades para determinar exógenamente dicho segmento, realizar múltiples análisis y llegar a un conjunto de variables de operación que satisfaga diversos aspectos de optimalidad.

En este caso, la simulación resuelve velozmente los balances de materia que el analista y diseñador, desde su papel de usuario, requiera con cada forma de agotar los grados de libertad que defina.

En síntesis, existen dos niveles donde el analista debe tomar "decisiones": primero, para la selección de las variables de entrada, con las cuales determina el modelo; y segundo, para la selección de los valores e intervalos de las variables de entrada, con los cuales quiere encontrar valores para las variables de salida. En uno y otro nivel es aconsejable "percibir" lo más profundamente posible la naturaleza del proceso sometido a estudio y posterior diseño.

Para este caso, y existiendo un extenso universo de conjuntos posibles, limitado por diez combinado veinticuatro, se sugiere un conjunto de variables de entrada íntimamente relacionado con variables de diseño y operación, con las cuales se agota la varianza matemática del segmento. La situación se resume en la tabla 1.

Tabla 1

Número de funciones, grados de libertad, variables de entrada y variables de salida	
Número de funciones linealmente independientes:	14
Número de variables, dependientes e independientes:	24
Número de grados de libertad, (funciones - variables):	10
Variables de entrada:	
AS1, BS1, k_1 , k_2 , V_r , d , P , T , $f_A(T)$ y $f_B(T)$	
Variables de salida:	
AS2, BS2, AS3, BS3, AS4, BS4, AS5, BS5, t , P_A^o , P_B^o , x_A , y_A y V	

Y ahora, con una potencial infinidad de valores para cada una de las diez variables sugeridas como de entrada, corresponde seleccionar la "mejor" operación, mediante ciclos de simulación y análisis, hasta cuando se considere conveniente.

En cuanto simulación, deben resolverse velozmente las catorce ecuaciones para indicar los valores de las catorce variables de salida, correspondientes a cada conjunto de valores dados a las diez variables de entrada. En cuanto a análisis, deben definirse los valores de las variables de entrada, tantas veces como se desee sin "abusar" del número de simulaciones, y decidir qué platillo de la balanza se inclina sobre las demás: definir cuál operación es la "mejor".

SISTEMA DE SIMULACION

Para la solución del problema planteado se diseñó e implementó un sistema interactivo, en lenguaje BASIC, para uso en microcomputador IBM o compatible, con opciones para monitor a color y para monocromático. Este sistema se denomina SIMUN1, ocupa 30 Kbytes en 600 líneas de programación, posee la estructura jerárquica y la organización de Entrada/Proceso/Salida indicadas en los diagramas 3 y 4 y se encuentra disponible en discos flexibles de 3 1/2 y 5 1/4 pulgadas.

ELEMENTOS INTERNOS

Las pantallas, ventanas, mensajes y gráficas que interactivamente va presentando SIMUN1, corresponden a la organización interna que se indica a continuación.

Para el programa principal, en el primer nivel:

1. Una pantalla con el menú principal que permite llegar a una de las cinco rutinas de primer nivel.
2. Un sistema de validación de la opción escogida. Si la opción es incorrecta, el sistema reproduce el menú principal.

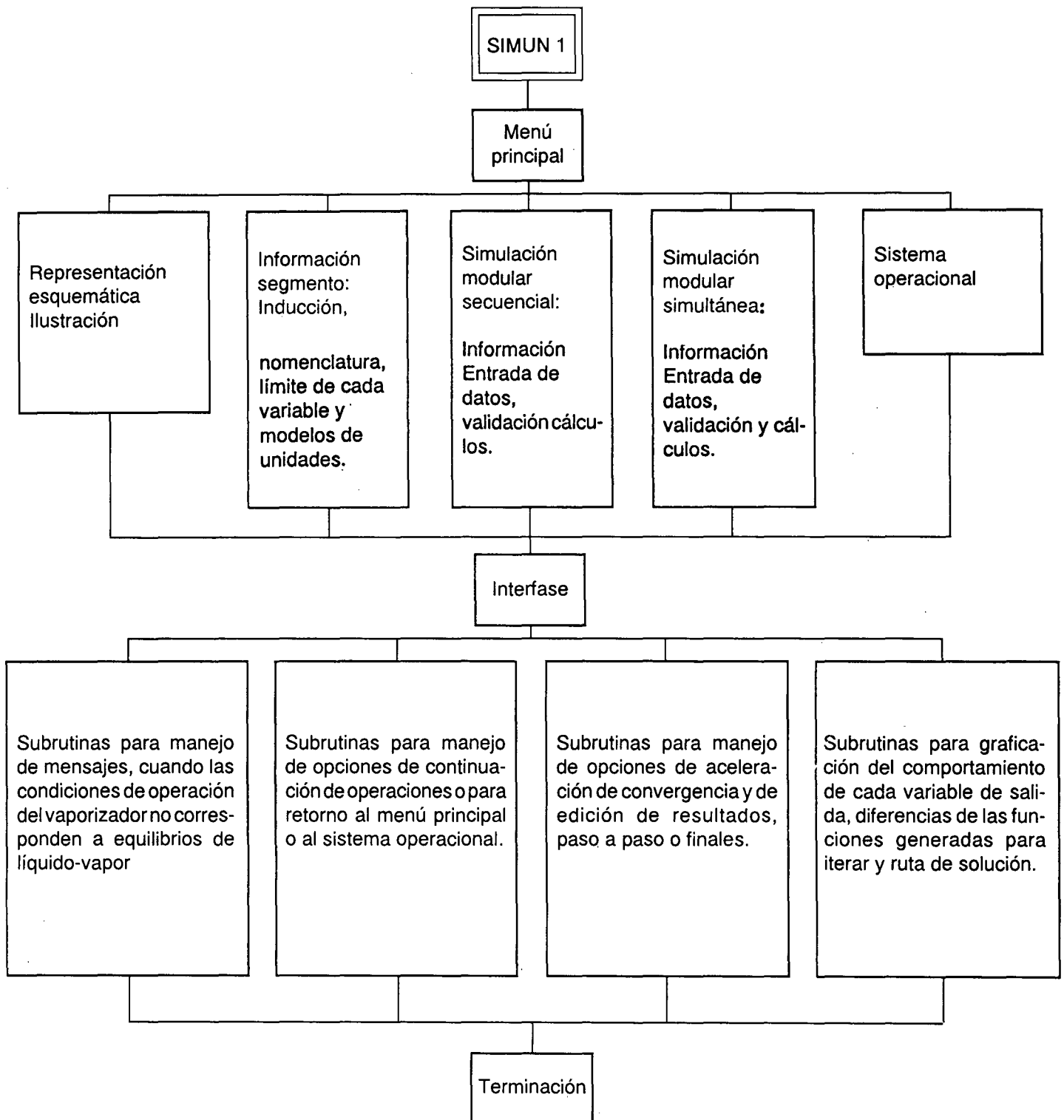


Diagrama 3
Estructura general del Sistema de simulación SIMUN1

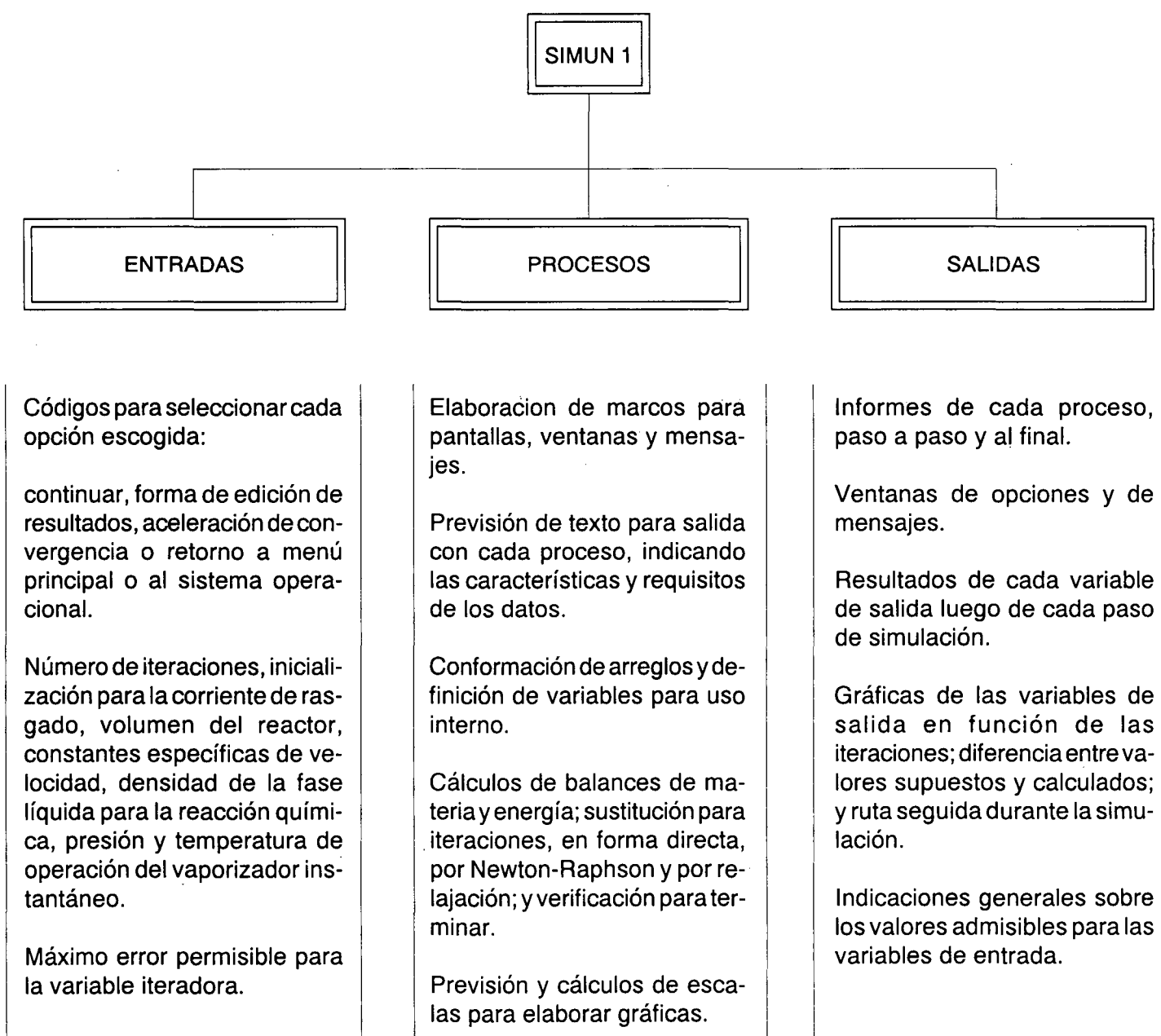


Diagrama 4
Diagrama de entrada / Proceso / salida de SIMUN1

Para las rutinas de segundo nivel:

1. Una pantalla de representación esquemática, donde se ilustra el segmento de proceso, con las unidades que lo conforman y las corrientes que "ingresan a" y "abandonan" cada unidad.
2. Cinco pantallas encadenadas de información, donde se ilustran detalles del segmento, la nomenclatura empleada y los modelos matemáticos para balances de materia en cada unidad, así como las variables y ecuaciones auxiliares establecidas para adelantar la simulación.
3. Cuatro pantallas de información y entrada de datos, dos para simulación modular secuencial y dos para simulación modular simultánea, donde se indican los intervalos de validez de cada variable de entrada, así como las acciones que se toman si los datos que se entregan están por fuera del intervalo previsto.
4. Una rutina para resolver el modelo matemático y cargar los resultados en los arreglos previstos para las variables de salida.
5. Una pantalla de resultados parciales de simulación por cada iteración, donde se presenta el valor transitorio de cada variable de salida y del grado de convergencia.
6. Una pantalla de resultados finales de simulación, donde se presenta el último valor de cada variable de salida y del grado de convergencia.
7. Una pantalla de retorno al sistema operacional.
8. Un sistema de validación de cada opción escogida y de la información de entrada.

Para las subrutinas de tercer nivel:

1. Dos ventanas para dar opciones de continuación o retorno, tanto al menú principal como al sistema operacional, luego de cada pantalla correspondiente a las rutinas de segundo nivel.
2. Una ventana para dar opciones de aceleración de convergencia en los cálculos iterativos: reemplazo por sustitución directa, Newton Raphson o relajación.
3. Una ventana para dar opciones de edición de resultados: paso a paso, finales o retorno a menú principal o a sistema operacional.
4. Dos ventanas para mensajes de advertencia, cuando las condiciones de operación escogidas para el vaporizador instantáneo corresponden a estados externos de la región de equilibrio líquido-vapor: es decir, condiciones de vapor recalentado (si la temperatura es superior a la de rocío, a la presión del vaporizador) o de líquido comprimido (si la temperatura es inferior a la de burbuja, a la presión del vaporizador). En estos casos hay "significación matemática" pero nunca "correspondencia física".
5. Tres subrutinas para reinicialización de las variables iteradoras. Para el caso de Newton Raphson, la derivada se evalúa mediante una expansión, con cada una de las variables, ya que la función bivariacional analítica no es explícita. Para el caso de relajación, se toma un intervalo igual al ciento cincuenta por ciento de la última diferencia registrada entre los valores supuestos y calculados.
6. Quince subrutinas de graficación, para ilustrar el comportamiento de:
 - + Caudales de A y B en S2, S3, S4, S5 y S5 supuesto, para el caso de simulación modular secuencial, en función del número de iteraciones, a lo largo de la simulación.
 - + Diferencia de caudales de A y de B, entre los valores supuestos y calculados para la corriente S5, en función del número de iteraciones.
 - + Caudal de A y de B supuestos en función de los valores calculados, iteración tras iteración. Esta gráfica ilustra la ruta seguida durante la simulación más que la dependencia funcional entre las variables citadas, ya que se atrapan los puntos no por correlación (tipo mínimos cuadrados, por ejemplo) sino siguiendo uno a uno los resultados parcia-

les, donde se "absorbe" el efecto bivariable.

+ Primeros y últimos caudales de A y de B en cada corriente y nuevamente un esquema a escala del segmento, finalizada la simulación.

7. Tres subrutinas para manejo del fondo y de los marcos de la pantalla y de las ventanas.

CONCLUSIONES

1. Este trabajo introduce al lector en las potencialidades de la simulación digital de procesos químicos en estado estable, entendida como herramienta matemática de cálculo, así como su relación con el análisis y el diseño, con miras a la obtención de información confiable de múltiples posibles estados de operación que permitan al analista inferir decisiones de diseño.
2. Con base en el planteamiento de un problema básico, conformado por un mezclador, un reactor químico y un vaporizador instantáneo, se presenta una estructura conducente a la evaluación sistemática de balances de materia y energía, vía simulación.
3. SIMUN1, sistema diseñado, programado e implementado para tratar el problema básico presentado, permite una fácil y amable utilización interactiva, por parte de cualquier usuario interesado en conocer las características, los elementos y la organización de "software" para Ingeniería Química, así como en llevar a cabo simulaciones y análisis variados de segmentos de proceso equivalentes.
4. En la implementación de SIMUN1 se comprueba que más del noventa por ciento del esfuerzo de diseño, programación y computación corresponde al manejo de pantalla para presentar opciones amigables al usuario; realmente, la componente propia de los "cálculos", donde reside la "esencia" de la solución numérica y de la simulación como tal, corresponde a un esfuerzo marginal. Es justamente una de las características prevaletentes de los simuladores modernos; se torna más interesante el manejo vistoso de la pantalla y su animación que la potencia misma para represen-

tar situaciones reales.

5. SIMUN1 está disponible en discos flexibles convencionales de tres y media y de cinco y cuarto pulgadas.

ENLACE

El próximo trabajo de esta serie consiste en aplicar SIMUN1 en la simulación y análisis del segmento de proceso aquí planteado, para estudiar la estabilidad y convergencia de los cálculos en función de la inicialización y el tipo de reemplazo que se utilice; sustitución directa, Newton Raphson o relajación. El análisis se presentará para un cálculo iterativo bifuncional bivariable, mediante simulación modular secuencial.

NOMENCLATURA

S1, S2,... S5	corrientes del segmento de proceso.
AS1,..., AS5	caudal del componente A en cada corriente, en Kg/sg.
BS1,..., BS5	caudal del componente B en cada corriente, en Kg/sg.
k_1, k_2	constantes específicas de velocidad, directa e inversa, para la reacción química, en 1/sg.
δ	diferencial, usada para concentración y para tiempo.
t	tiempo, en sg.
C_A, C_B	concentración de componentes A y B, en moles/metro cúbico.
t_r	tiempo de residencia en el reactor, en sg.
V_r	volumen del reactor, en metros cúbicos.
d	densidad de la fase líquida, en kg/metro cúbico.
P_A^o, P_B^o	presiones de vapor de los componentes A y B, en Kilopascuales.
$f_A(T), f_B(T)$	funciones de temperatura, tipo Antoine, por ejemplo.
T	temperatura de operación del vaporizador, en °K.
P	presión de operación del vaporizador, en Kilopascuales.
x_A	fracción molar del componente A en la corriente S5.
Y_A	fracción molar del componente A en la corriente S4.
V	caudal de la corriente S4, en Kg/sg.

BIBLIOGRAFIA

1. Biegler, L. T. (89). Chemical Process Simulation. Chemical Engineering Progress, No. 10.
2. Bogoya, J.D. (90). Simulación de Procesos Químicos en Estado estable. Universidad Nacional de Colombia, Bogotá.
3. Clark, P. A. and A. W. Westerberg (90). Bilevel Programming for Steady State Chemical Process Design I - Fundamentals and Algorithms. Computers & Chemical Engineering, No. 1.
4. Douglas, J.M. (88). Conceptual Design of Chemical Processes. MacGraw Hill.
5. Evans, L. B. and W. D. Seider (76). The Requirements of an Advanced Computing System. Chemical Engineering Progress, No. 6.
6. Evans, L. B. (84). Organization of Computers Programs for Steady State Process Simulation: The Building Block Approach. Curso de verano. M.I.T.
7. Luyben, W. L. (90). Process Modelling, Simulation and Control for Chemical Engineers. McGraw Hill, 2a. edición.
8. Motard, R. L., M. Shacham and E. M. Rosen (75). Steady State Chemical Process Simulation. American Institute of Chemical Engineers Journal, No. 21.
9. Robertson, J. L. (89). The Ideal Process Simulator. Chemical Engineering Progress, No. 10.
10. Westerberg, A. W. (78). Process Design Strategy. Curso Latinoamericano de Diseño de Procesos por Computadora. Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química, Argentina.
11. Westerberg, A. W., H. P. Hutchison, R. L. Motard and P. Winter (79), Process Flowsheeting. Cambridge University Press.

OJO AL LIBRO

El taller de Publicaciones de la Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional se permite anunciar la reedición de los siguientes títulos:

- ◆ ESTRUCTURA DE CONCRETO I
Ing. Jorge Segura Franco
- ◆ NOCIONES GEOLOGICAS BASICAS SOBRE ROCAS PARA INGENIEROS
Ing. Armando Celis Caldas
- ◆ APUNTES DE CLASE Y PROBLEMAS RESUELTOS DE ANALISIS ESTRUCTURA I
Ing. Fernando Spinel Gómez
- HIDRAULICA EN LAS EDIFICACIONES
Ing. Armando Granados