

La computación aplicada a la educación química. Una sección de intercambio de programas entre los lectores

La simulación como herramienta de desarrollo en la Ingeniería Química

Enrique Arce Medina*

Resumen

Se presentan definiciones de la simulación y modelos, así como algunas características de simuladores que se usan en la ingeniería química. Además se hace un repaso de los usos típicos de la simulación y se dan ejemplos de simulación de procesos químicos en estado estacionario, en funcionamiento intermitente y operación dinámica. Finalmente se mencionan brevemente algunos aspectos de la planeación y desarrollo de proyectos de simulación.

Abstract

In this paper the definition of simulation and modeling is presented along with several simulators used in chemical engineering. Examples are given of the simulators for dynamic, discontinuous and steady states processes. Finally some aspects of the planning and developing of simulation projects are made.

Introducción

El gran desarrollo de la tecnología de computadoras, tanto en el *hardware* como en el *software*, provoca día con día nuevos avances y transformaciones. En particular los métodos de cálculo para el análisis, síntesis, diseño y optimización de sistemas en todas las ramas de la ingeniería han sido desplazados o modificados por el uso de diversas técnicas de simulación.

Una de las definiciones más citada de la simulación es la de Mcleod (1968): "La simulación es el desarrollo y uso de modelos como ayuda en la evaluación de ideas y el estudio de situaciones dinámicas". Para Aburdene y Kochenburger (1973): la simulación es "la construcción y el uso de modelos". La simulación en computadoras es similar a la experimentación en sistemas reales, en el sentido en que se prueban factores de entrada y una respuesta es producida. Teniendo por diferencia que, en la simulación, se emplea un modelo del sistema en lugar del sistema real.

* Escuela Superior de Ingeniería Química e Industrias Extractivas, Instituto Politécnico Nacional. Edificio 8, tercer piso, Unidad Profesional Adolfo López M. Lindavista, México, D.F. 07300

Recibido: 13 de febrero de 1995; Aceptado: 8 de mayo de 1995.

Razones para usar la simulación

Existen algunas razones por los que se recomienda el uso de la simulación (Keating, 1985):

- a) Cuando no es práctico o es muy costoso el experimentar con el sistema físico real.
- b) Para el estudio de condiciones riesgosas.
- c) Para el análisis y diseño de nuevos sistemas.
- d) Para el ensayo de estabilidad y sensibilidad al cambiar condiciones de operación o los parámetros del sistema.
- e) Para la extrapolación y el escalamiento en el diseño.
- f) Cuando no es posible obtener una solución analítica del modelo.
- g) Cuando los cambios en el sistema real ocurren muy rápida o lentamente.
- h) Para la selección de alternativas bajo situación competitiva.
- i) Para la capacitación de operadores.

Shannon (1976) indica que las razones para conducir experimentos a través de la simulación son:

1. Evaluar qué tan bien se desempeña el diseño propuesto de un sistema en términos de criterios específicos.
2. Comparar el comportamiento de dos sistemas diferentes o de varios procedimientos de operación propuestos.
3. Predecir el funcionamiento de un sistema bajo ciertas condiciones.
4. Analizar la sensibilidad y determinar qué tanto afecta el cambio de ciertas variables al desempeño global del sistema.
5. Optimizar la operación de un sistema al estimar la combinación de los valores de las variables que producen el mejor desempeño del sistema.

Definición de modelo

En la definición de la simulación la parte más importante es el modelo, específicamente la construcción del modelo. Colello *et al.* (1974) definen a un modelo como: "la representación operacional del comportamiento de un sistema, que posee los atributos esenciales del sistema físico real, en donde este último dicta los requerimientos del modelo". Sisson (1974), agrega que la función de un

modelo es: “describir la estructura de algo (real o hipotético) que al referirlo simplemente llamamos sistema y las relaciones entre las partes que lo componen”.

Resumiendo, un modelo es algo que sirve como base para reproducirlo por imitación y hablando de sistemas se trata de representar su constitución y funcionamiento.

El tipo y la cantidad de detalle, es decir el nivel de complejidad, que el modelo debe incorporar, depende de los objetivos de la simulación; si es muy elaborado puede resultar bastante complejo, mientras que si es muy simple, puede no tener la suficiente precisión para representar fielmente al sistema. Por ejemplo, si se desea construir el modelo de una planta química que muestre la distribución espacial y la apariencia de los equipos en la planta, una maqueta es un buen modelo (Naphthali, 1983). Si se requiere un modelo que muestre la secuencia de las etapas de procesamiento y el flujo de los materiales, entonces se debe dibujar, como modelo, un diagrama de flujo. Por otro lado si el modelo que se busca es una representación física, casi real de la planta pero, que opere con cantidades mucho menores de materiales que en la planta real, entonces debe construirse, como modelo, una planta piloto.

Una etapa importante de la simulación es la validación del modelo, que trata con la comprobación de que representa satisfactoriamente los fenómenos del sistema para el cual fue específicamente propuesto.

La construcción de modelos confronta a los ingenieros con una gran variedad de situaciones, como definir con precisión el problema a resolver, especificar los objetivos de la simulación, definir el sistema y sus elementos, establecer el tipo y número de pruebas para la validación, etcétera.

Los modelos de los procesos químicos

En un proceso químico se producen materiales de alto valor agregado comparado con el valor de la materia prima de la cual se obtienen dichos productos. En su paso por la planta los materiales sufren transformaciones químicas y físicas en equipos diseñados para tal efecto. Por ejemplo, en los reactores ocurren transformaciones químicas en las sustancias de entrada hacia productos. Además, antes o durante la reacción se requiere agregar o eliminar calor a los materiales y este flujo de calor se transfiere a través de intercambiadores de calor.

Una parte fundamental de los procesos químicos es la separación de los componentes a la salida de los reactores, ya sea para su purificación o para retornar al reactor parte de los reactivos que no se consumieron. Esto se efectúa en equipos de separación como los evaporadores, filtros y destiladores, entre otros. Tanto los

reactores, los cambiadores de calor y los equipos de separación se estudian como operaciones unitarias de procesamiento. Cada conjunto de ecuaciones que sirve para el cálculo de los balances de materia y energía en las operaciones unitarias representa el modelo matemático de esas operaciones unitarias.

En cada equipo los materiales van cambiando sus propiedades químicas y físicas hasta su salida del proceso como productos terminados. Los equipos están conectados en las plantas químicas por tuberías y para simular el flujo de materiales por las tuberías se usa el término corrientes de proceso. Las propiedades de interés para caracterizar a una corriente de procesos son la concentración, la temperatura, el flujo, la presión y su fase.

La secuencia de transformaciones físicas y químicas en los procesos, a su paso por los equipos, así como el flujo de los materiales se indica en un esquema llamado diagrama de proceso. El análisis, diseño, optimización y síntesis de procesos se basa en el estudio de los diagramas y la determinación de las propiedades de las corrientes. Los diferentes equipos de la planta se simulan con módulos de cómputo que modelan diferentes operaciones unitarias del proceso.

El paso de materiales en el proceso puede ser de dos formas: flujo continuo o intermitente. En el primer caso los materiales fluyen entre los equipos de manera ininterrumpida, procesos como las refinerías, la fabricación del papel y la producción de la azúcar son de este tipo. En el segundo caso la transformación de los materiales se hace por lotes en los equipos, es decir, el flujo entre los equipos se interrumpe, por ejemplo en la fabricación del yogurt, en la producción de algunas medicinas, etcétera.

Los procesos continuos

Operación en estado estacionario

Cuando las propiedades de las corrientes se mantienen invariables en el tiempo, se dice que el proceso opera en estado estacionario o en régimen permanente.

La simulación de los equipos requiere los modelos matemáticos de las transformaciones que ocurren dentro de tal equipo, se logra con la determinación de los balances de materia y energía (Arce, 1991). Los modelos se expresan por ecuaciones algebraicas que por lo general son no lineales.

La simulación puede efectuarse a través de simuladores de uso específico o de uso general. En los primeros se elaboran los modelos de los equipos y procesos para casos particulares, los programas resultantes sólo pueden usarse para esos casos.

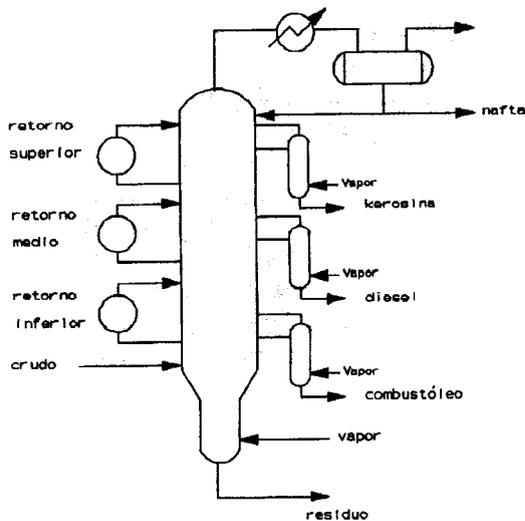


Figura 1. Columna de destilación primaria del petróleo.

En los simuladores de uso general se cuenta con un conjunto de módulos que calculan las operaciones unitarias, además se tiene un conjunto de procedimientos para hacer los cálculos de propiedades cinéticas y termodinámicas que se requieran. Para la realización de los cálculos se dispone de métodos numéricos en procedimientos aparte y existen protocolos de comunicación para el acopio de datos que por lo general son de tipo gráfico. Ejemplos de simuladores de este tipo son el HYSIM, el CHEMCAD, el PRO/II y el ASPEN PLUS.

La principal ventaja de los simuladores de uso general sobre los de uso específico es su facilidad de empleo además evitar la ardua labor de codificar los modelos de

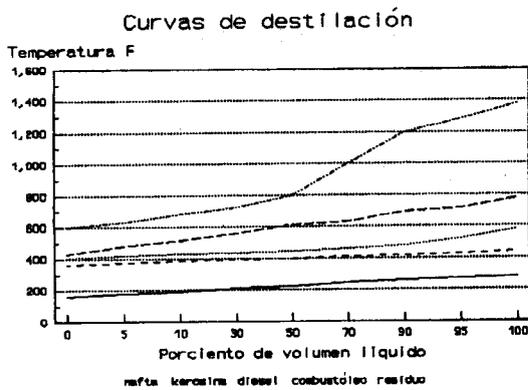


Figura 2. Curvas de destilación de la columna primaria.

las operaciones unitarias y su validación y con ellos construir el modelo completo de la planta según el diagrama de proceso.

En los simuladores de uso general, el diagrama de proceso se construye directamente en la pantalla del monitor, uniendo las figuras que representan a los equipos. Los datos de las sustancias a emplear y los parámetros de operación de los equipos se alimentan vía menús y ventanas. Una vez probado el modelo de una planta se pueden hacer cambios fácilmente y determinar el efecto de estos cambios casi de manera instantánea con la simulación.

Ejemplo de simulación en estado estacionario

La optimización de la operación de las refinерías de petróleo requiere el conocimiento preciso de las condiciones de la carga a la columna de destilación primaria. Frecuentemente se presentan variaciones en la calidad del petróleo crudo que entra a la columna primaria, debido a múltiples causas, entre las más comunes, se tienen: por la estratificación en los tanques de alimentación, por errores en la caracterización de laboratorio o por que se usan mezclas provenientes de diferentes fuentes de crudo.

En la figura 1 se muestra el diagrama de la columna primaria. En la planta se tienen múltiples sensores de temperatura y flujos que miden el comportamiento de la unidad, en la figura 2 se presentan las curvas de ebullición para los cortes laterales en la columna.

Al usar una simulación de la columna se compara con los valores medidos de la planta y se busca por métodos de optimización la conciliación entre lo predicho y lo observado. Con la simulación se determinan los ajustes requeridos para la adecuada operación de la planta tomando en cuenta las variaciones en la carga y así poder llevar la unidad a una operación óptima.

Operación en estado dinámico

Por otra parte, en oposición a los procesos de estado estacionario se tienen los procesos dinámicos cuyas variables cambian con el tiempo; en un sistema dinámico sus estados son transitorios, por ejemplo, el estado meteorológico de una región siempre es transitorio. Los modelos dinámicos se representan por ecuaciones diferenciales.

Durante el arranque o paro de las plantas de proceso se presentan cambios en los flujos que dependen de la naturaleza dinámica de las transformaciones de masa, energía y flujo. El estudio de estos cambios se hace por simuladores como el SPEEDUP y el PROTISS. Un amplio campo de la simulación de procesos dinámicos es el de

análisis y diseño de sistemas de control de procesos.

Ejemplo de simulación dinámica

Godfarb y Hinson (1995), reportan la simulación de una planta recuperadora de fluidos de pozos de mar en el norte de Europa. El fluido contiene petróleo, gas y agua, los cuales son separados en tres niveles de presión. La separación de presión alta ocurre a 65 bars, la intermedia a 20 y la de baja presión a 2 bars, ver figura 3. El gas separado se envía a recompresión y el agua es tratada para recuperar el aceite.

La recompresión del gas se efectúa en cuatro etapas mediante compresores centrífugos. En la cuarta etapa se usa un deshidratador con glicol para eliminar el agua remanente, y el gas, a 175 bars, sale para su venta o se inyecta a pozos.

La simulación de la planta requiere dos trenes de separación de aceite, tres etapas de recompresión, el deshidratador, el sistema de monitoreo y dispositivos de salida de productos para la venta así como un sistema de reinyección. Los diferentes equipos de la planta se simulan con módulos de cómputo que modelan diferentes operaciones unitarias del proceso. Los principales módulos de cómputo son: 17 tanques de separación de fases, 6 compresores centrífugos, una turbina de gas de velocidad variable, 2 motores de velocidad constante, 10 intercambiadores de calor, más de 60 lazos de control, 80 válvulas de control, etcétera. La simulación incluye 1,700 bloques de simulación y 454 corrientes con multicomponentes.

La simulación se efectúa con el simulador PROTISS que tiene la capacidad de simular procesos a régimen permanente y dinámico. Además de determinar políticas de operación con el modelo se realiza el entrenamiento a operadores de la planta.

Los procesos intermitentes

En un proceso intermitente los modelos son discretos, es decir, hay valores de la función sólo en ciertos valores de las variables (Arce, 1988). Los modelos discretos aleatorios se representan por funciones de densidad probabilística como la distribución de Gauss o la distribución exponencial. Para la elaboración de estos se fija la atención no en los valores específicos que tienen las corrientes en sus estados sucesivos, sino en las probabilidades de transición de un estado a otro y los tiempos de duración. El método más empleado para simular estos modelos es el de Monte Carlo que usa una técnica de muestreo con números aleatorios. Los simuladores BATCHES y SLAM usan este método para simular procesos intermitentes aleatorios.

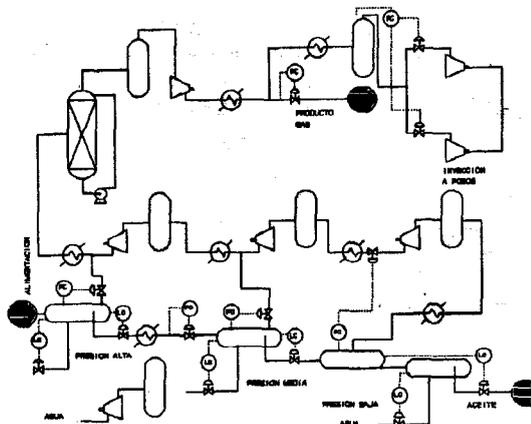


Figura 3. Proceso de separación de aceite, agua y gas.

Ejemplo de simulación discreta

En el proceso de fabricación de medicinas de la figura 4, el flujo de materiales es intermitente. En el tanque de dilución el motor de agitación arranca una vez que los materiales terminan de cargarse por la banda transportadora. El tiempo requerido para la dilución de materiales no es fijo, varía alrededor de un valor promedio y en tanto no termina la dilución no salen materiales.

La variación en los tiempos de operación de los procesos intermitentes es de naturaleza aleatoria.

En la figura 5 se muestra la secuencia de operaciones de la planta de la figura 4. Las barras horizontales, como en los diagramas de Gantt, denotan los tiempos requeridos para cada actividad y en ellos se nota cierta variación en su duración.

Los problemas más comunes en los procesos intermitentes son los congestionamientos y retrasos que ocurren cuando una actividad toma un tiempo mayor o menor del promedio para su terminación.

Debido a la presencia de factores fortuitos se obser-

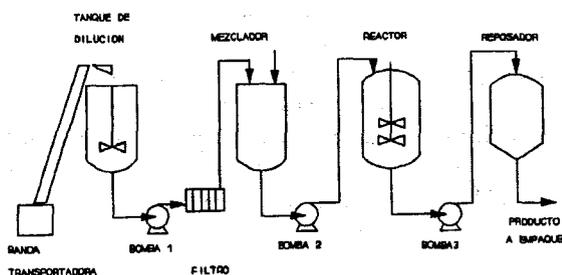


Figura 4. Diagrama de una planta de medicinas.

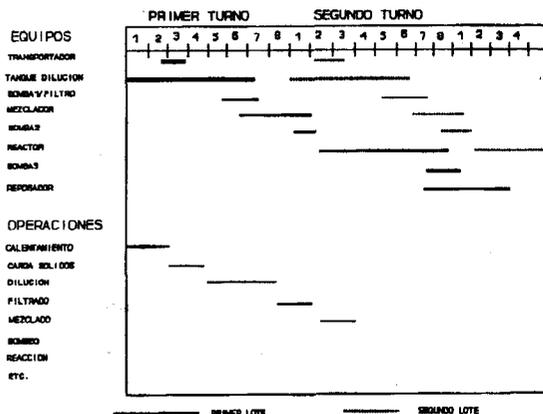


Figura 5. Duración de actividades de la planta de la figura 4.

van variaciones de un lote a otro. Por ejemplo en el proceso de la figura 4 cuando el reactor tenga una duración mayor al promedio y los materiales en el mezclador ya están listos para salir, el flujo se bloquea teniendo un congestionamiento. Uno de los principales usos de la simulación es determinar el efecto de estos factores en la producción, disminuir la ocurrencia de congestionamientos y retrasos y efectuar corrección en la planta para aumentar la productividad.

Los factores que limitan la capacidad de los procesos intermitentes son: la capacidad de los equipos, la planeación inadecuada o la operación deficiente. La simulación empleada para mejorar la productividad es una herramienta poderosa que permite evaluar las actividades que mejoren la planta; por ejemplo la adición de equipos u operadores, la redistribución de actividades, el rediseño de la planta, probar nuevas tecnologías, etcétera.

La planeación y desarrollo de la simulación

La implementación de un proyecto de simulación comprende como todo proyecto una serie de actividades que deben planearse y evaluarse para la exitosa realización del proyecto. Empezando por preguntarse ¿es o no necesaria la simulación, cuáles serían los objetivos de la simulación, quién la haría, si se compra, o alquila un simulador, o se elaboran los programas en la compañía? Debe definirse también el grado de complejidad del modelo, la exactitud requerida, la cantidad de datos requeridos para validar y verificar el funcionamiento del modelo, etcétera. Finalmente establecer el número de corridas requeridas.

Muchos de los proyectos de simulación no se pueden realizar en los simuladores arriba mencionados; por ejemplo, la simulación de la dispersión de las emisiones contaminantes en la atmósfera, el moldeo soplado de botellas con base en polímeros, la corrosión y desgaste simultáneo de piezas metálicas por ataque de medios ácidos a altas temperaturas, etcétera. Problemas que deben resolverse con programas de simulación elaborados *ad hoc*.

Conclusiones

La realización de un proyecto de simulación sigue un proceso progresivo que empieza en el planteamiento del problema y los objetivos. Después se hace el acopio de datos, la elección, la construcción y la validación de los modelos. Luego se pasa a una etapa intensa de experimentación —en la computadora— de situaciones que alternan aciertos y errores hasta llegar al logro de los objetivos.

El potencial de la simulación como herramienta de desarrollo ha sido probado muchas veces en la industria química, y recientemente con los avances en la capacidad de memoria y rapidez de las microcomputadoras, la simulación está casi al alcance de todos. Aunado a esto el desarrollo de *software*, cada vez más poderoso, hace de la simulación una gran herramienta para beneficio de la ingeniería. ■

Referencias

Aburdene M.E. y R.J. Kochenburger, "On computer simulation of social systems", *Proceedings of the Fourth Annual Pittsburgh Conference*, April 1973.

Arce-Medina E., "Balance: A material balance program simulator". *Proceedings of the Fourth Chemical Congress of North America*, New York, USA, Agosto 1991.

Arce-Medina E., "Improvement to Batch Chemical Plants Through Simulation", *Proceedings of the Third Chemical Congress of North America*, Toronto, Canada, Junio 1988.

Colello, A.M., M.J.O. Sullivan y D.F. Cartino, *Systems Simulation*, Lexington Books, New York, 1974.

Godfarb, S. y F. Hinson, "The PROTISS dynamic simulation environment for design and operational analysis", *Proceedings of the Computers Conference III*, Houston Tx., febrero 14, 1995.

Keating B. "Simulations: Put the real world in your computer", *Creative Computing*, p. 56-64, noviembre 1985.

Mcleod, J., *Simulation. The modeling of ideas and systems with computers*, McGraw-Hill, 1968.

Naphtali, L.M. y Z.S. Naphtali. "Modeling: The rules of the game", *Chemtech*, p. 95-99, febrero 1983.

Shannon, R.E., "Simulation modeling and methodology", *Winter Simulation Conference*, p. 9-15, diciembre 1976.

Sisson, R.L. *Introduction to decision models: a guide to models in governmental planning and operations*, Washington Environmental Research Center, 1974.