

La simulación de procesos en ingeniería química

García González Juan Manuel

Ibarra Castro Pablo

Félix Flores Ma. Guadalupe

Ríos Moreno Gustavo

Unidad Académica de Ciencias Químicas

Universidad Autónoma de Zacatecas

jmgarcia@uaz.edu.mx

Introducción

La necesidad de nuevos productos, así como, una nueva cultura del cuidado del medio ambiente, del ahorro y optimización de energía, el uso racionalizado de combustibles, etcétera hace necesario que la ingeniería química busque alternativas económicas y factibles para la solución de estos nuevos retos. La simulación de procesos son una herramienta eficaz y efectiva para el análisis, la síntesis y la optimización de proceso, lo que ayuda proponer las diferentes alternativas para resolver estos retos modernos.

El desarrollo de simuladores de procesos a nivel mundial se ha desarrollado a pasos agigantados. Principalmente debido a tres aspectos; a) Computadoras con procesadores de mayor velocidad, interfaces gráficas que facilitan el manejo de gráficos, almacenamiento de gran cantidad de datos. b) Lenguajes de programación estructurados que facilitan que con pocas sentencias se realicen de forma más eficiente la solución de sistemas de ecuaciones y la misma simulación. c) El cálculo de propiedades de mezclas y componentes con menor desviación de los datos obtenidos experimentalmente.

La ventaja que presenta la simulación de procesos es debido a que a partir de datos reales (los que se utilizaran para obtener un modelo matemático si no existe y/o validar los resultados obtenidos al resolver el modelo o la simulación en si) se pueden obtener información que permitirán el análisis, la síntesis y la optimización, además no se requiere una gran cantidad de experimentos (lo

que incrementa el costo y desestabiliza la operación de cualquier planta de proceso) ya que si el modelo utilizado es el adecuado, la reproducibilidad de resultados es excelente.

Palabras clave: Simulación, Ingeniería Química, Procesos.

Objetivo

El principal objetivo de este trabajo es el de presentar la simulación como una herramienta importante para la ayuda de toma de decisiones en el diseño, operación y optimización de procesos químicos.

Antecedentes

La simulación desde el punto de vista de la ingeniería química es la solución de las ecuaciones de balance de materia y energía para procesos químicos en estado estacionario o dinámico. Así como del dimensionamiento y la obtención de costos de los equipos involucrados en un proceso. Por último el efectuar la evaluación preliminar del proceso¹.

Es sabido que en la simulación convergen diversas corrientes del saber, como es 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, etcétera.²

Los simuladores se pueden clasificar en; a) Simuladores en estado estacionario (las propiedades de reactivos, productos o mezclas no varían con el tiempo) o Simuladores en estado dinámico (las propiedades varían con el tiempo); b) Simuladores de uso específico (los elaborados para una operación unitaria específica y un determinado rango de operación, ejemplo Madsed, Reformación, FCC, etc.) o Simuladores de uso general (contienen en su

estructura varias operaciones unitarias las cuales pueden ser interrelacionados entre sí para simular un proceso, ejemplo Aspen, Hysys, Chemcad, PRO II, etc.).

El reto del desarrollo tecnológico para el desarrollo de nuevos procesos y mejora de los existentes fue la principal motivación para el desarrollo de la simulación de procesos. El comienzo fue lento y de dio en forma conceptual, experimental y académica en algunas compañías y universidades de Estados Unidos, Canadá y Europa. Entre los años 1966 y 1968, aparecieron los primeros paquetes de simulación de procesos, encaminados a la realización de balances de materia y de energía para redes de procesos en estado estacionario. Los primeros paquetes medianamente difundidos fueron el PACER y el CHESS (desarrollados en universidades norteamericanas) y el FLOWTRAN (desarrollado por Monsanto).

Durante la década de los años setentas se presentó una evolución importante para alcanzar mayor estabilidad, sofisticación de cálculos y versatilidad; se refinaron los modelos de estimación de propiedades fisicoquímicas, se incluyeron criterios de rasgado y convergencia en corrientes de recirculación, se aumentaron las unidades de proceso, se flexibilizó la síntesis de variadas redes de proceso y se incluyeron criterios de optimización. El producto del anterior desarrollo quedó plasmado en los paquetes CONCEPT y SYMBOL (de la firma CADCO), CHEMSHARE, CHEMTRAN y FLOWTRAN (de Monsanto), PROCESS (de Simulation Science), PROSPRO (del Instituto INTEC) y además otros como GEMCS, GEPOS, PDA y FLOWPACK.

En los 80's surgieron las compañías elaboradoras de software, que desarrollaban paquetes de simulación para su comercialización, pero con la desventaja de que la entrada y la salida de la información eran rígidas y se presentaban en forma de listado de difícil interpretación. A finales de los 80's se inició el desarrollo de paquetes de simulación interactivos (Chemad, Microchess, Hysys, Aspen, etc.) y su comercialización marcó el comienzo de un uso más intensivo y generalizado en la industria y en la universidades. A partir de 1991 se

inicia la comercialización de paquetes de simulación dinámica y de integración de energía.

Metodología

Los simuladores de procesos pueden dividirse según la filosofía bajo la cual se plantea el modelo matemático que representa el proceso a simular; a) Simuladores globales u orientados a ecuaciones. b) Simuladores secuenciales modulares. c) Simuladores híbridos o modular secuencial-simultaneo. Bajo el enfoque de la simulación global u orientada a ecuaciones, se plantea el modelo matemático que representa al proceso construyendo un gran sistema de ecuaciones algebraicas que representa a todo el conjunto o planta a simular. De esta forma el problema se traduce en resolver un gran sistema de ecuaciones algebraicas, por lo general altamente no lineales.

El principal problema asociado a la filosofía de resolución global u orientada a ecuaciones es la convergencia del sistema y la consistencia de las soluciones que se encuentran. Ya que pueden producir múltiples soluciones.

Las principales características de los simuladores globales u orientados a ecuaciones son:

- Cada equipo se representa por las ecuaciones que lo modelan. El modelo es la integración de todos los subsistemas.
- Desaparece la distinción entre variables de proceso y parámetros operativos, por lo tanto se simplifican los problemas de diseño.
- Resolución simultánea del sistema de ecuaciones algebraicas (no lineares) resultante.
- Mayor velocidad de convergencia.
- Necesita una mejor inicialización (mejor cuanto mayor sea el problema a resolver).

- A mayor complejidad, menor confiabilidad en los resultados y más problemas de convergencia (soluciones sin sentido físico).
- Más difícil de usar por "no especialistas".

Los simuladores modulares secuenciales se basan, en módulos de simulación independientes que siguen aproximadamente la misma filosofía que las operaciones unitarias, es decir, cada equipo: bomba, válvula, intercambiadores, etc.; son modelados a través de modelos específicos para los mismos y además, el sentido de la información coincide con el "flujo físico" en la planta. En esta filosofía se tiene como ventaja el hecho que cada sistema de ecuaciones es resuelto con una metodología que resulta adecuada para el mismo, ya que es posible analizar bajo todas las circunstancias posibles, el comportamiento del método de resolución propuesto, esto es sistemas ideales, no ideales, topología diversas del equipo, distintas variantes, etc.

Las principales características son:

- Biblioteca de módulos
- Flowsheet: Equivale a un grafo orientado o digrafo
- Orden de resolución fijo
- Tres niveles de iteración
 1. Cálculos fisicoquímicos.
 2. Módulos en sí (ej. flash, columna, etc).
 3. Variables de iteración (reciclos).
 4. Optimización
- Modelos individuales resueltos eficientemente.
- Fácilmente comprendido por ingenieros "no especialistas en simulación".
- Métodos de convergencia robustos
- La información ingresada por el usuario resulta fácilmente accesible e interpretable.
- Los problemas de diseño son más difíciles de resolver.

- Se incrementa la dificultad cuando se plantea un problema de optimización ya que funcionan como cajas negras.
- Poco versátiles, pero muy flexibles, muy confiables y bastante robustos.

Los simuladores híbridos son aquellos que se forman de combinar la estrategia modular y la orientada a ecuaciones de forma tal de aprovechar los aspectos positivos de ambas metodologías lo máximo posible. Para ello se selecciona un grupo de variables sobre las cuales se procederá según la filosofía global, esto es, se las resolverá simultáneamente, mientras que para el resto se mantiene la filosofía modular, es decir, se trata de encontrar una secuencia acíclica, que provea por su cálculo, en cada iteración, los valores de las variables a resolverse simultáneamente. Es por ello que a esta filosofía también se la conoce como two-tear o de dos niveles jerárquicos, ya que se trabaja en uno con las variables tratadas simultáneamente, y en el otro secuencialmente. Otro nombre con el que se conoce este enfoque es modular secuencial-simultáneo.

Resultados

Aplicación de la simulación de procesos

La simulación de procesos químicos es una herramienta que se ha hecho indispensable para la solución adecuada de los problemas de procesos. Permite efectuar el análisis de plantas químicas en operación, de igual forma, se emplea para el diseño de nuevas plantas o equipos. El uso de los simuladores se realiza en el área ambiental, con los ingenieros de planta, en el área de alimentos, polímeros, etc. En el desarrollo de un proyecto se emplea para probar la factibilidad técnica y económica de este. En la toma crítica de decisiones se prueban diferentes alternativas de procesos y condiciones de operación. La simulación proporciona todos los datos de proceso requeridos para el diseño detallado de los diferentes equipos y para la construcción de plantas a nivel banco, piloto o industrial, que después de construirlas y operarlas

servirán para retroalimentar el modelo utilizado o para validarlo. De acuerdo a Martínez et al (2000) Hay tres tipos de modelos que pueden resolverse por medio de la simulación:

1. Análisis de un proceso
2. Diseño del proceso
3. Optimización del proceso

Ventajas y Desventajas de la Simulación

Ventajas

1. Es un proceso relativamente eficiente y flexible.
2. Puede ser usada para analizar y sintetizar una compleja y extensa situación real, pero no puede ser empleada para solucionar un modelo de análisis cuantitativo convencional.
3. En algunos casos la simulación es el único método disponible.
4. Los modelos de simulación se estructuran y nos resuelve en general problemas trascendentes.
5. Los directivos requieren conocer como se avanza y que opciones son atractivas; el directivo con la ayuda del computador puede obtener varias opciones de decisión.
6. La simulación no interfiere en sistemas del mundo real.
7. La simulación permite estudiar los efectos interactivos de los componentes individuales o variables para determinar las más importantes.
8. La simulación permite la inclusión de complicaciones del mundo real.

Desventajas

1. Un buen modelo de simulación puede resultar bastante costoso; a menudo el proceso de desarrollar un modelo es largo y complicado.

2. La simulación no genera soluciones óptimas a problemas de análisis cuantitativos, en técnicas como cantidad económica de pedido, programación lineal. Por ensayo y error se producen diferentes resultados en repetidas corridas en el computador.
3. Los directivos generan todas las condiciones y restricciones para analizar las soluciones. El modelo de simulación no produce respuestas por si mismo.
4. Cada modelo de simulación es único. Las soluciones e inferencias no son usualmente transferibles a otros problemas.
5. Siempre quedarán variables por fuera y esas variables (si hay mala suerte) pueden cambiar completamente los resultados en la vida real que la simulación no previó... en ingeniería se "minimizan riesgos, no se evitan".

Conclusiones

- ❖ La simulación facilita los objetivos del diseño moderno: A) Diseñar para conseguir una fabricación a costo competitivo. B) Diseñar en orden la utilización real en servicio. C) Diseñar bien al primer intento.
- ❖ La simulación ahorra tiempo y dinero, tanto en el diseño de nuevas plantas cómo, en la optimización de las existentes.
- ❖ El costo inicial de la simulación es alto (software y equipo de computo) pero a la larga es rentable y recuperable la inversión.
- ❖ Se requieren conocimientos en fenómenos de transporte, termodinámica y operaciones unitarias para que la persona que utiliza el simulador pueda interpretar los resultados.
- ❖ Los simuladores facilitan el aprendizaje de los alumnos y sus tareas.

Bibliografía

- Martínez V. H. et al. "Simulación de procesos en ingeniería Química", Ed. Plaza y Valdéz, 1era ed., Cap. 2, 2000. ISBN 968-856-755-8
- Scenna N. J. et al." Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos", Capítulo 5 y 6. 1999
- Law A. M. y Kelton W. D., "Simulation modeling and analysis", Ed. Mc. Graw Hill, 3era. Ed., Cap 1. 1999
- García G. J. M. et. al. "Antología del Curso de Ingeniería de Procesos II", PAIQ de la UACQ de la UAZ., Capítulos del 3 – 7, 2008
- Chung C. A. "Simulation Modeling Handbook; A Practical Approach" , CRC Press, 1era. Ed., 2003 ISBN 0-8493-1241-8
- Luyben W.L., "Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineering", Ed. Mc Graw Hill, 2da. Ed., Capítulos 4 y 5. 1999 ISBN 0-07-039159-9.