

# Conceptos básicos de modelado de procesos

<b>Apellidos, nombre</b>	Torregrosa López, Juan Ignacio (jitorreg@iqn.upv.es)
<b>Departamento</b>	Ingeniería Química y Nuclear
<b>Centro</b>	Universitat Politècnica de València



## 1 Resumen de las ideas clave

En este artículo se presenta una introducción a los conceptos básicos de modelado de procesos.

## 2 Introducción

El modelado de procesos es una tarea habitual del ingeniero. En particular, los modelos de procesos químicos son necesarios para la descripción del comportamiento del proceso, su simulación y control.

En este artículo docente se introducen los conceptos básicos de modelado de procesos químicos que ha de tener un ingeniero para afrontar el desarrollo de esta tarea. A continuación, se describe la utilidad de este artículo docente, los conocimientos previos requeridos, el esquema de contenidos y la secuencia de aprendizaje.

### 2.1 Utilidad

Al acabar esta sección el alumno habrá repasado los conceptos básicos de modelado procesos en ingeniería.

### 2.2 Conocimientos previos

Para obtener el mayor beneficio de este artículo docente, es necesario tener conocimientos básicos de procesos químicos.

### 2.3 Esquema de contenidos

A continuación, se presenta el esquema de los contenidos de este artículo docente.

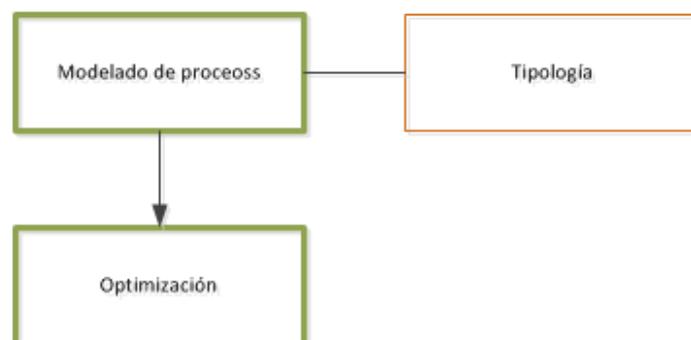


Figura 1. Esquema de contenidos

### 2.4 Secuencia de aprendizaje

Inicialmente se definirá el concepto de modelo de un proceso. Se estudiarán distintas tipologías de procesos. A continuación, se establecerá la necesidad de optimizar los modelos y mencionarán las distintas herramientas disponibles para ello.

### 3 Objetivos

Una vez el alumno estudie con detenimiento este artículo docente, será capaz de:

- Reconocer un modelo matemático de un proceso.
- Identificar la tipología de un modelo.
- Identificar las herramientas de optimización de modelos.

### 4 Modelado de procesos

El modelado de procesos implica la construcción de un modelo matemático mediante la descripción de sus relaciones físicas y química fundamentales. No es requisito especificar cómo han de ser resueltos.

Schlesinger (1980) [1] propone la metodología de constatación de modelos en la siguiente figura.

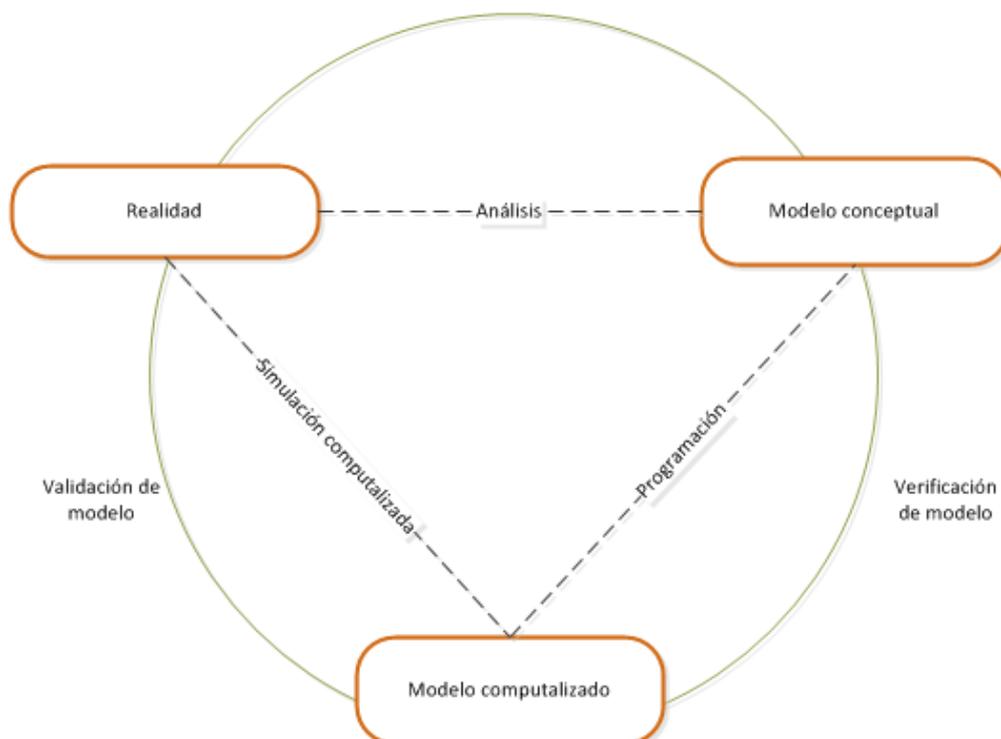


Figura 2. Metodología de modelado. [1]

La credibilidad del modelo es una característica fundamental. La verificación y validación del mismo son imprescindibles.

Los modelos ayudan en la toma de decisiones para conseguir que sean mejores, más rápidas y más seguras reduciendo con ello la incertidumbre.

Se ha realizado una gran cantidad de esfuerzos para desarrollar modelos nuevos y mejorados para el cálculo de propiedades. Esto incluye, por ejemplo:



- Propiedades termo-físicas como presiones de vapor, viscosidades, datos calóricos, etc. de los componentes puros y mezclas.
- Propiedades de los diferentes aparatos como reactores, columnas de destilación, bombas, etc.
- Reacciones químicas y cinéticas
- Datos ambientales y de seguridad

## 4.1 Tipología de modelos

Existen dos tipos principales de modelos:

1. Basados en ecuaciones bastante simples y correlaciones donde los parámetros se ajustan a los datos experimentales
2. Basados en métodos predictivos donde las propiedades son estimadas.

Las ecuaciones y correlaciones se prefieren debido a que describir la propiedad (casi) exactamente.

Para obtener parámetros fiables, es necesario disponer de datos experimentales que generalmente se obtienen a partir de bancos de datos o, si no hay datos a disponibles, a partir de las mediciones.

El uso de métodos de predicción es mucho más económico que el trabajo experimental o el uso de las bases de datos. A pesar de esta ventaja, estos métodos introducen errores mayores que las correlaciones obtenidas a partir de datos experimentales. Es por ello que las propiedades predichas normalmente sólo se utilizan en las etapas tempranas del proceso de desarrollo para así poder encontrar soluciones aproximadas primero y excluir las vías equivocadas.

En función del procesos que se desea modelar, existen modelos estáticos y modelos dinámicos.

Los modelos estáticos suelen ser más sencillos que los procesos dinámicos. Los modelos dinámicos contienen términos diferenciales para definir el dinamismo del proceso.

	<p><b>Actividad 1:</b></p> <p>¿Cuál de los siguientes modelos es dinámico? ¿Por qué?</p> <p>Modelo A: <math>\frac{dV}{dt} = F_e - k\sqrt{h}</math></p> <p>Modelo B: <math>F_e = k\sqrt{h}</math></p> <p>Encontraras la respuesta a esta actividad al final del artículo.</p>
---	--

## 5 Optimización de modelos

La obtención de modelos fiables puede requerir del uso de algoritmos de optimización que permitan conocer los parámetros del proceso a partir del modelo propuesto y los datos experimentales que se manejan.

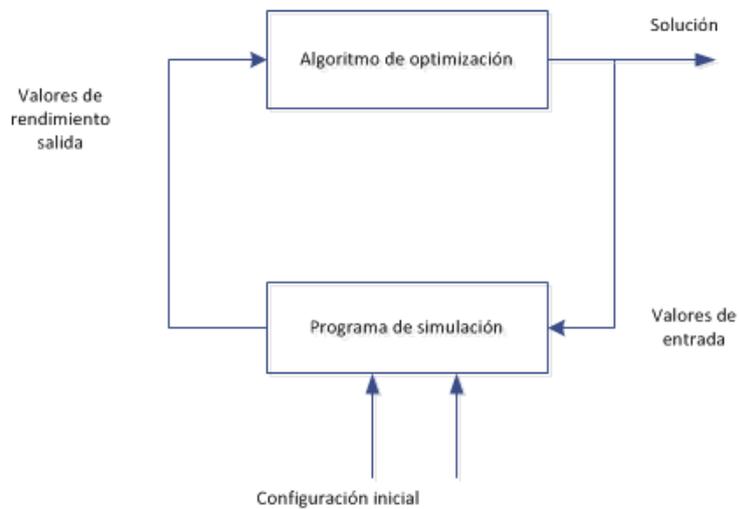


Figura 3. Dinámica de optimización de modelos.

Existe una amplia variedad de estrategias para el desarrollo de algoritmos de optimización. Los algoritmos empleados con mayor frecuencia son:

- Forward problema, o algoritmo de avance
- Inverse problema, o algoritmo inverso

Las siguientes figuras presentan estos algoritmos.

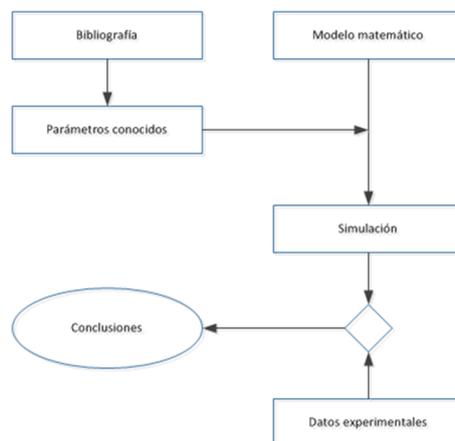
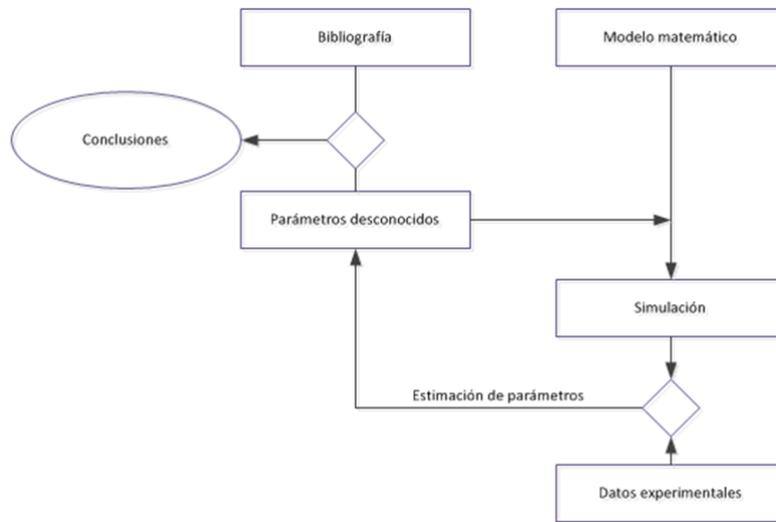


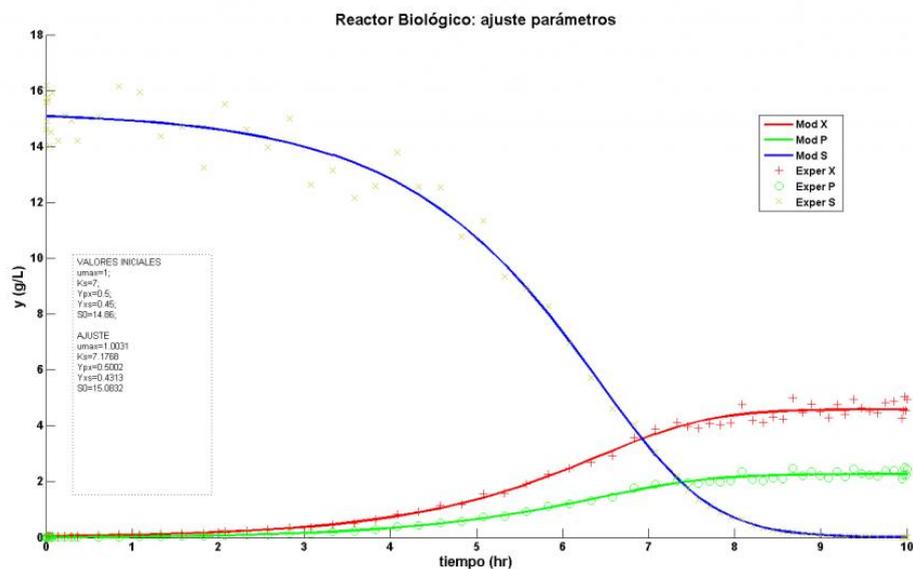
Figura 4. Algoritmos de optimización: forward problem



**Figura 5. Algoritmo de optimización Inverse problem.**

A modo de ejemplo de aplicación de estos algoritmos, en la siguiente figura se muestran la comparación de los valores experimentales y las curvas obtenidas a partir de un modelo matemático que describe el comportamiento de un reactor biológico.

Los parámetros son calculados a partir de la aplicación de algoritmos de optimización ("inverse problem").



**Figura 6. Modelado de un reactor biológico. Optimizado mediante 'inverse problem'.**



## 6 Cierre

El modelado de procesos es una herramienta de valor incalculable en la ingeniería química.

En este artículo, se han reflejado los conceptos básicos introductorios sobre qué es un modelo y su utilidad.

### 6.1 Respuestas a actividades

Actividad 1. El modelo A es dinámico. La expresión matemática indica que es un modelo que varía en función del tiempo.

## 7 Bibliografía

[1] Schlesinger, S. (1980), "Terminology for model credibility", *Simulation*, Vol. 34, pp. 101-5. Ed. Síntesis. ISBN 8497564049

### 7.1 Referencias de interés

Ollero de Castro, P. et al. (2006) Estrategias de modelado, simulación y optimización de procesos químicos.

Esparza Peidro, A. & Senant Español, J.S (2007) Modelado y control de procesos químicos. Ed. UPV.