

Conceptos básicos de simulación de procesos

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



1 Resumen de las ideas clave

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

2 Introducción

La simulación emplea el modelo matemático de los procesos a analizar.

Es una importante herramienta de toma de decisiones, ya que permite experimentar y predecir el comportamiento de un sistema o proceso ante distintos escenarios.

2.1 Utilidad

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

2.2 Conocimientos previos

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

2.3 Esquema de contenidos

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

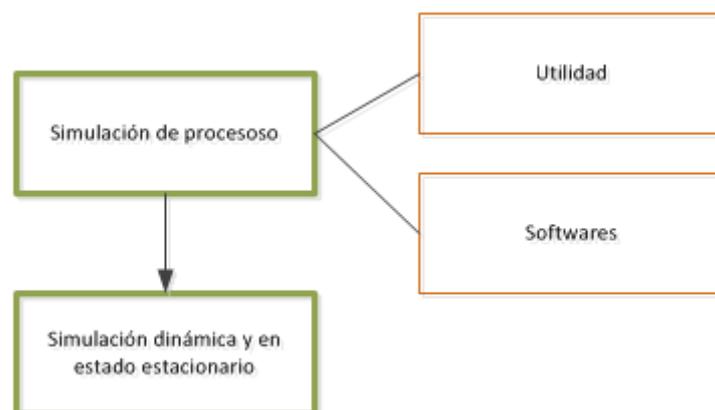


Figura 1. Esquema de contenidos

2.4 Secuencia de aprendizaje

Inicialmente se definirá el concepto de simulación de procesos. Se expondrá su utilidad y las herramientas disponibles para trabajar en simulación.

Por último, se definirán los dos tipos de simulaciones de procesos habituales.



3 Objetivos

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

- Definir adecuadamente el concepto de simulación
- Elegir la herramienta más adecuada ante la necesidad de realizar una simulación determinada.

4 Simulación de procesos

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.

Pero la simulación no sólo se aplica en las industrias químicas, sino también a multitud de procesos industriales y sistemas naturales.

La simulación de procesos conlleva la computación mediante software de los modelos que describen los procesos químicos, físicos, biológicos, así como otros procesos técnicos y operaciones unitarias. Los requisitos básicos para su aplicación requieren un conocimiento profundo de las propiedades químicas y físicas de los componentes puros y mezclas, de las reacciones, y de los modelos matemáticos que, en combinación, permiten el cálculo de un proceso usando la computación.

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.

4.1 Utilidad 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. En este ámbito, esta herramienta permite analizar, diseñar y optimizar procesos de interés en la Ingeniería Química y Ambiental.

Los tres tipos de modelos que pueden resolverse por medio de la simulación son:

- Análisis de un proceso: sirve para predecir el comportamiento óptimo del proceso mediante la computación de las ecuaciones de diseño obtenidas a partir del modelado previo del mismo. Además permite la interpolación y extrapolación - dentro de ciertos límites - así como la búsqueda de las condiciones fuera de la gama de propiedades conocidas.
- Diseño del proceso: 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.
- Optimización del proceso: facilita la optimización del modelo de acuerdo a los datos experimentales obtenidos de la observación del proceso.

En la simulación de procesos siempre se utilizan modelos que introducen aproximaciones y suposiciones, pero facilitan la descripción de una propiedad en un



amplio intervalo de propiedades (temperaturas y presiones, por ejemplo) que puede no estar cubierto por los datos reales.

La simulación de procesos también ha alentado el desarrollo de modelos matemáticos en el campo del cálculo numérico y la resolución de problemas complejos.

4.2 Software de simulación

El software de simulación de procesos describe, de manera más o menos explícita, los procesos en forma de diagramas de flujo donde las operaciones unitarias se colocan y se conectan las corrientes de intercambio de materiales y productos. El software tiene que ser capaz de resolver los balances de masa y energía para encontrar un punto de funcionamiento estable.

El desarrollo de modelos para una mejor representación de los procesos reales es el núcleo del desarrollo del software de simulación. El desarrollo del modelo implica la participación no sólo de la ingeniería química o la ambiental, sino también en la ingeniería de control así como de las técnicas de simulación matemática. La simulación de procesos es, por tanto, uno de los pocos campos donde los científicos y profesionales de la química, la física, la informática, las matemáticas, y de varios campos de la ingeniería trabajan juntos.

Los simuladores se pueden clasificar en:

- Simuladores con modelos previamente programados: en estos simuladores, el usuario utiliza paquetes de software de uso específico (los elaborados para una operación unitaria específica y un determinado rango de operación o de uso general que contienen en su estructura varias operaciones unitarias las cuales pueden ser interrelacionados entre sí para simular un proceso (por ejemplo [Aspen Hysys®](#), [Aspen Plus®](#), [Chemcad®](#), [COCO®](#), etc.) que ya incluyen la programación del modelo. Aunque son poco versátiles (ya que funcionan como cajas negras) se trata de programas muy confiables y robustos, donde el usuario no tiene porqué ser un especialista en simulación. En general, el valor de las licencias es elevado, aunque existen programas gratuitos.
- Simuladores programables: en estos, el usuario programa sus propios modelos mediante el uso de paquetes de software de cálculo matemático ([Mathematica®](#), [Matlab®](#), [Scilab®](#), etc.). Esto permite al usuario aplicar sus propios modelos e interactuar de una forma más profunda con los mismos. Se dispone de una mayor libertad para simular aunque como contrapartida requiere tanto de un mayor conocimiento de los principios científicos como de manejo de lenguajes de programación. En general, el valor de las licencias es accesible y existen programas muy fiables y gratuitos.

La siguiente figura presenta, como ejemplo de simulador pre-programado, una composición de los resultados obtenidos mediante [ChemSep®](#).

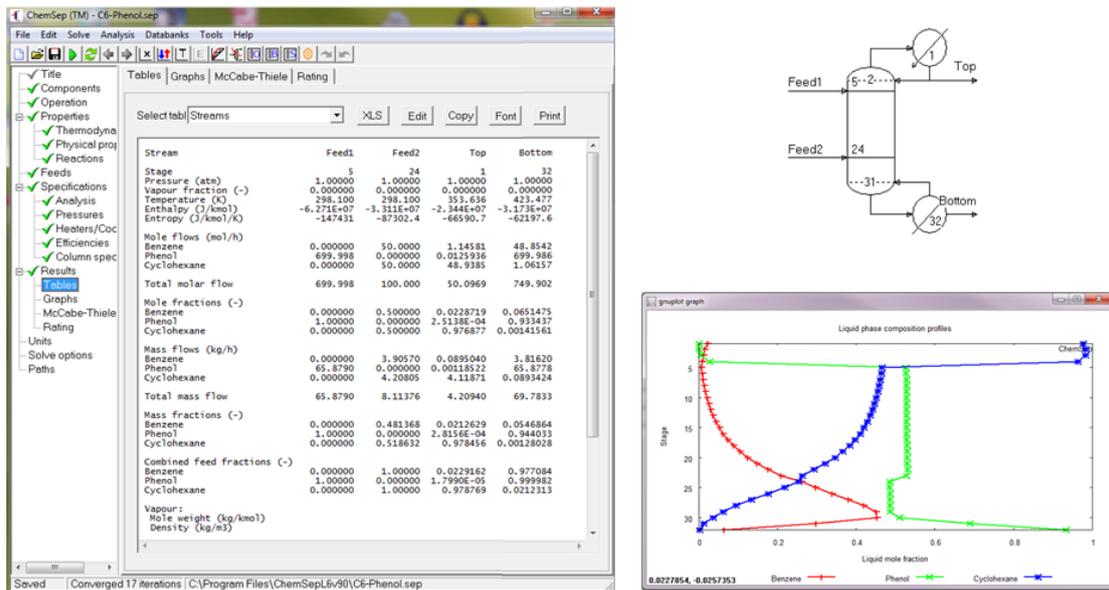


Figura 2. Ejemplo en ChemSep®. Destilación extractiva (Benceno - Fenol - Ciclohexano) definido por Harry Koojman ©

En Scilab®, al igual que en Matlab® y otros programas similares, es posible programar la simulación en detalle.

La siguiente figura, presenta un ejemplo de resultados obtenidos a través de Xcos®, herramienta alojada en Scilab® que permite el diseño de diagramas para simulación.

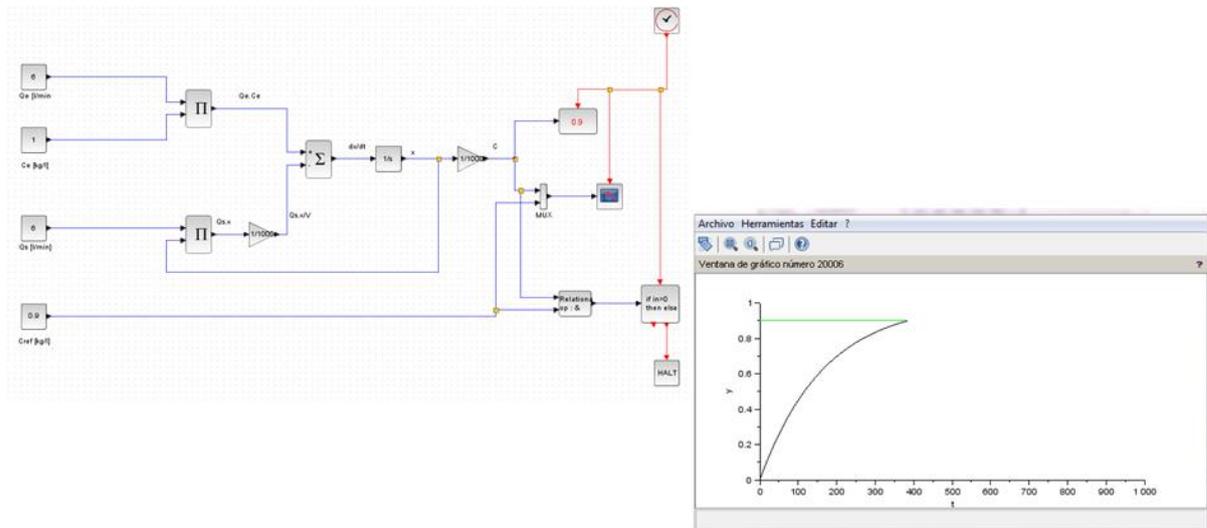


Figura 3. Ejemplo en Xcos®. Simulación del comportamiento de un tanque de mezclado continuo de volumen constante.



5 Simulación dinámica y en estado estacionario

Inicialmente, la simulación de procesos fue aplicada sobre procesos en estado estacionario, es decir, modelos que contemplan balance de materia y energía de un proceso un proceso en equilibrio.

Sin embargo, la simulación dinámica considera que existe una acumulación de masa y energía que varía con el tiempo. Permite la descripción dependiente del tiempo, la predicción y el control de los procesos reales en tiempo real. Esto incluye la posibilidad de modelar la puesta en marcha y el cierre de una planta, los cambios de las condiciones debidos a fenómenos de transporte, mezcla, reacción, etc.

Las simulaciones dinámicas requieren un mayor tiempo de cálculo y son matemáticamente más complejas que una simulación en estado estacionario. Puede verse como una multiplicación repetida de una simulación en estado estacionario (basado en un paso de tiempo fijo) donde las variables fluctúan con el tiempo.

La simulación dinámica se puede utilizar tanto en forma on-line (en línea) como off-line (fuera de línea). Por ejemplo, en el caso de un modelo predictivo on-line, los resultados de la simulación en tiempo real se usan para predecir los cambios que se producen para un cambio en la entrada de control, y los parámetros de control se optimizan en función de los resultados.

Por otro lado, la simulación de procesos fuera de línea se puede utilizar en el diseño, la solución de problemas y optimización de la planta de proceso, así como la realización de estudios de casos para evaluar los impactos de las modificaciones de los procesos.

6 Cierre

La simulación permite evaluar procesos en distintos escenarios de forma virtual. Es imprescindible para el control y la correcta gestión de procesos industriales. Pero también es muy interesante para el predicción de procesos ambientales y la toma de decisiones sobre ellos.

7 Bibliografía

García-González, J.M. et al. "La simulación de procesos en ingeniería química", Revista Investigación Científica, Vol. 4, No. 2, Nueva época. Mayo - Agosto 2008.

Disponible en:

<http://www.uaz.edu.mx/cippublicaciones/ricvol4num2tom1/Ciencias%20de%20la%20Salud/LASIMULACION.pdf>

7.1 Enlaces de interés

Academia de Ingenieros y Científicos Ambientales: <http://www.aaees.org/>

Computación numérica: http://en.wikipedia.org/wiki/Numerical_analysis

Simulación de procesos: http://en.wikipedia.org/wiki/Process_simulation

Simulación de procesos químicos:

http://en.wikipedia.org/wiki/Chemical_process_modeling