

# NATURALEZA DE LA SIMULACION

Daniel Bogoya M.  
Profesor Titular  
Universidad Nacional de Colombia

---

*El presente trabajo hace parte de la publicación SIMULACION DE PROCESOS QUIMICOS EN ESTADO ESTABLE, presentada por el autor en la Universidad Nacional de Colombia en 1990. Aquí se recoge de manera sintética la elaboración conceptual lograda alrededor del tema, en particular de las entidades modelamiento y simulación matemática de operaciones y procesos químicos; la evolución que esta disciplina ha tenido en los diferentes ambientes; los enfoques de cada desarrollo; y las estructuras básicas de simuladores modulares secuenciales.*

## INTRODUCCION

La actividad de explorar indirectamente el comportamiento de algún sistema, mediante el trabajo directo sobre un prototipo, ha sido empleada desde épocas ya remotas (siglo V antes de Cristo, en el escenario griego, por ejemplo) para allegar conocimiento válido dentro de límites y suposiciones dados. Y puesto que esta actividad exige la construcción de un prototipo o ente representador, o más comúnmente llamado modelo, es la naturaleza de dicho modelo (física o abstracta) la que ha condicionado la conducción de esta actividad, hasta el punto de confundirse una y otra.

No obstante tanta tradición tácita, es sólo a mediados del presente siglo XX cuando esta actividad se sistematiza y denomina como

simulación y cuando se le incluye formalmente en un campo del saber: la investigación operacional. Esta inclusión tuvo en cuenta fundamentalmente los siguientes aspectos: la intensa analogía existente entre la actividad de la simulación y el esquema del método científico, legitimado en la ciencia moderna tres siglos atrás; la avidez con la que (como una de las consecuencias de la revolución industrial) se buscaron sistemas de producción veloz y masiva de bienes y servicios; la necesidad creada de optimizar cada actividad, después de la segunda guerra mundial; y la aparición de ordenadores que permitieron realizar cálculos matemáticos a velocidad fantástica.

En efecto, con los propósitos de disminuir los esfuerzos y el consumo de recursos y de acertar más veces en el blanco o enemigo, durante la pasada guerra mundial nació formalmente la investigación de operaciones, dentro del mundo militar, con una marcada orientación matemática. Esta investigación operacional rindió frutos de eficacia y eficiencia tan benévolos que, culminada la guerra, trascendió también al mundo de la producción y de la ingeniería. Actualmente, la investigación operacional presenta dos campos bien definidos: primero, la programación (matemática); y segundo, la simulación (también matemática).

La programación matemática consiste fundamentalmente en estructurar modelos matemáticos de características variadas, con sus variables de entrada y de salida, donde aparece una función objetivo que debe minimizarse o maximizarse (según se trate de costos o beneficios

de la actividad en cuestión, local o globalmente), sujeta a una serie de restricciones establecidas como ecuaciones algebraicas (lineales o no), diferenciales (ordinarias o parciales), de diferencias finitas o integrales. Esta programación matemática puede contemplar un número muy grande de ecuaciones, en cuyo caso toma la denominación de “gran escala” y se lleva a cabo mediante técnicas un tanto ya clásicas; de otra parte, puede conducir a grupos teóricos de elementos, tales como teorías de la decisión, de colas, de inventarios, de juegos o de gráficos.

La simulación matemática consiste en experimentar con los modelos generados mediante la programación matemática, asignando valores a las variables de entrada y observando los valores de las de salida; es decir, es el laboratorio o rama experimental de la investigación operacional, donde la práctica y los resultados distan de la comprensión surgida de la física, la química o la biología. Las “entradas a” y las “respuestas de” la simulación son valores abstractos para las variables que se están manejando y no propiamente manifestaciones de cantidades mensurables a través de instrumentos. La simulación, en investigación operacional, es un *laboratorio abstracto*, donde se experimenta con información.

---

**Las “entradas a” y las “respuestas de” en la simulación son valores abstractos para las variables que se están manejando y no propiamente manifestaciones de cantidades mensurables a través de instrumentos.**

---

En este punto, y porque suelen confundirse, es pertinente enfatizar que simular no equivale a optimizar, aunque sus resultados parciales, y estado tras estado, se eslabonen convenientemente para sugerir algún conjunto preferido de valores de variables que satisfagan los criterios de optimalidad dados. Simular consiste más precisamente en perturbar o estimular un modelo para que, de acuerdo con su estructura orgánica interna, refleje las características y efectos correspondientes que se articulan con los estímulos recibidos, según la interpretación consignada en el modelo.

La simulación presenta diversos atributos que permiten caracterizarla según la naturaleza de los modelos empleados; y, para el caso de modelos matemáticos, también según la técnica de solución seguida. Igualmente, los modelos matemáticos pueden trasladar a la simulación su caracterización, según la naturaleza de las variables y las ecuaciones. Un esquema general de clasificación se ilustra en el diagrama 1.

El diagrama referido permite deducir que la simulación matemática, además de requerir un modelo matemático, emplea una secuencia de solución que permite, para cada grupo elegido de valores de las variables de entrada, organizar los cálculos y garantizar la obtención de los valores para las variables de salida; de otra forma, si no se dispone de la secuencia de solución (lo cual puede ser tedioso cuando se presentan demasiadas opciones para las variables de entrada), debe entonces contarse con los algoritmos que puedan desarrollar internamente dicha secuencia, según sea el conjunto de variables de entrada.

## **SIMULACION DE PROCESOS QUIMICOS**

La disciplina de la simulación de procesos químicos (con la ayuda de computadores) tuvo sus primeras manifestaciones en el ámbito universitario y poco a poco fué penetrando en la industria química. Esta simulación tuvo sus orígenes en el auge mismo de la investigación operacional, por ser una novedosa herramienta para realizar confiable y velozmente diversos cálculos numéricos. La simulación de procesos

químicos adquiere importancia por su potencialidad de aplicación en los siguientes campos:

- La docencia y la investigación académica, como ayuda didáctica mediante la cual se explica un fenómeno de difícil, inconveniente o costoso acceso físicamente;

- La investigación, evaluación y análisis de sensibilidad en redes de procesos existentes, para refrendar las condiciones de operación o sugerir otras, de acuerdo con algún nuevo criterio de optimalidad;

- La predicción de resultados en redes de procesos imaginados, con miras al diseño de procesos químicos; y

- La evaluación compartida, conjuntamente con especificaciones de diseño de proceso y de diseño de equipo, para llegar al diseño de plantas químicas.

La simulación de procesos químicos ha tenido dos grandes subdisciplinas: la dinámica (para estados transitorios) y la de estado estable (para procesos estacionarios). El énfasis del presente trabajo estriba justamente en la de estado estable.

## EVOLUCIÓN Y ENTORNO

En el campo de los procesos químicos, la simulación en estado estable (llamada también estacionaria, discreta o digital) ha tenido desarrollos más amplios y permanentes que la simulación dinámica (llamada también continua, análoga o de estado transitorio). La simulación híbrida (o combinación de digital con análoga y que emplea una serie de interfases que hacen compatibles resultados discretos con requerimientos continuos y viceversa) ha tenido tan sólo pequeñas manifestaciones, con interés preferentemente académico; esta combinación ha sido más fructífera en el campo del control automático que en el de la simulación.

En los albores de esta disciplina, y como consecuencia del estudio de algoritmos y métodos computacionales que aprovecharon al máximo la

### Simulación

#### Según los modelos

- Abstracta
- Simbólica
- Icónica
- Conceptual
- Matemática

#### Según las variables

- Discreta
- Continua
- Determinística
- Probabilística
- En estado estacionario (estable)
- En estado transitorio (dinámica)

#### Según las ecuaciones

- Algebraica
  - Lineal
  - No lineal
- Diferencial
  - Ordinaria
  - Parcial
- Diferencias finitas
- Integrales

#### Física o material

- Nivel de laboratorio
- Nivel de banco
- Nivel de planta piloto

#### Según la técnica de solución del modelo

- Análoga, dinámica o continua
- Digital, estacionaria, en estado estable o discreta
- Híbrida

*Diagrama 1*  
*Clasificación de la Simulación*

reducida capacidad de los computadores de las primeras generaciones, se creó en Estados Unidos el comité CACHE (Computers Aids for Chemical Engineering Education), integrado por varias universidades. Este comité popularizó algunos métodos computacionales útiles todavía en la actualidad, donde se requiere provisión externa de datos y propiedades físicas.

---

**La industria de procesos químicos comenzó a interesarse y a utilizar el computador como herramienta de apoyo en la solución de problemas de diseño y producción, creando dependencias especializadas para desarrollar aplicaciones de ingeniería.**

---

Con la subsiguiente evolución tecnológica de los computadores, que condujo a masificar su uso y a mejorar la rapidez de cálculo y la capacidad de almacenamiento de información, se concentró el esfuerzo en la amplitud de

cubrimiento para producir sistemas integrados o paquetes completos, donde con base en algún tipo de estructura cada parte cumple una función especializada. Al lado de este desenvolvimiento, la industria de procesos químicos comenzó a interesarse y a utilizar el computador como herramienta de apoyo en la solución de problemas de diseño y producción, creando dependencias especializadas para desarrollar aplicaciones de ingeniería. Fue en este contexto cuando, 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, con una explícita e importante aplicación en el diseño de procesos químicos.

Los primeros paquetes medianamente difundidos fueron el PACER y el CHESS (desarrollados en universidades

norteamericanas) y el FLOWTRAN (desarrollado por Monsanto). Por esta época, se desarrollaron correlaciones para estimar algunas propiedades fisicoquímicas, tales como las de Chao-Seader o Grayson-Streed, con lo cual los datos de dichas propiedades, a diferentes condiciones del proceso, se evaluaban internamente, en lugar de suministrarse externamente.

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. Al lado de este desenvolvimiento, y por el atractivo de rentabilidad que presentaban los paquetes de simulación con su nuevo atributo de producto comercial, se establecieron compañías especializadas y dedicadas exclusivamente al desarrollo y mercadeo de este *software* para ingeniería química.

El producto del anterior desarrollo quedó plasmado en los paquetes CONCEPT y SYMBOL (de la firma CADAC), CHEMSHARE, CHEMTRAN y FLOWTRAN (de Monsanto), PROCESS (de Simulation Science), PROSPRO (del Instituto INTEC) y además otros como GEMCS, GEPOS, PDA y FLOWPACK. Con esta tendencia, en los primeros años ochentas se difundió con vigor el proyecto "ASPEN", desarrollado en MIT, y el paquete SIMBAD, del Instituto INGAR, donde se incorporó un manejo estructural residente en base de datos; estos paquetes presentaron un punto de gran elaboración de la simulación en estado estable. En seguida, sobrevino una gran proliferación de programas para microcomputadores, entre los cuales aún se destacan: DESIGN 2000, ChemCAL, HYSIM, QUASILIN, ASCEND 11 y SPEED-UP.

A la par, durante los años ochentas, la simulación dinámica evolucionó hasta llegar al control digital directo o DDC, el cual consiste en integrar un computador digital con los instrumentos de proceso, mediante *buses* de señales y convertidores de interfases análogo/digital. De esta manera, uno o más computadores actúan sobre una planta de proceso, de acuerdo con criterios de optimalidad e información del funcionamiento de toda la planta (o del segmento así eslabonado) mediante valores de las variables de estado. La visión es entonces global y no local y la simulación se acompaña de la acción de

**Diagrama 2**  
*Ciclo de vida de un proyecto*

control; se trata de los preámbulos para la incorporación de la inteligencia artificial a esta disciplina: irrumpen los sistemas expertos en ingeniería química.

Igualmente, en este último período se consolidó un concepto bastante más amplio, que integra las bondades desarrolladas casi desafortunadamente de *software* (como relaciones abstractas lógicas o programas de computador con profunda elaboración, diseñados por especialistas) y de *hardware* (como configuraciones complejas y sofisticadas de materiales electromagnéticos, donde se condensa cada revolución y avance tecnológico): aparece el diseño asistido por computador o CAD. Así, mediante CAD, hoy es posible diseñar un proceso químico hasta el nivel de detalle de equipos y piezas y de disposición física de planta y redes de tuberías, pasando por los balances de masa y energía, por el diseño del diagrama de flujo y por los diseños de los sistemas de servicios, control e instrumentación.

De lo anterior puede extractarse que la simulación de estado estable conduce esencialmente al diseño de procesos químicos, mientras que la simulación dinámica conduce al control automático.

## LA SIMULACION PARA EL DISEÑO DE PROCESOS QUIMICOS

La actividad del diseño de procesos químicos implica definir la configuración y estructura de un diagrama, donde se contemplan estos aspectos:

- Tipo y naturaleza de cada unidad de proceso;
- Forma de interconexión de las unidades de proceso; y

Detección de necesidades

Definición de los objetivos del proceso general

Colección de información (demanda del producto, suministro de materias primas, expectativas económicas, impacto ambiental, dependencia tecnológica, incidencia sociopolítica, ...)

Creación de conceptos alternativos del proceso

Síntesis de un diagrama de flujo de proceso

- Selección de parámetros de equipos
- Selección de condiciones de operación
- Obtención de propiedades fisicoquímicas de los componentes involucrados
- Simulación del proceso en estado estable
- Determinación de funcionalidad
- Dimensionamiento de equipo
- Estimación de costos de instalación y de operación
- Optimización

Análisis de sensibilidad

Análisis de estados transitorios y de fallas

Diseño detallado de planta y equipos

Construcción

Puesta en marcha

Operación

- capacidad de dichas unidades y sus condiciones de operación.

Para definir una configuración se adelanta una secuencia de etapas de síntesis y análisis de dicho proceso, tendientes a optimizarlo, en el sentido de satisfacer algunos criterios dados. Y justamente siempre entre una y otra etapa deben realizarse una serie de cálculos velozmente; aquí es donde la simulación tiene su entronque con el diseño, ya que por su rapidez de respuesta permite explorar múltiples posibilidades de la etapa de síntesis mencionada, mejorando así la confiabilidad del diseño.

Un diseño óptimo es aquel que resulta de maximizar o minimizar alguna función objetivo de criterio previsto. Un diseño óptimo suele

responder a combinaciones variadas, con diversas ponderaciones según convenga o se prefiera, de algunas acciones, tales como:

- Minimizar los costos de elaboración del producto (concebidos como una combinación de factores de costo de materias primas, inventarios, tamaños de equipos, servicios y otros);
- Maximizar el nivel de seguridad; y/o
- Minimizar el impacto ambiental desfavorable del proceso.

En la etapa de síntesis se desarrolla una nueva alternativa tecnológica para el proceso en cuestión, basada en las observaciones y conclusiones de la etapa anterior de análisis; así, se plasma bien sea una nueva concepción de la estructura (vista como un diagrama de flujo con una nueva organización de corrientes y unidades de proceso), o bien sean unos nuevos valores para las condiciones de operación, con base en la misma estructura. En la etapa de análisis se examinan los resultados generados con la alternativa tecnológica creada en la etapa de síntesis, confrontándolos con los que surgen de los criterios de optimalidad establecidos; de otra forma, corresponde juzgar y calificar la bondad de una alternativa.

En este punto se identifica claramente la relación y diferenciación entre la simulación y el diseño. La simulación da velozmente respuestas a múltiples y concatenados problemas complejos de cálculo del tipo: dado A, encontrar . . . ; mientras que el diseño implica definir valores para aquellas variables que se eligen para agotar los grados de libertad, mediante criterios desarrollados por la experiencia o por tratamientos teóricos de optimización.

Las etapas referidas se encuentran enmarcadas dentro del ciclo de vida de un proyecto, el cual para ilustración se desglosa en el diagrama 2, siguiendo un esquema propuesto por Evans y Seider, con algunas modificaciones. Allí se observa la ubicación de la simulación en esta actividad.

## ENFOQUES DE SIMULACION

Ubicada la simulación de procesos químicos como poderosa herramienta de cálculo para el diseño de procesos químicos (donde se cuantifica el estado de un diagrama de flujo propuesto), se ilustran las estrategias de cálculo seguidas para su tratamiento. Estas estrategias son: modular secuencial; modular global con modelos rigurosos; y simultáneo con modelos simplificados mediante parámetros de linearización.

---

**En la etapa de análisis se examinan los resultados generados con la alternativa tecnológica creada en la etapa de síntesis, confrontándolos con los que surgen de los criterios de optimalidad establecidos; de otra forma, corresponde juzgar y calificar la bondad de una alternativa.**

---

Para ilustrar cada estrategia de cálculo se sigue este esquema: primero, se explica la metodología; y segundo, se aplica dicha metodología para generar un algoritmo de cálculo que permita simular el segmento de proceso 1, de la figura 1, para el cual se dispone de información de la corriente S1' y de los parámetros de operación de cada unidad de proceso.

Asociadas con el segmento de proceso 1, se presentan también tablas de información de corrientes, de unidades de proceso y de parámetros, donde se sintetiza de otra manera la estructura prevista para el segmento. La figura 1 y las tablas 1 y 2 se muestran a continuación.

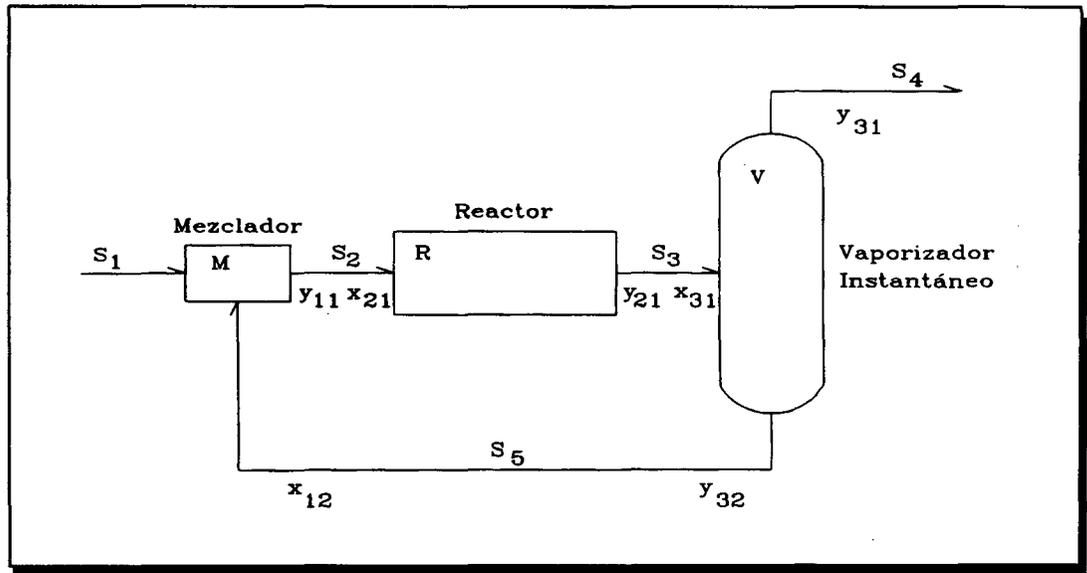


Figura 1.  
Segmento de  
Proceso 1

Corrientes	Ubicación en el segmento
$S_1$	Entrada al mezclador M
$S_2$	Salida del mezclador M y entrada al reactor R
$S_3$	Salida del reactor R y entrada al vaporizador V
$S_4$	Salida del vaporizador V
$S_5$	Salida del vaporizador V y entrada al mezclador

Tabla 1  
Información de corrientes

Así planteado el segmento de proceso 1, el modelo matemático asociado, en términos de conjuntos de funciones en forma estándar, es:

$$\begin{aligned} f_1(x_{11}, x_{12}, y_{11}, U_1) &= 0 \\ f_2(x_{21}, y_{21}, U_2) &= 0 \\ f_3(x_{31}, y_{31}, y_{32}, U_3) &= 0 \end{aligned}$$

y las ecuaciones de conexión de corrientes:

$$\begin{aligned} h_1: x_{21} - y_{11} &= 0 \\ h_2: x_{31} - y_{21} &= 0 \\ h_3: x_{12} - y_{32} &= 0 \end{aligned}$$

donde,

$f_i$ : representa un conjunto de ecuaciones (de balances de masa, energía, equilibrio, transferencia y de consistencia) que caracterizan el proceso de la  $i^{\text{a}}$  unidad, en términos

de las variables de sus corrientes de entrada y de salida y de sus parámetros,  $i = 1, 2, 3$ ;

$h_j$ : representa la  $j^{\text{a}}$  ecuación de conexión de corriente interna o no terminal del segmento;

$S_j$ : es el nombre de la  $j^{\text{a}}$  corriente y representa un conjunto de variables que caracterizan el estado de dicha corriente,  $j = 1, 2, 3, 4, 5$ ;

$U_i$ : representa un conjunto de parámetros (como tipo de unidad y condiciones de operación) para la  $i^{\text{a}}$  unidad de proceso,  $i = 1, 2, 3$ ;

$X_{ij}$ : representa alguna variable característica de la  $j^{\text{a}}$  corriente que entra a la  $i^{\text{a}}$  unidad de proceso; e

Unidad	Tipo	corrientes que entran	corrientes que salen	parámetros
M	Mezclador	$S_1, S_5$	$S_2$	$U_1$
R	Reactor	$S_2$	$S_3$	$U_2$
V	Vaporizador	$S_3$	$S_4, S_5$	$U_3$

*Tabla 2*  
*Información de unidades*  
*de proceso y parámetros*

$y_{ij}$ : representa alguna variable característica de la  $j^{\text{a}}$  corriente que sale de la  $i^{\text{a}}$  unidad de proceso. Junto con  $X_{ij}$ , estas variables preferencialmente son caudales o entalpías, globales o de algún componente, para efectos de balances de masa y energía; pero igualmente pueden ser otras como presión, volumen, difusividad, conductividad térmica o viscosidad.

Esta asignación dual de variables para cada corriente interna o no terminal que comunica las unidades consecutivas  $s$  y  $p$   $y_{st}$  cuando egresa de la  $s^{\text{a}}$  unidad y  $x_{pq}$  cuando ingresa a la sucesora o  $p^{\text{a}}$  unidad, tiene dos efectos: primero, implica construir nuevas ecuaciones, llamadas de conexión, a razón de una por cada corriente interna, aumentando el tamaño del modelo; y segundo, permite sistematizar grupos de cálculos unitarios independientes, con igual nomenclatura, pasando de  $y_{st}$  a  $x_{pq}$  mediante las ecuaciones de conexión.

## ENFOQUE MODULAR SECUENCIAL

### METODOLOGIA

Este tratamiento consiste en calcular separadamente, con base en los conjuntos de ecuaciones propias de cada modelo, unidad tras unidad de proceso en forma secuencial. El cálculo se hace siempre para evaluar las características de las corrientes de salida de cada unidad, con base en sus parámetros y en información de sus corrientes de entrada. Así, surgen dos alternativas

de cálculo en cada paso: primera, se toman las ecuaciones en forma estándar y se resuelven de acuerdo con un esquema secuencial-simultáneo combinado, tomando como variables de entrada al modelo las que corresponden a la información de corrientes de entrada al segmento y de parámetros; y segunda, todas las ecuaciones se escriben en forma explícita para las corrientes de salida y se emplean, cada vez que se requiera, únicamente para cálculos en esta dirección.

La solución modular secuencial es inmediata cuando se trata de un segmento de proceso lineal, caso muy poco frecuente en procesos químicos; en cambio, cuando el segmento presenta recirculaciones, caso demasiado frecuente en procesos químicos, la solución modular secuencial requiere en una etapa previa detectar y rasgar todos los ciclos formados. Un ciclo equivale al conjunto de unidades involucradas en la recirculación; y rasgar implica bifurcar una corriente, creando otra hipotética cuyas características se suponen con base en algún criterio. La suposición generada por el rasgado reduce los grados de libertad, a razón de uno por cada variable supuesta, y libera tantas ecuaciones como variables se supongan; generalmente, las ecuaciones liberadas se emplean para evaluar el grado de convergencia del cálculo iterativo.

La técnica sistemática que conduce a detectar ciclos, a seleccionar corrientes adecuadas para rasgarlos y consecuentemente a establecer un orden de solución de modelos de unidades de proceso, se denomina particionado, rasgado y ordenamiento.

Para la solución modular secuencial de los modelos de las unidades involucradas en un ciclo, en el caso de segmentos de proceso con recirculaciones, se procede a un cálculo iterativo donde se supone la información de las corrientes de entrada. El cálculo para cada ciclo concluye cuando se satisface algún valor para la diferencia entre las respuestas de la solución del modelo de la unidad que genera la corriente que se rasga y las suposiciones para la solución de los modelos de las unidades a las que ingresa tal corriente.

Dentro de la información global para la simulación, pueden aparecer datos para algunas de

las variables de la corriente que se rasga. Por tanto, deben suponerse valores sólo para aquellas variables faltantes y con las cuales se determine totalmente la corriente en mención; es decir, sólo se suponen aquellas variables con las cuales se reducen a cero los grados de libertad de los modelos de las unidades a las que ingresa la referida corriente que se rasga. Este es el subconjunto de variables iteradoras. Ahora bien, para efectos de establecer la convergencia del cálculo iterativo, no es necesario incluir todas las variables iteradoras: puede ser suficiente sólo una de ellas. Esta característica se debe a que el engranaje de las ecuaciones del modelo y de sus submodelos es único: hace que si una variable toma un valor, las restantes del modelo o submodelo (con las cuales guarda una relación única) tomen igualmente sólo un valor. En consecuencia, la convergencia es *simultánea* para todas las variables iteradoras.

La complejidad del cálculo iterativo planteado y aún su posible no convergencia dependen fundamentalmente de tres aspectos: primero, de la escogencia de una u otra corriente de rasgado; segundo, de los valores iniciales que se den a las variables iteradoras; y tercero, del método de ajuste que se emplee entre una y otra iteración para la corriente que se rasgue, método que puede ser simplemente de sustitución directa o con aceleradores de convergencia (tales como Wegstein o Newton, por ejemplo).

#### APLICACIÓN

Se ilustra aquí la simulación mediante un enfoque modular secuencial, para el segmento de proceso 1 planteado, donde se conocen los valores de las variables que caracterizan la

corriente  $S_1$  y los parámetros de las unidades de proceso  $U_1$ ,  $U_2$  y  $U_3$ . Cada corriente se caracteriza, por conveniencia práctica de esta ilustración, solamente por alguna variable  $x_{ij}$  si ingresa a la  $i^a$  unidad, o  $y_{ij}$  si egresa de ella, aunque estrictamente se requiere más de una variable para dicha caracterización. El algoritmo de cálculo implica los siguientes pasos:

1. Se expresan todas las ecuaciones en forma explícita, para evaluar las variables o condiciones de las corrientes de salida de cada unidad de proceso, así:

$$\begin{aligned} f_1(x_{11}, x_{12}, y_{11}, U_1) &= 0 \Rightarrow y_{11} = g_1(x_{11}, x_{12}, U_1) \\ f_2(x_{21}, y_{21}, U_2) &= 0 \Rightarrow y_{21} = g_2(x_{21}, U_2) \\ f_3(x_{31}, y_{31}, y_{32}, U_3) &= 0 \Rightarrow y_{31} = g_3(x_{31}, U_3) \\ & y_{32} = g_4(x_{31}, U_3) \end{aligned}$$

---

**El engranaje de las ecuaciones del modelo y de sus submodelos es único: hace que si una variable toma un valor, las restantes del modelo o submodelo (con las cuales guarda una relación única) tomen igualmente sólo un valor.**

---

donde  $g_i$  representa un conjunto de ecuaciones explícitas que permiten solamente evaluar las corrientes de salida de la  $i^a$  unidad de proceso, con base en los valores de las variables de sus corrientes de entrada y de sus parámetros;

2. Se detecta el ciclo formado entre las corrientes  $S_2$ ,  $S_3$  y  $S_5$ , debido a la recirculación;

3. Se rasga el ciclo detectado, mediante alguna corriente, de acuerdo con algún criterio que simplifique los cálculos subsiguientes. Como ejemplo se toma la corriente  $S_5$ , lo cual implica bifurcarla suponiendo valores de  $x_{12}$ , para resolver el modelo del mezclador, y calculando valores de  $y_{32}$ , a partir de

**Las ecuaciones se relacionan (todas global, simultánea e independientemente del modelo de la unidad que sea) a través de la igual significación y valor que cada variable tiene en las diferentes ecuaciones donde incide.**

la solución del modelo del vaporizador. En este caso, la ecuación de conexión  $h_2$  se libera para la solución misma y se emplea entonces para verificar la convergencia del cálculo;

4. Se ordena, para establecer la secuencia de solución: modelo del mezclador  $g_1$  -> modelo del reactor  $g_2$  -> modelo del vaporizador  $g_4$  -> repetir desde modelo del mezclador  $g_1$ , hasta convergencia de valores de  $x_{12}$  con  $y_{32}$  -> modelo del vaporizador  $g_3$ ;

5. Se supone un valor para la variable  $x_{12}$ , tomada como variable iteradora. El valor de esta variable permite aquí caracterizar el estado hipotético de la corriente  $S_5$ ;

6. Se define un criterio de convergencia para la corriente  $S_5$ , que permita concluir el cálculo iterativo. Esta definición consiste en asignar un tamaño máximo a la norma dada por  $\|x_{12} - Y_{32}\|$ ;

7. Se resuelve el modelo del mezclador, mediante el conjunto de ecuaciones  $g_1$  con base en la información dada para los

parámetros  $U_1$ , el valor de la variable  $x_{11}$  y el valor supuesto para  $x_{12}$ . Esta solución permite conocer el valor de la variable  $y_{11}$ , que caracteriza la corriente  $S_2$ , sujeto al estado hipotético de la corriente  $S_5$ ;

8. Se calcula  $x_{21}$  mediante la ecuación de conexión  $h_1$ ;

9. Se resuelve el modelo del reactor, mediante el conjunto de ecuaciones  $g_2$  con base en la información dada para los parámetros  $U_2$  y el valor de la variable  $x_{21}$ , calculado en el paso anterior. Esta solución permite conocer el valor de la variable  $Y_{21}$  que caracteriza la corriente  $S_3$ , sujeto al estado hipotético de la corriente  $S_5$ ;

10. Se calcula  $X_{31}$  mediante la ecuación de conexión  $h_2$ ;

11. Se resuelve el modelo del vaporizador, mediante el conjunto de ecuaciones  $g_4$ , con base en la información dada para los parámetros  $U_3$  y el valor de la variable  $x_{31}$  calculado en el paso anterior. Esta solución permite conocer el valor de la variable  $y_{32}$ , que caracteriza la corriente  $S_5$ , sujeto al estado hipotético de ella misma. (En este punto, se recalca que aún no debe resolverse el conjunto de ecuaciones  $g_3$ , para caracterizar la corriente  $S_4$ , mientras persista la necesidad de seguir iterando, por no satisfacción del criterio de convergencia dado en el paso 6;

12. Se evalúa la norma  $\|x_{12} - y_{32}\|$ , para compararla con el tamaño máximo asignado en el paso 6. Si esta norma es mayor, se supone un nuevo valor para la variable  $x_{12}$ , de acuerdo con algún método (bien de sustitución directa o de aceleración de convergencia), y se regresa al paso 7; y si esta norma es menor, se sigue al paso 13;

13. Se resuelve el modelo del vaporizador, mediante el conjunto de ecuaciones  $g_3$ , con base en la información dada para los parámetros  $u_3$  y el valor de la variable  $x_{31}$  evaluado en la última iteración del paso 10. Esta solución permite conocer el valor de la variable  $Y_{31}$ , que caracteriza la corriente  $S_4$ .

Así, el último valor de cada variable revela el estado del segmento de proceso 1, mediante una simulación con enfoque modular secuencial, correspondiente a la determinación establecida con los valores dados a las variables de entrada.

## ENFOQUE MODULAR GLOBAL

### METODOLOGIA

Este tratamiento consiste en conformar un sólo gran modelo de todo el segmento de proceso, a partir de los modelos de las unidades de proceso involucradas en el segmento bajo

consideración, y en resolver globalmente dicho gran modelo, bien en forma secuencial, simultánea o combinada. Se agrupan entonces todos los modelos, con las ecuaciones en forma estándar, para configurar el modelo global, cuyas entradas y salidas corresponden ahora a las del segmento y no a las de las unidades de proceso; allí se toman transparentes todas las conexiones entre las unidades de proceso, incluidas las de recirculación.

El modelo global resultante de este planteamiento es ciertamente más complejo, en el sentido de número de ecuaciones y de variables; ahora, una y otras son las sumas correspondientes sobre los modelos originales de cada unidad de proceso. Así, el modelo global se torna altamente disperso: tiene un alto número de ecuaciones y de variables; pero en cada ecuación incide un número muy reducido de variables. La solución de este modelo global (una vez determinado con los valores para las variables que se escogen para agotar los grados de libertad) se ejecuta en una sola etapa, aunque dentro de ella se requiera acceder a métodos iterativos, bien para la solución de grupos de ecuaciones o bien para la extracción de sus raíces.

En la solución del modelo no interesa si una corriente “entra a” o “sale de” alguna unidad de proceso, ya que cada variable y cada ecuación pierden identidad con el modelo de origen; ahora, su atributo de identidad está únicamente ligado con el modelo global. La solución simultánea absorbe la convergencia para las variables de las corrientes que conectan las unidades de proceso, involucradas con recirculaciones; para el conjunto global único de ecuaciones, cada variable toma un único valor para satisfacer simultáneamente más de una ecuación, de más de un modelo de origen. De otra forma, las ecuaciones se relacionan (todas global, simultánea e independientemente del modelo de la unidad que sea) a través de la igual significación y valor que cada variable tiene en las diferentes ecuaciones donde incide.

La solución tradicional de este modelo global, así se realice por una sola vez, es justamente compleja; por tanto, para simplificarla, se han desarrollado técnicas matemáticas especiales, que impiden realizar los cálculos

inoficiosos en los casos donde una variable no incide en una ecuación.

Una característica importante de este enfoque, donde las ecuaciones se toman en forma estándar, consiste en disponer de múltiples formas para reducir a cero los grados de libertad; las variables de entrada no solamente se escogen como las de las corrientes de entrada y los parámetros de la unidad de proceso, sino que pueden también escogerse con cualquier otro criterio.

Así, es posible entonces responder a preguntas del tipo: que características tendrían las corrientes de salida, si . . . ; también a preguntas del tipo: que características se requerirían para las corrientes de entrada, o para los parámetros de unidades de proceso, si . . . . Se tiene en consecuencia una variedad amplia de posibilidades de cálculo, para producir valores de diversos subconjuntos de variables de salida .

### APLICACION

La simulación mediante un enfoque modular global, para el segmento de proceso 1 planteado, requiere conocer en detalle cada ecuación de cada modelo (es decir, cuáles son las ecuaciones que conforman los conjuntos  $f_1$ ,  $f_2$  y  $f_3$ ), para poder sugerir un esquema de solución. Así, conocidas las ecuaciones, el procedimiento que se sigue

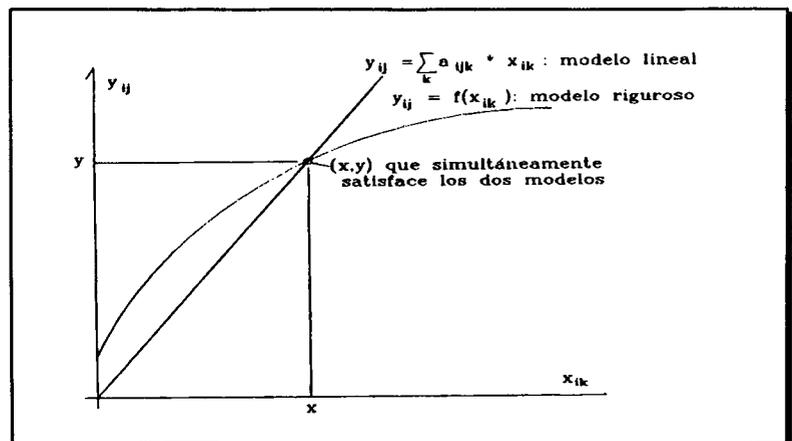


Figura 2.  
Representación gráfica de la linealización

consiste en establecer una secuencia de solución, donde cada ecuación se resuelve iterativa y numéricamente para satisfacer la condición estándar  $f(x) = 0$ .

## ENFOQUE SIMULTÁNEO CON ECUACIONES LINEALES

### METODOLOGIA

La esencia del enfoque simultáneo con ecuaciones lineales estriba en la construcción de un modelo lineal hipotético, donde las variables satisfacen punto a punto (con diferentes parámetros de linearización) tanto las ecuaciones rigurosas del modelo original como las ecuaciones lineales hipotéticas construidas. Es decir, en cada estado del modelo riguroso se intersecta un modelo lineal, para trabajar en las proximidades de tal estado con el modelo lineal en lugar del riguroso. Gráficamente, para una sola ecuación, la situación se muestra en la figura 2.

Para construir el modelo lineal hipotético, se identifica un estado del modelo riguroso, calculando las variables características de las corrientes de salida, mediante dichos modelos, con base en algunos valores escogidos para las variables características de las corrientes de entrada y la información de los parámetros de la unidad de proceso considerada. La primera escogencia de valores para las entradas a una unidad puede hacerse arbitrariamente o siguiendo un enfoque modular secuencial; es decir, tomando las salidas de una unidad como las entradas de la unidad que le suceda en el segmento.

En seguida, con un estado de cada modelo riguroso, reflejado en cada conjunto  $(x_{ij}, y_{ij})$ , se construye una ecuación lineal y se obliga a intersectar con dicho modelo, en el estado  $(x_{ij}, y_{ij})$ . La ecuación lineal es del tipo:

$$y_{ij} = \sum_k a_{ijk} * x_{ik}$$

donde,  $a_{ijk}$  es el parámetro lineal de la  $k^a$  entrada a la  $i^a$  unidad, para producir la  $j^a$  salida.

Así, el estado en mención satisface simultáneamente tanto el modelo riguroso como el modelo lineal construido. El mismo procedimiento se sigue estado tras estado, cambiando cada vez los parámetros de linearización. Ahora, cada ecuación lineal se expresa en la forma estándar, reemplazando las variables de las corrientes de salida de una unidad por las correspondientes de las corrientes de entrada a cada unidad sucesora en el segmento, calculadas de las ecuaciones de conexión, salvo aquellas que corresponden a corrientes de salida o terminales, pues no participan en ninguna ecuación de conexión; igualmente, dejando como términos independientes de constantes, los valores que corresponden a las variables que se den para reducir a cero los grados de libertad de cada modelo.

El modelo lineal es de la forma

$$A * X = B$$

donde, **A** es la matriz de parámetros de linearización; **X** es el vector de variables que caracterizan las corrientes; y **B** es el vector de términos independientes de constantes, surgidos de los valores dados para determinar el modelo.

Construido este modelo, la simulación procede mediante un cálculo iterativo que implica resolver varias veces el modelo lineal, por cualquier método convencional, recalculando para cada iteración los nuevos valores de los parámetros de linearización  $a_{ijk}$ , empleando para ello los modelos rigurosos. El cálculo concluye cuando se satisface algún valor para la diferencia entre los valores de los parámetros de linearización evaluados entre una y otra iteración. Con este enfoque de simulación, igual que con el enfoque modular global, se tornan transparentes las relaciones entre las unidades de proceso y sus modelos, cuando se resuelve simultáneamente el modelo lineal; y a la vez, igual que con el enfoque modular secuencial, aparecen explícitas las

identidades con los modelos de las unidades de proceso, cuando se calculan una y otra vez, los parámetros de linearización.

La simulación que se plantea presenta un alto número de etapas; e igualmente una gran sencillez para cada etapa. La solución de un modelo lineal es relativamente trivial; de todas maneras, el tamaño del modelo puede ser muy grande y la matriz de parámetros muy dispersa, caso en el que conviene un tratamiento especial para evitar tanto cálculo inoficioso con elementos nulos de dicha matriz.

## APLICACION

Como en el caso del enfoque modular secuencial, para este caso, y por conveniencia práctica,  $y_{ij}$  y  $x_{ij}$  se toman como una sola variable, aunque rigurosamente se refieren a un conjunto donde aparecen caudales, presiones, volúmenes y otras propiedades con las cuales se caracteriza una corriente. Así, la simulación mediante un enfoque simultáneo con ecuaciones lineales, para el segmento de proceso 1 planteado, donde se conoce el valor de la variable  $x_{11}$  que caracteriza la corriente  $S_1$  y los parámetros de las unidades de proceso  $U_1$ ,  $U_2$  y  $U_3$ , implica los siguientes pasos:

1. Se define un criterio de convergencia para los parámetros de linearización  $a_{ijk}$ , que permita concluir el cálculo iterativo. Esta definición consiste en asignar un tamaño máximo a la norma  $||a_{ijk}^u - a_{ijk}^p||$ , entendidos  $a_{ijk}^u$  como los valores últimos y  $a_{ijk}^p$  como los valores penúltimos de los parámetros;

2. Se asigna un valor a la variable  $x_{12}$ , para caracterizar la corriente  $S_2$ ;

3. Se resuelve el modelo del mezclador, mediante el conjunto de ecuaciones  $g_1$ ; con esta solución se conoce el valor de la variable  $y_{11}$ , que caracteriza la corriente  $S_2$ ;

4. Se encuentran los parámetros de linearización  $a_{111}$  y  $a_{112}$ , tales que  $y_{11}$ ,  $x_{11}$  y  $x_{12}$  satisfagan el modelo  $g_1$  y simultáneamente la ecuación lineal hipotética del tipo:

$$y_{11} = a_{111} * x_{11} + a_{112} * x_{12}$$

5. Se asigna un valor a la variable  $x_{21}$  para caracterizar la corriente  $S_2$ ; puede asignarse, con un enfoque modular secuencial, el valor de  $y_{11}$  obtenido en el paso 3, empleando la ecuación de conexión  $h_1$ ;

6. Se resuelve el modelo del reactor, mediante el conjunto de ecuaciones  $g_2$ ; con esta solución se conoce el valor de la variable  $y_{21}$ , que caracteriza la corriente  $S_3$ ;

7. Se encuentra el parámetro de linearización  $a_{211}$ , tal que  $y_{21}$  y  $x_{21}$ , satisfagan el modelo  $g_2$  y simultáneamente la ecuación lineal hipotética del tipo:

$$y_{21} = a_{211} * x_{21}$$

---

**La solución de un modelo lineal es relativamente trivial; de todas maneras, el tamaño del modelo puede ser muy grande y la matriz de parámetros muy dispersa, caso en el que conviene un tratamiento especial.**

---

8. Se asigna un valor a la variable  $x_{31}$  para caracterizar la corriente  $S_3$ ; puede asignarse, con un enfoque modular secuencial, el valor de  $y_{21}$  obtenido en el paso 6, empleando la ecuación de conexión  $h_2$ ;

9. Se resuelve el modelo del vaporizador, mediante los conjuntos de ecuaciones  $g_3$  y  $g_4$ ; con esta solución se conocen los valores de las variables  $y_{31}$ ,  $y_{32}$ , que caracterizan las corrientes  $S_4$  y  $S_5$  respectivamente;

10. Se encuentra el parámetro de linearización  $a_{311}$ , tal que  $y_{31}$  y  $x_{31}$  satisfagan el modelo  $g_3$  y simultáneamente la ecuación lineal hipotética del tipo:

$$y_{31} = a_{311} * x_{31}$$

11. Se encuentra el parámetro de linearización  $a_{321}$ , tal que  $y_{32}$  y  $x_{31}$  satisfagan el modelo  $g_4$  y simultáneamente la ecuación lineal hipotética del tipo:

$$y_{32} = a_{321} * x_{31}$$

12. Se construye un nuevo modelo lineal hipotético, reemplazando las variables  $y_{st}$  por las correspondientes  $x$  a partir de las ecuaciones de conexión  $h_1$ ,  $h_2$  y  $h_3$ ; en este caso persiste como incógnita la variable  $Y_{31}$  ya que, por corresponder a una corriente de salida o terminal del segmento, no participa en ninguna ecuación de conexión.

El modelo resultante, en forma estándar y donde participan cuatro variables y cuatro parámetros de linearización en cuatro ecuaciones, es:

$$\begin{aligned} a_{111} * x_{12} - x_{21} &= 0 \\ a_{211} * x_{21} - x_{31} &= 0 \\ a_{311} * x_{31} - y_{31} &= 0 \\ -x_{12} + a_{321} * x_{32} &= 0 \end{aligned}$$

o matricialmente, de la forma  $A * X = B$ , así:

$$\begin{pmatrix} a_{111} & -1 & 0 & 0 \\ 0 & a_{211} & -1 & 0 \\ 0 & 0 & a_{311} & -1 \\ -1 & 0 & a_{321} & 0 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} x_{12} \\ x_{21} \\ x_{31} \\ y_{31} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -a_{111} * x_{11} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

13. Se resuelve en forma simultánea el modelo lineal hipotético, para encontrar nuevos valores de las variables  $x_{12}$ ,  $x_{21}$ ,  $x_{31}$  e  $y_{31}$ ;

14. Se resuelven los modelos  $g_1$ ,  $g_2$ ,  $g_3$  y  $g_4$ , con los parámetros  $U_1$ ,  $U_2$  y  $U_3$  y los valores de las variables  $x_{12}$ ,  $x_{21}$  y  $x_{31}$  encontrados en el paso anterior; con estas soluciones se conocen los valores de las variables  $y_{11}$ ,  $y_{21}$ ,  $y_{31}$  e  $y_{32}$ ;

15. Se encuentran los nuevos parámetros de linearización, de acuerdo con los pasos 4, 7, 10 y 11;

16. Se compara la norma  $|| a^{u_{ijk}} - a^{p_{ijk}} ||$  con el tamaño máximo asignado en el paso 1. Si esta norma es mayor, se regresa al paso 13; y si es menor, se concluye el proceso de cálculo.

Así, el último valor de cada variable revela el estado del segmento de proceso 1, mediante una simulación con enfoque simultáneo con modelos simplificados mediante parámetros de linearización.

## ESTRUCTURAS DE SIMULADORES EN ESTADO ESTABLE

La simulación en estado estable, como apoyo importante en el diseño de procesos, se identifica fuertemente con los programas o paquetes de computador que la realizan. En efecto, estos programas se denominan simuladores y han tenido una evolución concomitante con la simulación misma, como técnica, y con los computadores, como máquina. Así, los simuladores han trascendido de los grandes equipos a los pequeños que hoy por hoy invaden al mundo; y a la par, con visos técnicos y comerciales, presentan una estructura y organización, para adecuarse competitivamente a la demanda solvente de cada momento, conservando algunos rasgos característicos.

Ahora bien, el enfoque de la simulación, o la estrategia seguida para el cálculo, trasladan este atributo al simulador, fijando y condicionando algunos parámetros de su estructura. En consecuencia, un simulador refleja a través de su estructura y organización el tipo de simulación

que realiza y determina el modo de su utilización en esta dirección. Un simulador con enfoque modular global se confecciona especialmente para cada propósito, con estructura rígida para simular cada determinado segmento de proceso; si se modifica la estructura del segmento a simular, también debe modificarse el simulador. Esta característica es inherente a este tratamiento de simulación: se construye un sólo gran modelo, a partir de los modelos de las unidades de proceso involucradas, con una y sólo una forma de conexión entre corrientes.

La estructura rígida trae consigo la necesidad de un tamaño pequeño de memoria para almacenamiento de información y una alta velocidad de respuesta, ya que no aparecen operaciones de ensamble ni transferencia de información y control entre módulos. Un simulador con enfoque simultáneo, con ecuaciones lineales, se confecciona también con propósitos especiales, con estructura rígida para simular un determinado segmento de proceso. Si cambia la organización del segmento, cambian también las ecuaciones de conexión de corrientes y los modos de ensamblar las ecuaciones lineales, aunque se conserven las ecuaciones de los modelos individuales; y si cambian las unidades del segmento, cambian además las ecuaciones de los modelos. Estos simuladores presentan necesidades de memoria y velocidades de respuesta similares a las de los simuladores con enfoque modular global.

Un simulador con enfoque modular secuencial se confecciona con propósitos generales, con estructura flexible para simular una gran variedad de segmentos de proceso, con diferentes tipos de unidades y diversos modos de conectarse; cada unidad, representada por un módulo, determina en forma autónoma sus corrientes de salida, con base en sus parámetros y sus corrientes de entrada, sin depender de cuales

unidades las generaron. En contraste con los simuladores de estructura rígida, la estructura flexible trae consigo la necesidad de un tamaño grande de memoria para almacenamiento de información y una moderada velocidad de respuesta, ya que abundan las operaciones de transferencia de información y control entre módulos.

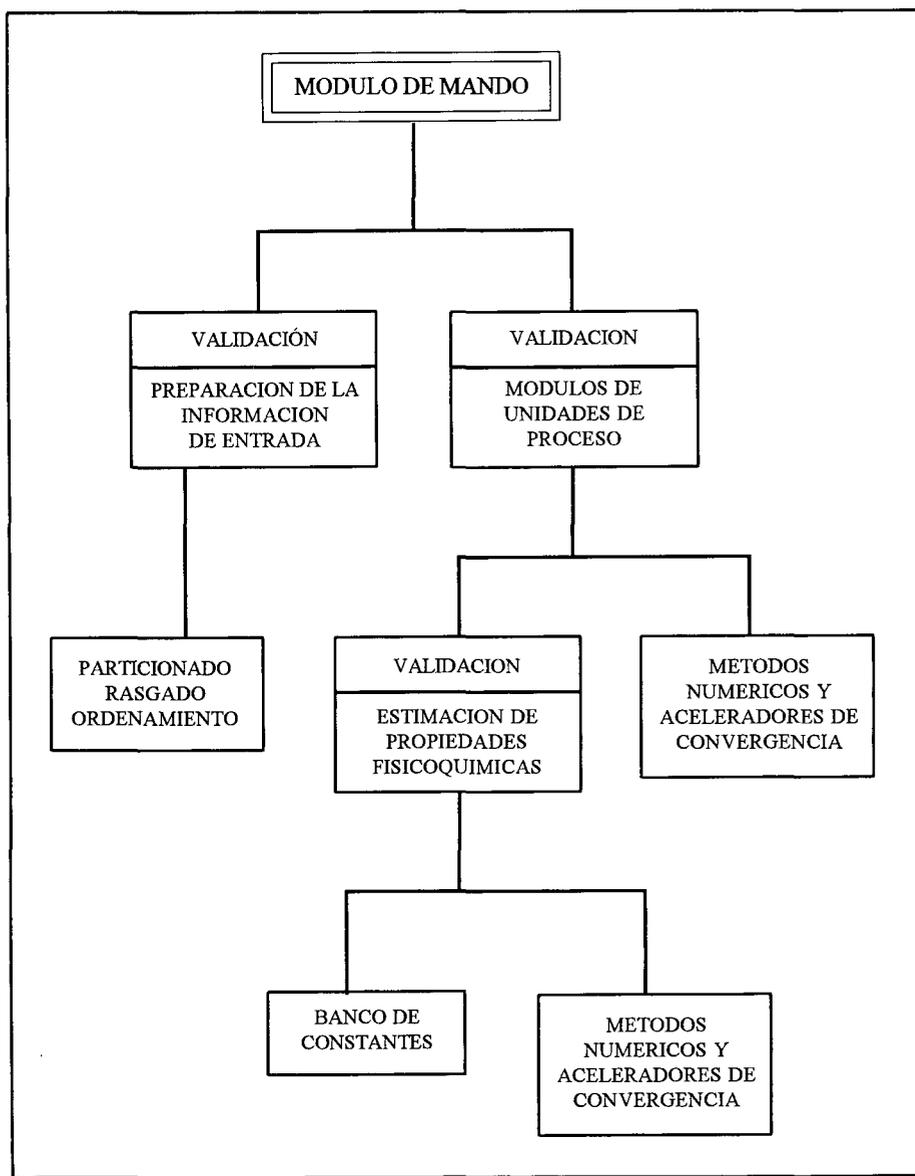


Figura 3. Estructura de un simulador de procesos químicos en estado estable, con enfoque modular secuencial.

## **ESTRUCTURA CON ENFOQUE MODULAR SECUENCIAL**

Un simulador con enfoque modular secuencial es un conjunto de módulos interconectados, cada uno con categoría e identidad particular y fines específicos, donde se establecen claramente las entradas y salidas de información. En efecto, la propiedad o cantidad que fluye es información, mediante valores de variables que se calculan como salidas de unos módulos y se trasladan a las entradas de otros, de acuerdo con el ordenamiento del segmento a simular.

La estructura de este simulador es el conjunto de normas y elementos que reflejan su organización y engranaje internos; de otra forma, es el conjunto de módulos, jerarquía, comunicaciones que hay entre ellos, dirección y

---

**El módulo de mando es sintéticamente una secuencia organizada de reglas de decisión, que operan de acuerdo con valores de variables normalmente binarias, para definir una ruta en la simulación.**

---

restricción de los flujos de información e interfases de compatibilidad de información entre módulos. La estructura de un simulador de esta naturaleza obedece a las necesidades y pretensiones de utilización, con más o menos módulos, unas u otras conexiones y un grado de alcance dado. En la figura 3 se ilustra una estructura genérica, con módulos de mando,

validación, preparación de la información de entrada, unidades de proceso, estimación de propiedades fisicoquímicas, métodos numéricos y aceleradores de convergencia y banco de constantes.

### **MODULO DE MANDO**

Este programa se conforma para organizar y supervisar las transferencias de control y los flujos de información, a lo largo de una simulación, de acuerdo con el diagrama de flujo del segmento de proceso simulado. Usualmente se da al módulo de mando el atributo de programa ejecutivo, asimilando su actividad “gerencial” de distribución ordenada y control del trabajo de cálculo que deben realizar otros módulos; así como por su función de seguimiento riguroso a cada cálculo, conociendo en cada momento el estado de la simulación.

El módulo de mando, mediante otros módulos, verifica la validez lógica y estructural de la información que emplea, paso a paso, para establecer la adecuada determinación del modelo que procede a resolver en un módulo dado, antes de llamarlo a ejecución. Así, se garantiza la existencia de la información mínima que permite obtener respuestas, luego de ejecutar cada módulo. Se denomina ejecución de un módulo al proceso de cálculo seguido en la solución del modelo que representa.

El módulo de mando es sintéticamente una secuencia organizada de reglas de decisión, que operan de acuerdo con valores de variables normalmente binarias, para definir una ruta en la simulación. El módulo de mando define en cada momento, que módulo ejecutar y cuándo terminar; igualmente, este módulo gobierna la entrada y salida de datos y mensajes, según las condiciones que vaya evaluando y confrontando con sus reglas de decisión.

### **MODULOS DE PREPARACION DE LA INFORMACIÓN DE ENTRADA**

La información relacionada con un segmento de proceso se transforma en un diagrama de flujo de información y se entrega a un simulador en forma de matrices y vectores, donde

se sintetizan las variables de proceso y su configuración, por medio de cantidades discretas. Con esta información, el simulador invoca la ejecución de los módulos de preparación, para realizar las etapas de particionado, rasgado y ordenamiento. Estos módulos de preparación se ejecutan por invocación solamente del módulo de mando y también solamente a él entrega respuestas.

Las etapas referidas conducen fundamentalmente a: primero, detectar los ciclos del diagrama de flujo de información, los cuales corresponden a las recirculaciones del segmento de proceso considerado; segundo, definir las corrientes de corte o rasgado, mediante las cuales se abre o lineariza cada ciclo; y tercero, consecuentemente establecer un orden de solución, donde se garantice, paso a paso, que se dispone de la información suficiente para ejecutar cada módulo. Para este efecto, se parte de un conjunto de modelos (o conjunto de conjuntos de ecuaciones), con alguna organización, y se concluye con un orden de solución de modelos. Complementariamente, trasladando esta estrategia al nivel de un sólo modelo (o conjunto de ecuaciones), es factible abordar un tratamiento para encontrar también sistemáticamente un orden de solución de ecuaciones.

### MODULOS DE UNIDADES DE PROCESO

Hay una simbiosis de identidad entre módulo, unidad de proceso y modelo representativo. Realmente, estos módulos corresponden a un modelo y un algoritmo de cálculo que permite resolver la unidad de proceso que representan, siempre en la dirección explícita de evaluar las corrientes de salida: no se permite otra forma para reducir a cero sus grados de libertad. Los módulos contemplados suelen construirse con modelos y métodos muy diversos, desde muy sencillos hasta muy sofisticados y complejos.

Así, es usual ejecutar los primeros pasos de simulación con modelos y métodos aproximados, para lograr una primera "idea" del estado del segmento de proceso simulado; y afinar las respuestas sólo en los últimos pasos de simulación, mediante modelos y métodos más precisos, para perfeccionar la predicción.

Estos módulos se invocan solamente desde el módulo de mando y también solamente a él entregan respuestas; y durante la ejecución suelen invocar los módulos de estimación de propiedades fisicoquímicas y los de métodos numéricos y aceleración de convergencia.

Los módulos disponibles deben cubrir una gama amplia de posibilidades, para que puedan simular múltiples segmentos de proceso. La

<b>Mezcla o suma de corrientes</b>	Para solución ideal o no ideal Adiabática o con alguna carga calórica
<b>División de corrientes</b>	Adiabática
<b>Equilibrio</b>	Físico: Vaporización instantánea adiabática o isotérmica Químico
<b>Separación física</b>	Columnas de destilación, absorción o extracción
<b>Reacción química</b>	Reactores estequiométricos o de equilibrio De tanque agitado de mezcla perfecta o tubular De lecho fijo o fluidizado
<b>Modificación de presión</b>	Bombas o compresores Expansores o turbinas
<b>Modificación de temperatura</b>	Intercambiadores de calor Calentadores o enfriadores Condensadores o evaporadores Hornos

Tabla 3. Módulos de simulación de unidades de proceso.

capacidad de un simulador se mide en términos del número de unidades, así como la variedad de opciones de modelos y métodos. Dentro de los módulos que representan unidades de proceso se encuentran convencionalmente los que se ilustran en la tabla 3, donde se clasifican de acuerdo con la naturaleza de la transformación que se lleva a cabo.

### **MODULOS DE ESTIMACION DE PROPIEDADES FISICOQUIMICAS**

Para la ejecución de los módulos de las unidades de proceso se necesitan, paso a paso y con diferentes condiciones, las propiedades fisicoquímicas de los componentes y mezclas presentes en cada corriente. Estas propiedades pueden suministrarse de dos maneras: externamente, para cada condición; o

internamente, ejecutando algún módulo con el cual se resuelve algún modelo, cada vez que sea el caso. En este sentido, la posibilidad de evaluación interna de propiedades aumenta la capacidad del simulador y evita accesos y validaciones al exterior; corresponde ilustrar aquí el procedimiento interno. Esta estimación se hace en dos grandes niveles: primero, para componentes puros, interactuando con algún módulo de unidades de proceso y el banco de constantes; y segundo, para mezclas, interactuando con algún módulo de unidades de proceso y el de estimación de propiedades de compuestos puros.

Estos módulos se invocan desde los de las

unidades de proceso e invocan al banco de constantes. Así, para estimar alguna propiedad de un compuesto puro, el módulo correspondiente toma información de las constantes características (desde el banco de datos, con base en el compuesto y el tipo de propiedad) y de las condiciones para la evaluación (desde el módulo donde se desea la propiedad); a continuación, con esta información sigue un algoritmo de cálculo para resolver un modelo y producir una respuesta: un valor estimado para la propiedad deseada del compuesto puro.

Análogamente, para estimar alguna propiedad de una mezcla, el módulo correspondiente toma información de las propiedades de los componentes que conforman la mezcla (desde los módulos de estimación de

propiedades de compuestos puros) y de las condiciones para la evaluación (desde el módulo donde se desea la propiedad); a continuación, con esta información sigue un algoritmo de cálculo para resolver un modelo y producir una respuesta: un valor estimado para la propiedad deseada de mezcla.

---

**Para estimar alguna propiedad de un compuesto puro, el módulo correspondiente toma información de las constantes características (desde el banco de datos, con base en el compuesto y el tipo de propiedad) y de las condiciones para la evaluación (desde el módulo donde se desea la propiedad).**

---

Los modelos de esta categoría estiman o simulan propiedades fisicoquímicas, con base en múltiples modelos (desde sencillos hasta complejos y desde particulares hasta generales), para estados determinados o con cero grados de libertad. La determinación se establece desde el módulo de la unidad de proceso que invoca la propiedad, otorgando los valores pertinentes. Las propiedades fisicoquímicas que suelen simularse, por diferentes modelos, se ilustran en la tabla 4.

PROPIEDAD	COMPUESTO	COMPONENTE	MEZCLA
	PURO	EN MEZCLA	
- Densidad	X		X
- Compresibilidad	X		X
- Coeficiente de fugacidad	X	X	X
- Fugacidad	X	X	X
- Coeficiente de expansión térmica	X		X
- Presión de vapor	X		
- Temperatura de ebullición	X		
- Calor latente de vaporización	X		
- Capacidad calorífica	X		X
- Entalpía	X	X	X
- Energía interna	X	X	X
- Energía libre	X	X	X
- Entropía	X	X	X
- Entalpía de formación	X		
- Energía libre de formación	X		
- Entropía de formación	X		
- Tensión superficial	X		X
- Viscosidad	X		X
- Conductividad térmica	X		X
- Difusividad	X	X	
- Presión de burbuja y rocío			X
- Temperatura de burbuja y rocío			X
- Coefi			

Tabla 4. Propiedades fisicoquímicas que se simulan.

---

## **BANCO DE CONSTANTES DE COMPUESTOS PUROS**

De los numerales anteriores se desprende que la solución de un determinado módulo de unidad de proceso, paso a paso, necesita las propiedades de los componentes y las mezclas que allí intervienen, sujetas a condiciones diferentes, según el estado simulado. Igualmente, estas propiedades se estiman desde los módulos pertinentes invocando las constantes características que se encuentran en un banco. Este banco permite su lectura solamente desde el módulo de estimación de propiedades de compuestos puros. El tamaño del banco depende del número de compuestos y del número de constantes por compuesto que se tenga; y en términos de este tamaño puede aumentar la capacidad y versatilidad de uso del simulador, para trabajar con más y más compuestos y mezclas. Este tamaño también puede conducir a alguna organización, para facilitar el acceso, con base en subbancos que contienen parte de la información.

La información del banco corresponde a un orden totalmente coherente con la información de los módulos de estimación de propiedades: desde estos se piden al banco (o leen de él) solamente las constantes de las posiciones que permiten la estimación deseada y no otras; según sea la propiedad y el compuesto, se accede a unas únicas posiciones en el banco. Un banco convencional de constantes, que tiene raigambre en el medio, lo constituye el de Reid, Prausnitz y Poling, con la mayoría de veintitrés constantes para seiscientos dieciocho compuestos variados; igualmente, tienen gran cobertura los bancos de DECHEMA y de DAUBERT & DANNER. La información

---

**El caso más frecuente en la simulación en estado estable es el de hallar una raíz, cuando se asigna el cálculo de una variable a una función, otorgando para ello valores a las demás variables que inciden en tal función.**

---

presente en el banco condiciona las estimaciones de las propiedades que se pretenden; tales estimaciones sólo son posibles si se dispone de las constantes requeridas en el modelo, para los compuestos pertinentes.

## **MODULOS DE METODOS NUMERICOS Y ACELERACION DE CONVERGENCIA**

Estos módulos prestan un apoyo importante para los cálculos que se realizan en los módulos de las unidades de proceso y de estimación de propiedades fisicoquímicas. En efecto, la solución de cada ecuación o de grupos de ecuaciones puede ser más rápida y segura con la utilización de estas técnicas especiales.

Los módulos de métodos numéricos, para favorecer los cálculos en la solución de un modelo o ecuación tienen como función primordial:

- calcular la raíz de cualquier ecuación, escrita en la forma  $f(x) = 0$ ;
- diferenciar numéricamente;
- integrar numéricamente; y
- resolver sistemas de ecuaciones lineales, y no lineales, siempre y cuando obedezcan a alguna estructura típica.

El caso más frecuente en la simulación en estado estable es el de hallar una raíz, cuando se asigna el cálculo de una variable a una función, otorgando para ello valores a las demás variables que inciden en tal función. El módulo recibe la función en forma estándar y un tamaño máximo permitido para el error y retorna el valor aproximado de la raíz:  $x$  tal que  $f(x) \approx 0$ . Los

métodos que se emplean son variados: sustitución directa, Regula-Falsi, Newton, Bisección y otros. De otra parte, para favorecer los cálculos en la solución iterativa de una serie de modelos, como en el caso de segmentos de proceso con recirculaciones, los módulos de aceleración de convergencia prestan un gran apoyo.

Estos módulos operan con análoga estrategia que los de métodos numéricos, trasladándose del nivel de ecuaciones al de modelo o conjunto de ecuaciones. La aceleración de convergencia promueve la culminación del cálculo iterativo; y a la vez incorpora un proceso más en cada iteración, algunas veces complejo. Los módulos de aceleración de convergencia más frecuentes, con sus diferentes variantes ya clásicas en el medio, son los de Wegstein, Newton, Eigen, Sobrerrelajación y otros.