

# Importancia de los Métodos Numéricos en la Simulación de Procesos Químicos

Matemática Superior Aplicada  
3er. Nivel de la Carrera en Ingeniería Química  
Universidad Tecnológica Nacional – Facultad Regional Rosario

Prof.: Dr. Alejandro S. M. Santa Cruz



# ¿Qué es la Simulación?

La simulación es el acto de representar algunos aspectos del mundo real por números o símbolos que pueden manipularse fácilmente para facilitar su estudio.



# ¿Cuál es su Propósito?

- Diseño de nuevas unidades y nuevos procesos.
- Adaptación de equipos en uso a otras alternativas de proceso (revamp).
- En proceso:
  - Identificación de cuellos de botella.
  - Estudios de conservación energéticos.
  - Revisión para nuevas especificaciones o distintas alimentaciones.
  - Optimización y ajustes.



# ¿Qué es un Simulador de Procesos?

Es una herramienta de ingeniería (programa) que permite realizar en forma automática cálculos sobre balances de materia, balances de energía y propiedades fisicoquímicas.

**NO ES UN INGENIERO DE PROCESOS!!**



# ¿Qué Ventajas Ofrece un Simulador?

- Los cálculos son rápidos (velocidad de cálculo).
- Se pueden explorar muchas soluciones.
- Exactitud y resultados consistentes.
- Cálculos sofisticados (termodinámicos y operaciones unitarias).
- Estandarización de organizaciones internas.
- La experiencia es menos costosa que cualquier ensayo en planta.



# ¿En qué Situaciones (Estados) y/o Regímenes de Operación/Diseño de Procesos se Aplica la Simulación de Procesos?

## 1) Situaciones de operación y/o diseño:

- Análisis en estado estacionario.
- Análisis dinámico.
- Análisis de eventos discretos.

## 2) Regímenes de operaciones y/o diseño de procesos:

- Régimen seguro => operación segura, diseño seguro.
- Operación/diseño en estado estacionario.
- Operación/diseño óptimo.



# ¿Qué Beneficios Otorga la Simulación?

## 1) Análisis en estado estacionario.

- Base para toma de decisión económica.
- Base para optimización y dinámica.
- Para análisis de rutina on-line.
- Conduce a diseños más ajustados o a medida con flexibilidad.
- Mejora de sistemas de administración o gestión de procesos .

## 2) Análisis dinámico en el diseño.

- Suministra visión interna del sistema.
- Mejoramiento de la calidad a través de un control más adecuado.
- Mejora de las políticas de arranque y parada.
- Mejor seguridad. Detección de riesgos.

## 3) Análisis dinámico en operaciones.

- Mejora calidad.
- Operación más segura.
- Investigación de incidentes.
- Procedimientos de emergencia.
- Mejora optimización.



# Para una Correcta Simulación se Requiere:

- Modelos apropiados de operaciones unitarias.
- Datos apropiados de componentes.
- Modelos termodinámicos apropiados.
- Datos apropiados de constantes de alimentación.
- Datos de operaciones unitarias apropiados.





# ¿Cuáles son las Dificultades que Ofrece la Simulación?

- Encontrar modelos adecuados
- Rigurosidad
- Calidad de la información termodinámica y fisicoquímica
- Disponibilidad de correlaciones adecuadas
- Interpretación
- Implementación



# ¿Cuáles son los Principales Tópicos a Considerar para que un Simulador Funcione?

- Modelado
- Flowsheeting
- Simulación en estado estacionario/dinámico
- Métodos de solución
- Estrategias de simulación



# Modelado y Simulación de Procesos Químicos

	Simulación Estado Estacionario	Optimización	Simulación Dinámica
Modelos	Grandes sistemas de ecuaciones algebraicas no lineales	Encontrar el máximo o mínimo de una función sujeta a restricciones	Grandes sistemas de ecuaciones algebraicas y diferenciales no lineales
Algoritmos	Sustitución directa Newton Wegstein Quasi-Newton	Programación lineal Métodos complejos	Euler Runge-Kutta Gear Modular Integración



# Problemas Típicos que se Plantean en Simulación de Procesos en IQ

Los problemas más comunes que se plantean en simulación de procesos son dos, a saber:

1. Encontrar la solución de un sistema de ecuaciones algebraicas no lineales (polinomios) o trascendentes (mediante un método iterativo).
2. Efectuar la integración numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias y en derivadas parciales (mediante ecuaciones discretizadas en diferencias finitas que aproximan a las ecuaciones diferenciales continuas).



# ¿Qué son los Algoritmos Numéricos?

- Algoritmo: Del latín, dixit algorithmus (y éste a su vez del matemático persa Al-Jwarizmi):
  - Lista bien definida, ordenada y finita de operaciones que permite hallar la solución a un problema.
  - Dado un estado inicial y una entrada, a través de pasos sucesivos y bien definidos se llega a un estado final, obteniéndose una solución.
  - La máquina de Turing es un modelo matemático abstracto que formaliza el concepto de algoritmo.
- Son una clase de métodos para resolver una amplia variedad de problemas.
- Estos problemas se plantean a partir de la modelización matemática de fenómenos o procesos fisicoquímicos.
- Son especiales en el sentido en que únicamente emplean operaciones lógicas y aritméticas; por consiguiente, pueden implementarse sobre computadoras digitales.



# Simuladores de Proceso

- Paquetes para simulación digital:
  - Relevan al ingeniero de adquirir conocimientos acerca de los métodos de integración numérica.
  - En teoría facilitan al ingeniero la formulación y resolución de los problemas que se le plantean.
  - En la práctica tienen una utilidad limitada; en su puja por generalizar, usualmente, se vuelven ineficientes.
- Desafortunadamente no existe un algoritmo que funcione en forma óptima para todos los problemas que se plantean.
- El tiempo computacional de ejecución para resolver un problema real de ingeniería con uno de estos simuladores o paquetes de simulación es usualmente más largo que con un programa ad-hoc escrito en un lenguaje de alto nivel (FORTRAN, C, PASCAL, etc.).



# Uso de Paquetes Informáticos para Simulación de Procesos

➤ **Argumento en favor de la utilización de estos paquetes para simulación digital:**

- El tiempo de formulación y de resolución de problemas que se plantean en ingeniería de procesos se reduce.

➤ **Objeción:**

- La experiencia demuestra que es mucho mejor para el estudiante o ingeniero desarrollar un programa específico para el problema que se desea resolver. No sólo es computacionalmente más eficiente sino que además garantiza el conocimiento de cómo funciona el programa y cuáles son las hipótesis realizadas y las técnicas utilizadas. Esta metodología permite:
  1. La supervisión del programa cuando éste no funciona.
  2. Su modificación para manejar mucho más fácilmente nuevas situaciones que se planteen.
  3. El uso de subrutinas especiales para efectuar cálculos específicos (Numerical Recipes, IMSL, IBM, etc.).



# Métodos Numéricos + Computadoras Digitales



## Poderosa Herramienta para el Análisis Matemático

Permiten el manejo de:

1. *No linealidades*
2. *Geometrías complejas*
3. *Grandes sistemas de ecuaciones acopladas*





**Los métodos numéricos han desplazado al análisis matemático clásico en muchas aplicaciones industriales y de investigación, dado que:**

- **Son fáciles de emplear.**
- **Son poco costosos.**
- **Frecuentemente se dispone de ellos en programas computacionales enlatados.**



# ¿Existe algún límite a la capacidad de cálculo de los métodos numéricos?

- La respuesta es afirmativa.
- Punto de vista de muchos de científicos e ingenieros:

Si un problema no puede resolverse analíticamente (usando las herramientas del Análisis Matemático), entonces lo mejor es utilizar un algoritmo numérico implementado sobre una computadora digital. Este punto de vista se debe, sin lugar a dudas, al enorme poder de cálculo de los métodos numéricos.



# Desafortunadamente existen muchos problemas que son imposibles de resolver utilizando métodos numéricos:

- Para algunos de estos problemas no se ha encontrado todavía un modelo matemático completo y seguro que permita encontrarles una solución numérica.
- La dimensión de otros problemas es tan grande que su solución está más allá de los límites prácticos en términos de la tecnología computacional disponible.



# La cuestión depende de cuánto uno está dispuesto a pagar para obtener una respuesta.

- Algunos problemas son tan importantes que las industrias y los gobiernos están dispuestos a invertir millones de pesos para hacer práctica la resolución de problemas que antes no resultaba práctica.
- Todavía restan muchos problemas que resolver, tanto desde el punto de vista de la modelización de los sistemas fisicoquímicos como de la capacidad computacional.



# Algunos argumentos en contra del estudio e implementación en computadora de los métodos numéricos son:

- En los últimos años se han desarrollado grandes programas computacionales para simular el comportamiento de sistemas fisicoquímicos complejos. Estos programas se han diseñado para ser utilizados por aquellos profesionales de la ingeniería e investigadores científicos sin un conocimiento extensivo de su funcionamiento interno.
- Por otra parte, existen bibliotecas de subrutinas de cálculo en continua expansión que utilizan sofisticados métodos numéricos para realizar una amplia variedad de tareas matemáticas.



- La selección y aplicación de un método numérico en una situación específica es más una actividad propia de un arte que de una ciencia.
- Por consiguiente, el usuario de computadora que no tenga la habilidad ni el conocimiento para seleccionar modificar y/o utilizar un método numérico para aplicar a un problema específico y efectuar la programación del método, encontrará una severa restricción en el rango de problemas que puede manejar.
- Cuando se disponga de programas enlatados o subprogramas que han sido probados y demostrado su buen funcionamiento, lo más razonable es utilizarlos.



## Las dificultades en la utilización de programas enlatados y/o subrutinas tienen diversas causas, entre ellas:

- Existe una abrumadora variedad de programas que se pueden aplicar para resolver un problema dado.
- El material descriptivo (Guía del Usuario) rara vez dará una indicación sobre la eficiencia de la subrutina para resolver un problema específico o de su adaptabilidad para resolver el particular problema que se plantea.

# Conclusiones

- Existe una fuerte justificación para que el ingeniero o científico adquiera conocimiento acerca del funcionamiento de los métodos numéricos.
- Este conocimiento permitirá al usuario de computadora, seleccionar, modificar y programar un método adecuado para cualquier tarea específica, ayudarse en la selección y uso de programas enlatados y en subrutinas de bibliotecas y posibilitar la comunicación con un especialista en una forma inteligente y eficiente toda vez que busque ayuda para resolver un problema particularmente difícil.





# Lenguajes de Computación

- Lenguajes de bajo nivel o lenguajes de máquina.
- Lenguajes ensambladores.
- Lenguajes de alto nivel.



# Lenguajes de Alto Nivel

- Independientes de la computadora sobre la cual se corre el programa.
- A través del uso de un programa de computadora llamado compilador (o trasladador), los programas de alto nivel pueden convertirse a lenguaje de máquina (código de máquina) sobre el que el realmente el programa se ejecutará.



# El Problema de la Verificación (I)

- Una de las tareas más difíciles al obtener una solución numérica de un problema de ingeniería es verificar si tanto el programa computacional como la solución final son correctos.



# El Problema de la Verificación (II)

- El proceso de verificación se lleva a cabo en dos etapas:

1. Determinando si el programa funciona como el programador desea (por ejemplo, si la codificación es correcta). Este proceso se cumplimenta:

- a) Imprimiendo resultados intermedios.
- b) Efectuando manualmente verificaciones puntuales o mediante calculadoras de escritorio.

2. Determinando si el algoritmo empleado suministrará la solución correcta.

La verificación, dado que la solución del problema no se conoce de antemano, es indirecta. Esta verificación podría consistir, por ejemplo, en:

- a) Analizar los casos límites del problema para los cuales muchas veces pueden encontrarse soluciones analíticas.
- b) En el caso de programas o subrutinas de bibliotecas, el proceso de verificación, por lo general, se realiza en forma similar pero de una manera más extensiva y cuidadosa.



# ¿Cometen Errores las Computadoras?

- En un sentido o en otro, las computadoras pueden cometer errores, y de hecho lo hacen.
- Sin embargo, la gran mayoría de los errores encontrados en computación provienen de los usuarios. A veces resulta difícil de aceptar que un error que se resiste a ser detectado provenga de uno mismo.
- Por consiguiente, el procedimiento más eficiente que debe seguirse para descubrir errores es suponer que invariablemente éstos provienen del usuario hasta que esa posibilidad sea esencialmente eliminada.



# Errores de Computación

En el caso en que sean detectados errores de computación, éstos pueden deberse a:

- 1) Errores de hardware (máquina).
- 2) Errores de software (programa).
- 3) Una combinación de ambos.



# Errores de Hardware

- Relativamente raros.
- No los discutiremos en esta presentación.



# Errores de Software

- 1) Errores del sistema administrador de la computadora (sistema operativo). Estos errores provienen de interacciones imprevistas de un programa con otro.

Consecuencia:

- a) Falla total del sistema.
  - b) Comportamiento errático y resultados incorrectos.
- 2) Errores del compilador, que resulta en códigos incorrectos del programa objeto (programa de máquina).
- 3) Errores de las subrutinas de las bibliotecas.





# Consideraciones Acerca del Uso de los Métodos Numéricos

- En este punto crucial se hace necesario afirmar que para comprender a los métodos numéricos no basta con estudiarlos sino que los mismos deben ser utilizados en la resolución de problemas prácticos.
- Por consiguiente, resulta de vital importancia tratar de resolver los problemas que se plantean en el ámbito de la ingeniería de procesos utilizando los métodos numéricos más adecuados.

