

EVOLUCION SOBRE LA SIMULACION DE PROCESOS QUIMICOS EN LA UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

El presente documento pretende ilustrar el tránsito que suele seguirse para institucionalizar un programa de investigación en una Universidad del tercer mundo. Las diferentes etapas que se presentan corresponden a una combinación entre los elementos que se han programado y aquellos que han surgido en el camino, como consecuencia de la velocidad de cambio de esta temática en el mundo. De cualquier manera, y aún muy lentamente en el tiempo, ha sido posible penetrar en la disciplina de la simulación y generar dentro del profesorado y el estudiantado de ingeniería química de la Universidad una mínima cultura alrededor de este tópico. Los documentos aquí referidos se encuentran disponibles en el material bibliográfico con que cuenta el Grupo que investiga el tema.

*Daniel Bogoya M., Jorge Spinel G., Hermes Rangel J. y Pedro Bejarano J. Profesores
Departamento de Ingeniería Química
Universidad Nacional de Colombia.*

Es significativo el contraste entre la literatura especializada, de cobertura y de credibilidad universal, proveniente de comunidades científicas reconocidas mundialmente y el poblamiento gradual de una mediana tradición escrita en un micromundo, donde aún persisten dudas para acogerla. Este contraste es característico de una cultura tercermundista que, más temprano que tarde, debe evolucionar hacia estadios de mayor cobertura, donde se identifique y trascienda su utilidad. Es pertinente recorrer ese camino.

Esta evolución comenzó en la Universidad, a nivel del Departamento de Ingeniería Química de Bogotá, dentro del ambiente del gran computador de tercera generación, con base en operación fuera de línea y tarjetas perforadas.

En este contexto se realizaron dos Proyectos de Grado, como trabajos de simulación enfocados especialmente a cálculos de equilibrio líquido-vapor para procesos de separación física, con estructura rígida, en 1968 y 1972. Luego, se comenzaron ejercicios aislados para resolver pequeños problemas con la ayuda del computador, con alcances limitados a un único conjunto de variables de entrada.

A finales de 1980 se estructura la propuesta de investigación: “Simulación de procesos de transformaciones fisicoquímicas”, donde se sustentaron y plantearon estos objetivos:

1. Impulsar en la Universidad la investigación en el campo del modelamiento y adecuación de diversas transformaciones fisicoquímicas;
2. Integrar un grupo de especialistas para trabajar coordinadamente en el desarrollo de módulos simuladores;
3. Generar un paquete de simulación de procesos químicos;
4. Integrar algunos Proyectos de Grado de estudiantes, en la generación del paquete.

Para el desarrollo de esta propuesta, se plantearon entonces los siguientes pasos:

1. Generación de la estructura general del paquete de módulos. Se trataba aquí de establecer la jerarquía que debe tener el programa principal y de definir las transferencias de control, que puedan permitirse entre las rutinas, subrutinas y banco de propiedades de sustancias puras y de mezclas. De otra parte, debía definirse el tipo de información necesaria para la operación de cada módulo y aquella que había que entregar como mínimo, previendo las pruebas de consistencia que debería tener cada unidad, tanto al recibir información, como al entregarla procesada. También debió estimarse la necesidad primaria de cada módulo, dando una orden de prioridad y estableciendo la capacidad, restricción y alcance de cada uno de ellos.

2. Creación del banco de propiedades. Realmente las propiedades fisicoquímicas de un componente o de una mezcla de ellos no se tienen almacenadas; tales propiedades se calculan cada vez que las necesite un módulo de resolución de algún equipo, conocido un conjunto mínimo de propiedades de estado y los parámetros que caracterizan la naturaleza química del componente o de la mezcla. En consecuencia, el término “banco de propiedades fisicoquímicas” implicaba la organización de un archivo de parámetros y el desarrollo de una subrutina de cálculo por cada propiedad que se quería utilizar. Para satisfacer

Impulsar en la Universidad la investigación en el campo del modelamiento y adecuación de diversas transformaciones fisicoquímicas; e integrar un grupo de especialistas para trabajar coordinadamente en el desarrollo de módulos simuladores.

este paso debían colectarse los parámetros de un número alto de sustancias puras y de interacción de sus mezclas, para cargar el archivo. Estos datos se tomarían en parte de la literatura y en parte de la experimentación que se llevaría a cabo en el Laboratorio de Termodinámica.

3. Desarrollo de módulos para resolver equipos. En este paso se trataba realmente de seleccionar los modelos matemáticos, representativos de los procesos que sucederían en tales equipos, y las correspondientes técnicas numéricas que permitían su solución.

4. Integración del banco de propiedades con los módulos, constituyendo el paquete simulador de procesos químicos. En este momento se tenía la capacidad de someter a prueba el simulador, con los datos de aquellas plantas químicas que prestaran información real de sus procesos, como también de confrontar datos experimentales de laboratorio, con información procesada por el paquete.

Esta propuesta se mantuvo en incipiente debate en el Departamento, escudriñando la conveniencia de acogerla. La propuesta se archivó rápidamente en 1981.

Así, continuaron algunos trabajos todavía aislados con el propósito de mostrar la utilidad de la simulación como herramienta de cálculo, aplicable como ayuda docente, para evaluar procesos ya existentes y para estudiar el comportamiento de procesos en vías de diseño.

En el mismo 1981 se desarrolló el Proyecto de Grado "Diseño de un módulo para simular procesos de extracción líquido-líquido", el cual se incorporó al simulador de la Empresa Colombiana de Petróleos, SIMECP.

En este Proyecto se seleccionaron algunas correlaciones teóricas y empíricas para generar constantes de equilibrio líquido-líquido; se definieron modelos matemáticos para representar el proceso de extracción; y se implementaron los programas respectivos con su documentación de uso.

También en 1981 se desarrolló la Tesis de Posgrado "Diseño e implementación de un modelo simulador de sistemas multirreactivos homogéneos, isobáricos e isotérmicos", donde se propuso una variable impulsora de cambio, basada en una función logarítmica de la relación de actividades y la constante de equilibrio, para predecir un grado de transformación. Como consecuencia de este estudio, y con parte de la temática desarrollada en esta tesis, se presentó el trabajo "Un modelo de simulación de sistemas multirreactivos" en los siguientes eventos internacionales

1. I Congreso Latinoamericano de Investigación de Operaciones, Río de Janeiro, Brasil, 1 982.

2. X Congreso Interamericano de Ingeniería Química, VIII Congreso Chileno de Ingeniería Química, Santiago, Chile, 1983.

En 1982 se desarrolló el Proyecto de Grado "Introducción a la creación de un paquete para Ingeniería Química por computador", con enfoque modular secuencial de estructura flexible y una variedad de rutinas para estimar propiedades de compuestos puros y de mezclas, representar procesos y adelantar soluciones numéricas. Este Proyecto permitió hacer más tangible el concepto de simulación.

En el mismo 1982 se propuso incorporar al plan de estudios de ingeniería química una línea de tres asignaturas electivas técnicas, en el campo de la simulación. Esta propuesta debió sustentarse ante los profesores del Departamento y luego se archivó. Pasados seis años, tanto en el pregrado como en el reciente programa de posgrado, se ofreció formalmente una asignatura electiva de simulación.

En 1982 se desarrolló el Proyecto de Grado "Introducción a la creación de un paquete para Ingeniería Química por computador", con enfoque modular secuencial de estructura flexible y una variedad de rutinas para estimar propiedades de compuestos puros y de mezclas,

Durante 1983, y ante la relativa apertura investigativa, la Universidad pidió estructurar una propuesta de investigación en el área, para canalizar esfuerzos y adelantar trabajos coordinadamente.

Esta vez se elaboró y presentó una propuesta, con un presupuesto de diez millones de pesos (valor presente en 1983), respaldada por un grupo de trece profesores como investigadores, cubriendo casi todas las áreas de la ingeniería química; legitimada así la presentación, el Departamento la aprobó y, antes de culminar ese año, la Facultad de Ingeniería decidió presentarla

independientes; así mismo, se torna interesante toda labor que conduzca a la optimización del proceso. Para aquellos procesos en vía de diseño se despierta la intención de realizar estimativos del valor de las variables dependientes, para un sinnúmero de las variables independientes, eligiendo algún intervalo de funcionalidad; de otra parte, es indispensable conocer la factibilidad termodinámica del proceso, para continuar estudiando, si fuese el caso, su factibilidad económica.

... Actualmente, con la penetración de los computadores y la introducción de la ingeniería de sistemas, se presenta una adecuada complementación para acelerar la resolución de modelos matemáticos, labor que manualmente sería extremadamente dispendiosa. Por lo anterior, pueden fundirse los conjuntos de ecuaciones que gobiernan las transformaciones básicas de la materia y los parámetros de correlaciones empíricas, obtenidos de la experimentación, generando los módulos simuladores de las transformaciones en cuestión.

... Hoy en el mundo hay empresas e institutos de investigación, como Dow Chemical, Monsanto, Intec y otras, que dedican parte de sus esfuerzos al logro de módulos simuladores. Durante la década del 70, tales instituciones desarrollaron paquetes de simulación de procesos químicos como el Chess, el Flowtran, el Dyflow, el SiproProspro y otros, donde se invirtieron entre 60 y 100 años-ingeniero. Varios de los paquetes mencionados se encuentran en el comercio, para venta o alquiler, con precios elevados; por ejemplo, el paquete Flowtran cuesta unos US\$250.000 y no posee aún todas las opciones de predicción generadas en las últimas investigaciones sobre la temática..."

Nació, entonces, formalmente y se incorporó en la sociedad académica el grupo de investigación en simulación de procesos químicos, grupo que iba a generar una cultura y una mediana tradición escrita, dentro y fuera del país.

En 1984 el Comité de Investigaciones y Desarrollo Científico de la Universidad, CINDEC, aprobó el Proyecto de Investigación PI239: "Área del modelamiento y simulación matemática:

Para aquellos procesos en vía de diseño se despierta la intención de realizar estimativos del valor de las variables dependientes, para un sinnúmero de las variables independientes, eligiendo algún intervalo de funcionalidad.

ante el Comité de Investigaciones y Desarrollo Científico de la Universidad, CINDEC.

En este punto vale la pena resaltar algunos apartes de los antecedentes y las justificaciones que se plantearon en su momento:

"... como una respuesta a esta evolución nació la idea de generar modelos matemáticos y elegir técnicas de cálculo, para conocer las posibles respuestas en diferentes procesos, bien se trate de procesos existentes o de aquellos en vía de diseño. Para el caso de los procesos ya existentes, es importante conocer su dinámica y la manera como las variables dependientes varían cuando se estimule o perturbe en determinada dirección, una o más de las variables

generación de un simulador de procesos químicos”, le asignó un presupuesto de cuatrocientos mil pesos y lo presentó ante COLCIENCIAS, para obtener la financiación requerida.

En un primer momento, COLCIENCIAS oficialmente consideró importante el Proyecto; cinco meses después, aplazó la decisión de financiarlo hasta que alguna empresa del sector productivo se interesara por el Proyecto.

Finalmente, y ante la resistencia de diferentes empresas por financiar el Proyecto, COLCIENCIAS lo retiró de su trámite interno en 1985, año en el que un profesor del grupo de investigación realizó una pasantía en el Complejo Industrial de Barrancabermeja de ECOPETROL, concebida especialmente para coadyuvar la articulación Universidad-Industria.

Paralelamente, integrados ya con el Proyecto de Investigación, entre 1984 y 1986 se realizaron seis interesantes Proyectos de Grado:

1. “Transformación de diagramas de flujo de plantas de proceso, para su tratamiento en computadores digitales”, donde se trabajaron algoritmos de particionado, rasgado y ordenamiento, dentro de un enfoque de simulación modular secuencial.

2. “Desarrollo e implementación de programas por computador, para la estimación de propiedades fisicoquímicas de sistemas multicomponentes”, donde se afinaron modelos y métodos de cálculo para propiedades, en fase líquida o gaseosa, con interfases de acceso.

3. “Diseño de un módulo de simulación digital de reactores químicos”, donde se trabajaron reactores homogéneos

Se incorporó en la sociedad académica el grupo de investigación en simulación de procesos químicos, grupo que iba a generar una cultura y una mediana tradición escrita, dentro y fuera del país.

elementales, tubulares intermitentes o de tanques agitados de mezcla perfecta, en operación isobárica, isotérmica o no isotérmica. En este Proyecto se incorporó un procedimiento para resolver sistemas de ecuaciones multivariadas, lineales o no lineales, y un acelerador de convergencia.

4. “Dimensionamiento de equipo para la transferencia de calor con la ayuda de

computador”, donde se introdujo la programación matemática y los métodos numéricos en la optimización del diseño, se permitió la evaluación de equipos existentes y se estimaron coeficientes de transferencia.

5. “Elaboración de un módulo para la simulación de operaciones de humidificación”, con una estructura flexible e interfases para acoplarlo con otros módulos.

6. “Simulación digital de un reactor de flujo continuo”, con un modelo de tipo general y su sistema de control, aplicado particularmente a la reacción del ácido acético y el alcohol etílico para formar acetato de etilo, con diferentes tipos de perturbaciones en las variables de entrada.

De otra parte, en 1985 se ofreció en Bogotá el Seminario: “Simulación de procesos con énfasis en separaciones físicas”, soportado por diferentes profesores del grupo de investigación. A este Seminario asistieron, además de estudiantes y profesores de la Universidad Nacional, treinta y tres profesionales de diferentes entidades de todo el país: Universidades del Valle, Industrial de Santander, Distrital y de América; Servicio

Nacional de Aprendizaje, SENA, de Barranquilla y de Bogotá; Instituto de Asuntos Nucleares, IAN, BAVARIA, VIDRIOALUM, INDUSTRIAS LACTEAS, INGESAM; y Sociedad Colombiana de Ingeniería Química. En este Seminario se editaron memorias de las conferencias.

Y en 1987, en la Facultad de Minas en Medellín, también con profesores del grupo de investigación, se ofreció el Seminario "Simulación de procesos", enfocado a las estrategias de simulación para el diseño de procesos químicos. A este Seminario asistieron estudiantes, profesores universitarios y profesionales de la industria de la región. En este Seminario también se editaron las memorias correspondientes.

A partir de 1987 se cristalizó una reorganización de los grupos de investigación, ya a nivel de Facultad o Universidad. También se abrió camino el programa de posgrado de ingeniería química, con dos áreas de énfasis bien definidas: catálisis y polímeros. Simultáneamente, irrumpieron los microcomputadores de uso personal, con sistemas de operación en línea. La simulación se convirtió en un producto más comprensible, con operación interactiva; y a la vez, los módulos hasta ahora desarrollados, mediante decenas de miles de tarjetas perforadas para operación fuera de línea, cayeron en obsolescencia. Correspondió acometer una nueva era: la simulación vía microcomputador.

Así, en 1989 se realizó el Proyecto de Grado "Sistema interactivo para la estimación de propiedades fisicoquímicas vía microcomputador", donde se utilizaron diversos modelos para la estimación en línea y se conformaron dos bancos de datos: uno de bibliografía específica de este tema y el otro de constantes de compuestos. Este "software" se probó con diferentes sistemas, respondió satisfactoriamente y permitió presentar el trabajo "Estimación de propiedades fisicoquímicas vía microcomputador" en los siguientes eventos:

1. XVI Congreso Colombiano de Ingeniería Química, Cali, 1989.

2. II Simposio Latinoamericano de Propiedades de los Fluidos y Equilibrio de Fases, Salvador, Brasil, 1989.

Durante 1991, con la colaboración de un grupo importante de ingenieros químicos egresados de la Universidad en 1964, se logró obtener una licencia académica del programa de simulación HYSIM, desarrollado por HYPROTECH, y una primera llave para instalar un puesto de trabajo en microcomputador. Esta nueva circunstancia abrió la posibilidad de combinar los esfuerzos de esta disciplina: de una parte, se continuó con el desarrollo y la generación de software, de propósito específico; y de otra, se empezó a utilizar dicho programa, con la perspectiva de usuario.

En relación con el tipo de labor orientada al desarrollo y generación de software de propósito específico, se trabajó en dos frentes a partir del año 1991. En el primero se ejecutaron, con el carácter de Proyectos o Tesis de Grado, los siguientes trabajos:

1. "Modelamiento de un reactor de lecho fluidizado para combustión de carbón", en 1992.
2. "Simulación de un horno rotatorio para la producción de clínker", en 1993.
3. "Cálculo de condensadores para mezclas multicomponentes", en 1993.
4. "Simulación de un reactor multitubular catalítico de lecho fijo para la oxidación de o-xileno a anhídrido ftálico", en 1994.

La simulación se convirtió en un producto más comprensible, con operación interactiva; y a la vez, los módulos hasta ahora desarrollados, mediante decenas de miles de tarjetas perforadas para operación fuera de línea, cayeron en obsolescencia.

5. "Modelo bidimensional pseudohomogéneo para la simulación de un reactor multitubular catalítico de lecho fijo para la producción de o-xileno a anhídrido ftálico", en 1995.

6. "Modelamiento y simulación de un secador rotatorio", en 1995.

En el segundo frente se elaboraron artículos que daban cuenta de aplicaciones diversas a nivel de operaciones y procesos; varios de estos artículos sirvieron para participar en eventos académicos de orden nacional e internacional. Los más significativos fueron:

1. "Cálculo numérico mejorado de una vaporización instantánea. Caso generalizado de una mezcla de hidrocarburos ligeros". Ingeniería e Investigación, N° 22, Vol. 6, 1991.

2. "Formulación y cálculo numérico de una destilación diferencial para una mezcla de multicomponentes". Ingeniería e Investigación, N° 23, Vol. 6, 1991.

3. "Perfil de concentración en una pastilla catalítica cilíndrica". Ingeniería e Investigación, N° 23, Vol. 6, 1991; Química e Industria, N° 1, Vol. 17, 1992.

4. "A proposal numerical technique for the calculation of multicomponent condensers". Latin American Applied Research, N° 2, Vol. 23, 1993.

5. "Propuesta numérica para el cálculo generalizado del factor de efectividad". Memorias XV Congreso Interamericano de Ingeniería Química, Caracas, Venezuela, 1993.

6. "Propuesta numérica para el cálculo de columnas complejas en la destilación de multicomponentes". Ingeniería e Investigación, N° 28, Vol. 7, 1994.

7. "Elementos de modelamiento y modelos" Química e Industria, N° 2, Vol. 18.

En la perspectiva de utilización del programa HYSIM, con el apoyo dual de generación y de usuario, en 1994 se ofreció en Santafé de Bogotá nuevamente un Seminario sobre el tema, dirigido a ingenieros de diseño y desarrollo de procesos y a docentes universitarios. En esta ocasión se presentaron desarrollos propios y se utilizaron algunos casos típicos en el simulador Hysim.

En la dirección de usuario se desarrolló en 1995 el Proyecto de Grado "Análisis de sensibilidad del proceso de producción de estireno a partir de etil-benceno, asistido mediante Hysim", donde se emplean fundamentalmente las herramientas de transformación química, separación física, manejo de recirculaciones y dimensionamiento y evaluación de costos de un determinado esquema de producción propuesto.

Esta sintética evolución refleja algunos de los rasgos característicos del asentamiento de una investigación en nuestro medio, que comienza ahora la fase de la popularización, a nivel de microcomputador, posiblemente fundiéndose con la inteligencia artificial para confeccionar sistemas expertos en ingeniería química.

Para ésto, actualmente (1995), se cuenta con una incorporación social y tradición cultural valiosas, un recurso humano formado, un programa de proyectos y dos asignaturas electivas de simulación de procesos químicos, una en el pregrado y otra en el posgrado, desde donde se pretende formar los futuros "pares" que, interesados ya en la disciplina, participen en la construcción de otro salto cuántico conceptual.