



DISEÑO E IMPLEMENTACIÓN DE UNA SIMULACIÓN CON LA INCORPORACIÓN DE UNA OPERACIÓN UNITARIA CAPE-OPEN

Grado en Ingeniería Química Industrial

Autor: Juan Calixto Soto Afonso

Tutor: José Juan Macías Hernández

La Laguna, 5 de Julio de 2016

OP.UNIT. = Sistema (Equipo + Proceso Q.F.)
SIMULACIÓN = Sistema (Modelo Mat. + Comput. Digital)
INTERFAZ CAPE-OPEN = Sistema (Datos +Algoritmos)

Arquímedes en el siglo XXI

<< dadme la interfaz adecuada y controlaré el proceso del mundo>>

RESUMEN

La conceptualización de las operaciones unitarias como componentes fundamentales de la moderna Ingeniería de Sistemas y Procesos, llevó a la introducción en este campo de los métodos computacionales, utilizando software específico para su simulación y control. Sin embargo, normalmente los simuladores de procesos químicos solo permiten programar operaciones unitarias parcialmente personalizadas y con funcionalidad restringida al propio entorno del simulador. Con la llegada del middleware de interface CAPE-OPEN se hace posible programar y simular las mencionadas operaciones en todos los entornos que soporten este estándar. El propósito del trabajo consiste en mostrar la viabilidad de la implementación de una operación compatible CAPE-OPEN; una de las líneas de desarrollo de mayor perspectiva por sus cualidades de flexibilidad/personalización, interoperabilidad y carácter open source. Para esto, se modeliza y programa en el entorno Matlab - haciendo uso de la novedosa herramienta Unit Operation de Amsterchem - una operación unitaria de transporte de calor en un intercambiador de carcasa y tubos en estado estacionario, optando por el método de Bell-Delaware para el cálculo térmico e hidráulico. Una vez seleccionados los casos de estudio, se procede a la validación de la operación programada, mediante la comparación de los resultados de su ejecución en el simulador compatible y freeware COCO y los del simulador profesional UNISIM, que se toma como referencia o patrón de contraste.

Palabras clave: Operación Unitaria, Sistema, Modelo, Bell-Delaware, Simulación, interfaces CAPE-OPEN, Matlab Unit Operation, COCO, UNISIM

ABSTRACT

The conceptualization of the unit operations as basic elements of modern Process Systems Engineering led to the introduction of the computational methods in this area by using a specific software for its simulation and control. However, usually, chemical process simulators only make it possible to program partially customized unit operations with a functionality restricted to the simulator's own environment. The programming and simulation of the aforementioned operations were made possible by the advent of the CAPE-OPEN middleware of interface, in all the environments that support this standard. The aim of this work is to prove the viability of the implementation of a compatible CAPE-OPEN operation; one of the lines of investigation with more prospects due to its qualities of flexibility/customization, interoperability, and open source nature. With this aim in view, the Matlab environment is modeled and programmed using a new tool: the Unit Operation of Amsterchem -a stationary state heat transfer unit operation in a shell and tube heat exchanger, choosing the Bell-Delaware method for the thermal and hydraulic analysis. Once the case-studies have been selected, the validation of the programmed operation begins, by comparing the results of its execution in the compatible and freeware COCO simulator to those of the professional UNISIM simulator, which is taken as a reference pattern.

Key words: Unit Operation, System, Model, Bell-Delaware, Simulation, interfaces
CAPE-OPEN, Matlab Unit Operation, COCO, UNISIM

Estructura

1. INTRODUCCIÓN	1
1.1. Formulación del problema y justificación.....	1
1.2. Alcance y limitaciones.....	1
1.3. Objetivos.....	2
1.3.1. Objetivo General	
1.3.2. Objetivos Específicos	
1.3.3. Alcance y límites	
1.4. Metodología.....	3
2. MARCO CONCEPTUAL Y FUNDAMENTOS.....	4
2.1. Estado del Arte	4
2.2. Una epistemología sistémica para la ingeniería de procesos.....	7
2.3. Las operaciones unitarias como sistemas equipo-proceso.....	12
2.4. Operación unitaria estudiada.....	16
2.4.1. Equipo intercambiador de carcasa y tubos	
2.4.2. Proceso de transporte de calor en estado estacionario	
2.4.3. Método de Bell-Delaware para el cálculo térmico e hidráulico	
2.5. Modelización.....	27
2.6. La simulación de procesos.....	30
2.7. La simulación y los métodos numéricos.....	34
2.7.1. Solución analítica vs solución numérica	
2.7.2. Problemas de resolución con métodos numéricos	
2.7.3. Clasificación de los problemas en ingeniería química	
2.8. Software y programación.....	41
2.8.1. Los programas y las aplicaciones informáticas	
2.8.2. El entorno Matlab	
2.8.3. El middleware de interface CAPE-OPEN	
2.8.4. La herramienta stand alone Matlab Unit Operation	

3. SOLUCIÓN ADOPTADA.....	52
3.1. Modelo del sistema equipo-proceso.....	52
3.1.1. Deducción del modelo térmico de transferencia de calor	
3.1.2. Correlaciones de Bell-Delaware para el cálculo de U y Δp	
3.1.3. Diseño del modelo de la Operación Unitaria	
3.2. Programación del modelo.....	61
3.2.1. El programa Matlab	
3.2.2. Script con el código de la Operación Unitaria	
3.3. Implementación informática de la solución.....	68
4. MATERIALES Y MEDIOS.....	70
4.1. Ordenador.....	70
4.2. Simuladores COCO, UNISIM, Matlab y Matlab Unit Operation de Amsterchem.....	70
5. CASOS DE ESTUDIO, EJECUCIÓN, RESULTADOS Y VALIDACIÓN.....	71
5.1. Selección de los casos de estudio.....	71
5.2. Ejecución.....	72
5.2.1. Ejecución con el simulador COCO	
5.2.2. Ejecución con simulador profesional UNISIM	
5.3. Diseño experimental y resultados.....	77
5.4. Tratamiento de los datos.....	79
5.5. Validación y discusión de los resultados.....	81
6. CONCLUSIONES Y FUTUROS TRABAJOS.....	83
7. REFERENCIAS.....	89
8. ANEXOS.....	92

INDICE DE FIGURAS

Fig. 2-1: <i>Clasificación de operaciones unitarias</i> . Tomada de [11]	13
Fig. 2-2: <i>Representación de una operación unitaria</i>	15
Fig. 2-3: <i>Componentes del intercambiador de carcasa y tubos</i> . Tomada de [12]	16
Fig. 2-4: <i>Disposición geométrica de los tubos</i>	17
Fig. 2-5: <i>Parámetros geométricos y efectos de los baffles</i> . Tomado de [13]	18
Fig. 2-6: <i>Tipos de transmisión de calor en el intercambiador</i>	20
Fig. 2-7: <i>Flujo de calor a través de pared cilíndrica</i> . Tomada de [15]	21
Fig. 2-8: <i>Trasmisión de calor en el intercambiador</i> . Tomada de [14]	23
Fig. 2-9: <i>Representación de las corrientes de Tinker en la carcasa</i> . Adaptada de [3]	24
Fig. 2-10: <i>Zonas de caída de presión en el intercambiador</i> . Adaptada de [2]	26
Fig. 2-11: <i>Espectro del grado de modelización</i> . Adaptada de [16]	27
Fig. 2-12: <i>Tipos de modelo: caja negra, caja gris, caja blanca</i>	28
Fig. 2-13: <i>Modelo de una operación unitaria genérica</i>	28
Fig. 2-14: <i>Modos de simulación</i>	30
Fig. 2-15: <i>Componentes de un simulador de procesos</i> . Adaptada de [19]	31
Fig. 2-16: <i>Componentes de un simulador de procesos</i>	32
Fig. 2-17: <i>Uso de los métodos numéricos en la Ingeniería Química</i>	37
Fig. 2-18: <i>Métodos de resolución de ecuaciones algebraicas</i> . Adaptada de [23]	39
Fig. 2-19: <i>Tipos de software</i> . Tomada de [25]	42
Fig. 2-20: <i>Interacciones de un sistema operativo</i> . Tomada de [25]	42
Fig. 2-21: <i>Componentes de una aplicación informática</i>	43
Fig. 2-22: <i>Documentación función ode45 MATLAB</i>	45
Fig. 2-23: <i>Documentación función bvp4c MATLAB</i>	46
Fig. 2-24: <i>Interfaces de conexión para componentes CAPE-OPEN</i> . Tomada de [6]	47
Fig. 2-25: <i>Esquema de una operación unitaria genérica CAPE-OPEN</i> . Tomada de [7]	49
Fig. 2-26: <i>Conexión entre el simulador y la operación CAPE-OPEN</i> . Adaptada de [30].....	49
Fig. 2-27: <i>Instalación de la MUO</i>	50
Fig. 2-28: <i>Contenido de un archivo .xml</i>	51
Fig. 2-29: <i>Estructura y funcionalidad del módulo MUO</i>	51

Fig. 3-1: Circuito hidráulico y perfil de temperaturas en paralelo. Adaptada de [32]	52
Fig. 3-2: Volumen diferencial de control. Adaptada de [32]	53
Fig. 3-3: Perfil de temperaturas y valores en la frontera en sentido contracorriente. Adaptada de [32]	54
Fig. 3-4: Modelo de la operación unitaria	60
Fig. 3-5: Integración y funcionalidad de los componentes de la simulación. Adaptada de [7]	68
Fig. 5-1: Introducción de parámetros en Matlab Unit Operation	71
Fig. 5-2: Menú de edición de la herramienta MUO	72
Fig. 5-3: Introducción de datos de las corrientes, paralelo	73
Fig. 5-4: Menú de COCO, inserción de operaciones unitarias	73
Fig. 5-5: Flowsheet de la simulación COCO	73
Fig. 5-6: Valores de las corrientes de salida COCO, paralelo	74
Fig. 5-7: Perfil de temperaturas COCO, paralelo	74
Fig. 5-8: Introducción de datos de las corrientes, contracorriente	74
Fig. 5-9: Perfil de temperaturas COCO, contracorriente	75
Fig. 5-10: Flowsheet de la simulación Unisim	75
Fig. 5-11: Valores de las corrientes de salida UNISIM, paralelo	76
Fig. 5-12: Perfil de temperaturas UNISIM, paralelo	76
Fig. 5-13: Valores de las corrientes de salida UNISIM, contracorriente	76
Fig. 5-14: Perfil de temperaturas UNISIM, contracorriente	77
Fig. 5-15: Gráfico comparativo temperaturas de salida corriente caliente	79
Fig. 5-16: Gráfico comparativo temperaturas de salida corriente fría	79
Fig. 5-17: Gráfico comparativo presiones de salida corriente caliente	80
Fig. 5-18: Gráfico comparativo presiones de salida corriente fría	80

INDICE DE TABLAS

Tabla 2-1: Fuerza impulsora en las operaciones unitarias	15
Tabla 3-1: Parámetros de configuración del equipo	55
Tabla 3-2: Coeficientes para el cálculo de las correlaciones de Bell-Delaware. Adaptada de [2]	56
Tabla 5-1: Resultados simulaciones COCO	78
Tabla 5-2: Resultados simulaciones UNISIM	78
Tabla 5-3: Errores relativos de los resultados de las simulaciones	81

1. INTRODUCCIÓN

1.1 FORMULACIÓN DEL PROBLEMA Y JUSTIFICACIÓN

El problema planteado corresponde a una concreción, consensuada, de la propuesta de TFG del departamento de Ingeniería Química, presentada por el tutor de este trabajo, y que se formula como:

Diseño e implementación de una operación unitaria compatible CAPE-OPEN de transporte de calor en un intercambiador de carcasa y tubos

El estándar CAPE-OPEN representa una de las líneas de desarrollo de la simulación de procesos de mayor perspectiva por sus cualidades de flexibilidad, personalización e interoperabilidad. Además, la combinación de las cualidades de las interfaces CAPE-OPEN con el surgimiento de nuevas herramientas para los tradicionales paquetes de cálculo en ingeniería está favoreciendo su uso incluso para propósitos no comerciales. Por su parte, los intercambiadores de calor son equipos de lo más representativos de la industria y su modelización rigurosa constituye, aún hoy, un problema abierto.

Adicionalmente, resulta que los intereses académicos y personales del autor de este trabajo, concuerdan, en gran medida, con la temática de la propuesta del TFG. De hecho, se pretende, en un futuro, alcanzar una especialización profesional en el campo de la simulación de procesos.

1.2 ALCANCE Y LIMITACIONES

El presente trabajo contempla las siguientes especificaciones: simulación en modo rating y estado estacionario del equipo, corrientes mono-multicomponentes en fase líquida, sentido de corrientes paralelo/contracorriente y 1/2 pasos por tubos, constancia de las propiedades de las corrientes a lo largo del intercambiador, y proceso adiabático.

Y por el contrario, no se consideran: corrientes gaseosas o con cambio de fase, el modo de simulación diseño, la modelización rigurosa de la opción de múltiples pasos por tubos o carcasa y la discretización del modelo, para asumir la variación de los calores específicos, viscosidad, conductividad... de las corrientes respecto de su posición en el equipo.

1.3 OBJETIVOS

1.3.1 OBJETIVO GENERAL

Consiste en mostrar la viabilidad, a nivel académico, de la implementación de una operación unitaria compatible CAPE-OPEN, cubriendo todas las fases y aspectos implicados – epistemológico, teórico y práctico – en la elaboración de la misma.

1.3.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- ✓ Determinar una epistemología que de unidad y coherencia a las nociones o ideas, supuestos, métodos y procedimientos del ámbito propio de la ingeniería de procesos.
- ✓ Esclarecer la conceptualización de las operaciones unitarias y su inserción en un marco conceptual sistémico.
- ✓ Conocer las características, funcionamiento y procesos que se realizan en los intercambiadores de carcasa y tubos, en sus implicaciones para el modelado.
- ✓ Desarrollar la competencia de la modelización de operaciones unitarias.
- ✓ Adquirir los conocimientos y destrezas necesarios de programación y métodos numéricos para la implementación de operaciones unitarias en entornos de cálculo técnico.
- ✓ Utilizar simuladores y programas no comerciales, introduciéndose en el uso de software freeware/open source.
- ✓ Familiarizarse con las interfaces y nuevas herramientas CAPE-OPEN que permiten desarrollar componentes de software más flexibles e interoperables para la simulación de procesos químicos.

1.4 METODOLOGÍA

Teniendo en cuenta alcance y los límites del problema planteado, los objetivos a conseguir, así como la tipología que corresponde a este trabajo según la normativa de la ESIT:

Trabajo teórico-experimental, consistente en un trabajo de investigación en que se planteen unos objetivos y metodología. La consecución de los objetivos se contrastará de forma experimental o mediante modelos computacionales. En estos trabajos se requerirá una introducción al estado del arte, la metodología, una exposición clara y completa de los objetivos de la investigación, la exposición detallada de los resultados obtenidos y una lista de conclusiones.

Se adopta la siguiente metodología:

Fase teórica (obtener una solución)

- ✓ Revisión bibliográfica-documental: para determinar el estado de la cuestión y el marco conceptual de la investigación
- ✓ Exposición de los fundamentos teóricos y prácticos requeridos para la resolución del problema planteado
- ✓ Método hipotético-deductivo: para, a partir de las hipótesis-especificaciones del problema, determinar las correlaciones matemáticas del modelo
- ✓ Método deductivo: para obtener a partir de las correlaciones del modelo el código del programa que implementa la operación unitaria

Fase experimental (probar la solución adoptada)

- ✓ Determinación de los materiales y recursos necesarios para la experimentación
- ✓ Selección de los casos de estudio y diseño experimental
- ✓ Ejecución de la implementación desarrollada
- ✓ Tratamiento de los datos
- ✓ Validación y discusión de resultados

2. MARCO CONCEPTUAL Y FUNDAMENTOS

2.1 ESTADO DEL ARTE

Modelización de intercambiadores de calor

Los intercambiadores de carcasa y tubos son los más utilizados en la industria química por su gran versatilidad y eficacia en la transferencia de calor, que es fundamental en la mayoría de procesos industriales.

Hacia la mitad del siglo XX, con el objetivo de optimizar el rendimiento de estos equipos, se realizan las primeras investigaciones teóricas enfocadas en comprender su funcionamiento, principalmente en el aspecto del flujo en la carcasa, dada su gran complejidad fluidodinámica.

En efecto, en 1950 Kern presentó uno de los primeros métodos para el estudio del comportamiento térmico y de la caída de presión en el equipo [1], considerando el flujo en la carcasa como ideal. Posteriormente, en 1958 Tinker desarrolló un método más avanzado, ya que fue el primero en realizar un análisis del flujo real en la carcasa. Sin embargo, debido a la complejidad de este análisis, Bell en 1963, partiendo de las ideas de Tinker, propone un método basado en factores de corrección experimentales para determinar el coeficiente de transferencia de calor y la caída de presión en la carcasa [2]. En 1969 Taborek realizó modificaciones al trabajo desarrollado por Bell, ajustando algunos factores de corrección con nuevos datos experimentales. El último avance significativo logrado en este área fue el logrado por Wills-Johnson, que en 1984 consiguió realizar una simplificación del laborioso método de Tinker. Existen numerosos procedimientos para la simulación de intercambiadores de calor de carcasa y tubos, pero la gran mayoría son modificaciones de los anteriormente citados [3].

En la actualidad, los métodos tienen implementación informática mediante costosas suites especializadas, que permiten la simulación rigurosa, el análisis y la optimización de estos equipos aplicando fluidomecánica computacional (CFD).

Simulación en ingeniería química

En las décadas de los 80 y 90, la computación abrió nuevos horizontes a la ingeniería química. Aumentó exponencialmente la capacidad de cálculo, facilitando así la automatización, programación y control de las operaciones unitarias y los procesos.

La aparición del primer simulador de procesos químicos (Flowtran) en el año 1962 [4] supuso un hito que condujo al desarrollo de los actuales simuladores. El mismo, estaba basado en la estrategia modular secuencial, que es la que han utilizado tradicionalmente los programas comerciales (Aspen, Hysis, PRO/II, etc.) por su robustez y facilidad de uso. Sin embargo, las dificultades de éstos para el manejo de los reciclos, la simulación dinámica y las limitadas capacidades de optimización han supuesto que, a pesar de la problemática implementación industrial de los simuladores orientados a ecuaciones, éstos vayan imponiéndose paulatinamente. Herramientas como Aspen Custom Modeler o ROMEo son ejemplos de módulos complementarios basados en una perspectiva orientada a ecuaciones para potenciar las capacidades de los simuladores modulares secuenciales [5]. A pesar de los beneficios de esta estrategia, aun son pocos los simuladores que se basan en la misma (gProms, Emso), debido principalmente a que todavía no se ha conseguido resolver de forma eficaz el problema de la aproximación de los valores iniciales de la simulación.

Paralelamente, se han ido desarrollando simuladores con fines académicos y de investigación, no comerciales, que aunque no tienen todas las prestaciones de los simuladores profesionales, permiten adentrarse a los estudiantes en este campo aprovechando las posibilidades de personalización e interoperabilidad que ofrecen. Así, el simulador freeware COCO ha sido diseñado específicamente con este propósito.

Un nuevo paradigma

En el entorno de la Computer Aided Process Engineering (CAPE), el aumento en la complejidad de las simulaciones hizo necesario una interacción cada vez mayor entre distintos tipos de aplicaciones informáticas [6], cosa que resultaba bastante difícil y e ineficiente. Por esta razón, a principios de los 90 la empresa BP constató la necesidad de la creación de una serie de estándares para resolver la problemática de la interoperabilidad de forma sencilla y eficaz. Así pues, las compañías BASF y BP comenzaron proyectos paralelos con el mismo objetivo, que finalmente se fusionaron por iniciativa de la Unión Europea surgiendo el estándar no propietario CAPE-OPEN, mantenido por el consorcio CO-LaN. En la actualidad, el proyecto ha alcanzado un grado de madurez que ha permitido la implementación industrial del mismo en numerosas aplicaciones de simulación de procesos químicos, tanto comerciales como open-source o freeware. CAPE-OPEN soporta la interacción entre muchos tipos de elementos, pero actualmente solo los componentes de software que definen operaciones unitarias y paquetes termodinámicos tienen aplicaciones reales [7]. En definitiva, todo parece indicar que el futuro de la simulación de procesos va a estar muy vinculado al desarrollo de este estándar.

2.2 UNA EPISTEMOLOGÍA SISTÉMICA PARA LA INGENIERÍA DE PROCESOS

En este trabajo se considera necesario establecer el marco conceptual que de unidad y coherencia a las nociones o ideas, supuestos, métodos y procedimientos del ámbito que abarca la ingeniería de procesos. A este respecto, se propone como más adecuado un enfoque sistémico, que Senge [8 p. 23] define como:

... el Pensamiento Sistémico es un procedimiento para ver totalidades. Es un marco para ver interrelaciones en vez de cosas, patrones o regularidades en vez de eventos, procesos en vez de estados.

La adaptación que se presenta de esta epistemología (formulada en postulados, axiomas y tesis) se basa en el desarrollo que realiza Mario Bunge en su obra *Ser, saber, hacer* [9], hasta llegar al concepto nuclear de sistema.

Un objeto puede definirse como un individuo junto con sus propiedades. Es decir, $o = \langle x, P \rangle$, donde x es un elemento del sistema S y P es el conjunto de las propiedades conocidas de x . El principio subyacente es:

Ax1 Toda propiedad lo es de algún objeto, y no hay objetos sin propiedades.

Los objetos ideales (o conceptuales) son inmutables. Por ejemplo, el número 1 no se puede transformar en el número 2; lo que puede ocurrir es que una célula se divida en dos. En cambio, los objetos materiales son mutables; ni siquiera los más duraderos son inmutables.

Postulado: la propiedad universal de los objetos materiales es su mutabilidad.

Ax2 Para todo x : (x es material = df x es mutable)

Todo lo que cambia o puede cambiar posee energía (capacidad de cambio el propio objeto y/o su entorno) o sea, los conceptos de mutabilidad y energía son coextensos, aunque no cointensos. Cada rama de la ciencia caracteriza por lo menos un concepto de energía: cinética o potencial, térmica o elástica, nuclear o electromagnética, etc. Pero el concepto general de energía es ontológico, no científico.

Ax3 Para todo x : (x es material =df x tiene energía)

Postulado: Todo cuanto existe realmente es material

Ax4 Para todo x: (x es real =df x es material)

El mundo real es material. Este principio no niega la existencia de ideas; sólo niega su existencia autónoma, es decir, independiente de los sujetos pensantes, que son objetos materiales (aunque dotados de propiedades tanto suprafísicas como físicas).

Las propiedades de los objetos son muy diferentes de las propiedades de las ideas acerca de éstos, es decir, son independientes de los *ideantes* y sus circunstancias.

Tesis:

- ✓ Existen leyes objetivas, es decir, pautas a las que se ajustan las cosas, independientemente de nuestra actividad cognoscitiva
- ✓ Las leyes objetivas de las cosas son propiedades esenciales de ellas
- ✓ El principio de Lucrecio: nada sale de la nada y nada se convierte en nada
- ✓ El principio de legalidad: todo cuanto acontece satisface, por lo menos, una ley. No hay milagros.

Concepto de sistema

Un objeto complejo cuyas partes o componentes interactúan entre sí se llama *sistema*. Existen sistemas de tres tipos: materiales, conceptuales y semióticos. Los primeros están compuestos exclusivamente por cosas materiales (átomos, células, empresas). Los segundos están formados por conceptos (proposiciones, clasificaciones, hipótesis, teorías). Los terceros están compuestos por signos, que son cosas materiales artificiales y que, por convención, denotan a otros objetos o conceptos (código de programas, lenguas, textos, diagramas). La noción de sistema Bunge [9 p. 11] la define como:

Una entidad S es un sistema si y sólo si S es representable por la cuaterna

S = <composición, entorno, estructura, mecanismo>

Composición

Conjunto de todas los elementos de S.

Entorno

Elementos no pertenecientes a S que interactúan con los componentes de S.

Estructura

Conjunto de relaciones entre sus componentes, y entre éstos y su entorno.

Mecanismo

Conjunto de procesos de S que hace que el sistema funcione como tal.

Los componentes de una facultad son sus alumnos, profesores y sus empleados (PAS), edificios, instalaciones. El entorno de la facultad es el barrio donde se ubica, los padres, empresas; la estructura está constituida por las relaciones de estudiar, administrar, limpiar, etc., y el mecanismo típico de la facultad es el proceso de aprendizaje.

Proceso

Es una secuencia ordenada de estados de los objetos, ya sean materiales, conceptuales o semióticos. No hay proceso sin objetos, así

$$P = \langle e_i, \dots, e_f \rangle$$

A esta secuencia, que va del estado inicial al final, se la denomina *historia*. Si el estado siguiente del actual está completamente determinado por la historia anterior al mismo, el proceso se denomina determinista. En el caso de que el estado siguiente dependa exclusivamente del estado actual y no de la historia del sistema, el proceso es probabilístico o estocástico.

La representación sistémica de un proceso es

$$e_i \text{ (entrada)} \rightarrow \text{proceso} \rightarrow e_f \text{ (salida)}$$

Emergencia

Un sistema no es una mera agregación de elementos, debe necesariamente poseer propiedades de las que carecen sus componentes. Estas propiedades sistémicas se llaman emergentes (la energía de disociación de una molécula, la vida de una célula, la música de una orquesta, el valor de verdad de una proposición compuesta, etc).

La diversidad cualitativa del mundo es enorme, sin embargo, los objetos pueden agruparse en unas pocas categorías o niveles: físico, químico (reactores químicos), biológico (organismos), social (sistemas sociales), técnico (artefactos).

Postulados del materialismo sistémico, dinamicista y emergentista:

Ax5 Todos los objetos, sean materiales, conceptuales o semióticos, son sistemas o componentes (actuales o potenciales) de sistemas.

Ax6 Todos los sistemas poseen propiedades emergentes.

Ax7 Todos los sistemas se forman por agregación de objetos más simples.

Ax8 Todas las cosas de cada nivel están compuestas por objetos pertenecientes a niveles inferiores

El mobiliario del universo consta de los siguientes tipos de sistemas:

Conceptual, como las teorías, los sistemas hipotético- deductivos y los códigos legales.

Material

- ✓ Natural: los átomos, el sistema solar, los sistemas nerviosos, los organismos...
- ✓ Social: las facultades, las empresas, los partido políticos, las redes sociales informales...
- ✓ Técnico: los artefactos, la red internet, una planta química...

Semiótico, como los lenguajes, las partituras musicales, los proyectos técnicos...

Fisiosistemas

Es un sistema material en el que entre las relaciones de su estructura no se incluyen las de reconfiguración de los átomos de las moléculas de sus componentes: el sistema solar, un intercambiador de calor, un átomo...

Quimiosistemas

Es un fisiosistema en el que existe reconfiguración de los átomos de sus elementos para formar o disociar moléculas. Puede considerarse como un *reactor* cuyos componentes pertenecen a especies atómicas o moleculares, y cuya estructura incluye relaciones de ligadura que se forman y deshacen.

Los quimiosistemas tienen componentes físicos que interactúan de manera peculiar, mediante reacciones químicas. Estos procesos satisfacen leyes que no son físicas sino químicas, si bien tienen su raíz en propiedades físicas de los reactivos, tales como su número atómico. Lo químico está pues arraigado en lo físico y emerge de éste con leyes propias. Precisamente este es el fundamento de la industria química, obtener productos con propiedades emergentes respecto de las de los reactivos.

Los reactivos y productos dejan de ser parte de un quimiosistema y pasan a serlo de un fisiosistema una vez que se ha completado la reacción química, como sucede cuando cesa el fuego en una hoguera o se agota una pila eléctrica. Sin embargo, en ciertos reactores químicos la reacción permanece activa, aunque se llegue al equilibrio, se siguen formando y disociando moléculas permanentemente.

La relación lógica entre la química y la física todavía es una cuestión controvertida. La opinión de los *reduccionistas* es que la química se ha convertido en un capítulo de la física y, más en concreto, de la mecánica cuántica. No obstante, un análisis detallado de la química cuántica muestra que la mayor parte de los enunciados de los problemas de este campo presuponen conceptos suprafísicos como los de reacción química y la teoría de la cinética química.

2.3 LAS OPERACIONES UNITARIAS COMO SISTEMAS EQUIPO-PROCESO

En sus orígenes, la ingeniería química era básicamente una extensión de la ingeniería mecánica para resolver los problemas de fabricación de equipos, y una aplicación de los métodos de la Química y la Física en los procesos industriales de obtención de productos químicos. A principios del siglo XX, la Ingeniería Química se establece como una disciplina independiente y su primer avance teórico significativo se desarrolló en el marco de un pensamiento sistémico. Así, el concepto fundamental de *operación unitaria*, fue formulado en 1915 por Arthur D. Little, que Foust [10 p. 20-21] recoge en los términos siguientes:

Cualquier proceso químico, sin importar la escala, puede resolverse en una serie coordinada de lo que puede llamarse operaciones unitarias, como pulverización, mezclado, calentamiento, calcinación, absorción, condensación, lixiviación, precipitación, cristalización, filtración, disolución, electrólisis, etc. El número de estas operaciones unitarias básicas no es muy grande y, relativamente pocas de ellas, participan en un proceso particular. La complejidad de la ingeniería química se origina en la variedad de condiciones de temperatura, presión, etc., bajo las cuales deben llevarse a cabo las operaciones unitarias en diferentes procesos, y de las limitaciones en cuanto a materiales de construcción y diseño de aparatos, que son impuestas por el carácter físico y químico de las sustancias reaccionantes.

Este paradigma de las operaciones unitarias aportó la base epistemológica de la moderna Ingeniería de Procesos Químicos, sistematizando lo que era un estudio desordenado de multitudes de procesos y equipos, aparentemente distintos, con una metodología propia: analítica al considerar módulos independientes (operaciones unitarias) y sintética al estudiar la interrelación y acción conjunta de estos (proceso).

En efecto, en una fabricación compleja las interacciones de las etapas obligan a los ingenieros a considerar el proceso total como un macrosistema. Por otra parte, un estudio y análisis singularizado de los distintos tipos de procesos y equipos, según la forma en que los insumos se transforman en productos, permitió considerar a las operaciones unitarias concretas como casos particulares de un reducido número de tipos de éstas.

A continuación, se muestra una clasificación de las operaciones unitarias atendiendo tanto al tipo de proceso, como a la clase de equipo en que se realizan. Puede observarse que algunas operaciones son combinaciones de otras y que no figuran en la misma la gran diversidad de procesos de reacción química con sus correspondientes equipos, los llamados reactores. En el presente trabajo se estudia el caso de una operación unitaria de transporte de calor en un intercambiador de carcasa y tubos.

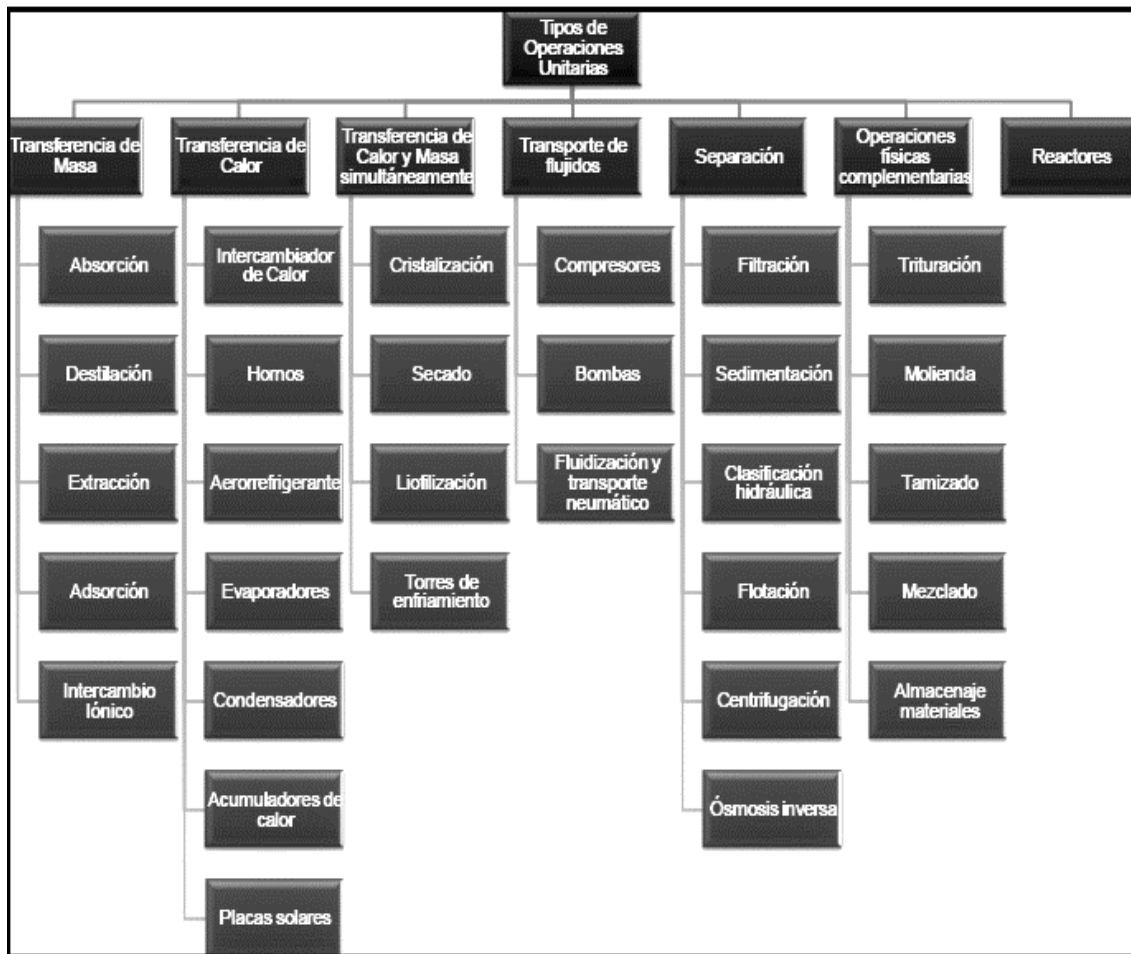


Fig. 2-1 Clasificación de operaciones unitarias. Tomada de [11]

Concepto de operación unitaria

De lo expuesto anteriormente, y siguiendo los planteamientos de la epistemología sistémica ya desarrollados, se puede definir a una operación unitaria (UO) como un tecnosistema equipo-proceso.

$$S = \langle \text{componentes, entorno, estructura, mecanismo} \rangle$$

$$UO = \langle \text{equipo, exterior del equipo, correlaciones, proceso} \rangle$$

Además, la operación unitaria como todo sistema tiene propiedades emergentes, es decir, que no poseen sus partes, por ejemplo la capacidad de transformar insumos en productos mediante un proceso. Así como la variedad en los equipos es enorme, solo se consideran cuatro clases de procesos.

Tipos de proceso en las operaciones unitarias

El objetivo de toda operación es modificar las propiedades de una determinada materia en función de las necesidades del proceso a realizar. Ahora bien, un cuerpo está completamente definido cuando están especificadas su:

- ✓ Masa o cantidad de materia y composición
- ✓ energía total (interna, potencial, cinética, eléctrica, magnética)
- ✓ Posición y velocidad

Por lo que este cambio de propiedades sólo puede suceder de tres formas:

- ✓ Modificando su masa o composición (separación, mezcla, reacción química)
- ✓ Modificando el nivel o tipo de la energía que posee (enfriamiento, vaporización, aumento de presión, ...)
- ✓ Modificando sus condiciones de movimiento (variando la magnitud y/o dirección de su velocidad)

En los procesos que se llevan a cabo en las operaciones unitarias existe una fuerza impulsora que establece la dinámica de los mismos. Se trata del gradiente, dentro del sistema, de alguna propiedad que determina la naturaleza del proceso.

TIPO DE PROCESO	PROCESO	GRADIENTE
Transferencia de masa	Difusión	Concentración
Transferencia de calor	Conducción, Convección, Radiación	Temperatura
Transferencia de cantidad de movimiento	Impulsión, Fricción	Velocidad
Reacción química	Mecanismo de la reacción	Gradiente químico

Tabla 2-1 Fuerza impulsora en las operaciones unitarias

En la Ingeniería de Procesos se consideran las operaciones unitarias como módulos del diagrama de flujo del proceso. A continuación se muestra la representación modular de una operación unitaria genérica

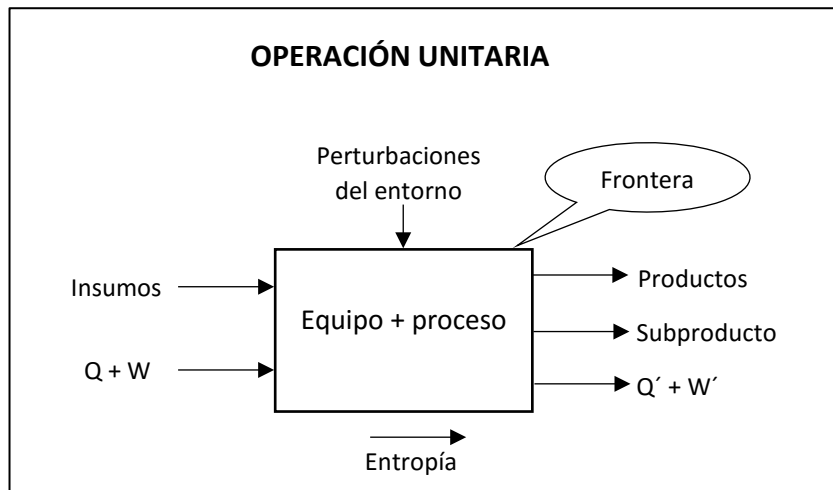


Fig 2-2 Representación de una operación unitaria

Tanto los insumos, como los productos y subproductos pueden ser sólidos o fluidos. Por la forma de entrada y salida se distingue entre corrientes y lotes. La energía, sea en forma de calor o trabajo, puede ser de entrada o de salida, sin embargo la operación unitaria siempre transfiere entropía al entorno, ya que los procesos reales son irreversibles. La influencia del entorno sobre la operación unitaria puede ser natural, como la producida por las condiciones del medio ambiente (presión o temperatura) o artificial, como la originada por instrumentos de medida. Para disminuir los posibles efectos negativos del ambiente, suele protegerse mediante aislamiento la frontera del sistema.

2.4 OPERACIÓN UNITARIA ESTUDIADA

2.4.1 EQUIPO INTERCAMBIADOR DE CARCASA Y TUBOS

Estos dispositivos funcionan sobre la base de la segunda ley de la termodinámica, que establece que entre dos cuerpos en contacto a distinta temperatura se produce una transferencia de energía, siempre desde el caliente hacia el frío hasta alcanzar el equilibrio térmico.

Los intercambiadores de carcasa y tubos son los más utilizados en la industria química por su gran versatilidad y por su eficacia en los procesos de transferencia de calor [2], ofreciendo las siguientes ventajas:

- ✓ Proporcionan grandes áreas de transferencia en pequeños espacios
- ✓ Soportan altas presiones y altas temperaturas de operación
- ✓ Tienen procedimientos de diseño y fabricación estandarizados (norma TEMA)
- ✓ Buenas prestaciones de operación y facilidad de mantenimiento (limpieza)

El equipo [12] está compuesto por una envoltura cilíndrica (carcasa) que alberga en su interior un haz de tubos. Los fluidos caliente/frío pueden circular, según los casos, por la carcasa o los tubos. La siguiente figura muestra el circuito hidráulico y los componentes estructurales de este tipo de intercambiador

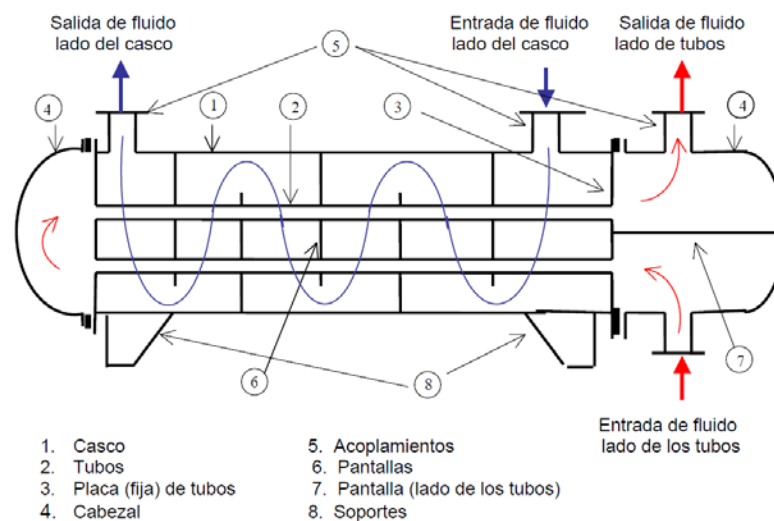


Fig. 2-3 Componentes del intercambiador de carcasa y tubos. Tomado de [12]

A continuación se expone la funcionalidad y características de los elementos principales

Tubos

Proporcionan la superficie de transferencia de calor por conducción entre el fluido que circula por su interior, y el de la carcasa, están hechos de cobre o aleaciones de acero de alta conductividad térmica. Los tubos se mantienen en su posición al estar insertados las placas que les sirven de soporte.

La disposición de los tubos en el intercambiador tiene una gran influencia para su rendimiento; por lo general, la distancia entre los centros de los tubos (pitch) no debe ser menor a 1,25 veces el diámetro exterior de los mismos. Se utilizan dos configuraciones básicas, la triangular y la cuadrangular.

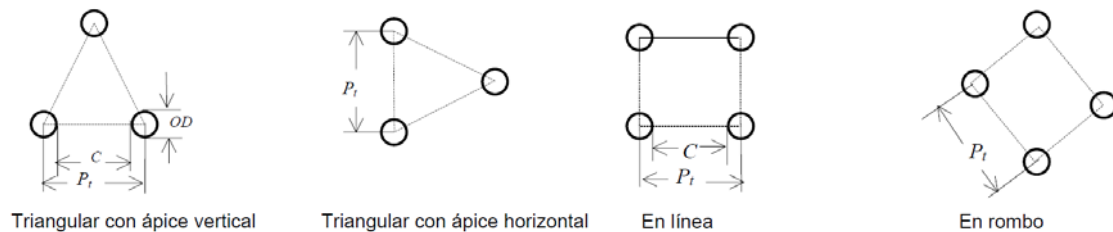


Fig. 2-4 Disposición geométrica de los tubos

La triangular permite albergar un mayor número de tubos dentro de la carcasa, pero al estar estos más empaquetados, la limpieza es más difícil y la caída de presión es mayor. El número de pasos por tubos, suele ser de 1 o 2, en el segundo caso para efectuar el cambio de sentido del fluido se puede optar entre tubos en U o cabezal.

Carcasa

El diámetro y longitud de la misma determina las prestaciones del intercambiador, al limitar el número de tubos, es decir el área de trasmisión de calor. Se fabrica en acero bajo en carbono siempre que sea posible por razones de economía aunque también pueden usarse otras aleaciones cuando la corrosión o las altas temperaturas así lo requieran.

Pantallas o baffles

Son mamparas transversales que se insertan a lo largo de la carcasa que modifican la dirección y velocidad del fluido que circula por la misma, al objeto de lograr un flujo cruzado respecto a los tubos y mejorar así el coeficiente de convección al favorecer las turbulencias. Sin embargo, estos obstáculos a la circulación del fluido conllevan mayores caídas de presión. Los criterios para la disposición y superficie de los baffles se muestran en la siguiente figura, para flujos de líquidos en el lado de la carcasa el corte del deflector generalmente es del 20 a 25 por ciento.

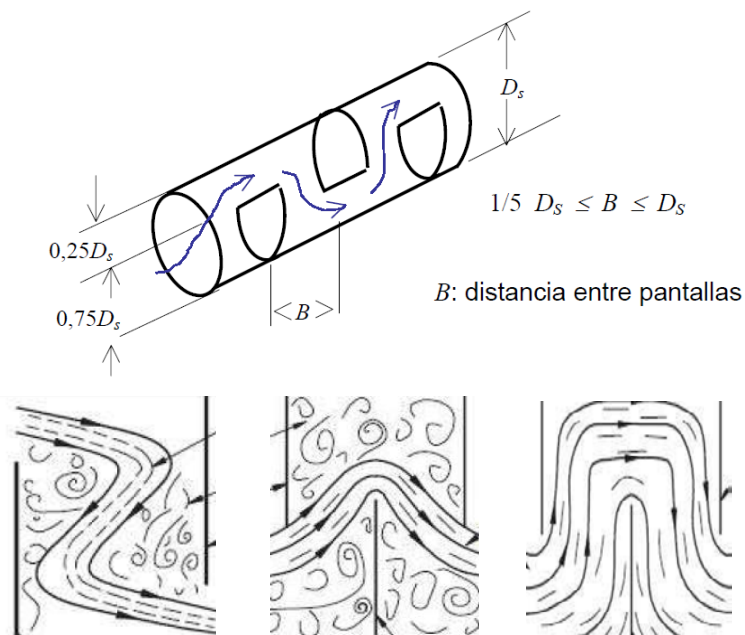


Fig. 2-5 Parámetros geométricos y efectos de los baffles. Tomado de [13]

Cabezales

Los cabezales actúan como cámara de distribución de entrada y salida del fluido de los tubos. En el caso de que el intercambiador sea de doble paso por tubos, además permiten el cambio de sentido de circulación. Si se disponen los tubos en U, obviamente sólo se necesita un cabezal.

Criterios para la circulación de los fluidos por el intercambiador:

Sentido de las corrientes. Generalmente es más ventajoso el sentido contracorriente porque el salto de temperatura se mantiene más uniforme a lo largo del intercambiador, pero esto depende de factores como la longitud del equipo, propiedades físicas de los fluidos.

Viscosidad. Generalmente, se obtendrá un coeficiente de transferencia de calor alto, enviando el material más viscoso por el lado de la carcasa, ya que la circulación por la carcasa favorece el régimen turbulento.

Temperaturas de los fluidos. El envío del fluido caliente por el lado de los tubos reduce las temperaturas en la carcasa, y por lo tanto se reduce la necesidad de aislamiento para evitar las pérdidas de calor.

Presiones de operación. El fluido de mayor presión debe circular por el lado de los tubos al existir mayores pérdidas de carga por la carcasa.

Corrosión. El fluido más corrosivo deberá ser enviado por el lado de los tubos. Esto reduce el costo por el uso de aleaciones costosas o materiales de recubrimiento.

Incrustaciones. El fluido que tiene una mayor tendencia a formar incrustaciones en las superficies deberá enviarse por los tubos ya que las mayores velocidades permitidas por el lado de los mismos reducen las incrustaciones, además de facilitar la limpieza.

2.4.2 PROCESO DE TRANSPORTE DE CALOR EN ESTADO ESTACIONARIO

En el proceso de transporte de calor en un intercambiador de carcasa y tubos [1] [14] [15], tal como se muestra en la figura, un flujo de calor q pasa a través de tres resistencias térmicas: convección en el interior de los tubos, conducción en la pared de los mismos (de superficie A , espesor e y conductividad k) y convección en la carcasa. En régimen estacionario, q y las temperaturas T_i y T_o se mantienen constantes.

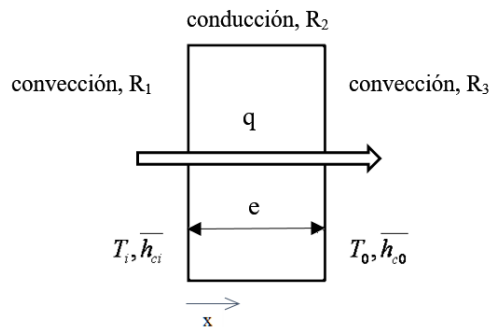


Fig. 2-6 Tipos de transmisión de calor en el intercambiador

Transferencia de calor por conducción

Cuando en un medio sólido existe un gradiente de temperatura, el calor se transmite de la región de mayor temperatura a la de menor temperatura. La componente del flujo en una determinada dirección q (calor transmitido por unidad de tiempo) es proporcional al gradiente de temperatura dT/dx en esa dirección multiplicado por el área A , a través del cual se transfiere, esto es

$$q \propto A \frac{dT}{dx}$$

El factor de proporcionalidad en la expresión anterior corresponde a la conductividad térmica k que es una propiedad física del medio, por lo que la expresión de la Ley de Fourier en forma unidimensional y gradiente de temperatura negativo (al aumentar la distancia disminuye la temperatura), toma la forma

$$q = -kA \frac{dT}{dx} \quad (2.1)$$

En el caso de una pared cilíndrica (tubos)

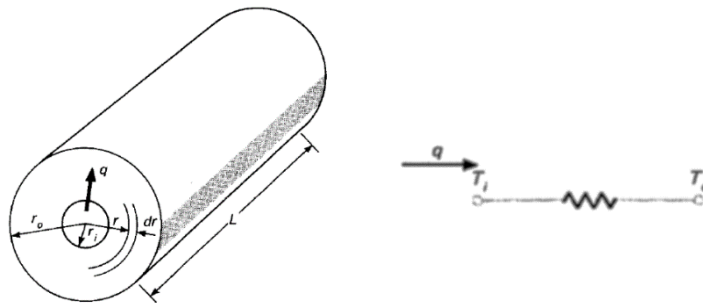


Fig. 2-7 Flujo de calor a través de pared cilíndrica. Tomada de [15]

Se tiene que $A = 2\pi rL$

$$q = -2\pi krL \frac{dT}{dr}$$

Integrando la ecuación para el intervalo $[r_i, r_o]$

$$q \int \frac{dr}{r} = -2\pi kL \int dT$$

$$q = \frac{2\pi kL}{\ln(r_o/r_i)} (T_i - T_o)$$

Transformando esta expresión por su analogía al caso eléctrico: intensidad es igual a la caída de tensión dividida por la resistencia

$$q = \frac{(T_i - T_o)}{\frac{\ln(r_o/r_i)}{2\pi kL}} = \frac{\Delta T}{R}$$

Por lo que la resistencia térmica de la pared cilíndrica es

$$R = \frac{\ln(r_o/r_i)}{2\pi kL} \quad (2.2)$$

Transferencia de calor por convección

Cuando un fluido se pone en contacto con una superficie sólida a una temperatura distinta, el proceso resultante de intercambio de energía térmica se denomina convección. En la misma no solo hay transmisión de calor, sino que también de materia. Existen dos tipos de procesos de convección: convección libre o natural y forzada. En el primer caso la fuerza motriz procede de la diferencia de densidad en el fluido debida al gradiente de temperatura. En el segundo caso, una fuerza exterior mueve al fluido en la dirección del flujo de calor. Para una u otra forma de transmisión, en régimen estacionario, el flujo de calor según la Ley de Enfriamiento de Newton, toma la forma simplificada

$$q = h_c A (T_s - T_{f\infty})$$

Donde: h_c es el coeficiente de convección, A el área de contacto con el fluido, T_s la temperatura de la superficie y $T_{f\infty}$ la temperatura del fluido a una distancia empírica en la que deja de tener efectos la convección, en teoría podría llegar hasta el infinito. Que como en el caso de la conducción puede expresarse como

$$q = \frac{(T_s - T_{f\infty})}{\frac{1}{h_c A}}$$

Por lo que la resistencia térmica es

$$R = \frac{1}{h_c A} \quad (2.3)$$

Coefficiente global de transferencia de calor

En el caso del intercambiador intervienen tres resistencias en serie, como se muestra en la siguiente figura, por lo que es conveniente definir un coeficiente global de transferencia de calor U_o a través de la superficie exterior A_o , por lo que el flujo de calor se expresa como

$$q = U A_o \Delta T_{total}$$

Que expresado en función de la resistencia eléctrica

$$q = \frac{\Delta T_{total}}{\frac{1}{UA_o}}$$

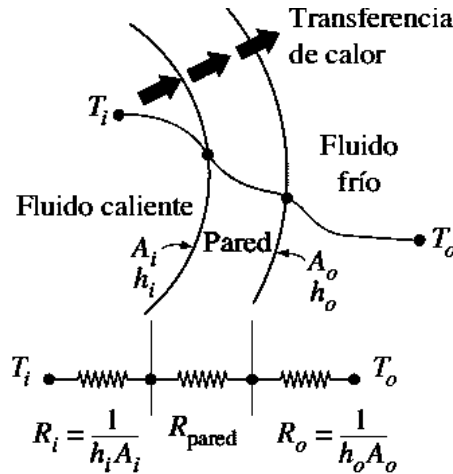


Fig. 2-8 Trasmisión de calor en el intercambiador. Tomada de [14]

$\frac{1}{UA_o}$ es la resistencia total $R_i + R_{pared} + R_o$, por tanto

$$U = \frac{1}{\left(\frac{1}{h_i A_i} + \frac{\ln(r_o/r_i)}{2\pi k L} + \frac{1}{h_o A_o} \right) \cdot A_o}$$

poniendo los radios y las áreas en función de los diámetros, $A_o = \pi d_o L$ y $A_i = \pi d_i L$

$$U = \frac{1}{\frac{d_o}{d_i h_i} + \frac{d_o \ln\left(\frac{d_o}{d_i}\right)}{2k} + \frac{1}{h_o}} \quad (2.4)$$

resultado que es fundamental para el cálculo térmico del intercambiador. Según era de esperar, U solo depende: de parámetros geométricos (los diámetros), el coeficiente de convección en los tubos, la conductividad de la pared y el coeficiente de convección en la carcasa. Como se verá en el apartado siguiente, establecer el valor del último de los coeficientes h_o es lo que resulta verdaderamente problemático.

2.4.3 MÉTODO DE BELL-DELAWARE PARA EL CÁLCULO TÉRMICO E HIDRÁULICO

La determinación del coeficiente global de trasmisión de calor y las caídas de presión en el equipo conllevan una gran dificultad dado lo complejo del flujo por la carcasa y su gran dependencia de la geometría de la misma [1] [2] [13] (disposición de los tubos y baffles) . Esto supuso que en una primera aproximación solo fueran aplicables métodos integrales - de resolución numérica o iterativa - , que se enfocan en el comportamiento global del sistema, es decir un modelo de caja negra basado en correlaciones - experimentales para el cálculo de la fricción y de la transferencia de calor entre las superficies y los fluidos, tal como son los de Donohue o Kern. Sin embargo, estos métodos basados en correlaciones empíricas de flujo a través de un banco de tubos, difícilmente pueden evaluar los efectos, muy diversos, de las diferentes corrientes que circulan por la carcasa. Como consecuencia de ello, dependiendo del diseño del intercambiador , los errores son notables y pueden variar considerablemente. Fue Tinker (1951) el primero en proponer un método diferencial, también de tipo iterativo, por lo que se centra en las relaciones entre los componentes internos del sistema, los que a su vez afectan al comportamiento global del mismo. Su modelo teórico es de caja gris, fundamentado en el estudio de las distintas corrientes del flujo por la carcasa. No obstante, este método requería una gran capacidad de cómputo, por lo que no tuvo desarrollo hasta que se generalizó el uso de los ordenadores.

Método de Bell-Delaware

Se fundamenta en la aplicación del modelo teórico de las corrientes de Tinker para evaluar y corregir las correlaciones empíricas del flujo en bancos de tubos. En el mismo se considera al flujo dividido en las siguientes corrientes:

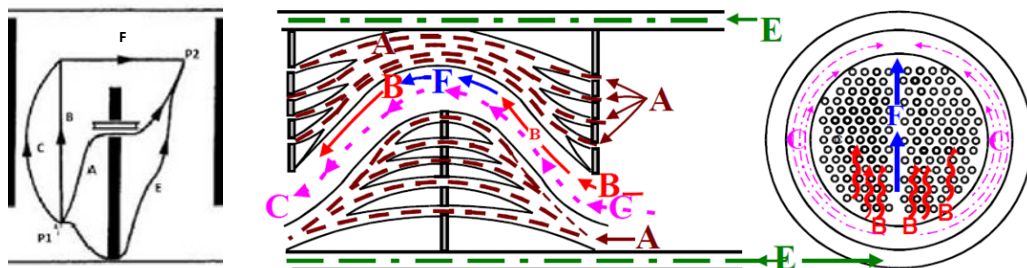


Fig. 2-9 Representación de las corrientes de Tinker en la carcasa. Adaptada de [3]

En la figura se identifican cinco tipos de corrientes. La corriente A es la que fluye entre los tubos y los baffles. La corriente B es la principal, perpendicular al haz de tubos; por lo que es la que se desea en un intercambiador de carcasa y tubos. La corriente C es la que fluye entre los tubos más exteriores del haz y la carcasa. La corriente E es la que circula en el espacio que queda entre los baffles y la superficie interior de la carcasa. Finalmente, la corriente F es la que fluye entre el haz de tubos y la pantalla divisora de la carcasa en el caso de pasos múltiples. Los diferentes tipos de corrientes pueden interactuar entre sí, además de existir recirculación, lo que supone una gran complejidad de cálculo.

En este método, la corriente B es la corriente esencial. Las demás corrientes reducen la corriente B y alteran el perfil de temperaturas, lo que resulta en una disminución del coeficiente de transferencia de calor del lado de la carcasa. Este es el motivo por el que se utilizan los baffles.

Cálculo térmico

Con el método de Bell-Delaware se calcula el coeficiente de transferencia de calor del lado de la carcasa utilizando las correlaciones obtenidas considerando el caso ideal de que todo el caudal que circula por la carcasa atraviesa perpendicularmente al banco de tubos por efecto de los baffles, véase la Fig. 2-5. Posteriormente, este coeficiente ideal de flujo cruzado h_{id} se corrige por una serie de factores para tener en cuenta las fugas que se producen. Así pues, la expresión para el cálculo del coeficiente de convección es:

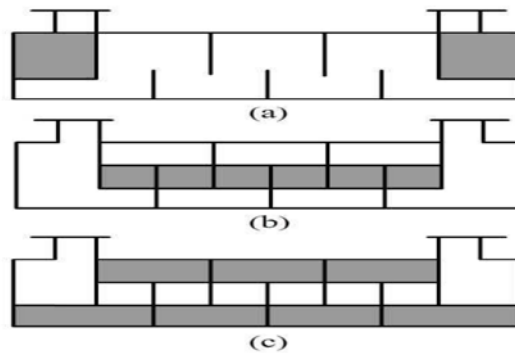
$$h_0 = h_{id} J_c J_b J_s J_r \quad (2.5)$$

Donde el valor de h_{id} se determina mediante expresiones analíticas, obtenidas de la interpolación y ajuste de los datos de las soluciones numéricas-iteradas. Los términos $J_c J_b J_s$ corresponden a correcciones que dependen de los parámetros de la geometría del intercambiador, J_r depende del régimen de circulación del fluido (nº de Reynolds).

Los coeficientes de transmisión de calor de conducción a través de la superficie de los tubos y convección en el interior de los mismos se calculan aplicando la teoría clásica de transferencia de calor por la circulación de fluidos en tuberías.

Cálculo hidráulico

En el método de Bell-Delaware, la caída de presión en la carcasa se calcula como la suma de tres componentes, en función de las diferentes pérdidas de carga que existen en los espacios del intercambiador



a) Área de entrada, b) área de flujo interna, y c) área de ventana

Fig. 2-10 Zonas de caída de presión en el intercambiador. Adaptada de [2]

La caída de presión total en la carcasa se calcula como

$$\Delta p_s = \Delta P_e + \Delta p_c + \Delta P_w$$

En la que ΔP_e es la caída de presión en las secciones de entrada y salida, Δp_c es la de los bafles, y ΔP_w la correspondiente al área de ventana. Para los cálculos de estos términos se utilizan correlaciones específicas que dependen de variables como la viscosidad, densidad, velocidad, parámetros geométricos, etc.

Para el cálculo de la caída de presión por los tubos se aplica la correspondiente correlación hidráulica de pérdida de carga en tuberías.

Justificación de la elección del método

La elección del método de Bell-Delaware se debe a que actualmente es considerado un estándar en la industria, tiene mayor precisión que el método tradicional de Kern, resulta más fácil de calcular que el de Tinker y - a pesar de su carácter numérico - es posible formularlo, como se verá en el apartado 3.1.2., con aproximaciones analíticas (correlaciones matemáticas) susceptibles de ser programadas según el alcance de este trabajo. El objetivo de abordar la programación de la resolución numérica del método, solo está al alcance de desarrolladores de costoso software profesional.

2.5 MODELIZACIÓN

Con la modelización se pretende sustituir el sistema real (equipo + proceso) , con toda su complejidad, por una representación simplificada, de cualquier tipo, que permita replicar el comportamiento del sistema mediante su *simulación*. Según Bunge [16]:

Cualquier entidad M es un modelo del sistema S para el experimentador E syss E puede utilizar M para responder correctamente a preguntas acerca de S.

Los modelos pueden ser:

Físicos

Estáticos: maquetas

Dinámicos: prototipos, planta piloto

Mentales o psicológicos

Heurísticos, Intuitivos

Simbólicos

Lingüísticos: cualitativos, descriptivos

Icónicos: mapas, dibujos, planos, esquemas

Matemáticos: cuantitativos, funcionales, estocásticos

En ingeniería tienen interés los físicos y simbólicos matemáticos. Los primeros, para el trabajo cotidiano del ingeniero, resultan costosos, de difícil realización y hasta peligrosos para el experimentador. Por lo anterior, se centrará el estudio en los modelos simbólicos matemáticos.

El grado o nivel de conocimiento que los modelos pueden aportar sobre los sistemas, se muestra en el siguiente espectro de modelización

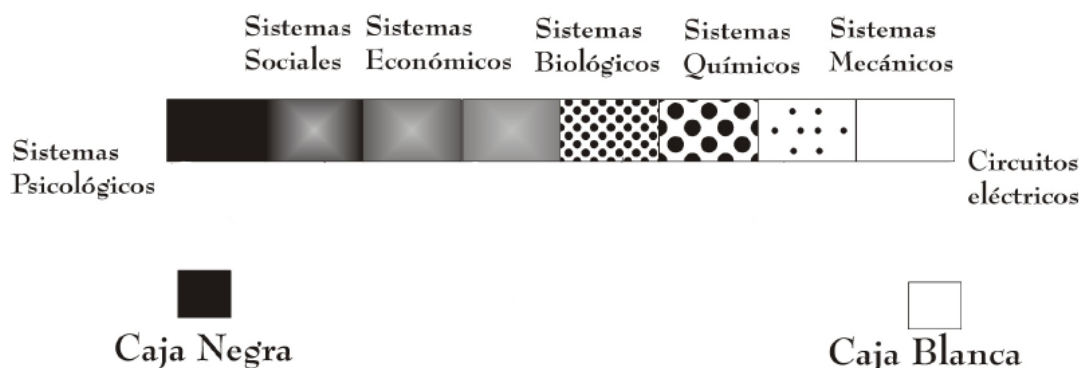


Fig. 2-11 Espectro del grado de modelización. Adaptada de [16]

Este espectro contempla tres categorías básicas de modelos:

Caja blanca. Se conocen todos los elementos del sistema, su organización e interacción en cada momento. Si hay subsistemas dentro del sistema principal, estos también son conocidos. En un modelo de caja blanca conocemos todas las rutas o enlaces, el camino que sigue la materia y energía dentro del sistema.

Caja gris. En este caso se identifican los subsistemas con sus entradas y salidas, así como los enlaces entre los mismos, pero se desconoce lo que sucede en el interior de los mismos.

Caja negra. Sólo conocemos las entradas y salidas del sistema, pero desconocemos absolutamente lo que sucede dentro del mismo.

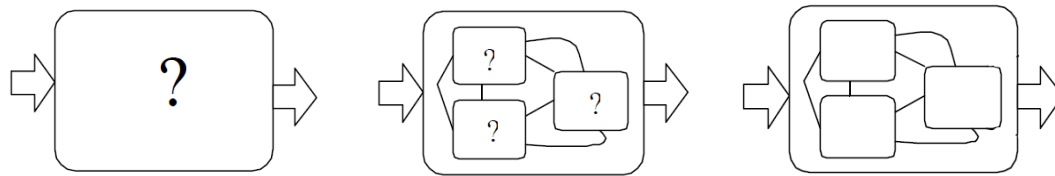


Fig. 2-12 Tipos de modelo: caja negra, caja gris, caja blanca

Modelo matemático de una operación unitaria

En Ingeniería Química se utilizan modelos matemáticos, que a su vez son sistemas conceptuales simbólicos (datos + algoritmo), permiten correlacionar las variables de entrada y parámetros de configuración (variable cuyo valor se fija) con las de salida según el esquema

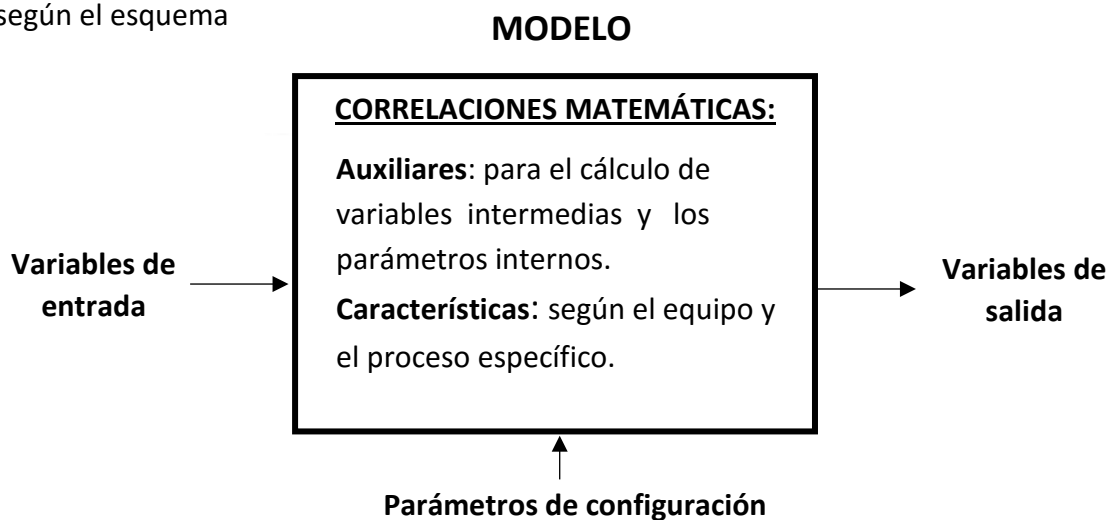


Fig. 2-13 Modelo de una operación unitaria genérica

Correlaciones características del modelo

Como se ha dicho estas dependen en gran medida de las especificaciones del equipo y del tipo de proceso propio de la operación unitaria. No obstante lo anterior, con carácter general se pueden aplicar las siguientes clases de correlaciones:

- ✓ Leyes físicas y químicas fundamentales
- ✓ Principios de conservación de materia, energía y momento
- ✓ De los fenómenos de transporte
- ✓ Termodinámicas (ecuaciones de estado, equilibrio)
- ✓ Cinéticas (velocidad de las reacciones)
- ✓ De configuración, que dependen de la geometría y de la dependencia o no de las variables respecto a la posición

Clases de modelo de operación unitaria

Según la dependencia de estas correlaciones respecto del tiempo, de las coordenadas de posición (parámetros globales y distribuidos) así como la naturaleza matemática de las mismas: teórica/empírica, funcional/estocástica..., se consideran las siguientes clases de modelos alternativos [17]:

Estático	vs	Dinámico
Agrupados	vs	Distribuidos
Determinísticos	vs	Estocásticos
Continuos	vs	Discretos
Lineal	vs	No lineal
Teóricos	vs	Empíricos

En la práctica de la Ingeniería de Procesos, tienen especial relevancia los modelos estáticos o de estado estacionario ya que corresponden al régimen de funcionamiento u operación de los equipos.

2.6 LA SIMULACIÓN DE PROCESOS

Concepto y aplicaciones

Por simulación, en sentido amplio, se entiende:

cualquier actividad realizada sobre el modelo M por el experimentador E, que permite a éste extraer información o replicar el comportamiento del sistema S.

En los modelos matemáticos esta actividad corresponde a la resolución de sus ecuaciones. Sin embargo, dado que la gran mayoría de los modelos en ingeniería no admiten solución analítica, en el campo de la Ingeniería de Procesos se denomina simulación a la resolución numérica de las correlaciones características del modelo, mediante computación digital [18] [19].

La simulación por ordenador es una potente herramienta ampliamente utilizada en Ingeniería Química puesto que resuelve problemas como: el discriminar entre diversas opciones de proceso alternativas, verificar el rendimiento de un diseño, el control, optimización, puesta en marcha y parada de los equipos, etc.

Modos de simulación

Como ya se planteó anteriormente, cuando se simula se interactúa con un modelo para obtener ciertos resultados. Como ya se dijo un modelo es a su vez también un sistema, por lo que de acuerdo a cuales sean sus variables de salida, el modo de simulación será:

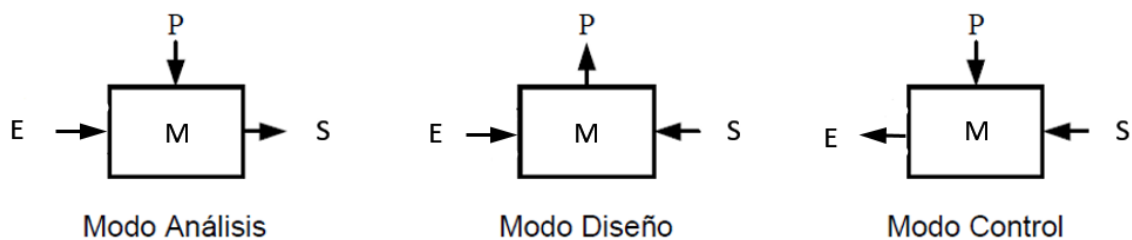


Fig. 2-14 Modos de simulación

Análisis o rating : Es el modo más empleado, en él las variables de salida del modelo representan a las variables de salida del sistema real. Este modo se utiliza para estimar la respuesta del sistema real ante entradas y parámetros especificados.

Diseño: En este modo las salidas del modelo representan a los parámetros del equipo. Se utiliza en la etapa de diseño de un dispositivo donde el problema es determinar los parámetros para los cuales el sistema producirá las salidas deseadas según las entradas previstas.

Control: Las variables de salida del modelo representan a las variables de entrada del sistema real. Este modo sirve para determinar los valores que deberán tomar las entradas del sistema para producir los resultados deseados.

Por otra parte, atendiendo al criterio de la dependencia de las correlaciones matemáticas del modelo respecto al tiempo, se distinguen los modos de simulación estacionario y dinámico.

Simuladores de procesos

Son aplicaciones informáticas que, como ya se dijo, resuelven numéricamente las correlaciones matemáticas de los modelos de las operaciones unitarias, así como sus conexiones, lo que queda representada en el correspondiente diagrama de flujo del proceso. Como todo software de aplicación, como se verá en el apartado correspondiente, consta de los siguientes componentes básicos: interfaz de usuario, kernel o módulo ejecutivo y paquetes o librerías.

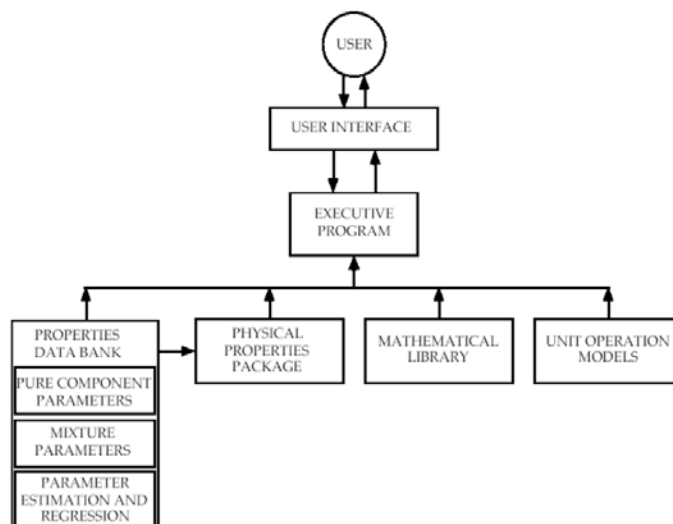


Fig. 2-15 Componentes de un simulador de procesos. Adaptada de [19]

Tipos de simuladores

Según la estrategia de resolución de los modelos (secuencial o simultánea), los simuladores se clasifican en:

Modulares secuenciales

Los simuladores modulares secuenciales se basan, en módulos de simulación independientes que siguen la misma filosofía que las operaciones unitarias [20], es decir, cada equipo es modelado de forma individual y el flujo de la información a través de las conexiones (entradas y salidas) coincide con el de la planta.

Esta estrategia tiene como ventaja el hecho que cada sistema de ecuaciones es resuelto mediante una subrutina con una metodología que resulta la adecuada para el mismo.

Para resolver el proceso completo es necesario determinar mediante un algoritmo apropiado la secuencia óptima de resolución de los distintos módulos. La solución es aproximada, puesto que al aparecer reciclos o equipos funcionando en contracorriente, es necesario realizar iteraciones. Los pasos que el módulo ejecutivo sigue para detectar los reciclos, seleccionar corrientes de corte y establecer la secuencia de solución lógica reciben el nombre de particionado, rasgado y ordenamiento.

Históricamente estos tipos de simuladores fueron los primeros en surgir, y todavía la mayoría de los simuladores comerciales son de este tipo. A continuación se muestra su arquitectura: con la interrelación entre sus componentes y el flujo de datos.

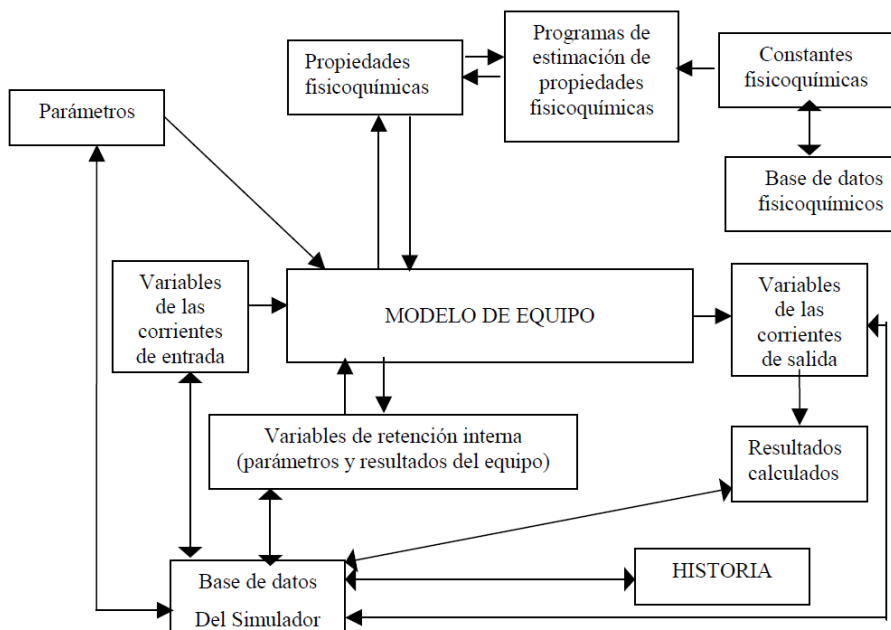


Fig. 2-16 Componentes de un simulador de procesos

Globales u orientados a ecuaciones

Bajo este enfoque, las ecuaciones que rigen cada equipo se integran entre sí, dando lugar a un gran sistema de ecuaciones que representan a todo el proceso, y que ha de resolverse de forma simultánea. A priori, la gran capacidad de cálculo de los computadores digitales hace parecer a esta estrategia como muy atractiva, porque una vez planteadas todas las ecuaciones, se obtiene de una sola vez la solución de todo el proceso. Sin embargo, los algoritmos capaces de resolver estos complejos sistemas de ecuaciones tienen poca convergencia, por lo que es necesario tener una aproximación de los valores de las incógnitas para que las iteraciones den resultados correctos.

Alcance y límites de la simulación digital

A pesar de la enorme potencia de la simulación por ordenador, esta herramienta no es una panacea que pueda sustituir totalmente a los métodos tradicionales de simulación analógica de modelos físicos (prototipos, plantas piloto), o la a veces imprescindible experimentación con el sistema real [21]. Por otra parte, como se verá en el apartado siguiente, en los casos en que sea posible la solución analítica, ésta es preferible a la propia simulación. En definitiva, la estrategia de la simulación tiene las siguientes:

Ventajas

- Su ejecución es un proceso rápido, eficiente y flexible
- Puede ser usada para analizar y sintetizar una compleja y extensa situación real
- En muchos casos la simulación es el único método disponible
- La simulación no interactúa con el mundo real, por lo que permite tratar situaciones límite o peligrosas
- Bajo costo en comparación con la simulación analógica

Desventajas

- Desarrollar un buen modelo de simulación puede resultar un proceso lento y laborioso, ya que la elaboración del mismo se realiza por aproximaciones sucesivas
- Puesto que solo se obtienen soluciones particulares, resulta complejo extraer conclusiones
- Sus resultados deben ser validados con experimentos reales

2.7 LA SIMULACIÓN Y LOS MÉTODOS NUMÉRICOS

Uno de los grandes avances de la ciencia y la técnica consiste en la formulación cuantitativa matemática de sus principios, leyes, problemas y soluciones. En efecto, con el desarrollo del cálculo diferencial e integral se pudo dar una expresión matemática, incluso a los fenómenos en cambio o evolución [22]. Sin embargo, a pesar de que casi cualquier problema técnico puede modelizarse en forma matemática por medio de ecuaciones algebraicas y diferenciales, la solución analítica (exacta y general) sólo es posible para algunos casos particulares, normalmente de poco interés práctico. Estas limitaciones de los métodos analíticos – fundamentados en la deducción lógico matemática - favorecieron el surgimiento de otros métodos alternativos, denominados numéricos o iterativos. Sin embargo, estos métodos, aunque conocidos con mucha anterioridad, requerían una gran capacidad de cálculo, por lo que sólo tuvieron una aplicación efectiva con la llegada de los modernos computadores digitales.

En el campo de la ingeniería de procesos, el problema consiste en la resolución del modelo del sistema a estudiar, el cual tiene un carácter formal o simbólico: un conjunto de ecuaciones, reglas lógicas o correlaciones estadísticas.

2.7.1 SOLUCIÓN ANALÍTICA VS SOLUCIÓN NUMÉRICA

La solución analítica

Algunos modelos simbólicos pueden resolverse analíticamente haciendo innecesaria o poco conveniente la resolución numérica o simulación. Esta clase de solución consiste en una expresión matemática que proporciona toda la información sobre el sistema, para cualquier valor de las variables y parámetros que intervienen en las ecuaciones del modelo. Además, estudiando el cambio de estos valores es posible identificar fácilmente cambios importantes en el comportamiento del sistema, detectar puntos críticos y sacar conclusiones generales sobre el mismo. Por ejemplo, la solución analítica de las ecuaciones del movimiento del péndulo simple, $T = 2\pi \sqrt{\frac{l}{g}}$, permite concluir que el periodo T de cualquier péndulo es independiente de la posición inicial, pero que su cuadrado es directamente proporcional a la longitud del mismo.

Limitaciones de los métodos analíticos

La demostración de la inexistencia de soluciones generales analíticas en la mayoría de los problemas - ecuaciones algebraicas de grado n , integración de funciones elementales y ecuaciones diferenciales - impuso la necesidad de simplificar el modelo recurriendo a hipótesis restrictivas o singulares. Debido a esto, en las ciencias tecnológicas los modelos pueden ser considerados en gran medida como empíricos (caja negra), en los que aparecen muchos parámetros (factores o coeficientes) que surgen de correlaciones experimentales, y no de la aplicación de principios o leyes fundamentales. Aún hoy, pese a todos los avances, exista la necesidad de utilizar permanentemente parámetros, lo que no es otra cosa que una medida de nuestra ignorancia. El método de Bell-Delaware, que se expuso en el apartado 2.3.3, constituye un claro ejemplo de este tipo de modelo.

La solución numérica/iterativa

Se trata de una aproximación sucesiva (iteración) a la solución que se obtiene mediante el cálculo de operaciones matemáticas elementales (numéricas) y la aplicación sistemática de las tres estructuras algorítmicas básicas (secuenciales, selectivas y repetitivas). Precisamente, esta característica hace que los métodos numéricos sean apropiados para su implementación en los computadores digitales.

La resolución numérica de un modelo, lo es sólo para un caso particular del mismo, y la solución será un número, un vector o una matriz; pero no se tendrá una función analítica. Debido a lo anterior, la información que se obtiene es más restringida, y el análisis del comportamiento del modelo ante un cambio de las variables o parámetros resulta más complejo.

La simulación como resolución numérica mediante computación digital

La estrategia común de todos los métodos numéricos es el *divide y vencerás*, transformando ecuaciones funcionales del modelo - realizando una discretización de las mismas; descomponiendo los intervalos de las variables en conjuntos de puntos y al propio sistema en partes o elementos finitos – en sistemas de ecuaciones algebraicas

con un número finito de incógnitas. Naturalmente, la solución será tanto más aproximada cuanto mayor sea el número de discretizaciones, lo que supone que el número de ecuaciones e incógnitas puede llegar a ser, en la mayoría de los casos, de muchos miles e incluso millones, por lo que la solución final sólo puede obtenerse con la ayuda de ordenadores.

La simulación digital constituye una poderosa herramienta para la resolución y análisis matemático de modelos de sistemas fisicoquímicos que se presentan en ingeniería, como los de carácter no lineal, de geometrías complejas y sistemas de ecuaciones acopladas. Como consecuencia de ello, los métodos numéricos han desplazado al análisis matemático clásico en la industria química y aplicaciones de investigación, incluso en problemas en donde podrían obtenerse soluciones analíticas.

Aunque los métodos numéricos se prestan a un uso mecánico no debe caerse en el error de suponer *a priori* que un determinado algoritmo es adecuado para resolver un problema concreto, de hecho, la selección y aplicación de un método numérico en una situación específica es más una actividad propia de un *arte* que de una ciencia. Esto aparte de la necesidad de validar el algoritmo mediante la comparación del error admisible y el cometido, que suele ser difícil de evaluar.

2.7.2 PROBLEMAS DE RESOLUCIÓN CON MÉTODOS NUMÉRICOS

En la simulación de problemas en ingeniería [23] se presenta la necesidad de la resolución de:

Ecuaciones algebraicas (EA), no lineales. Expresan correlaciones donde no es posible despejar (solución analítica) las variables o parámetros que interesan.

Sistemas de ecuaciones algebraicas. Se buscan unos valores que satisfagan simultáneamente un conjunto de correlaciones algebraicas (lineales o no). Las cuales se utilizan en modelos matemáticos de grandes sistemas de módulos interrelacionados (operaciones unitarias). También, como ya se dijo, se usan en para discretizar y aplican especialmente en el ajuste de curvas y las ecuaciones diferenciales.

Problemas de optimización. Se busca determinar el valor o los valores de una variable independiente que corresponden al valor óptimo de una función: máximos o mínimos.

Ajuste de curvas. Se trata de obtener funciones que representen lo más fielmente posible un conjunto de datos normalmente empíricos. Se consideran dos casos: regresión e interpolación.

Derivadas e integrales numéricas. Para estudiar el comportamiento local (velocidad o tasa de cambio) y global (aproximación a la totalidad como una suma finita de sus partes) de una función.

Ecuaciones diferenciales ordinarias (ODE). Éstas tienen una enorme importancia en la práctica de la ingeniería, que se debe a que muchas leyes físicas y químicas están expresadas en términos de la tasa de variación instantánea o derivada de una variable $y', y'' \dots$

Ecuaciones diferenciales parciales (PDE). En las mismas aparecen las derivadas de varias variables, surgen cuando el problema presenta un carácter multidimensional; debido a geometría compleja Y/o dependencia temporal.

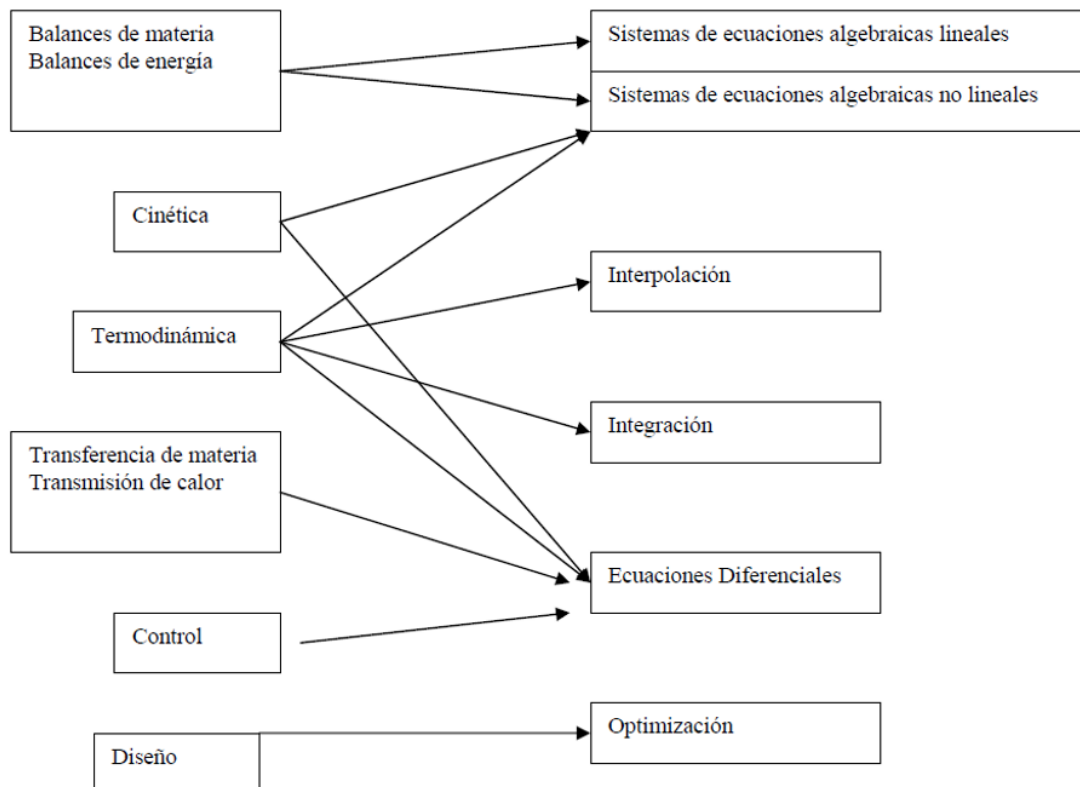


Fig. 2-17 Uso de los métodos numéricos en la Ingeniería Química

2.7.3 CLASIFICACIÓN DE LOS PROBLEMAS EN INGENIERÍA QUÍMICA

Según la dependencia respecto al tiempo

Problemas estáticos o de equilibrio-estado estacionario: En estos problemas lo que se busca es hallar la configuración de funcionamiento o equilibrio de los equipos y sistemas. La solución encontrada no cambia con el tiempo.

Problemas dinámicos o de evolución-estado transitorio: En estos problemas el objetivo es determinar la evolución o tránsito de un sistema o equipo en función del tiempo, desde un estado inicial o puesta en marcha hasta un estado final o de parada .

Según la geometría

Problemas de parámetros globales o agrupados. Las variables o propiedades que dependen de los parámetros del sistema no cambian según la posición dentro del mismo, como por ejemplo en el reactor de mezcla perfecta.

Problemas de parámetros distribuidos o locales. Las variables o propiedades que dependen de los parámetros del sistema cambian según la posición dentro del mismo, como sucede en el reactor flujo pistón.

La simulación estacionaria resuelve el sistema con independencia del tiempo, lo que transforma al problema en un sistema de ecuaciones algebraicas, si el modelo es de parámetros globales. Esto último implica que los valores de las variables son promediados. En el caso de parámetros distribuidos, serán necesarias ecuaciones diferenciales, incluso en derivadas parciales, para reflejar los cambios de las variables con la posición.

La simulación dinámica pretende reflejar el comportamiento del sistema en su evolución entre dos estados estacionarios. Si los parámetros son globales solo se requieren ecuaciones diferenciales respecto del tiempo, en los casos de parámetros distribuidos, se requieren además ecuaciones diferenciales parciales para la posición.

ESPACIO (x,y,z)	TIEMPO	
	Estáticos	Dinámicos
P. globales	AE	ODE
P. distribuidos	ODE/PDE	PDE

2.7.4 RESOLUCIÓN DE ECUACIONES ALGEBRAICAS Y DIFERENCIALES

Ecuaciones algebraicas

Como es sabido las ecuaciones y sistemas de ecuaciones algebraicas lineales tienen solución analítica (Gauss, Kramer, Jordan...) En las ecuaciones no lineales existe una gran variedad de algoritmos de resolución especializados según el grado y el nivel de acoplamiento.

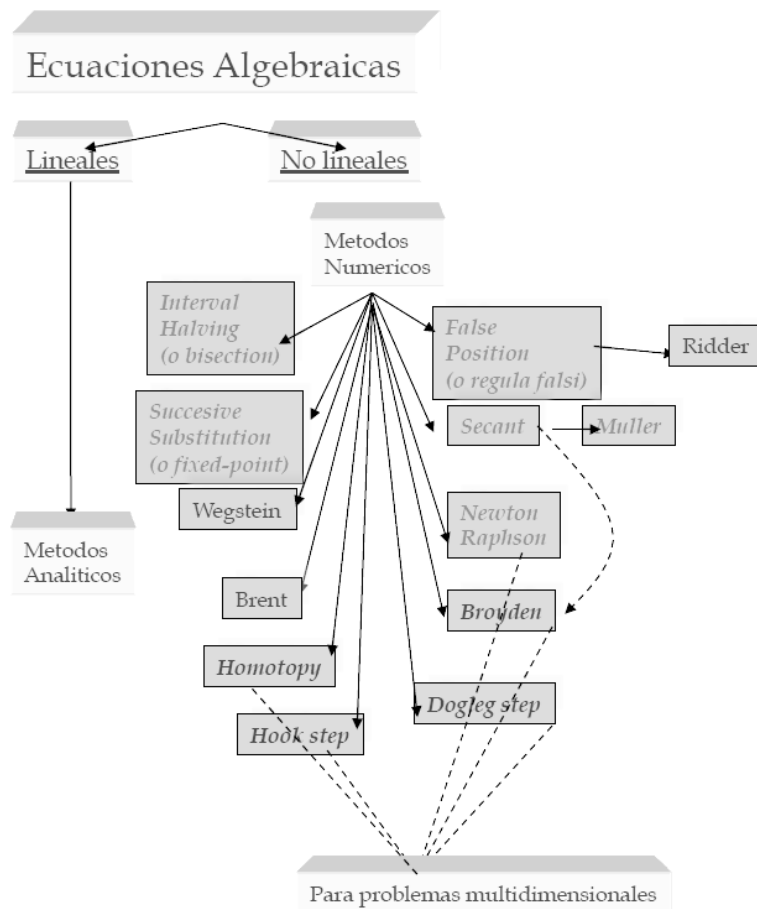


Fig. 2-18 Métodos de resolución de ecuaciones algebraicas. Adaptada de [23]

Ecuaciones diferenciales

Se consideran solo las ODE puesto el problema planteado en este trabajo, un caso de parámetros distribuidos en estado estacionario, solo requiere este tipo de ecuaciones diferenciales.

Modelización mediante sistemas ODE-IVP

Los problemas de este tipo suponen la resolución de una o varias ecuaciones diferenciales ordinarias, en las que las funciones solo dependen de una variable. Las constantes de integración que determinan la solución particular del problema se obtienen a partir de una o varias condiciones iniciales (IVP) que definen el problema singularmente. Ejemplos habituales son problemas de cinética de las reacciones químicas, modelado de reactores de mezcla perfecta dinámicos, o de flujo pistón estacionarios. En este caso corresponde al modelo térmico del intercambiador en estado estacionario en sentido paralelo.

Los métodos habituales de resolución son el de Euler, Taylor, Runge – Kutta...

Modelización mediante sistemas ODE-BVP

Se trata de una variante del caso anterior en el que los datos para obtener las constantes de integración corresponden a los valores de las funciones en la frontera del intervalo de integración. Los ejemplos habituales en ingeniería química corresponden a problemas modelizados por sistemas de ecuaciones diferenciales o a problemas de difusión de materia o transmisión de energía, en los que se necesitan los valores en la frontera para definir el problema singularmente. En este caso corresponde al modelo térmico del intercambiador en estado estacionario en sentido contracorriente.

A pesar de su similitud, los algoritmos de resolución (métodos de disparo, de diferencias finitas,...) son bastante diferentes.

2.8 SOFTWARE Y PROGRAMACIÓN

2.8.1 LOS PROGRAMAS Y LAS APLICACIONES INFORMÁTICAS

Un computador digital, al igual que una operación unitaria, no es más que un sistema (equipo + proceso), funcionando bajo el esquema: entradas → proceso → salidas. El equipo, soporte material, corresponde al hardware, y el proceso, que transforma los datos mediante los algoritmos, al software. Así pues, un software o programa es un conjunto finito de instrucciones, definidas sin ambigüedad, y codificadas en un lenguaje específico de sintaxis unívoca, a esto se lo denomina código fuente. Este código al ser ejecutado por el ordenador permite al usuario realizar tareas que requieran una gran velocidad y capacidad de cómputo. El contenido de estas instrucciones, el proceso, se implementa mediante un subsistema (datos + algoritmos) [24] de carácter no material sino conceptual simbólico. En síntesis se puede decir:

Software-Programa = Estructuras de datos + Algoritmos / Niklaus Wirth

Los lenguajes de programación actuales son de alto nivel, su código fuente no puede ejecutarse directamente por el hardware, por lo que el mismo debe ser transformado en código de bajo nivel (máquina/objeto) que ya si es plenamente ejecutable. Los lenguajes de alto nivel pueden ser compilados o interpretados.

En los primeros se traduce el conjunto completo de instrucciones directamente a código máquina mediante el programa llamado *compilador*; que genera un archivo ejecutable, pero que ya no es posible modificar por el usuario, y que aunque se procesa mucho más rápido, su funcionalidad depende del tipo de hardware de la máquina.

En los interpretados o de guion-script el programa *intérprete* traduce el código fuente instrucción por instrucción, no se generan archivos ejecutables por lo que su velocidad de procesamiento es menor. A cambio, permiten un uso interactivo por parte del usuario y ofrecen al programa interpretado un entorno no dependiente de la máquina donde se ejecuta (máquina virtual). Además, algo muy importante es la posibilidad de crear librerías de programas- scripts especializados, con un código modificable por el usuario y de fácil transportabilidad y mantenimiento.

Tipos de software

Los programas o software se pueden dividir en las siguientes categorías, según su finalidad:

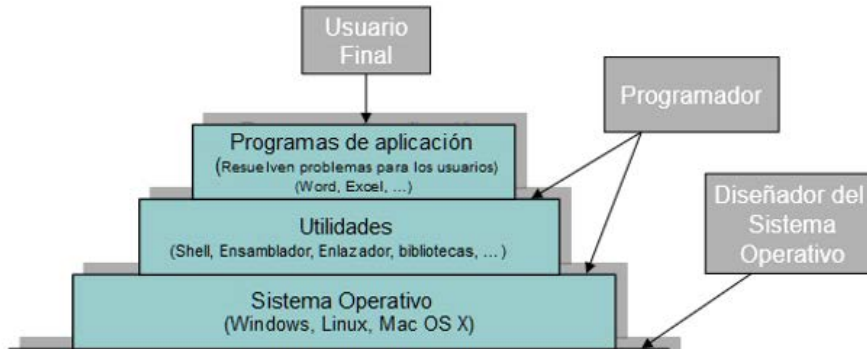


Fig. 2-19 Tipos de software. Tomada de [25]

Sistema operativo

Es el componente de software necesario para que se puedan ejecutar los programas en la máquina, gestiona la interacción entre las aplicaciones y el hardware: procesador, memorias, periféricos ...

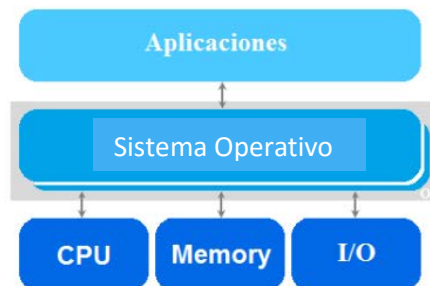


Fig. 2-20 Interacciones de un sistema operativo. Tomada de [25]

El concepto de interfaz

Una interfaz es componente de software o dispositivo físico que permite la comunicación y el control entre dos elementos, tales como software, hardware o un usuario. Esto hace que su importancia sea fundamental, el término *interfaces* tiene relación con la superficie de contacto entre los dos entidades a comunicar. Las mismas pueden ser: usuario-software, software-software, software-hardware y por último hardware-hardware.

Aplicación informática

Es un tipo de software especialmente diseñado para permitir al usuario realizar tareas específicas con el ordenador [26]. Su funcionamiento es independiente de otro software, excepto el sistema operativo. Los componentes fundamentales de una aplicación son:

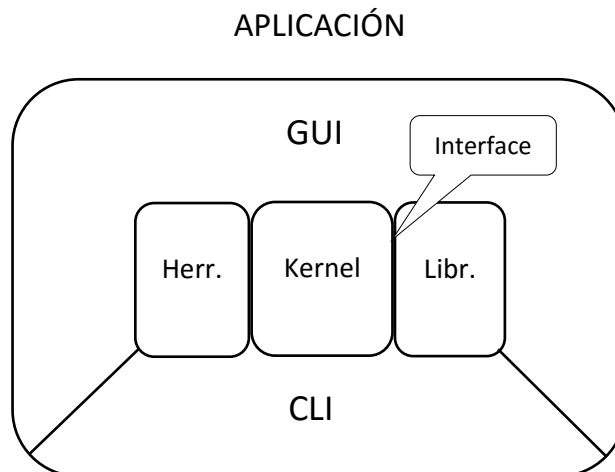


Fig. 2-21 Componentes de una aplicación informática

Interfaces de usuario. Gráficas GUI y de consola o línea de comandos CLI. Permiten interactuar al usuario con el kernel y los módulos complementarios (herramientas y librerías).

Kernel/núcleo. Es el componente fundamental, denominado también módulo ejecutivo/evaluador y motor de cálculo en los softwares de tipo matemático.

Herramientas. Son módulos que permiten realizar a la aplicación tareas complementarias o adicionales. Pueden tener su propia interfaz de usuario gráfica e instalarse en el sistema operativo de forma independiente (stand alone), pero no son capaces de funcionar de forma autónoma.

Librerías/paquetes. Son archivos que contienen programas-scripts diseñados para resolver problemas específicos. Estos paquetes solo se cargan en la aplicación cuando van a ser utilizados.

2.8.2 EL ENTORNO MATLAB

Matlab es la abreviatura de Matrix Laboratory, creado en 1984 por The MathWorks, es un referente en el campo de la ingeniería. Se trata de un potente software matemático que contiene un lenguaje de alto nivel y un entorno interactivo para el cálculo numérico, visualización y programación [27]. Mediante MATLAB, es posible analizar datos, desarrollar algoritmos y crear modelos y aplicaciones.

El lenguaje m se adapta especialmente a las necesidades del cálculo matemático, basándose en estructuras de datos matriciales, sustituyendo, en la mayoría de los casos, los ineficientes bucles por la vectorización de las variables. Al igual que en matemáticas, el concepto fundamental es el de función, por lo que se encuentra inserto en el paradigma de la programación funcional. Las rutinas no son más que funciones vectoriales que correlaciona un vector con los argumentos de entrada con otro vector con los argumentos de salida.

```
function [y1,...,yN] = nombre_funcion(x1,...,xM)
```

Por otra parte m, es un lenguaje de scripting o interpretado, por lo que MATLAB se puede utilizar tanto en modo interactivo a través de la consola de comandos (CLI) como en modo no interactivo ejecutando scripts que realizan tareas automatizadas independientemente del usuario.

Arquitectura de MATLAB

Internamente MATLAB se estructura en tres componentes principales:

El **núcleo o motor de cálculo**, formado por rutinas escritas y compiladas en lenguaje C, donde se realizan la mayor parte de los cálculos básicos hechos por el sistema.

Las **librerías o paquetes**, donde se encuentra la mayoría de los comandos de MATLAB, y que están escritas en su propio lenguaje de programación. Las mismas deben su existencia a que MATLAB dispone de miles comandos. Sólo los más importantes se cargan en memoria cuando el programa comienza a ejecutarse. La mayor parte de los comandos están agrupados en distintas librerías temáticas, que se alojan en un

directorio del ordenador. Para poder ejecutar los comandos de las librerías hay que cargarlos previamente.

Las **interfaces** del programa GUI/CLI hacen posible comunicarse con el sistema. Se encargan de todas las operaciones de entrada/salida y de la interacción con otros componentes. MATLAB cuenta tanto con una interfaz gráfica de usuario o Front End como con una consola de comandos.

Herramientas-Tool boxes, MATLAB cuenta con una gran variedad de las mismas que amplían su funcionalidad a otros campos como el cálculo simbólico, la simulación, el procesamiento de señales....

Rutinas o funciones MATLAB utilizadas

En este trabajo ha sido necesario emplear funciones específicas para resolver los sistemas de ecuaciones diferenciales de los modelos térmicos.

El modelo térmico del intercambiador para el sentido de corrientes paralelo, corresponde a un sistema ODE IVP [28], la función MATLAB apropiada para este tipo de problema es **ode45** [29], que implementa un algoritmo Runge-Kutta de orden 4º - 5º, como se vio en el apartado 2.6.3., y su código es

Syntax

```
[t,y] = ode45(odefun,tspan,y0)
[t,y] = ode45(odefun,tspan,y0,options)
[t,y,te,ye,ie] = ode45(odefun,tspan,y0,options)
sol = ode45( __ )
```

Description

`[t,y] = ode45(odefun,tspan,y0)`, where `tspan = [t0 tf]`, integrates the system of differential equations $y' = f(t,y)$ from `t0` to `tf` with initial conditions `y0`. Each row in the solution array `y` corresponds to a value returned in column vector `t`.

All MATLAB® ODE solvers can solve systems of equations of the form $y' = f(t,y)$, or problems that involve a mass matrix, $M(t,y)y' = f(t,y)$. The `ode23s` solver only can solve problems with a mass matrix if the mass matrix is constant. `ode15s` and `ode23t` can solve problems with a mass matrix that is singular, known as differential-algebraic equations (DAEs). Specify the mass matrix using the `Mass` option of `odeset`.

`ode45` is a versatile ODE solver and is the first solver you should try for most problems. However, if the problem is stiff or requires high accuracy, then there are other ODE solvers that might be better suited to the problem. See [Choose an ODE Solver](#) for more information.

`[t,y] = ode45(odefun,tspan,y0,options)` also uses the integration settings defined by `options`, which is an argument created using the `odeset` function. For example, use the `AbsTol` and `RelTol` options to specify absolute and relative error tolerances, or the `Mass` option to provide a mass matrix.

`[t,y,te,ye,ie] = ode45(odefun,tspan,y0,options)` additionally finds where functions of (t,y) , called event functions, are zero. In the output, `te` is the time of the event, `ye` is the solution at the time of the event, and `ie` is the index of the triggered event.

For each event function, specify whether the integration is to terminate at a zero and whether the direction of the zero crossing matters. Do this by setting the 'Events' property to a function, such as `myEventFcn` or `@myEventFcn`, and creating a corresponding function: `[value,isterminal,direction] = myEventFcn(t,y)`. For more information, see [ODE Event Location](#).

`sol = ode45(__)` returns a structure that you can use with `deval` to evaluate the solution at any point on the interval `[t0 tf]`. You can use any of the input argument combinations in previous syntaxes.

Fig. 2-22 Documentación función ode45 MATLAB

El modelo térmico para el sentido de corrientes contracorriente corresponde a un sistema ODE BVP, según lo expuesto en el citado apartado. Para su resolución se emplea un algoritmo de diferencias finitas, implementado mediante la función **bvp4c**.

Syntax

```
sol = bvp4c(odefun,bcfun,solinit)
sol = bvp4c(odefun,bcfun,solinit,options)
solinit = bvpinit(x, yinit, params)
```

Arguments

odefun	A function handle that evaluates the differential equations $f(x,y)$. It can have the form $dydx = \text{odefun}(x,y)$ $dydx = \text{odefun}(x,y,parameters)$ For a scalar x and a column vector y , $\text{odefun}(x,y)$ must return a column vector, $dydx$, representing $f(x,y)$. $parameters$ is a vector of unknown parameters.	
bcfun	A function handle that computes the residual in the boundary conditions. For two-point boundary value conditions of the form $bc(y(a),y(b))$, $bcfun$ can have the form $res = \text{bcfun}(ya,yb)$ $res = \text{bcfun}(ya,yb,parameters)$ where ya and yb are column vectors corresponding to $y(a)$ and $y(b)$. $parameters$ is a vector of unknown parameters. The output res is a column vector. See Multipoint Boundary Value Problems for a description of $bcfun$ for multipoint boundary value problems.	
solinit	A structure containing the initial guess for a solution. You create $solinit$ using the function <code>bvpinit</code> . $solinit$ has the following fields.	
	x	Ordered nodes of the initial mesh. Boundary conditions are imposed at $a = solinit.x(1)$ and $b = solinit.x(end)$.
	y	Initial guess for the solution such that $solinit.y(:,i)$ is a guess for the solution at the node $solinit.x(i)$.
	$parameters$	Optional. A vector that provides an initial guess for unknown parameters.
	The structure can have any name, but the fields must be named x , y , and $parameters$. You can form $solinit$ with the helper function <code>bvpinit</code> . See <code>bvpinit</code> for details.	
options	Optional integration argument. A structure you create using the <code>bvpset</code> function. See <code>bvpset</code> for details.	

Fig. 2-23 Documentación función bvp4c MATLAB

2.8.3 EI MIDDLEWARE CAPE-OPEN INTERFACE

Por middleware se entiende un tipo de software que proporciona un enlace o vía de comunicación entre componentes y módulos independientes, tales como: sistemas operativos, aplicaciones, herramientas, librerías..., permitiendo la transferencia de datos y el control entre ellas.

En el caso de las interfaces de tipo CAPE-OPEN, se trata de la comunicación entre dos clases de componentes de software especializado: *Process Modelling Executive* (PME) y *Process Modelling Components* (PMC) [30].

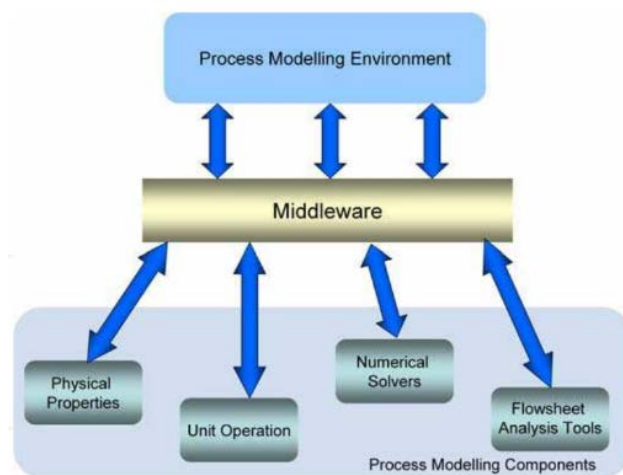


Fig. 2-24 Interfaces de conexión para componentes CAPE-OPEN. Tomada de [6]

Los elementos PME se corresponden con las aplicaciones de simulación compatibles (Aspen, COCO, DWSIM...), y los PMC son los módulos - que pueden o no estar integrados en el simulador - con los que este interactúa para realizar tareas específicas de: operaciones unitarias, servidores termodinámicos, paquetes de reacciones...

Origen y desarrollo del estándar

Tradicionalmente los simuladores de procesos químicos solo permitían programar operaciones unitarias parcialmente personalizadas y con funcionalidad restringida al propio entorno del simulador. Las interfaces eran rígidas, no normalizadas y relativamente eficientes en la gestión de las bases de datos de los paquetes y los motores de cálculo.

Dentro del ámbito de la Computer Aided Process Engineering (CAPE), y bajo la influencia del movimiento en favor del *open source*, a finales de los años 90 del pasado siglo, se constituye el consorcio *Cape Open Laboratories Net* CO-LaN [7] – formado por empresas y universidades –, cuyo objetivo es la creación de los estándares para los componentes CAPE-OPEN, en los que se establecen un conjunto de reglas y especificaciones para las interfaces - en los paquetes numéricos, las bases de datos (termodinámicos, de reacciones y otras propiedades) y las operaciones unitarias -, de uso libre y código abierto en un lenguaje accesible. Esto permite a los ingenieros de procesos programar ellos mismos componentes de software personalizados e interoperables.

Dadas sus prestaciones, en la actualidad este estándar tiene una gran difusión en el área de la ingeniería de procesos. En efecto, el mismo es soportado por la mayoría de los simuladores - aunque éstos se basen en tecnologías informáticas muy diversas - que comprenden desde programas tradicionales escritos en Fortran, hasta aplicaciones diseñadas con programación orientada a objetos como C ++.

Características del estándar CAPE-OPEN

Los componentes CAPE-OPEN están desarrollados en el marco de la programación orientada a objetos (POO), por lo que se considera a cada PMC como un objeto programable totalmente independiente, realizándose la comunicación con los mismos mediante las mencionadas interfaces. Por lo tanto, su diseño no contempla todos los aspectos de estos objetos PMC, solo lo necesario para su comunicación e interoperabilidad, es decir la capa externa o de *interface*. Así pues, la norma no cubre:

- Formatos de archivo
- La programación y el código del modelo
- Interfaz de usuario
- La implementación interna (componentes encapsulados)

Estructura y funcionalidad de una operación genérica CAPE-OPEN

Como se ha dicho se trata de objetos programables, cuyos atributos o propiedades se configuran (mediante los puertos) en correspondencia a los de las operaciones

unitarias, por lo que, como éstas, se implementan como una estructura (entrada-proceso-salida).

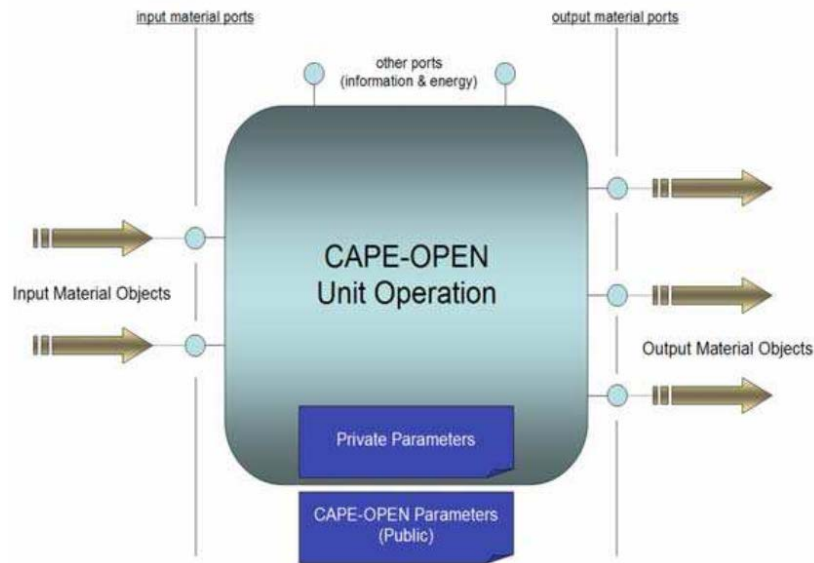


Fig. 2-25 Esquema de operación unitaria genérica CAPE-OPEN. Tomada de [7]

El módulo de la operación unitaria genérica CAPE-OPEN es un objeto contenedor - en el que deben de introducirse el modelo, la configuración de puertos y los parámetros - que encapsula el software que procesa a la misma. Éste se comporta como una caja negra con respecto a los otros componentes, solo se correlacionan entradas con salidas mediante interfaces compatibles.

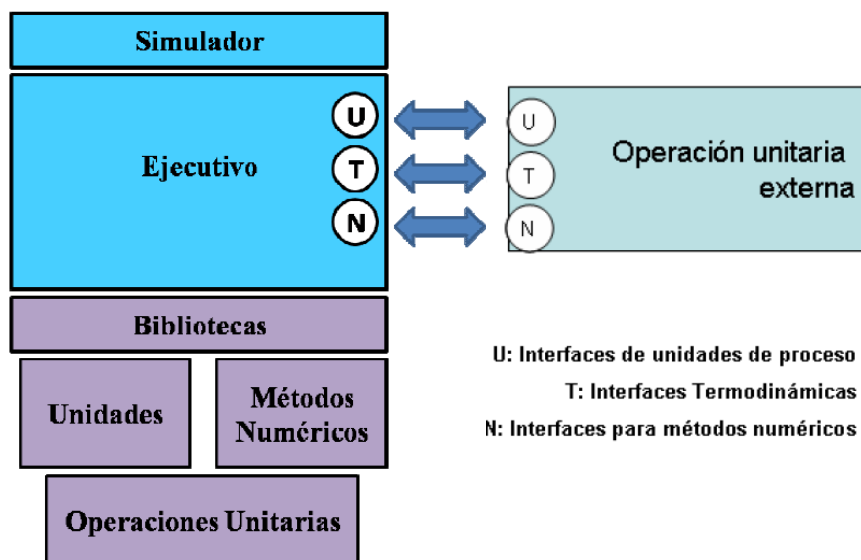


Fig. 2-26 Conexión entre el simulador y la operación unitaria CAPE-OPEN. Adaptada de [30]

En esta figura se muestra la funcionalidad de una operación unitaria externa CAPE-OPEN que sólo utiliza módulos integrados en el simulador. En el caso de que la operación unitaria requiera el uso de un componente o módulo no incluido en la aplicación, es necesario, además, una herramienta que permita la comunicación del mismo con el simulador.

2.8.4 LA HERRAMIENTA STAND ALONE MATLAB UNIT OPERATION (MUO)

Esta novedosa herramienta/toolbox de Amsterchem permite la implementación de operaciones unitarias cuya resolución se realiza en el entorno Matlab [31]. Se trata de un componente de software *stand alone*, es decir; que se instala de forma independiente en el sistema operativo del ordenador, generando su propio directorio

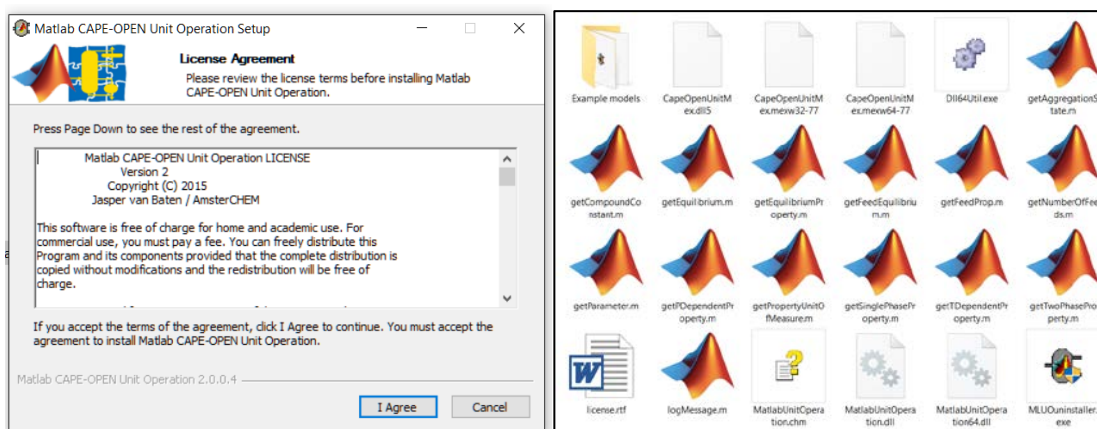


Fig. 2-27 Instalación de la MUO

MUO contiene los siguientes módulos:

- Interfaz GUI/CLI
- Kernel (módulo ejecutivo)
- Librerías de funciones Matlab CAPE-OPEN
- Operación unitaria genérica
- *Matlab Unit Operation Model (MUM)*

El módulo MUM genera, carga o guarda archivos comprimidos y de formato (.mum), el cual contiene: un fichero (.m) con el script del modelo de la operación unitaria y otro (.xml) con la configuración de la misma (puertos, parámetros, *reports...*). El formato .xml es un tipo especial de archivo de texto, adecuado para codificar información como la antes mencionada, a continuación se muestra un ejemplo

```

<?xml version="1.0" standalone="yes"?>
<UnitOperation>
<docInfo version="1" infoLevel="0" />
<report name="Matlab Output">MATLAB output: &#xA; &#xA; xcold =&#xA; &#xA; 0.2500 0.2500 0.2500
<report name="last run">limiting temperature: 356.4493 K&#xD; &#xA; limiting heat transfer: 6559.4107
<report name="last run">Report not available...&#xD; &#xA; </report>
<feed name="Cold feed" />
<feed name="Hot feed" />
<product name="Cold product" />
<product name="Hot product" />
<parameter name="efficiency" mode="input" type="real" value="1" min="0" max="1" def="1" />
<parameter name="heat transferred" mode="output" type="real" value="6559.41" uom="2,1,-3" />
<file name="deltaH.m" />
</UnitOperation>

```

Fig. 2-28 Contenido de un archivo .xml

Estructura y funcionalidad de MUO

Este componente realiza la gestión de los archivos .mum y funciona como enlace o conexión; entre el simulador y la aplicación Matlab que realiza los cálculos de la operación unitaria. Desde el entorno del simulador se activa la herramienta MUO que carga de disco el archivo .mum con los ficheros .m y .xml, cuyos datos se transfieren a la operación unitaria genérica. Cuando se ejecuta la simulación, el componente MUO activa la aplicación Matlab, que le devuelve a este los resultados de los cálculos, que a su vez son pasados al simulador.

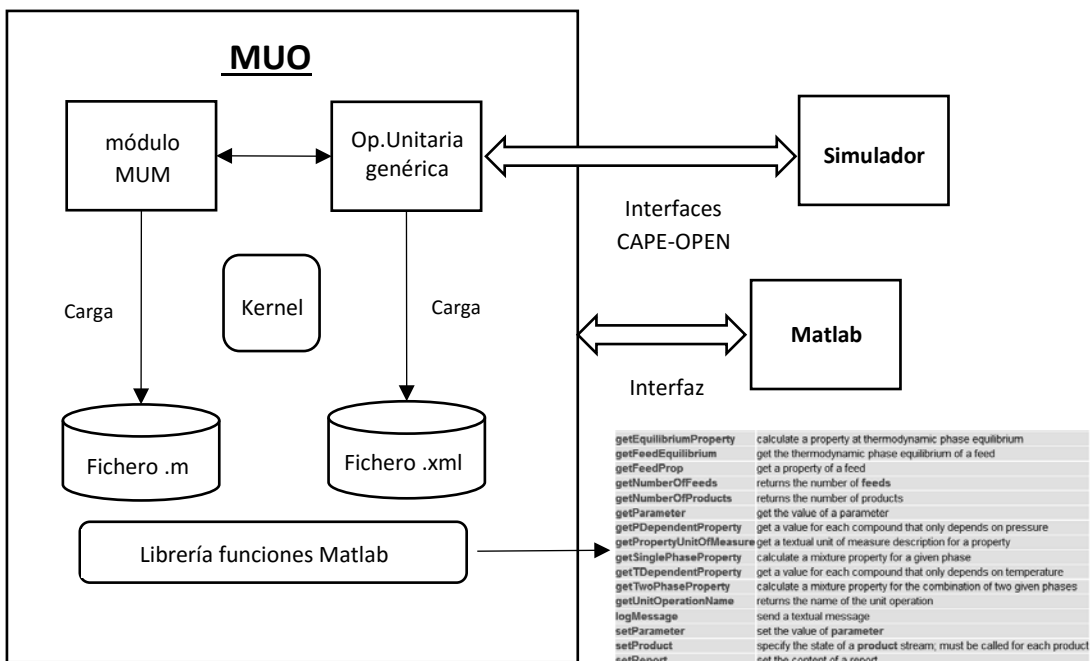


Fig. 2-29 Estructura y funcionalidad del módulo MUO

Además, para programar y resolver en Matlab el modelo de la operación unitaria se requiere el uso del módulo de librería de funciones específicas Matlab CAPE-OPEN [31].

3. SOLUCIÓN ADOPTADA

3.1 MODELO DEL SISTEMA EQUIPO-PROCESO

3.1.1 DEDUCCIÓN DEL MODELO TÉRMICO DEL TRANSPORTE DE CALOR

Como ya se ha visto al estudiar el transporte de calor - en estado estacionario - en un intercambiador de carcasa y tubos, en el mismo se produce una transmisión de calor a través de tres resistencias térmicas en serie con: convección, conducción y convección. Esto hace que la misma se considere como un solo proceso con un coeficiente global de transmisión de calor U , por lo que la ley de enfriamiento de Newton toma la forma:

$$q = UA\Delta T_m$$

q = cantidad de calor transferido por unidad de tiempo (flujo)

U : Coeficiente global de transferencia de calor

A : Superficie de transferencia de calor

ΔT_m : Diferencia de temperaturas media entre los fluidos

La siguiente figura muestra el circuito térmico y el perfil de temperaturas de las corrientes a lo largo de la longitud del intercambiador. La temperatura del fluido frío se eleva a medida que éste gana energía a su paso por el equipo, por el contrario el fluido caliente disminuye su temperatura a medida que pierde energía según avanza por el equipo.

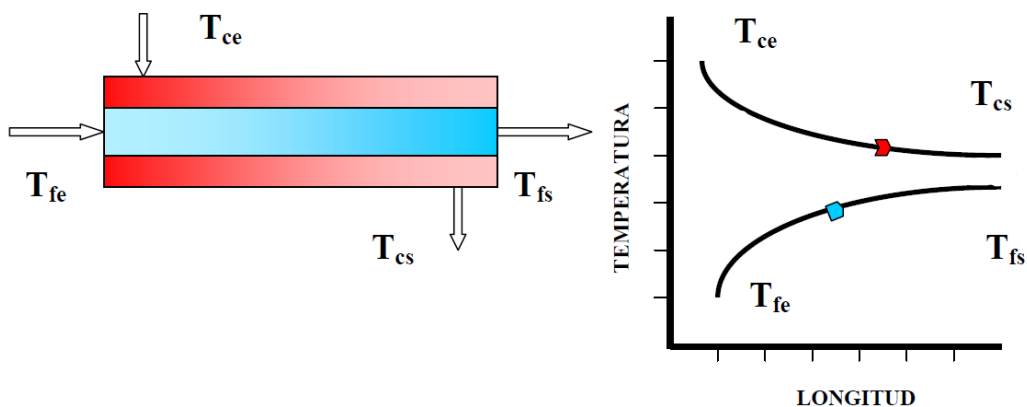


Fig. 3-1 Circuito hidráulico y perfil de temperatura en paralelo. Adaptada de [32]

Para obtener el modelo térmico del intercambiador de un paso por tubos [32] basta con considerar los balances de las leyes de conservación y las correlaciones específicas del proceso. Puesto que la temperatura a la que se realiza la transmisión de calor varía con x (posición a lo largo del intercambiador) se plantea el balance de energía en un volumen diferencial de control, lo cual corresponde al caso de un modelo de parámetro distribuido.

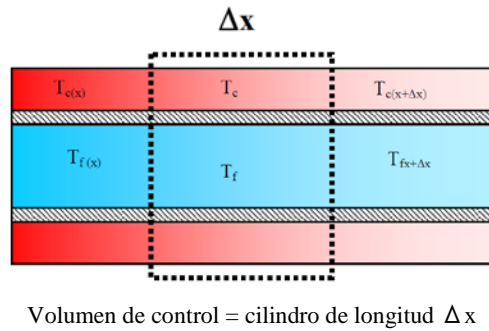


Fig. 3-2 Volumen diferencial de control. Adaptada de [32]

Aplicando la LCE: el calor ganado por el fluido frío y cedido por el caliente es igual al calor transferido, la ley de enfriamiento de Newton, y asumiendo las hipótesis simplificadoras de un proceso adiabático y que los valores de C_p y U - que dependen de T y que se evalúan para la media aritmética de las temperaturas de entrada y salida - no varían con x , se llega al sistema:

$$\begin{cases} m_f C p_f (T_f(x+\Delta x) - T_f(x)) = UP\Delta x (T_c(x) - T_f(x)) \\ m_c C p_c (T_c(x) - T_c(x+\Delta x)) = UP\Delta x (T_c(x) - T_f(x)) \end{cases}$$

Donde U (W/m^2K) es el coeficiente de transferencia de calor y P (m) es el perímetro del cilindro diferencial. Por lo tanto; $P\Delta x$ es A (el área lateral del volumen de control), es la superficie de transferencia de calor. Luego expresando el sistema en forma incremental tenemos

$$\begin{cases} m_f C p_f \frac{\Delta T_f(x)}{\Delta x} = UP(T_c(x) - T_f(x)) \\ m_c C p_c \frac{-\Delta T_c(x)}{\Delta x} = UP(T_c(x) - T_f(x)) \end{cases}$$

Que en forma diferencial resulta:

$$\text{modelo térmico (flujo paralelo)} \left\{ \begin{array}{l} \frac{dT_{f(x)}}{dx} = \frac{UP}{m_f Cp_f} (T_{c(x)} - T_{f(x)}) \\ \frac{dT_{c(x)}}{dx} = -\frac{UP}{m_c Cp_c} (T_{c(x)} - T_{f(x)}) \end{array} \right. \quad (3.1)$$

Se trata de un sistema ODE de ecuaciones diferenciales ordinarias, con valores iniciales en el intervalo de integración $[0,L]$, que corresponden a las dos temperaturas de entrada. La solución del modelo térmico (temperaturas de salida) se determina por métodos numéricos, debiendo obtenerse además el perfil de temperaturas, que aporta una información necesaria para evaluar el funcionamiento del equipo puesto que se trata de un modelo de parámetro distribuido.

En el caso de flujo contracorriente, razonando análogamente se llega a:

$$\text{modelo térmico (flujo contra corriente)} \left\{ \begin{array}{l} \frac{dT_{f(x)}}{dx} = -\frac{UP}{m_f Cp_f} (T_{c(x)} - T_{f(x)}) \\ \frac{dT_{c(x)}}{dx} = -\frac{UP}{m_c Cp_c} (T_{c(x)} - T_{f(x)}) \end{array} \right. \quad (3.2)$$

Que corresponde a un sistema de ecuaciones diferenciales del mismo tipo, pero con valores en la frontera del intervalo de integración

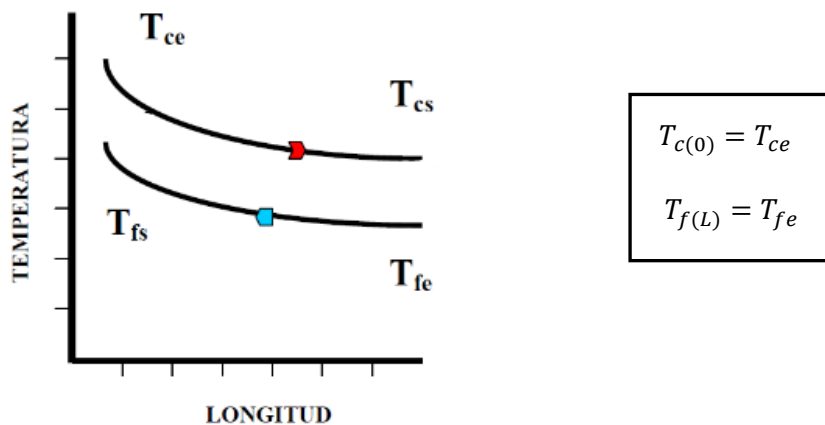


Fig. 3-3 Perfil de temperatura y valores en la frontera en sentido contracorriente. Adaptada de [32]

3.1.2 CORRELACIONES DE BELL-DELAWARE (cálculo de U y Δp)

Se utiliza el método de Bell-Delaware para calcular las resistencias térmicas, a partir de las cuales se obtiene el coeficiente global de transmisión de calor, así como la caída de presión en el equipo. Las correlaciones dependen del valor que se asigne a los siguientes parámetros de configuración del intercambiador

PARÁMETROS DE CONFIGURACIÓN DEL INTERCAMBIADOR		
Parámetro	Definición	unidad
l	Longitud del intercambiador	m
d_s	Diámetro de la carcasa	m
B	Espaciado bafles	m
C	Parámetro geométrico	m
P_t	„	Fig. 2-4
P_p	„	
d_o	Diámetro exterior de los tubos	m
d_i	Diámetro interior de los tubos	m
k	Conductividad del material de los tubos	W/m*K
F_{en}	Factor de ensuciamiento	m ² *K/W
N_{tubos}	Número de tubos	
N_{pasos}	Números de pasos	

Tabla 3-1 Parámetros de configuración del equipo

Térmicas:

Coeficiente de convección en la carcasa

Como se ha visto en el apartado 2.3.3 la ecuación básica para calcular el coeficiente promedio de transferencia de calor del lado de la carcasa es

$$h_0 = h_{id} J_c J_b J_s J_r$$

Donde h_{id} es el coeficiente ideal de transferencia de calor para el flujo en el haz de tubos

$$h_{id} = j_i C p_s \frac{m_s}{A_s} \left(\frac{K_s}{C p_s \mu_s} \right)^{2/3} \left(\frac{\mu_s}{\mu_{sw}} \right)^{0.14}$$

j_i es el factor j de Colburn para un haz ideal de tubos, k la conductividad térmica, s el subíndice que indica carcasa, y A_s es el área transversal a la línea central de la carcasa para flujo entre dos bafles. μ_s es la viscosidad del fluido de la carcasa, y μ_{sw} un factor de corrección para la viscosidad que no se tendrá en cuenta en el modelo, por lo que su valor será 1. Como ya se expuso en 2.3.3, j_i y el factor de fricción f_i se obtienen a partir

de gráficas, pero para propósitos computacionales estas gráficas se traducen mediante ajuste en las expresiones analíticas

$$j_i = a_1 \left(\frac{1.33}{P_T/d_0} \right)^a Re_s^{a_2}$$

$$a = \frac{a_3}{1 + 0.14Re_s^{a_4}}$$

$$f_i = b_1 \left(\frac{1.33}{P_T/d_0} \right)^b Re_s^{b_2}$$

$$b = \frac{b_3}{1 + 0.14Re_s^{b_4}}$$

Los coeficientes a y b se obtienen de la siguiente tabla

Angulo del arreglo	Número de Reynolds	a_1	a_2	a_3	a_4	b_1	b_2	b_3	b_4
30°	$10^5 - 10^4$	0.321	-0.388	1.450	0.519	0.372	-0.123	7.00	0.500
	$10^4 - 10^3$	0.321	-0.388			0.486	-0.152		
	$10^3 - 10^2$	0.593	-0.477			4.570	-0.476		
	$10^2 - 10$	1.360	-0.657			45.100	-0.973		
	< 10	1.400	-0.667			48.00	-1.000		
45°	$10^5 - 10^4$	0.370	-0.396	1.930	0.500	0.303	-0.126	6.59	0.520
	$10^4 - 10^3$	0.370	-0.396			0.333	-0.136		
	$10^3 - 10^2$	0.730	-0.500			3.500	-0.476		
	$10^2 - 10$	0.498	-0.656			26.200	-0.913		
	< 10	1.550	-0.667			32.00	-1.000		
90°	$10^5 - 10^4$	0.370	-0.395	1.187	0.370	0.392	-0.148	6.30	0.378
	$10^4 - 10^3$	0.107	-0.266			0.0815	+0.022		
	$10^3 - 10^2$	0.408	-0.460			6.0900	-0.602		
	$10^2 - 10$	0.900	-0.631			32.100	-0.963		
	< 10	0.970	-0.667			35.000	-1.000		

Tabla 3-2 Coeficientes para el cálculo de las correlaciones de Bell-Delaware. Adaptada de [2]

Factores de corrección de h_{id}

J_c : es el factor de corrección para el corte y espaciado del bafle. Este factor tiene en cuenta la transferencia de calor en la ventana de bafles, depende del diámetro de la coraza y la distancia del corte del bafle a la pared interna de la carcasa.

J_l : factor de corrección para los efectos de fuga de los baffles. Si los baffles se colocan muy próximos, entonces la fuga de las corrientes se incrementa comparada con el flujo transversal. J_l está en función del área total de fuga en los baffles.

J_b : factor de corrección para los efectos sobre la corriente de paso por el haz de tubos debido a la que circula por el espacio entre los tubos más exteriores y la carcasa.

J_s : factor de corrección debido a los cambios de velocidad por el espaciamiento de los baffles en la entrada y salida.

J_r : factor de corrección que depende del régimen de circulación del fluido por la carcasa, se aplica solo si el Reynolds es menor que 100.

El efecto combinado de todos estos factores para un intercambiador de carcasa y tubos razonablemente bien diseñado, es del orden de 0.60, que es el valor que se tomará para el modelo.

Coefficiente de convección en el interior de los tubos

Este coeficiente, como se expuso en 2.3.3 es independiente del método de Bell-Delaware, y se calcula a partir de la bien establecida correlación dada por Petukhov-Kirillov

$$h_i = Nu_t \frac{k}{d_i} \quad (3.3)$$

$$Nu_t = \frac{\frac{f_t}{2} Re_t Pr_t}{1.07 + 12.7(0.0029)^{1/2} (Pr_t^{1/2} - 1)}$$

Donde Re_t es el número de Reynolds por dentro de los tubos, Pr_t el número de Prandtl y f_t el factor de fricción, que se calcula a partir de la correlación de McAdams

$$f_t = 0.0028 + 0.25 Re_t^{-0.32}$$

Coeficiente global de transferencia de calor U

Con los coeficientes individuales, se obtiene el coeficiente global para superficie limpia utilizando ya deducida

$$\frac{1}{U_c} = \frac{d_o}{d_i h_i} + \frac{d_o \ln\left(\frac{d_o}{d_i}\right)}{2k} + \frac{1}{h_o}$$

En la que k es la conductividad del material de los tubos. El valor real del U, teniendo en cuenta el factor de ensuciamiento, que implica una resistencia en serie más

$$U = \frac{1}{\frac{1}{U_c} + F_{en}} \quad (3.4)$$

Hidráulicas:

Caída de presión en la carcasa

En el método de Bell-Delaware, como se vio en 2.3.3, la caída de presión en la carcasa se calcula como la suma de tres componentes: la caída de presión entre los baffles Δp_c , en la ventana ΔP_w y en las secciones de entrada y salida ΔP_e . Para las que el método determina las siguientes correlaciones

$$\Delta p_s = [(N_b - 1)\Delta P_{bi}R_b + N_b\Delta P_{wi}]R_l + 2\Delta P_{bi}\left(1 + \frac{N_{cw}}{NC}\right)R_bR_s \quad (3.5)$$

$$\Delta P_{bi} = 4f_i \frac{G_s^2}{2p_s} \left(\frac{\mu_{sw}}{\mu_s}\right)^{0.14} \quad (3.6)$$

$$\Delta P_{wi} = \frac{m_s^2(2 + 0.6N_{cw})}{2p_s A_s A_w} \quad (3.7)$$

G_s es el caudal másico por unidad de área, y N_b el número de baffles, que se obtiene de la siguiente ecuación, en la que B es un parámetro geométrico

$$N_b = \frac{L}{B} - 1 \quad (3.8)$$

N_c corresponde al número de hileras de tubo que cruza el flujo durante un cruce en el intercambiador

$$N_c = \frac{d_i(1 - 2 * 0.25)}{P_t} \quad (3.9)$$

y N_{cw} proporciona el número de filas de tubos cruzados en cada ventana de baffles

$$N_{cw} = \frac{0.8 * 0.25 * d_s}{P_t} \quad (3.10)$$

El valor del área de flujo a través de la ventana A_w será 0.027 para este modelo.

Por último, se emplean los siguientes factores de corrección en

R_l : las corrientes A y B de la Figura 2-9, con valores entre 0.4 y 0.7.

R_b : las corrientes C y F de la figura anterior, con valores típicos entre 0.5 y 0.9.

R_s : las secciones de entrada y salida con espaciamiento de baffles diferentes al de las secciones internas, debida a la existencia de toberas de entrada y salida, para este modelo su valor será 1.

Caída de presión en los tubos

Al igual que para el cálculo térmico, la pérdida de carga - incluida la que se produce por el cambio de dirección en los pasos- no está contemplada en el método de Bell-Delaware. El valor de la misma se calcula mediante la correspondiente correlación hidráulica

$$\Delta P_t = \left(4f_t \frac{LN_p}{d_i} + 4N_p \right) \frac{\rho u_m^2}{2}$$

Donde N_p es el número de pasos y u_m es la velocidad media.

3.1.3 DISEÑO DEL MODELO DE LA OPERACIÓN UNITARIA

Se trata de un caso típico de modelo de caja gris, que se articula en torno a los elementos característicos del caso de un modelo matemático en modo funcionamiento-rating de un intercambiador de calor en estado estacionario. Las variables de las corrientes de entrada y parámetros, las correlaciones matemáticas y las variables de salida.

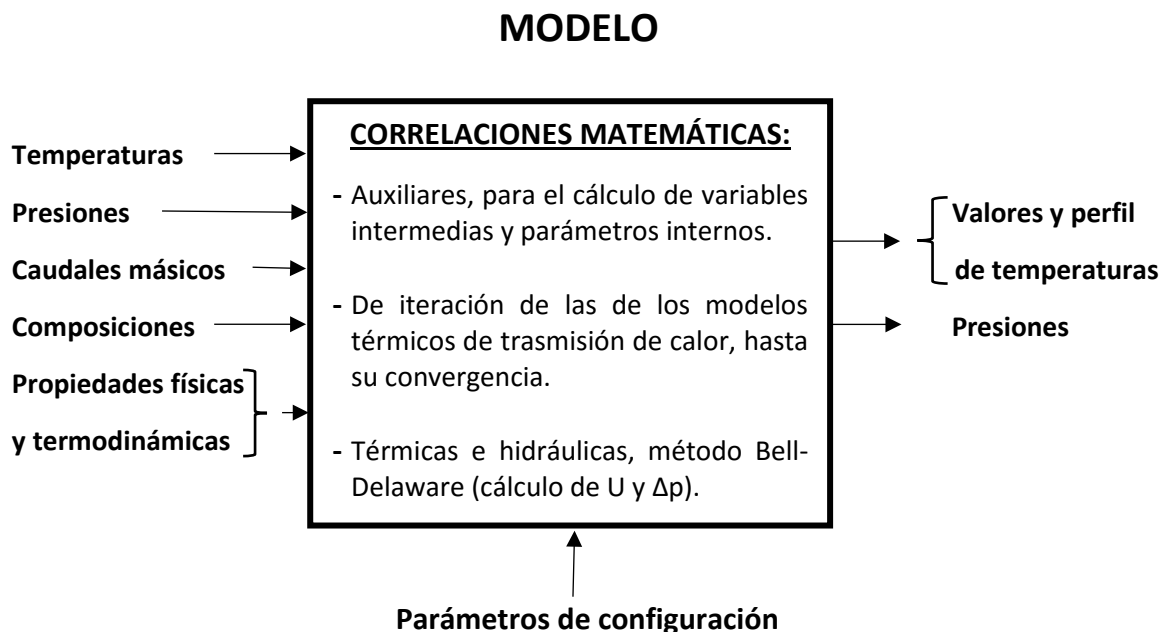


Fig. 3-4 Modelo de la operación unitaria

Las entradas correspondientes a las propiedades físicas y termodinámicas deben obtenerse de los respectivos paquetes del simulador compatible CAPE-OPEN. Los parámetros de configuración del intercambiador, que incluyen: sentido de corrientes y nº de pasos, se introducen al modelo mediante la interfaz gráfica de la herramienta Matlab Unit Operation. Al tratarse de un modelo de parámetro distribuido, en la salida no solo deben obtenerse los valores de las temperaturas finales, sino también su perfil de variación respecto a este parámetro (longitud del intercambiador).

Consideraciones sobre el modelo:

La iteración de las correlaciones de los modelos térmicos, hasta la convergencia de los valores de las temperaturas de salida, es necesaria puesto que C_p y U dependen de T y, como aproximación, son evaluados para la media aritmética de las temperaturas de entrada y salida. Por otra parte, este modelo, como se ha visto en la deducción de los modelos

térmicos, solo contempla la opción de un paso por tubos, considerando la de dos pasos como una extrapolación, la misma se trataría como un intercambiador de un paso, pero de doble longitud de tubos, obviando así el cambio de sentido de circulación de las corrientes en el segundo paso.

3.2 PROGRAMACIÓN DEL MODELO

3.2.1 EL PROGRAMA MATLAB

En consideración a lo establecido en el paradigma de la programación estructurada y modular

Algoritmos + Estructuras de datos = Programas Niklaus Wirth

Se ha implementado el algoritmo principal mediante: bloques secuenciales de instrucciones relacionadas, un bucle while para la iteración de las correlaciones térmicas hasta su convergencia, una estructura selectiva switch para elegir la opción del sentido de las corrientes y los módulos o subrutinas que resuelven tareas específicas. Para una mayor claridad del código [33], por su mayor facilidad en el manejo de las variables y el paso de argumentos, se ha optado por una estructura del tipo: *function main*, con sus correspondientes subfunciones (subrutinas) anidadas. Esto, además, tiene la ventaja de utilizar un solo fichero Matlab para programar el modelo.

3.2.2 SCRIPT CON EL CÓDIGO DE LA OPERACIÓN UNITARIA

Al objeto de facilitar una mayor comprensión se han incorporado, en este apartado, bloques de texto al código, que contienen información adicional. El fichero .m del script se incorpora al TFG como anexo nº1.

```

%=====
%{
Script que realiza el rating de un intercambiador de calor de carcasa y tubos
en modo paralelo/contracorriente y régimen estacionario.
Método Bell-Delaware para cálculo del coeficiente global de transmisión de
calor y las caídas de presión en el equipo
%} %=====

function main

% no es necesario resetear Matlab, porque funciona como servidor

format long g % devuelve los resultados en forma decimal extendida

```

% BLOQUE DE ENTRADA DE DATOS Y PARÁMETROS

En primer lugar se obtienen del paquete termodinámico del simulador las propiedades que no dependen de la temperatura de las dos corrientes de entrada, la caliente y la fría, utilizando las funciones específicas CAPE-OPEN **getCompoundConstant** (obtener constante de componente) y **getFeedProp** (obtener propiedad de corriente).

En el caso de corrientes multicomponentes es necesario realizar un cálculo para obtener el peso molecular de la corriente. Pmc_hot es un vector con los pesos moleculares de cada componente. X_hot es otro vector con las composiciones, y Pm_hot el peso molecular de la corriente, que se obtiene del producto escalar de Pmc_hot y x_hot mediante la función **dot**. El resto de datos de la corriente se obtienen mediante la función getFeedProp. Para la corriente fría se repite la misma secuencia, variando únicamente el nombre de las variables.

% Corriente entrada caliente

% Cálculo del peso molecular de la corriente

```
Pmc_hot = getCompoundConstant('molecularWeight'); % peso molecular de
cada componente
x_hot = getFeedProp(1,'fraction');
Pm_hot = dot(Pmc_hot,x_hot); % Pm= sumatorio Pm(i)*x(i)

m_hot = (Pm_hot*sum(getFeedProp(1,'flow')))/1000; % caudal masico Kg/s
T_hot_in =getFeedProp(1,'temperature'); % temperatura entrada K
P_in_hot= getFeedProp(1,'pressure'); % presion entrada Pa
p_hot=1/(getFeedProp(1,'volume')*1000/Pm_hot);% densidad Kg/m3
```

% Corriente entrada fría

```
Pmc_cold = getCompoundConstant('molecularWeight');
x_cold = getFeedProp(2,'fraction');
Pm_cold = dot(Pmc_cold,x_cold);
m_cold = (Pm_cold*sum(getFeedProp(2,'flow')))/1000; % Kg/s

T_cold_in = getFeedProp(2,'temperature'); % K
P_in_cold = getFeedProp(2,'pressure'); % Pa
p_cold = 1/(getFeedProp(2,'volume')*1000/Pm_cold); % kg/m3
```

Mediante la función **getParameter** se pasan al modelo, desde el simulador con la herramienta MUO, los parámetros de configuración del equipo, según las prescripciones del método Bell-Delaware. También se añaden una serie de coeficientes para esta configuración del equipo.

% Parámetros del equipo

```
Sentido_corrientes=getParameter('Sentido_corrientes'); % Permite elegir el
sentido de las corrientes
l= getParameter('l'); % longitud intercambiador m
D_car = getParameter('D_carcasa'); % diametro carcasa m
B = getParameter('B'); % parámetro geométrico(espaciado baffle) m
C = getParameter('C'); % parámetro geométrico m
Pt = getParameter('Pt'); % parámetro geométrico m
Pp = getParameter('Pp'); % parámetro geométrico m
D_out = getParameter('D_out'); % diámetro exterior tubos m
D_in = getParameter('D_in'); % diámetro interior tubos m
k = getParameter('k'); % conductividad material tubos W/m*K
F_en = getParameter('F_en'); % factor ensuciamiento m2*K/W
n_tubos = getParameter('n_tubos'); % número de tubos
N_pasos = getParameter('N_pasos'); % número de pasos
lt = l*N_pasos; % longitud total de los tubos m
```

```

% Factores de corrección Bell-Delaware
a1=0.370; a2=-0.395; a3=1.187; a4=0.370;
b1=0.392; b2=-0.148; b3=6.3; b4=0.378;
Rl=0.7 ; Rb= 0.8 ; Rs=1;
C_visc=1; % factor corrección viscosidad

```

% CORRELACIONES AUXILIARES

Según las especificaciones del método Bell-Dellaware, para las variables N_c (número de filas en la sección de carcasa) y N_{cw} (número de filas de tubos en cada baffle) se utiliza la función **round** para redondear al valor más próximo porque los números de filas deben ser valores enteros. Lo mismo sucede con el número de baffles, en este caso se emplea **floor**, que trunca el valor.

% Tubos

```

P= pi*((D_out+D_in)/2)*n_tubos; % perímetro total tubos m
A_tubo = pi*D_in^2/4*n_tubos; % area interior tubos m2
G_tubo = m_cold/A_tubo; % caudal masico por areakg/m2*s
u_tubo = G_tubo/p_cold; % velocidad dentro de los tubos m/s

```

% Carcasa

```

% Area de paso por carcasa
Ntc = D_car/Pt; % variable adimensional

```

```

% Area de flujo en el diametro de la carcasa m2
Ac =(D_car - Ntc*D_out)*B;

```

```

% Caudal masico por area kg/m2*s
G_car= m_hot/Ac;

```

```

% Diametro equivalente para arreglo cuadrado m
D_eq= (4*Pt^2 - pi*D_out^2/4)/(pi*D_out);

```

```

% Nc numero de filas de tubos en la sección de carcasa %(Lc/D_car=0.25)
Nc = round(D_car*(1-2*0.25)/Pp);

```

```

% Distancia del final del baffle hasta la pared de la carcasa m
Lc = 0.25*D_car;

```

```

% Numero de filas de tubos en cada baffle
Ncw = round(0.8*Lc/Pp);

```

```

% Numero de baffles
Nb = floor((1/B)-1); % El numero de baffles debe ser un entero

```

```

% Area de flujo a través de la ventana
Aw = 0.027; % m2 se obtiene por Taborek o Bell

```

% CÁLCULO ITERATIVO DE LAS TEMPERATURAS DE SALIDA

Puesto que las temperaturas de salida dependen de propiedades físicas de las corrientes que a su vez son dependientes de T , y ya que esta varía a lo largo del intercambiador, se utiliza su valor promedio entre la entrada y la salida. Esto determina la necesidad de un cálculo iterativo, para el que se realiza una inicialización de variables (para la caliente: $T_{hot_sal} = T_{hot_in}$; $T_{hot_sal_p} = T_{cold_in}$, y en forma similar para la fría) que asegure la entrada en el bucle. El mismo se repite hasta que la diferencia entre los valores iterados sea menor o igual de medio grado. Las propiedades se obtienen mediante la función **getSinglePhaseProperty**, que toma como argumentos la propiedad y las condiciones a las que va a ser evaluada.


```

% Valores iniciales de la iteración
T_hot_sal= T_hot_in;
T_cold_sal = T_cold_in;

% Valores de paso o intermedios
T_hot_sal_p = T_cold_in;
T_cold_sal_p = T_hot_in;

while (or(abs(T_hot_sal-T_hot_sal_p) > 0.5, abs(T_cold_sal-T_cold_sal_p)>0.5))

    % Las variables de paso toman el valor de la iteracion anterior para
    comparación
    T_hot_sal_p = T_hot_sal;
    T_cold_sal_p = T_cold_sal;

    % Temperaturas medias
    T_hot_m = (T_hot_in + T_hot_sal_p)/2;
    T_cold_m = (T_cold_in + T_cold_sal_p)/2;

    % Calculo de propiedades de las corrientes para temperatura promedio

    % Corriente entrada caliente
    c_p_hot = (getSinglePhaseProperty('heatCapacityCp','liquid',T_hot_m,
    P_in_hot,x_hot)*1000)/Pm_hot; % J/kg*K
    visc_hot=getSinglePhaseProperty('viscosity','liquid',T_hot_m,P_in_hot,
    x_hot);%kg/m*s
    k_hot = getSinglePhaseProperty('thermalConductivity','liquid',T_hot_m,
    P_in_hot,x_hot); % W/m*K
    Pr_hot = c_p_hot*visc_hot/k_hot; % Numero de Prandtl
    Re_car = (m_hot*D_eq)/(Ac*visc_hot) % Numero de Reynolds

    % Corriente entrada fría
    c_p_cold = (getSinglePhaseProperty('heatCapacityCp','liquid',T_cold_m,
    P_in_cold,x_cold)*1000)/Pm_cold; % J/kg*K
    visc_cold = getSinglePhaseProperty('viscosity','liquid',T_cold_m,
    P_in_cold,x_cold); % kg/m*s
    k_cold = getSinglePhaseProperty('thermalConductivity','liquid',
    T_cold_m,P_in_cold, x_cold); % W/m*K
    Pr_cold =c_p_cold*visc_cold/k_cold; % Numero de Prandtl
    Re_tubo = (u_tubo*p_cold*D_in)/visc_cold; % Numero de Reynolds

    % Factor de friccion en tubos, McAdams
    fr = 0.0028+0.25*(Re_tubo^(-0.32));

    % Calculo del coeficiente global de trasmisión de calor mediante la
    % llamada a las subrutinas correspondiente

    % Coeficiente convección tubo
    [h_tubo]= coeficiente_tubo; % W/m2*K
    % Coeficiente convección carcasa
    [h_car] = coeficiente_car; % W/m2*K
    % Coeficiente global trasmision de calor
    [U] = coeficiente_global;

```

Se implementan las dos opciones de la variable Sentido_corrientes mediante un switch en el que se resuelve el caso seleccionado. En la opción *paralelo*, implica la resolución de un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias con valores iniciales, por lo que se utiliza la subrutina **ode45** de Matlab. Para el caso *contracorriente*, el modelo matemático consiste en un sistema análogo al anterior, pero con valores en la frontera, por lo que se emplea la rutina **bvp4c**.

```

switch Sentido_corrientes

    case 'paralelo'

        intervalo = [0 lt];
        T_iniciales = [T_hot_in T_cold_in];
        [L,y] = ode45(@ecdif,intervalo,T_iniciales);

    case 'contracorriente'

        % Instrucciones que corresponden al código de la rutina bvp4c
        ya = 0;
        yb = 1;

        solinit = bvpinit([0,lt],[T_cold_in,T_hot_in]);
        sol = bvp4c(@ecdif,@twobc,solinit);
        L = linspace(0,lt);
        y = deval(sol,L);
        y = y'; % Se transpone el vector y para su graficación

    end

end % while

    % CÁLCULO DE LAS PRESIONES DE LAS CORRIENTES DE SALIDA

% Calculo caidas presion llamando a las funciones correspondientes

% Caida presión tubos
[AP_tubo]= Presion_tubos; % Pa
P_tubo_out= P_in_cold-AP_tubo; % presion de salida tubos Pa

% Caida presion carcasa
[AP_car] = Presion_carcasa; % Pa
P_car_out= P_in_hot-AP_car; % presion de salida carcasa Pa

    % SALIDA MATLAB DEL PERFIL DE TEMPERATURAS (vent. emergente)

% y es la matriz con los valores de las T de salida en el intervalo de
integracion

plot(L,y(:,1),'r',L,y(:,2),'b')

xlabel('Longitud (m)');
ylabel('Temperatura (K)');
title('Perfil de temperaturas');

    % SALIDA DE DATOS AL SIMULADOR CAPE-OPEN


```

Se utilizan las funciones CAPE-OPEN, **setParameter** y **setProduct**, que establecen en el simulador los valores de los parámetros y las propiedades de las corrientes de salida.

```

setParameter('DP_tubo', AP_tubo/1000); % caida presion tubos kPa
setParameter('DP_carcasa', AP_car/1000); % caida presion carcasa kPa

setProduct(1,m_hot,x_hot,'temperature',T_hot_sal,'pressure',P_car_out);
setProduct(2,m_cold,x_cold,'temperature',T_cold_sal,'pressure',P_tubo_out);

```

% FIN DEL ALGORITMO, BLOQUE DE SUBROUTINAS

```
function [AP_tubo]= Presion_tubos
% devuelve caida presion tubos

    AP_tubo= ((4*fr*lt*N_pasos)/D_in+4*N_pasos)*p_cold*(u_tubo^2)/2;

end

function [h_tubo]= coeficiente_tubo
% devuelve coeficiente conveccion tubos

    Nu_tubo = ((fr/2)*Re_tubo*Pr_cold)/(1.07+12.7*(fr/2)^0.5
    *(Pr_cold^(2/3)-1));
    h_tubo = Nu_tubo*k_cold/D_in;

end

function [AP_car] = Presion_carcasa
% devuelve caida presion carcasa

    % Factor de fricción carcasa
    b= b3/(1+0.14*Re_car^b4);
    f_car=b1*(1.33/(Pt/D_out))^b*Re_car^b2;
    APbi = (4*f_car*G_car^2*Nc)/(2*p_hot*C_visc^-0.14);
    APwi = (m_hot^2*(2+0.6*Ncw))/(2*p_hot*Ac*Aw);
    AP_car = ((Nb-1)*APbi*Rb+Nb*APwi)*Rl+2*APbi*(1+Ncw/Nc)*Rb*Rs;

end

function [h_car] = coeficiente_car
% devuelve coeficiente conveccion carcasa

    % Factor j de Colburn
    a = a3/(1+0.14*Re_car^a4);
    ji = a1*(1.33/(Pt/D_out))^a*Re_car^a2;
    h_id = ji*c_p_hot*(m_hot/Ac)*(k_hot/(c_p_hot*visc_hot))^(2/3)
    *C_visc^0.14;
    % El conjunto de factores de corrección se asume en un 60%
    F_cor=0.60;
    h_car=h_id*F_cor;

end

function [U] = coeficiente_global
% devuelve coeficiente global de transferencia de calor

    % Coeficiente superficie limpia
    Uc = 1/((1/h_car)+ (D_out/(h_tubo*D_in))+ D_out*log(D_out/D_in)
    /(2*k));
    % Coeficiente real
    U = 1/(1/Uc + F_en);

end
```

```

function dy = ecdif(L,y)
% devuelve un vector con el sistema de ecuaciones diferenciales

    switch Sentido_corrientes % selecciona el modelo del caso elegido

        case 'paralelo'

            % Vectorización de las variables de salida
            T_hot_sal= y(1);
            T_cold_sal= y(2);

            % Ecuaciones del modelo
            dy1 = -(U*p*(T_hot_sal - T_cold_sal))/(m_hot*c_p_hot);
            dy2 = (U*p*(T_hot_sal - T_cold_sal))/(m_cold*c_p_cold);
            dy = [dy1;dy2];

        case 'contracorriente'

            % Vectorización de las variables de salida
            T_hot_sal= y(1);
            T_cold_sal= y(2);

            % Ecuaciones del modelo
            dy1 = -(U*p*(T_hot_sal - T_cold_sal))/(m_hot*c_p_hot);
            dy2 = -(U*p*(T_hot_sal - T_cold_sal))/(m_cold*c_p_cold);
            dy = [dy1;dy2];

    end

end

function res = twobc(ya,yb)
% Devuelve las condiciones de frontera para la rutina bvp4c, resolucion caso
contracorriente

    res = [ya(1) - T_hot_in; yb(2)- T_cold_in];

end

end % main

```

3.3 IMPLEMENTACIÓN INFORMÁTICA DE LA SOLUCIÓN

La implementación requiere instalar en el ordenador los siguientes componentes de software: el simulador COCO (compatible CAPE-OPEN), la herramienta Matlab Unit Operation y la aplicación Matlab. En la siguiente figura se muestra la integración y funcionalidad de los citados componentes, especificando los módulos de los mismos que son utilizados.

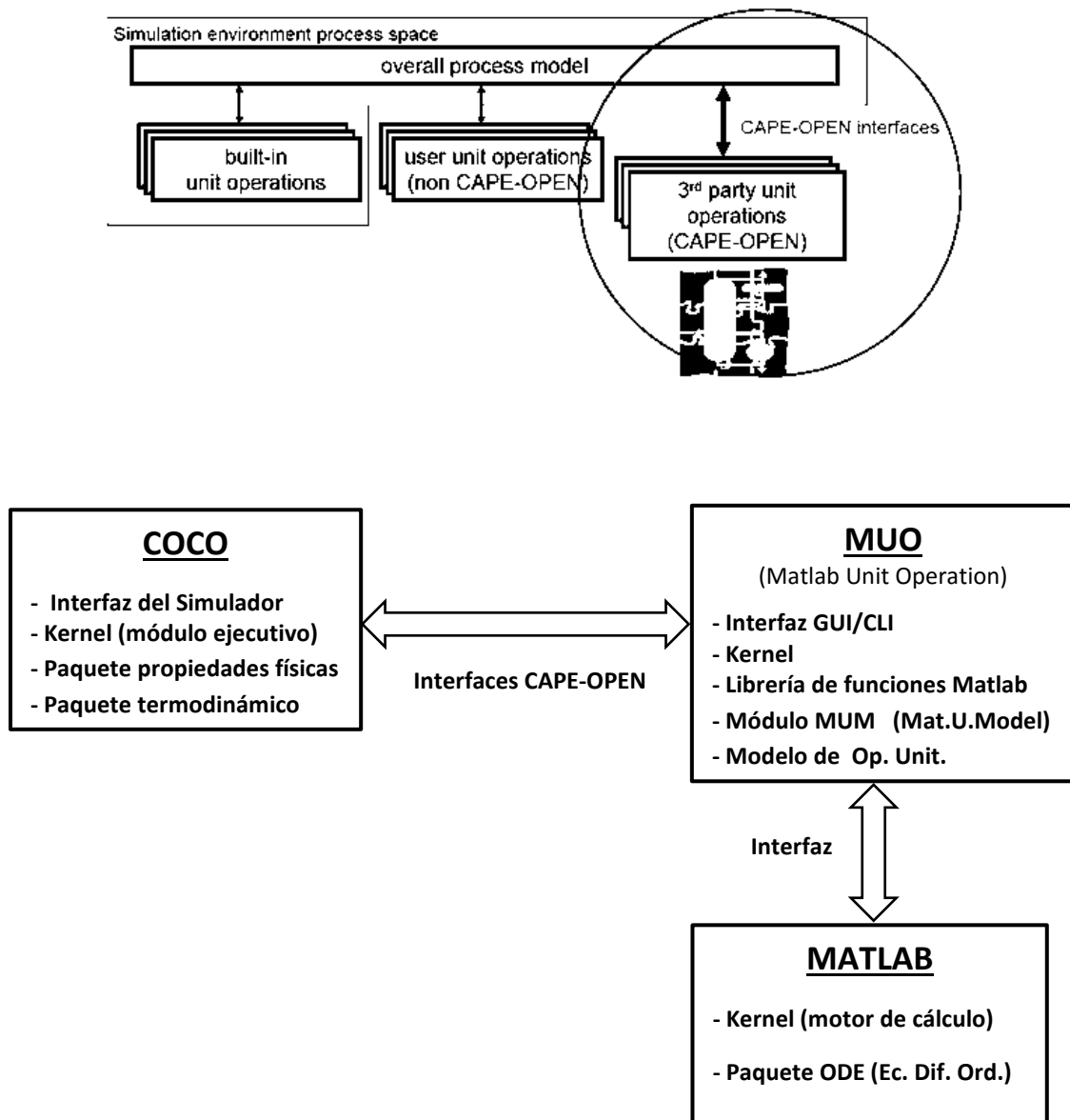


Fig. 3-5 Integración y funcionalidad de los componentes de la simulación. Adaptada de [7]

Se trata de una típica arquitectura:

cliente(COCO) ↔ servidor/cliente(MUO) ↔ servidor(MATLAB)

Para realizar computacionalmente la solución adoptada debe seguirse la secuencia de pasos correspondiente: En el entorno del simulador se elige la opción de inserción de operación unitaria CAPE-OPEN, esto activa la interfaz del componente MUO, a través de la cual se carga el archivo (.mum) que contiene: el script del modelo de la operación unitaria y el fichero (.xml) con la configuración de la misma. Desde el simulador se ejecuta la operación, lo que hace que la herramienta MUO active la aplicación Matlab para realizar los cálculos, cuyos resultados se devuelven a MUO y éste a su vez los pasa al simulador. La comunicación entre los componentes COCO y MUO se hace a través de interfaces CAPE-OPEN, que permiten el flujo de datos que sean compatibles con este estándar.

4. MATERIALES Y MEDIOS

Para la realización de este trabajo se han utilizado los siguientes recursos

4.1 HARDWARE

Ordenador Microsoft Surface Pro 4: procesador Intel i5, 8 GB RAM, 256 GB SSD bajo plataforma Windows 10.

4.1 SOFTWARE ESPECÍFICO

Matlab (v. R2015A)

Software propietario (de carácter matemático) de la empresa Mathworks que ofrece un entorno de desarrollo con lenguaje de programación m, de uso generalizado en ingeniería. Para el desarrollo del trabajo ha sido necesario la adquisición de una licencia de estudiante.

Matlab Unit Operation (v. 2.0.0.4)

Software shareware, herramienta/toolbox stand alone de Amsterchem que permite la implementación de operaciones unitarias cuya resolución se realiza en el entorno Matlab. Obtenido mediante solicitud de licencia académica.

COCO Simulator (v. 3.1.0.9)

Software freeware con fines académicos y de investigación, mantenido por la empresa Amsterchem, para la simulación en estado estacionario. Se trata de un simulador modular secuencial diseñado ad hoc (CAPE-OPEN to CAPE-OPEN) para este estándar.

Unsim Design (v. R430)

Software propiedad de Honeywell International Inc. Suite de carácter profesional que incorpora un potente simulador modular secuencial. El mismo se ha utilizado en las clases de simulación, y se encuentra instalado en los ordenadores de la Facultad de Química.

5. CASOS, EJECUCIÓN, RESULTADOS Y VALIDACIÓN

Una vez seleccionados los casos de estudio se procede a la validación de la operación unitaria programada mediante la comparación de los resultados de su ejecución en el simulador freeware COCO (compatible CAPE-OPEN) y los obtenidos del simulador profesional UNISIM, cargado con los mismos datos, y que se toma como referencia o patrón de contraste.

5.1 SELECCIÓN DE LOS CASOS DE ESTUDIO

A fin de conseguir el necesario grado de fiabilidad en las conclusiones de la investigación, se considera suficiente la discusión - con distintos valores de las entradas y la misma configuración del equipo - de los resultados de la simulación de los siguientes casos de estudio:

- **Modelizado:** corrientes multi/mono componente, sentido de flujo paralelo o contracorriente y un paso por tubos.
- **Extrapolado:** corrientes multi/mono componente, sentido de flujo paralelo o contracorriente y dos pasos por tubos. Como se deduce de la formulación del modelo, este caso no queda cubierto por el mismo. Se trata de ensayar con una extrapolación.

A continuación se muestra el valor de los parámetros de la configuración del equipo – definidos en el apartado 3.1.2 - utilizada en la simulación de los casos de estudio, la misma ha sido tomada de Kakac y Liu [2 p. 315-328] y se considera representativa de las especificaciones normales de desempeño o funcionamiento de un intercambiador de carcasa y tubos.

Parameter	Value	Unit
L	5	m
D_carcasa	0.387	m
B	0.3048	m
C	0.00635	m
Pt	0.03175	m
Pp	0.03175	m
D_out	0.025	m
D_in	0.0229	m
k	42.3	W / m K
F_en	0.00017	m ⁴ K kg / s ³
n_tubos	80	
N_pasos	1	
Sentido_corrientes	paralelo	

Fig. 5-1 Introducción de parámetros en Matlab Unit Operation

Los valores de los parámetros: sentido corrientes (paralelo/contracorriente) y número de pasos (1/2) se escogen según la simulación a realizar.

En cuanto a los fluidos circulantes; se toma como corriente caliente una mezcla de hidrocarburos y como corriente fría agua, lo que es una situación típica en la industria química.

5.2 EJECUCIÓN

En esta memoria, por su carácter redundante, solo se reflejará, a título de ejemplo, la secuencia de ejecución de una simulación completa del primer caso de estudio.

5.2.1 SIMULADOR COCO

Se ejecuta la simulación realizando la correspondiente secuencia de pasos, mostrando su ruta o path:

1. **Paso previo de creación del modelo:** con la herramienta Matlab Unit Operation (MUO) se genera y guarda el archivo .mum de la operación unitaria (UO) - se incluye como anexo nº 2- que contiene el modelo con los ficheros .m con el script de la UO y el .xml con la configuración de los puertos y parámetros.

GUI (COCO) → Insert → Unit operation → Custom → MUO → GUI (MUO) → Edit

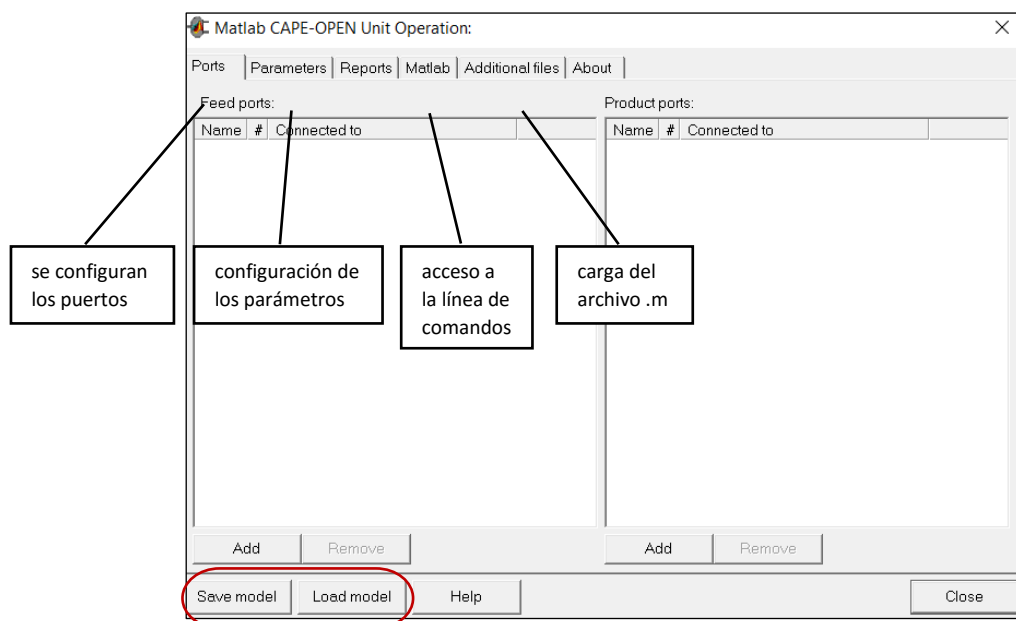


Fig. 5-2 Menú de edición de la herramienta MUO

2. Establecer los valores de las corrientes de entrada y definir las de salida

name	Feed hot	unit
▶ Stream		
▶ Connections		
▼ Overall		
pressure	400	kPa
temperature	60	°C
mole fraction [N-hexane]	0.5	
mole fraction [Water]	0	
mole fraction [N-heptane]	0.5	
mole fraction [N-octane]	0	
mole fraction [N-nonane]	0	
mole fraction [1-heptene]	0	
flow	30	kg / s
MW	0.093190502	kg / mol

name	Feed cold	unit
▶ Stream		
▶ Connections		
▼ Overall		
pressure	350	kPa
temperature	20	°C
mole fraction [N-hexane]	0	
mole fraction [Water]	1	
mole fraction [N-heptane]	0	
mole fraction [N-octane]	0	
mole fraction [N-nonane]	0	
mole fraction [1-heptene]	0	
flow	30	kg / s
MW	0.018014999	kg / mol

Fig. 5-3 Introducción de datos de las corrientes de entrada, paralelo

3. Insertar la UO CAPE-OPEN en el simulador

GUI (COCO) → Insert → Unit operation → Custom

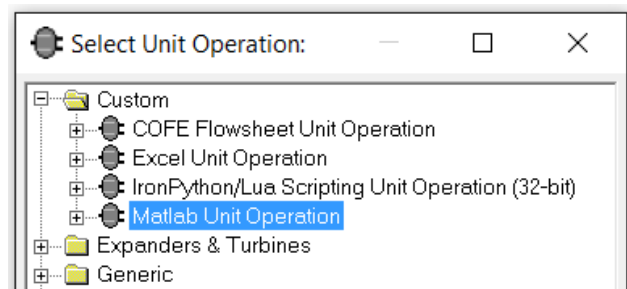


Fig. 5-4 Menú de COCO, inserción de operaciones unitarias

4. Mediante la interfaz de la herramienta MUO se carga el archivo .mum, creado anteriormente y que contiene el modelo, véase Fig. 5-2.

GUI (MUO) → Edit → Load model

5. En COCO se conectan los módulos de las corrientes de entrada y salida a los puertos de la UO.

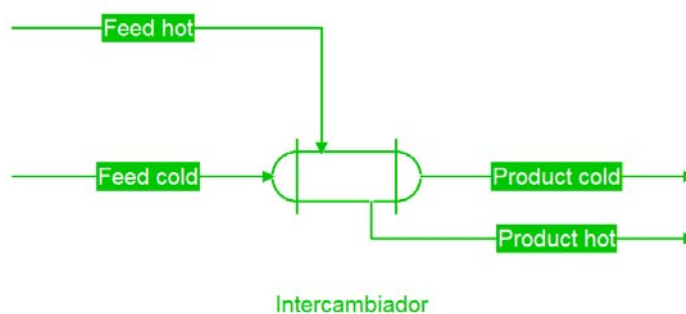


Fig. 5-5 Flowsheet de la simulación COCO

6. Se ejecuta la simulación (incorporada como anexo nº 3) obteniéndose los valores de las variables de salida en los módulos de las corrientes respectivas

name	Product hot	unit	name	Product cold	unit
▶ Stream			▶ Stream		
▶ Connections			▶ Connections		
▼ Overall			▼ Overall		
pressure	345.07807	kPa	pressure	345.04852	kPa
temperature	47.01417	°C	temperature	26.626819	°C
mole fraction [N-hexane]	0.5		mole fraction [N-hexane]	0	
mole fraction [Water]	0		mole fraction [Water]	1	
mole fraction [N-heptane]	0.5		mole fraction [N-heptane]	0	
mole fraction [N-octane]	0		mole fraction [N-octane]	0	
mole fraction [N-nonane]	0		mole fraction [N-nonane]	0	
mole fraction [1-heptene]	0		mole fraction [1-heptene]	0	

Fig. 5-6 Valores de las corrientes de salida COCO, paralelo y el perfil de temperaturas en una ventana emergente de Matlab

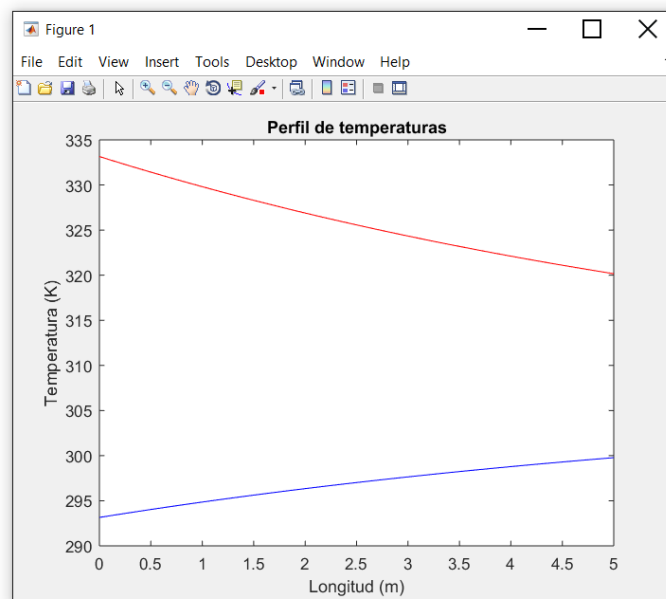


Fig. 5-7 Perfil de temperaturas COCO, paralelo

Para la simulación con flujo contracorriente, los valores de las variables de salida son:

pressure	345.10238	kPa	pressure	345.05029	kPa
temperature	48.796011	°C	temperature	26.799818	°C
mole fraction [N-hexane]	0.5		mole fraction [N-hexane]	0	
mole fraction [Water]	0		mole fraction [Water]	1	
mole fraction [N-heptane]	0.5		mole fraction [N-heptane]	0	
mole fraction [N-octane]	0		mole fraction [N-octane]	0	
mole fraction [N-nonane]	0		mole fraction [N-nonane]	0	
mole fraction [1-heptene]	0		mole fraction [1-heptene]	0	

Fig. 5-8 Introducción de datos de las corrientes de entrada, contracorriente

con el perfil de temperaturas

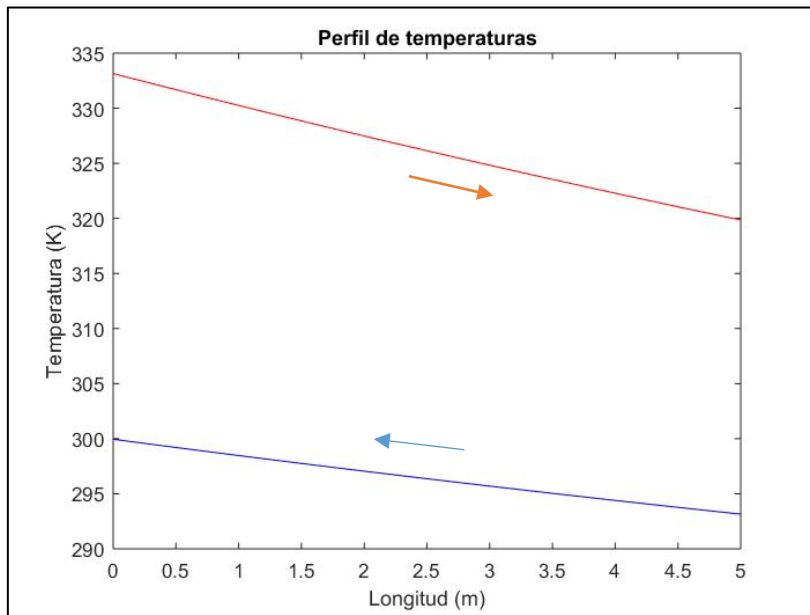


Fig. 5-9 Perfil de temperaturas COCO, contracorriente

5.2.2 EJECUCIÓN CON EL SIMULADOR UNISIM

Introduciendo en el simulador los mismos datos (se incorpora simulación como anexo , nº 4) se inserta la operación unitaria:

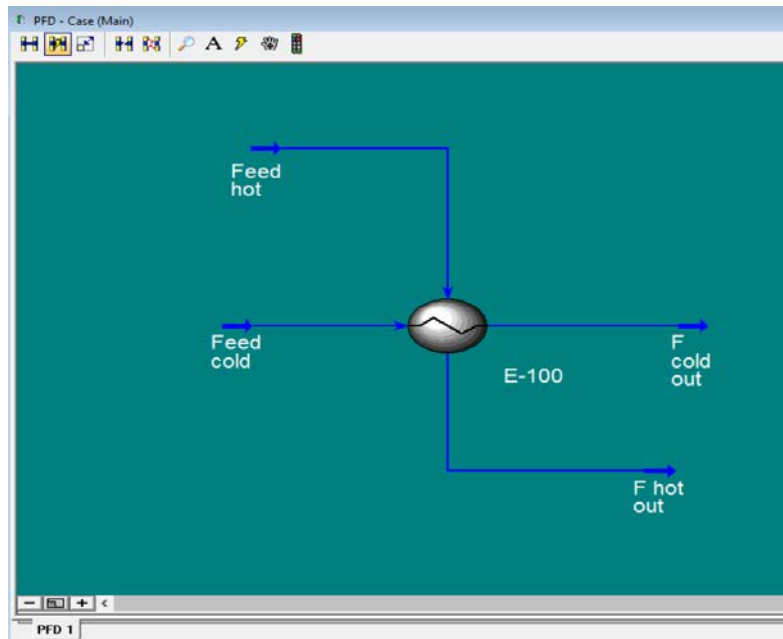


Fig. 5-10 Flowsheet de la simulación UNISIM

Para flujo paralelo se obtienen los siguientes resultados:

Worksheet	Name	Feed cold	F cold out	Feed hot	F hot out
Conditions	Vapour	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
	Temperature [C]	20,00	27,29	60,00	47,78
	Pressure [kPa]	350,0	344,5	400,0	342,3
	Properties				
	Composition				
	PF Specs				
	Molar Flow [kgmole/h]	4985	4985	1166	1166
	Mass Flow [kg/h]	1,080e+005	1,080e+005	1,080e+005	1,080e+005
	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	117,2	117,2	160,1	160,1
	Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-2,852e+005	-2,846e+005	-2,030e+005	-2,056e+005
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	51,80	53,86	113,9	105,9	
Heat Flow [kJ/h]	-1,422e+009	-1,419e+009	-2,366e+008	-2,397e+008	

Fig. 5-11 Valores de las corrientes de salida UNISIM, paralelo

con el perfil de temperaturas:

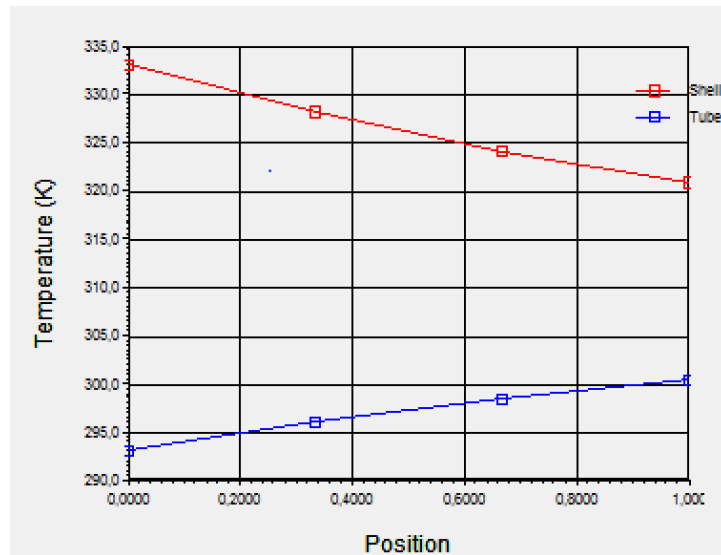


Fig. 5-12 Perfil de temperaturas UNISIM, paralelo

En la opción de flujo contracorriente:

Worksheet	Name	Feed cold	F cold out	Feed hot	F hot out
Conditions	Vapour	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
	Temperature [C]	20,00	27,47	60,00	47,47
	Pressure [kPa]	350,0	344,5	400,0	342,3
	Properties				
	Composition				
	PF Specs				
	Molar Flow [kgmole/h]	4985	4985	1166	1166
	Mass Flow [kg/h]	1,080e+005	1,080e+005	1,080e+005	1,080e+005
	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	117,2	117,2	160,1	160,1
	Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-2,852e+005	-2,846e+005	-2,030e+005	-2,057e+005
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	51,80	53,91	113,9	105,7	
Heat Flow [kJ/h]	-1,422e+009	-1,419e+009	-2,366e+008	-2,398e+008	

Fig. 5-13 Valores de las corrientes de salida UNISIM, contracorriente

UNISIM proporciona una gráfica de las temperaturas respecto al porcentaje de la distancia recorrida por los fluidos en el intercambiador, por lo que en este caso la misma no coincide con la de Matlab, que se ha programado con el criterio matemático (x,y), temperatura frente a posición en el intercambiador.

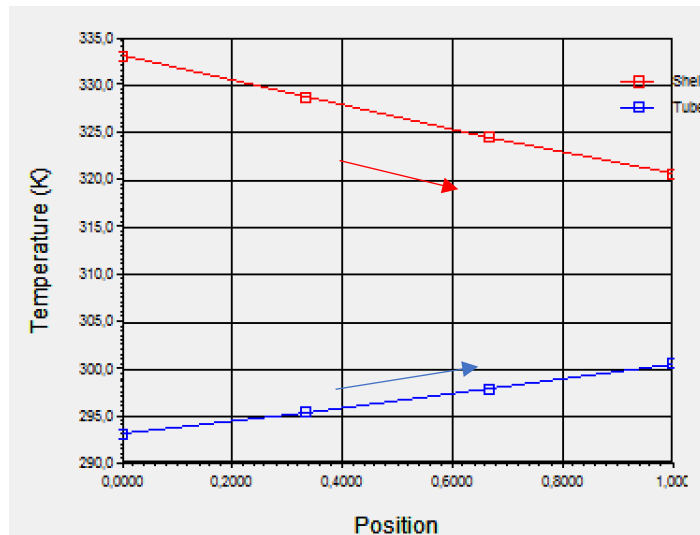


Fig. 5-14 Perfil de temperaturas UNISIM, contracorriente

5.3 DISEÑO EXPERIMENTAL Y RESULTADOS

Se han ejecutado 8 simulaciones (6 del primer caso y 2 del segundo), con el siguiente diseño experimental:

- ✓ **Sentido de las corrientes:** 50% en cada uno.
- ✓ **Variación de caudales máxicos:** caudales iguales, caudal caliente mayor que caudal frío y viceversa.
- ✓ **Variación del salto de térmico o fuerza impulsora:** diferencia de temperaturas de entrada alta, intermedia y pequeña.
- ✓ **Constancia de las presiones de entrada:** puesto que lo relevante son las caídas de presión en el intercambiador, que no dependen de la magnitud de estas presiones ni de los sentidos de las corrientes.
- ✓ **Circulación de fluidos:** el fluido más viscoso (hidrocarburos) circula por la carcasa.

Los datos recabados de las simulaciones efectuadas se muestran en las siguientes tablas:

SIMULACIONES COCO								
E/S	1	2	3	4	5	6	7	8
C. Entrada Cal								
Caudal (kg/s)	30	ID	35	ID	15	ID	30	ID
Temperatura (°C)	60	ID	70	ID	50	ID	60	ID
Presión (kPa)	400	ID	400	ID	400	ID	400	ID
C. Entrada Fría								
Caudal (kg/s)	30	ID	25	ID	20	ID	30	ID
Temperatura (°C)	20	ID	15	ID	30	ID	20	ID
Presión (kPa)	350	ID	350	ID	350	ID	350	ID
Nº pasos	1	1	1	1	1	1	2	2
Sentido	Paralelo	Contracorriente	Paralelo	Contracorriente	Paralelo	Contracorriente	Paralelo	Contracorriente
C. Salida Cal								
Temperatura (°C)	47,01	48,79	54,49	56,71	41,84	42,76	40,29	40,23
Presión (kPa)	345,1	ID	325,1	ID	385,8	ID	349,9	ID
C. Salida Fría								
Temperatura (°C)	26,62	26,79	26,3	26,62	34,09	34,28	29,98	30,76
Presión (kPa)	345	ID	346,4	ID	348,6	ID	332,9	ID

Tabla 5-1 Resultados simulaciones COCO

SIMULACIONES UNISIM								
E/S	1	2	3	4	5	6	7	8
C. Entrada Cal								
Caudal (kg/s)	30	ID	35	ID	15	ID	30	ID
Temperatura (°C)	60	ID	70	ID	50	ID	60	ID
Presión (kPa)	400	ID	400	ID	400	ID	400	ID
C. Entrada Fría								
Caudal (kg/s)	30	ID	25	ID	20	ID	30	ID
Temperatura (°C)	20	ID	15	ID	30	ID	20	ID
Presión (kPa)	350	ID	350	ID	350	ID	350	ID
Nº pasos	1	1	1	1	1	1	2	2
Sentido C.	Paralelo	Contracorriente	Paralelo	Contracorriente	Paralelo	Contracorriente	Paralelo	Contracorriente
C. Salida Cal								
Temperatura (°C)	47,47	47,78	55,7	55,33	42,01	41,73	46,33	46,34
Presión (kPa)	342,3	ID	322,2	ID	384,7	ID	342,4	ID
C. Salida Fría								
Temperatura (°C)	27,47	27,29	27,2	27,51	33,5	33,62	28,14	28,14
Presión (kPa)	344,5	ID	346	ID	347,4	ID	311,9	ID

Tabla 5-2 Resultados simulaciones UNISIM

5.4 TRATAMIENTO DE LOS DATOS

Se ha realizado un **tratamiento cualitativo** de los datos consistente en la representación comparativa, de las temperaturas y presiones de salida, entre los dos simuladores, obteniéndose las gráficas

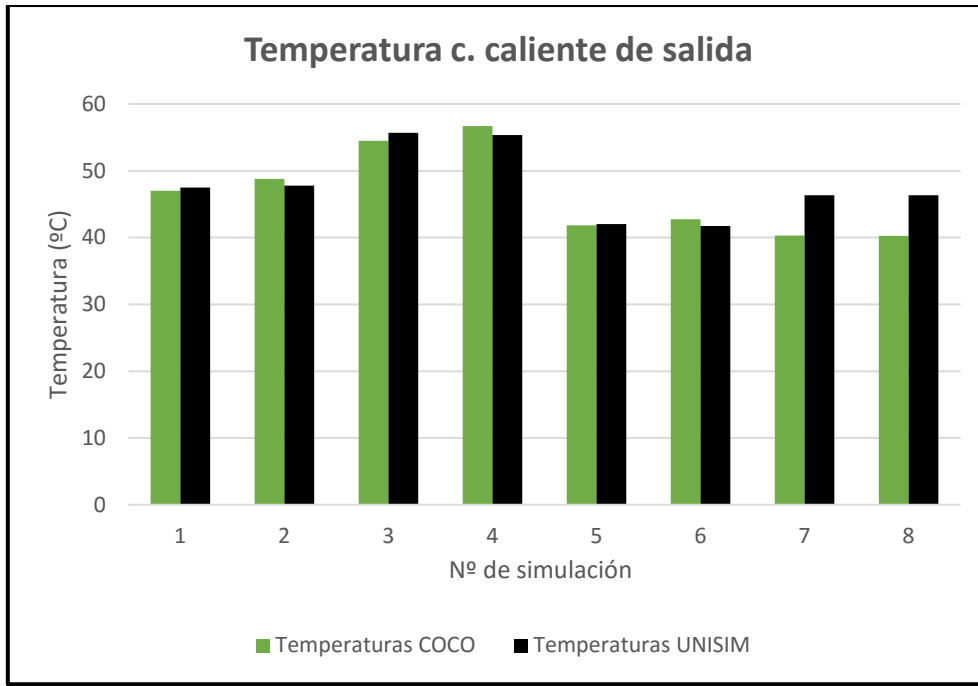


Fig. 5-15 Gráfico comparativo temperaturas de salida corriente caliente

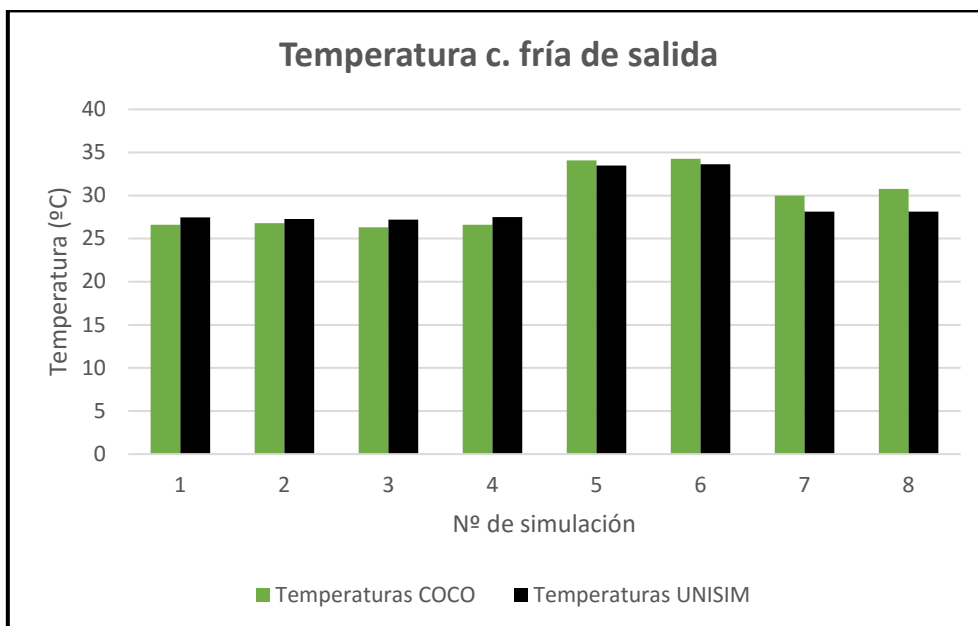


Fig. 5-16 Gráfico comparativo temperaturas de salida corriente fría

Según lo expuesto en los criterios del apartado anterior, para las presiones solo se grafican 4 simulaciones

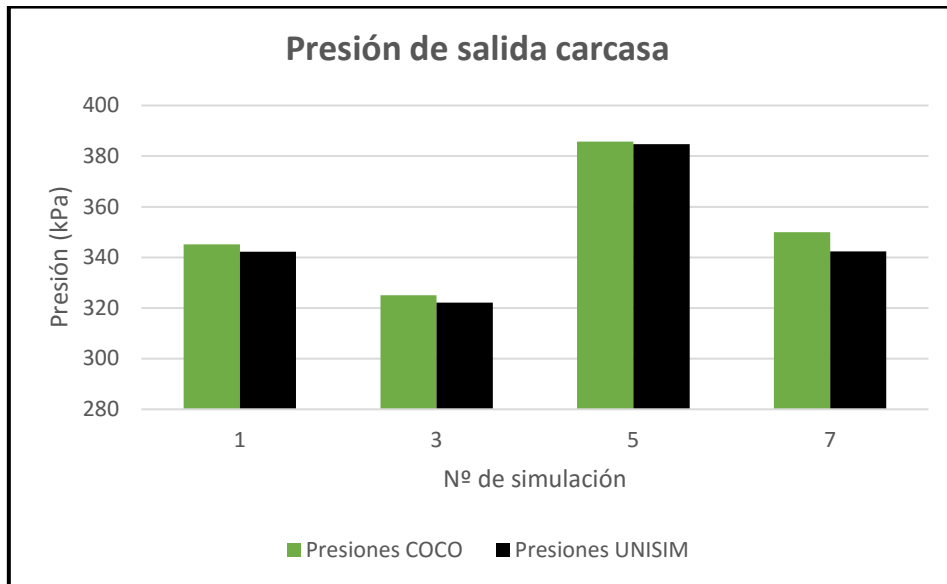


Fig. 5-17 Gráfico comparativo presiones de salida corriente caliente

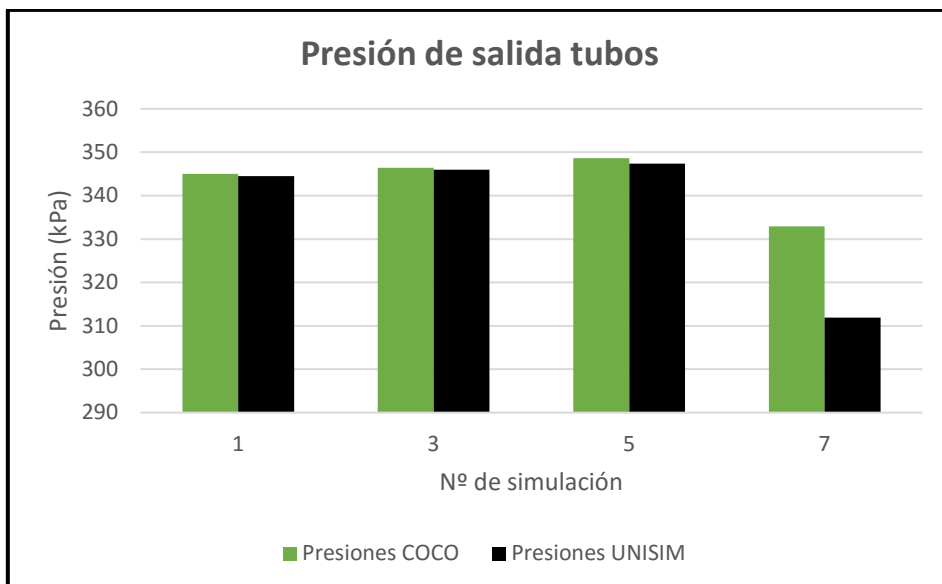


Fig. 5-18 Gráfico comparativo presiones de salida corriente fría

Así como un **tratamiento cuantitativo**: tabla comparativa del error relativo para los valores de las variables de salida. Tomando como valores reales los del UNISIM y experimentales los del COCO

$$e_r = \frac{|Valor\ COCO - Valor\ UNISIM|}{Valor\ UNISIM} * 100$$

SALIDAS	ERRORES RELATIVOS DE LAS SIMULACIONES							
	1	2	3	4	5	6	7	8
C. Salida Cal								
Temperatura (°C)	0,97%	2,11%	2,17%	2,49%	0,40%	2,47%	13,04%	13,19%
Presión (kPa)	0,82%	ID	0,90%	ID	0,29%	ID	2,19%	ID
C. Salida Fría								
Temperatura (°C)	3,09%	1,83%	3,31%	3,24%	1,76%	1,96%	6,54%	9,31%
Presión (kPa)	0,15%	ID	0,12%	ID	0,35%	ID	6,73%	ID

Tabla 5-3 Errores relativos de los resultados de las simulaciones

5.5 VALIDACIÓN Y DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS

Dadas las características y fines académicos de este trabajo, se considera que los resultados quedan validados cuando el margen de error de los mismos no supera el 5% de su valor. A este respecto, del análisis del contenido del apartado anterior se desprende lo siguiente:

Validación.-

Los resultados de las seis primeras simulaciones, que corresponden al caso de estudio modelizado, quedan validados. El mayor error - 3,31% de la temperatura de la corriente de salida fría de la simulación 3 - queda claramente por debajo del máximo permitido.

Por otra parte, los resultados de las dos últimas simulaciones, que corresponden al caso de estudio extrapolado, no son validados. Con la excepción del error de la presión de la corriente de salida caliente de las simulaciones de este caso, los errores superan el límite del 5%.

Discusión.-

Un análisis comparativo de los resultados de las simulaciones, dentro de los límites del diseño experimental, permite constatar que:

- ✓ No se aprecia una diferencia significativa entre las temperaturas de salida de las simulaciones con sentido de flujo paralelo y contracorriente.
- ✓ Aunque los resultados del caso de estudio extrapolado no quedan validados, los mismos se aproximan razonablemente - con un error máximo de un 13% - a los del simulador UNISIM.
- ✓ Dentro del rango de valores considerados, la caída de presión en la carcasa está fuertemente correlacionada con la variación del caudal, hecho que no se aprecia en los tubos, como se observa en la Fig. 5-17 al variar el caudal másico la caída de presión se mantiene relativamente constante.
- ✓ Los resultados de los dos simuladores son convergentes para las simulaciones con distintos valores tanto del salto de temperaturas de entrada como para el caudal másico.

6. CONCLUSIONES

Una vez realizada la discusión y validación de los resultados, de acuerdo al alcance y los límites del trabajo, así como la naturaleza los objetivos propuestos se presentan las siguientes conclusiones:

Respecto al objetivo general

Dentro del marco de diseño experimental de la investigación: para el caso de estudio modelizado, se ha logrado una implementación, totalmente funcional, de la operación unitaria seleccionada. Esto, con unas prestaciones que prácticamente se equiparan a las del simulador comercial UNISIM, utilizado como patrón de contraste. Además, según lo previsto, se han contemplado todas las fases y aspectos de la citada implementación, dados los fines académicos de la misma.

Respecto a los objetivos específicos

- ✓ La adaptación de la epistemología sistémica de Mario Bunge al ámbito de la ingeniería de procesos se ha mostrado fructífera para dotar a esta disciplina de un marco conceptual que aporte coherencia y unidad a la misma. Logrando el esclarecimiento de sus nociones o ideas fundamentales: las operaciones unitarias como tecnosistemas equipo-proceso, la modelización y simulación.
- ✓ Del mero estudio del funcionamiento y proceso de los intercambiadores de calor de carcasa y tubo, se ha constatado la enorme complejidad de los mecanismos internos de las transformaciones y fenómenos que suceden en los equipos empleados en la ingeniería química. Debido a esto, los modelos propuestos suelen ser del tipo caja negra o gris, en los que aparecen factores o coeficientes *ad hoc* que surgen de correlaciones experimentales, y no de la aplicación de teorías, principios o leyes fundamentales, lo cual no es otra cosa que una muestra del grado de desconocimiento. El método de Bell-Delaware, utilizado en una parte de la modelización de la operación unitaria de este trabajo, constituye un claro ejemplo de lo mencionado anteriormente.

- ✓ La inexistencia de solución analítica para la mayoría de los problemas reales en ingeniería impone la necesidad de simplificar el modelo recurriendo a hipótesis restrictivas o singulares, por lo que las soluciones analíticas obtenidas suelen tener poco valor práctico. En el presente caso, la resolución del modelo de la operación unitaria; un sistema de ecuaciones diferenciales lineales de primer orden, si admite una solución analítica, aunque laboriosa. Sin embargo, las facilidades dadas por los recursos computacionales actuales, siempre y cuando se cuenten con los conocimientos de programación y cálculo numérico necesarios, hacen que sea preferible optar por la simulación (resolución numérica + computación digital), no solo en este caso, sino de forma general.

- ✓ La usabilidad de las nuevas herramientas como Matlab Unit Operation con los componentes compatibles CAPE-OPEN utilizados (simuladores, motor de cálculo), presenta ciertos problemas iniciales de comunicación hasta lograr una correcta configuración de las interfaces entre los mismos, de hecho, en el caso de UNISIM no fue posible solucionarlo, siendo utilizado solo como patrón o contraste. Además, para programar una operación unitaria con este estándar se precisa incorporar a los comandos y rutinas del lenguaje m funciones adicionales Matlab CAPE-OPEN, así como familiarizarse con su uso. Sin embargo, una vez superados estos obstáculos, el carácter wizard de la herramienta permite obviar los tecnicismos y sutilezas propios de los desarrolladores de aplicaciones informáticas, para centrarse en las cuestiones fundamentales para el ingeniero de procesos, la modelización y simulación.

- ✓ En lo posible, se ha tratado de utilizar en este trabajo recursos freeware/open source/shareware: LibreOffice, COCO, Matlab Unit Operation, documentación en línea..., que aunque por el momento, no ofrecen todas las prestaciones del software propietario y comercial, ni están disponibles, algunas de ellas, en la plataforma alternativa Linux, han sido plenamente operativos y compatibles con los fines académicos de este trabajo.

Conclusión personal a modo de agradecimiento

De la reflexión sobre la experiencia que ha supuesto la elaboración de este trabajo, solo formalmente individual, se ha llegado al reconocimiento de la supremacía del paradigma fundamentado en las relaciones de sinergia entre los individuos como soporte de la complejidad y evolución de un sociosistema, al igual que la combinación adecuada de las *aisladas* operaciones unitarias de Little en un proceso químico, transforma la materia dotándola de propiedades emergentes y provechosas.

Trabajos futuros

Las sugerencias obvias corresponden a la superación de los límites fijados para este trabajo, considerando: corrientes gaseosas o con cambio de fase, el modo de simulación diseño, la modelización rigurosa de la opción de múltiples pasos por tubos o carcasa, la discretización del modelo para tener en cuenta la variación del calor específico, viscosidad y conductividad de las corrientes respecto de la posición a lo largo del equipo.

Adicionalmente, convendría superar las limitaciones intrínsecas del método de Bell-Delaware (caja gris), utilizando un método diferencial para la modelización, basado en fluidodinámica computacional.

6. CONCLUSIONS

Once the results have been discussed and validated, in accordance with the scope and the limits of the work, as well as the nature of the proposed objectives, we have come to the following conclusions:

Regarding the general objective

In the context of the experimental design of the research: for the modeled case-study, a fully functional implementation of the selected unit operation has been achieved, with a performance almost comparable to those of the commercial UNISIM simulator, used as contrast pattern. In addition, as expected, all the stages and aspects of the aforementioned implementation have been taken into consideration, given its academic purposes.

Regarding the specific objectives

The adaptation of Mario Bunge's systemic theory to the field of process engineering has been particularly fruitful in providing this discipline with a conceptual framework which adds consistency and cohesion and makes some fundamental notions easier to understand: unit operations as technosystems device-process, modelization and simulation.

After a simple study of the workings and the process of the shell and tube heat exchangers, it has been noted a huge complexity in the internal mechanisms of the transformations and phenomena that occurs in the devices used in chemical engineering. For that reason, blackbox-type models or greybox-type models are usually proposed, with factors or ad hoc coefficients that come from experimental correlations and not from the application of theories, principles or fundamental laws, which is nothing but a sign of the degree of ignorance. The Bell-Delaware method partially used in the modelization of the unit operation of this work is a clear example of what has been mentioned above.

Because of the lack of an analytical solution to most of real problems in engineering, there is no option but to simplify the model by resorting to restrictive or specific hypotheses. That is the reason why the obtained solutions usually have little practical value. In the case we are dealing with, the resolution of the unit operation model, a system of first-order or second-order linear differential equations indeed admits an analytical solution, although it is labourious. However, considering the advantages offered by today's computational resources, providing that we have the necessary knowledge in computer programming and numerical analysis, it is preferable to opt for simulation (numerical resolution + digital computing), not only in this case but in general.

The usability of new tools such as Matlab Unit Operation along with the CAPE-OPEN compatible components (simulators, calculation engine), presents some initial communication problems until a correct interface configuration between them was achieved, in fact, in the case of UNISIM, it was not possible to resolve it and was used only as a pattern of contrast. Moreover, in order to program a unit operation with this standard, it is necessary to add additional Matlab CAPE-OPEN functions to the commands and routines of the m language as well as becoming familiar with its usage. However, once these obstacles have been overcome, the wizard nature of this tool allows us to avoid technical terms and subtleties which are characteristic of software developers, in order to focus on fundamental matters for a process engineer: modelization and simulation.

Freeware/open source/shareware resources have been used whenever possible: LibreOffice, COCO, Matlab Unit Operation, online documentation... They still do not have for now all the features of commercial and proprietary software and some of them are not available in the alternative Linux platform. In spite of that, they have been fully operative and compatible with the academic purposes of this work.

Personal conclusion as a mark of gratitude

After reflecting on the experience that the preparation of this (only formally) individual work has meant, we came to recognition of the supremacy of the paradigm based on the relations of synergy between individuals as support of the complexity and evolution of a social system, as well as the adequate combination of the isolated unit operation of Little in a chemical process, transforms the matter by providing it with emergent and useful properties.

7. REFERENCIAS

- [1] KERN, D. *Procesos de Transmisión de Calor*. McGraw Hill, 1950/1999.
- [2] KAKAK, S. and LIU, H. *Heat exchangers selection, rating and thermal design*. CRC Press, 2002.
- [3] TOLEDO-VELÁZQUEZ, M. *Delaware Method Improvement for the Shell and Tubes Heat Exchanger Design*. Engineering, 6, 193-201, 2014.
- [4] MACÍAS HERNÁNDEZ, J. *La simulación de procesos en la industria química: ¿espectador o protagonista del cambio?*. Revista Ingeniería Química, 2015.
- [5] PANTELIDES, C.C. *Equation oriented process modelling technology: recent advances & current perspectives*, 2015. Disponible en: http://www.psenterprise.com/assets/data/equation_oriented_modelling_technology_2015.pdf.
- [6] CAPE - OPEN Consortium. *CAPE-OPEN: Next generation computer aided process engineering open simulation environment. Synthesis report*, 1997. Se encuentra en: http://www.colan.org/Specifications/v093/00_CO_Public_Synthesis.pdf.
- [7] VAN BATEN, J. and PONS, M. CAPE-OPEN: Interoperability in Industrial Flowsheet Simulation Software. *Chemie Ingenieur Technik*, Volume 86, Issue 7, pages 1052–1064, 2014.
- [8] SENGE, P. *The Fifth Discipline: The Art & Practice of The Learning Organization*. Crown Business, 2010.
- [9] BUNGE, M. *Ser, saber, hacer*. Paidós Iberica, 2002.
- [10] FOUST, A. *Principios de operaciones unitarias*. CECSA, 1987/2006.
- [11] Clasificación operaciones unitarias. Disponible en: <http://procesosbio.wikispaces.com/Concepto>
- [12] FLORES GONZÁLEZ, R. *Fabricación y validación experimental de un intercambiador de tubo y coraza* (Tesis doctoral), 2007. Disponible en: http://azul.bnct.ipn.mx/tesis/repositorio/1716_2007_ESIMEZAC_MAESTRIA_flores_gonzalez_rafael.pdf.
- [13] TEIXEIRA ZAO, I. *Análise computacional das correntes de tinkler (Dissertação de Mestrado)*, 2014. Disponible en: http://w2.files.scire.net.br/atricio/ufripem_upl//THESIS/1408/pemufjrj2014m_scisabelaramosteixeirazao.pdf.

- [14] CENGEL, Y. y GHAJAR A. *Transferencia de calor y masa*. McGraw Hill, 2011.
- [15] LEVENSPIEL, O. *Flujo de fluidos e intercambio de calor*. Reverté, 1993.
- [16] Bunge, M. *Ontología II. un mundo de sistemas (Tratado de filosofía)*. Gedisa, 2015.
- [17] CAMERON, I. and HANGOS, K. *Process Modelling and Model Analysis*. Academic Press, 2001.
- [18] LUYBEN, W. *Process modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers*. McGraw Hill, 1969/1996.
- [19] FINLAYSON, B. *Introduction to Chemical Engineering Computing*. Willey, 2012.
- [20] MARTINEZ SIFUENTES, V. et al. *Simulación de Procesos en Ingeniería Química*. Plaza y Valdes, 2000.
- [21] PEREZ GUERA, A. et al. *Estrategias de Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos*. Síntesis, 2014.
- [22] ZILL, D. *Ecuaciones diferenciales con aplicaciones de modelado*. Paraninfo, 2011.
- [23] ZILL, D, and CULLEN, M. *Matemáticas avanzadas para Ingeniería*. McGraw Hill, 2012.
- [24] WIRTH, N. *Algoritmos + Estructuras de Datos = Programas*. Dossat, 1992.
- [25] Apuntes de sistemas operativos. Disponible en:
<http://slideplayer.es/slide/3576520/>
- [26] FERRAN, V. *Fundamentos de Informática*. McGraw-Hill, 2008.
- [27] BORRELL, G. *Introducción informal a Matlab y Octave*. Disponible en:
<http://iimyo.forja.rediris.es/>
- [28] DE CASTRO, C. *Métodos numéricos para ingeniería con implementaciones en Matlab y Excel*. Disponible en:
https://www.researchgate.net/publication/262144148_Metodos_numericos_basicos_para_ingenieria_-_Con_implementaciones_en_Matlab_y_Excel
- [29] AL MALAH, K. *MATLAB Numerical Methods with Chemical Engineering Applications*. McGraw Hill, 2013.

- [30] PERNALETE, C et al. *Modelo de los Reactores de la Tecnología HDHPLUS® como componentes de simulación interoperables*. PDVSA, 2011.
- [31] Matlab Unit operation. Disponible en:
<http://www.amsterchem.com/matlabunitop.html>
- [32] AYALA HERRERA, E. Apuntes intercambiadores de calor. Disponible en:
<https://dredgarayalaherrera.wordpress.com/>
- [33] SCHLOMER, N. *Guidelines for writing clean and fast code in MATLAB*. 2015.
Disponible en:
<https://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/22943-guidelines-for-writing-clean-and-fast-code-in-matlab>

8. Anexos

Se incorporan al trabajo los siguientes ficheros electrónicos:

1. Script_UO.m (script Matlab con el código de la operación unitaria)
2. Modelo_UO.mum (modelo de la operación unitaria Matlab)
3. Simulacion COCO.fsd
4. Simulación Unisim.usc