

# ANÁLISIS Y SIMULACIÓN DE PROCESOS

DAVID M. HIMMELBLAU / KENNETH B. BISCHOFF



EDITORIAL REVERTÉ



# ANÁLISIS Y SIMULACIÓN DE PROCESOS

DAVID M. HIMMELBLAU / KENNETH B. BISCHOFF



EDITORIAL  
REVERTÉ

Barcelona · Bogotá · Buenos Aires · México

*Título de la obra original:*

**Process Analysis and Simulation**

*Edición original en lengua inglesa publicada por*

**John Wiley & Sons, Inc., New York**

Copyright © by John Wiley & Sons, Inc.

Edición en papel

© Editorial Reverté, S. A., 1976

ISBN: 978-84-291-7235-5

Edición ebook (PDF)

© Editorial Reverté, S. A., 2021

ISBN: 978-84-291-9177-6

*Versión española por*

**Dr. Fidel Mato Vázquez**

Catedrático de Química Técnica

de la Universidad de Valladolid

**Propiedad de**

**EDITORIAL REVERTÉ, S. A.**

Loreto, 13-15. Local B

08029 Barcelona. ESPAÑA

Tel: (34) 93 419 33 36

reverte@reverte.com

www.reverte.com

Reservados todos los derechos. La reproducción total o parcial de esta obra, por cualquier medio o procedimiento, comprendidos la reprografía y el tratamiento informático, queda rigurosamente prohibida, salvo excepción prevista en la ley. Asimismo queda prohibida la distribución de ejemplares mediante alquiler o préstamo públicos, la comunicación pública y la transformación de cualquier parte de esta publicación (incluido el diseño de la cubierta) sin la previa autorización de los titulares de la propiedad intelectual y de la Editorial. La infracción de los derechos mencionados puede ser constitutiva de delito contra la propiedad intelectual (Art. 270 y siguientes del Código Penal). El Centro Español de Derechos Reprográficos (CEDRO) vela por el respeto a los citados derechos.

# Prólogo

*Los métodos utilizados por los ingenieros químicos para la concepción, diseño y operación de procesos químicos han experimentado cambios considerables en los últimos años. La disponibilidad de equipo de cálculo de gran capacidad ha permitido realizar análisis más realistas y detallados con un esfuerzo y costes razonables. Se emplean principios físicos más básicos (y complejos), así como también se hace posible el uso de nuevas técnicas, lo que da lugar a que intervengan métodos matemáticos avanzados. La aplicación de muchas de estas modernas técnicas se ha dado en llamar «análisis de procesos», «ingeniería de sistemas» o «simulación».*

*Aun cuando pocos aspectos del análisis de procesos son realmente nuevos, la construcción de modelos matemáticos complicados de procesos reales y la manipulación de los modelos mediante calculadoras de gran capacidad representa una nueva fase en el análisis ingenieril. Ya no se acostumbra a resolver los problemas ingenieriles solamente con una regla de cálculo y papel para representaciones gráficas, sino que el ingeniero utiliza cada vez con mayor frecuencia máquinas calculadoras. El empleo de ordenadores como simuladores de procesos se encuentra también suficientemente establecido como para favorecer el desarrollo de procesos. Las técnicas estadísticas se utilizan frecuentemente para la correlación de datos. Todos estos aspectos del panorama actual exigen al ingeniero lo mejor de su formación matemática a la vez que imponen una severa limitación a su criterio. También pueden hacer que el ingeniero cometa errores más importantes. Por fortuna, las reglas básicas que gobiernan el análisis y simulación de procesos permanecen invariables a lo largo del tiempo; la aplicación de estas reglas es la que se hace más sofisticada.*

*Este libro tiene un doble objetivo. Primeramente, en la Parte I, se hace hincapié en los fundamentos de la construcción del modelo con el fin de familiarizar al ingeniero con los principios del desarrollo y las destrezas que se requieren para la aplicación de modelos matemáticos. En la bibliografía se han propuesto diversos tipos de modelos pero «los árboles no dejan ver el bosque». Una de las principales características de este libro consiste en que hemos organizado los distintos modelos dentro de normas lógicas, basadas en principios físicos y matemáticos, de forma que puedan aplicarse con confianza a problemas reales. Las suposiciones, simplificaciones y grado de detalle están claramente establecidos y relacionados con la complejidad del problema completo.*

*En segundo lugar, hemos tratado de fomentar la habilidad en la aplicación de la construcción de modelos a una gran variedad de sistemas y subsistemas. Creemos que el camino más eficaz para enseñar a los ingenieros cómo analizar procesos consiste en mostrar las técnicas analíticas, proporcionar ejemplos claros de sus aplicaciones y poner de manifiesto los escollos que pueden surgir en el análisis real. Un ingeniero de prospección necesita instrucción y práctica para establecer en qué consiste el problema, definirlo, analizarlo, desmenuzar la información, ensamblar los principios básicos dentro de nuevas normas y contrastar las soluciones obtenidas. También debe saber cómo recoger e inquirir datos. Con el fin de promover este segundo objetivo, los principios descritos en la Parte I van seguidos en las Partes II y III de ejemplos íntimamente relacionados con ellos, y, además, se han dedicado dos capítulos exclusivamente a aplicaciones: en el Capítulo 7 se examina el análisis de subsistemas y en el Capítulo 9 se discute el análisis de sistemas.*

*Hemos tratado de mostrar cómo las soluciones de los problemas dependen de las suposiciones introducidas, y que, por otra parte, dependiendo de tales suposiciones, los problemas tienen una o más soluciones. También se demuestra que distintos problemas de áreas diferentes pueden realmente resolverse por métodos similares, obteniéndose también soluciones semejantes. Nos hemos esforzado en descomponer los problemas en sus conceptos fundamentales y manipular los conceptos para formularse preguntas tales como: ¿qué ocurre si se cambia esta suposición?; ¿si se aplican límites diferentes?; ¿y si se invierte la secuencia?; ¿cómo concuerdan con otros conceptos de este campo? Resulta especialmente deseable para el lector comprender las razones que le han llevado a fallar en el seguimiento del camino recto para la resolución de un determinado problema. Si pone especial interés sobre el método de análisis y reflexión original puede esperar confiadamente en no transformarse en un ingeniero «de manual».*

*El libro está dividido en cuatro partes:*

- 1. Una breve introducción general y descripción cualitativa del análisis de procesos.*
- 2. Parte I. Principios de la construcción de modelos basados en principios físico-químicos y balances de población.*
- 3. Parte II. Metodología y aplicaciones del análisis de subsistemas.*

4. *Parte III. Metodología y aplicaciones del análisis de sistemas a gran escala.*

Además, el Apéndice A proporciona fuentes de las que se pueden obtener coeficientes del modelo, mientras que el Apéndice B describe algunas de las herramientas matemáticas empleadas en la mayor parte del texto.

Debido a que muchas de las materias que se abordan en este libro son diferentes de las que anteriormente han encontrado los estudiantes de ingeniería, cabe preguntarse qué papel podría desempeñar este libro en el curriculum académico. Los conocimientos básicos del lector deben abarcar ecuaciones diferenciales, fenómenos de transporte, algo de termodinámica y cinética de reacción, así como alguna instrucción acerca de ordenadores. Es deseable, pero no esencial, tener alguna experiencia adicional en el empleo de matrices y transformadas de Laplace, toda vez que las técnicas necesarias se describen en el Apéndice B y se pueden asimilar juntamente con su aplicación. Consideremos que este libro se puede utilizar mejor como texto para alumnos no graduados de último curso o, tal vez, primer curso de postgraduados, toda vez que trata de una forma unificada muchas de las partes de matemáticas e ingeniería que habitualmente se abordan en cursos separados. Así, aun cuando el libro trata el tema del análisis, está diseñado para constituir una síntesis de material nuevo y antiguo. No es un texto de matemáticas ni de fenómenos de transporte. No trata, por tanto, de substituir los cursos clásicos de diseño de plantas sino que podrá utilizarse paralelamente y con ventaja, puesto que el texto presenta caminos adicionales de enfocar algunos de los mismos problemas.

Este libro ha sido utilizado durante tres años en una disciplina electiva con alumnos no graduados de último curso en la Universidad de Texas, y partes del mismo se han utilizado en otros centros. Cometeríamos negligencia si no expresásemos nuestro agradecimiento a los centenares de estudiantes que, de una u otra forma (a veces sin saberlo), han participado en su preparación. Estamos también especialmente en deuda con el Dr. George Cummings por su temprano interés en nuestra obra, con los profesores John Prados y Robert Kadlec por su asistencia, así como con la California Research Corp. (ahora Chevron Research Corp.) por su continuada ayuda.

A los lectores que se encuentren en la situación del anónimo ingeniero que dijo

*Dear Lord, I pray  
When tired and weary  
Let my last results  
Fit the bl--dy theory*

(Querido Lord, cansado y aburrido, rezo para que mis últimos resultados concuerden con la maldita teoría.)

les resultará útil este libro.  
Austin. Texas

D. M. HIMMELBLAU  
K. B. BISCHOFF



# Índice analítico

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1 ¿Qué es análisis de procesos?	2
1.2 Valor del análisis y simulación de procesos	3
1.3 Principios generales del análisis de procesos	5
1.4 Modelos y construcción del modelo	8
1.5 Precauciones que se deben tomar en la construcción de modelos y en el análisis de procesos	10
<i>Referencias suplementarias</i>	12
<b>PARTE I MODELOS</b>	<b>13</b>
<b>2. Modelos basados en los principios de los fenómenos de transporte</b>	<b>15</b>
2.1 Descripción molecular	18
2.2 Descripción microscópica	18
2.3 Descripción de gradiente múltiple	37
2.4 Descripción de gradiente máximo	47
2.5 Descripción macroscópica	59
2.6 Términos cinéticos	67
2.7 Condiciones límite	70
<i>Referencias suplementarias</i>	79
<i>Problemas</i>	79

<b>3. Otras clasificaciones de los modelos de fenómenos de transporte</b>	<b>91</b>
3.1 Terminología de modelos matemáticos	92
3.1-1 Modelos deterministas frente a modelos probabilistas	92
3.1-2 Modelos lineales frente a modelos no lineales	92
3.1-3 Modelos de estado estacionario frente a modelos de estado no estacionario	93
3.1-4 Modelos de parámetro distribuido frente a modelos de parámetro globalizado	94
3.2 Otra clasificación de los modelos matemáticos	98
3.3 Razones por las que se utilizan con frecuencia ecuaciones diferenciales en la construcción de modelos	105
3.4 Representación integral de modelos	108
3.4-1 Método de momentos	108
3.4-2 Formulación variacional	118
3.4-3 Funciones de Green	119
 <i>Referencias suplementarias</i>	 122
<i>Problemas</i>	122
<b>4. Modelos de balance de población</b>	<b>127</b>
4.1 Introducción	127
4.2 Descripción de tipos de flujo en tanques de proceso	129
4.3 Definiciones de las funciones de distribución de edad	131
4.3-1 Distribución interna de edad de un fluido en un tanque cerrado: $I(t)$	131
4.3-2 Distribución de edad de la corriente de salida: distribución de residencia del fluido en un tanque cerrado: $E(t)$	132
4.3-3 Función de intensidad $\Lambda(t)$	134
4.3-4 Relaciones entre las funciones de distribución de edad	134
4.3-5 Medida experimental de distribución de edad	136
4.3-6 Ejemplos de funciones de distribución de edad; flujo de tapón y de mezcla perfecta	140
4.4 Balance general de población	146
4.5 Interpretación de las funciones de distribución de edad	153
4.5-1 Grado de mezcla relativamente pequeño	154
4.5-2 Detección de espacios muertos	159
4.5-3 Detección de cortocircuitos	161
4.5-4 Detección de regiones no uniformes	164
4.6 Modelos combinados	177
4.6-1 Problemas especiales en la definición de regiones muertas	181

4.6-2	Relaciones generales entre los parámetros de modelos combinados	182
	<i>Referencias complementarias</i>	190
	<i>Problemas</i>	190
<b>PARTE II ANÁLISIS DE SUBSISTEMAS</b>		<b>195</b>
<b>5.</b>	<b>Principios del análisis de subsistemas para modelos de fenómenos de transporte</b>	<b>197</b>
5.1	Estrategia para el análisis de subsistemas	197
5.2	Soluciones generales de modelos para subsistemas	203
5.2-1	Solución general de ecuaciones diferenciales lineales de primer orden	206
5.2-2	Solución general para sistemas de ecuaciones diferenciales lineales simultáneas de primer orden	207
5.2-3	Solución general para sistemas de ecuaciones diferenciales no lineales simultáneas de primer orden	208
5.2-4	Solución de sistemas de ecuaciones de diferencia ordinarias	209
5.2-5	Soluciones de ecuaciones lineales en derivadas parciales	210
5.2-6	Soluciones numéricas y empleo de calculadoras	210
5.3	Respuesta a entradas típicas	214
5.3-1	Tipos de entradas comúnmente utilizadas	214
5.3-2	Respuesta de escalón de subsistemas	217
5.3-2-1	Respuesta de escalón de una sola ecuación diferencial ordinaria	217
5.3-2-2	Respuesta de escalón para sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias y ecuaciones de diferencia	221
5.3-2-3	Respuesta en escalón para ecuaciones en derivadas parciales	228
5.3-3	Respuesta de impulso para subsistemas	236
5.3-3-1	Modelos representados por ecuaciones diferenciales ordinarias	236
5.3-3-2	Modelos representados por ecuaciones en derivadas parciales	249
5.3-4	Respuesta de frecuencia para subsistemas	262
5.4	Lineación de modelos no lineales	280
5.5	Funciones de transferencia	287
5.5-1	Modelos representados por ecuaciones diferenciales ordinarias	28

5.5-2	Modelos representados por sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias simultáneas	291
5.5-3	Modelos representados por ecuaciones en derivadas parciales	293
5.6	Estabilidad de subsistemas	301
5.6-1	Estabilidad de subsistemas representados por ecuaciones diferenciales ordinarias lineales y ecuaciones de diferencia	307
5.6-2	Estabilidad de subsistemas representados por ecuaciones diferenciales ordinarias no lineales y ecuaciones de diferencia	320
5.6-2-1	Lineación para determinar la estabilidad	322
5.6-2-2	Técnicas de plano de fase para determinar la estabilidad	330
5.6-2-3	«Segundo» método de Lyapunov para determinar la estabilidad	332
5.6-2-4	Empleo de calculadoras para determinar la estabilidad	349
5.6-3	Estabilidad de subsistemas representados por ecuaciones diferenciales en derivadas parciales	349
5.7	Análisis dimensional	359
	<i>Referencias suplementarias</i>	376
	<i>Problemas</i>	377
<b>6.</b>	<b>Aplicación de los modelos del balance de población</b>	<b>399</b>
6.1	Predicción del comportamiento general	399
6.2	Reactores químicos	401
6.2-1	Macromezcla	401
6.2-2	Micromezcla	411
6.3	Balances generales de población	420
	<i>Problemas</i>	438
<b>7.</b>	<b>Aplicaciones y ejemplos de análisis de subsistemas para modelos de fenómenos de transporte</b>	<b>441</b>
7.1	Subsistemas de parámetro globalizado	442
7.2	Subsistemas de parámetro distribuido	462
7.3	Globalización de un subsistema de parámetro distribuido	484
	<i>Problemas</i>	496

PARTE III ANÁLISIS DE SISTEMAS	<b>507</b>
<b>8. Fundamentos del análisis de sistemas</b>	<b>509</b>
8.1 Diagramas de bloques	511
8.2 Descomposición de sistemas de gran escala	524
8.2-1 Teoría de gráficos y matrices booleanas	525
8.2-2 Descomposición de sistemas lineales de gran escala	534
8.2-3 Descomposición de sistemas de gran escala compuestos de elementos no lineales	548
8.3 Gráficos de flujo de señal	563
8.3-1 Reglas fundamentales	564
8.3-2 Reglas de recirculación	570
8.3-3 Reducción de gráficos de flujo de señal	571
8.4 Estabilidad de sistemas	581
8.5 Sensibilidad de sistemas	585
8.6 Determinancia del sistema	604
8.7 Distribución de un modelo de parámetro globalizado	609
<i>Referencias suplementarias</i>	616
<i>Problemas</i>	618
<b>9. Aplicaciones y ejemplos del análisis de sistemas</b>	<b>637</b>
9.1 Procesos de etapas en contracorriente	638
9.2 Flujo en tuberías	644
<i>Referencias suplementarias</i>	662
<i>Problemas</i>	663
<b>Notación</b>	<b>675</b>
<b>Apéndice A. Métodos de estimación de coeficientes de modelos</b>	<b>685</b>
A.1 Flujo de una sola fase	686
A.2 Flujo de dos fases	694
<b>Apéndice B. Resumen matemático</b>	<b>697</b>
B.1 Propiedades y características de las ecuaciones lineales	697
B.2 Operadores lineales y no lineales	699
B.3 Sistemas lineales	700
B.4 Álgebra de matrices	701
B.4-1 Resolución de ecuaciones algebraicas	706
B.4-2 Autovalores y autovectores	707
B.4-3 Resolución de sistemas de ecuaciones no lineales	711

B.5	Soluciones de ecuaciones diferenciales ordinarias	711
B.5-1	Ecuaciones lineales sencillas de segundo orden y superiores	712
B.5-2	Ecuaciones lineales especiales con coeficientes variables	715
B.5-3	Ecuaciones no lineales	716
B.6	Solución de sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias lineales con coeficientes constantes	716
B.7	Solución de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales	730
B.8	Transformadas de Laplace	731
B.9	Funciones generalizadas	740
	<i>Referencias suplementarias</i>	747
	<b>Índice de autores</b>	749
	<b>Índice alfabético</b>	753

# Introducción

El empleo de métodos científicos en el análisis de procesos no es nuevo, pero la verdad es que se observa un creciente interés en los últimos diez años en este campo. Por métodos científicos se entiende la acumulación de información, el análisis de esta información por técnicas adecuadas, síntesis y toma de decisiones, todo ello utilizando una base matemática. Una gran parte de este crecimiento de las aplicaciones científicas se debe sin duda a la existencia y empleo de calculadoras de gran capacidad (digitales, analógicas e híbridas) que en la actualidad permiten el estudio de problemas de gran complejidad, que, solamente hace unos años, no se podían abordar. Esta tendencia ha de continuar sin duda en el futuro a medida que se desarrollen nuevos métodos y se perfeccionen los actualmente disponibles.

Para adquirir competencia en el análisis de procesos se requiere una doble capacidad por parte del ingeniero. La primera y más evidente de ellas es que debe poseer unos conocimientos sólidos y versátiles tanto de ingeniería como de matemáticas. En segundo lugar, debe ser suficientemente perceptivo para encontrar dónde las técnicas descritas en este libro se pueden emplear con mayor eficacia que los métodos ingenieriles clásicos. Esta capacidad perceptiva no es menos importante. Además de los ejemplos, al final de cada capítulo se propone un cierto número de problemas que permitirán al estudiante comprobar el progreso que va realizando.

En este capítulo se presenta la terminología del análisis de procesos así como algunas motivaciones que permitan al lector familiarizarse con el tema.

## 1.1 ¿QUÉ ES ANÁLISIS DE PROCESOS?

El rápido desarrollo de lo que se ha dado en llamar análisis de procesos, ingeniería de sistemas o investigación de operaciones, como un campo esencialmente interdisciplinario, ha puesto en uso una inevitable proliferación de términos y conceptos. Términos tales como «modelo», «sistema» y «variable» (por mencionar solamente unos pocos) se han utilizado en notaciones muy diferentes. El *análisis de procesos* se refiere a la aplicación de métodos científicos al reconocimiento y definición de problemas, así como al desarrollo de procedimientos para su solución. En una forma más concreta, esto quiere decir (1) especificación matemática del problema para la situación física dada, (2) análisis detallado para obtener modelos matemáticos, y (3) síntesis y presentación de resultados para asegurar la total comprensión. El *proceso* representa una serie real de operaciones o tratamiento de materiales, tal como es contrastado por el *modelo*, que representa una descripción matemática del proceso real. A continuación se hace referencia a otros términos que se encuentran con frecuencia y se utilizan en este libro.

*Sistema.* La disposición de *elementos* (divisiones arbitrarias y abstractas del proceso) que están unidos entre sí por flujos comunes de materiales y/o información. La salida del sistema es una función no solamente de las características de los elementos del sistema, que reciben también el nombre de *subsistemas*, sino también de sus interacciones e interrelaciones.

*Parámetro.* Una propiedad del proceso o de su entorno, a la que se puede asignar valores numéricos arbitrarios; también puede ser una constante o coeficiente de una ecuación.

*Simulación.* El estudio de un sistema o sus partes mediante manipulación de su representación matemática o de su modelo físico.

El análisis de procesos comprende un examen global del proceso, de otros procesos posibles, así como de sus aspectos económicos. Se hace resaltar el aspecto económico porque al efectuar una selección de distintos esquemas posibles, los costes constituyen un elemento tan importante que nunca se pueden ignorar. Si se ha de realizar una amplia selección, es preciso conocer los costes de cada proyecto y compararlo con los demás. De esta forma, se pueden estimar los beneficios de cada una de las alternativas con fines comparativos. La estimación de costes para distintos sistemas resulta vital, no solamente porque el ensayo de un nuevo sistema resulta muy costoso sino porque generalmente son numerosos los sistemas competitivos que es necesario tener en consideración. Sin embargo, a pesar de la importancia de los factores económicos, en este libro se tratan fundamentalmente los aspectos fisicoquímicos, ingenieriles y matemáticos en vez del estudio de la evaluación económica.

El *tratamiento de sistemas* trata conjuntamente las técnicas utilizadas por ingenieros de muy distinta formación básica, con el fin de entrenar al personal

que es (o será) el usuario del sistema. El punto de vista corresponde a un tratamiento *global* basado en los requerimientos funcionales que debe cumplir el sistema. Esperamos que de esta forma se puedan obtener las deseadas soluciones en función de los datos y parámetros. Por otra parte, con frecuencia se incorpora un análisis dinámico, en contraste con los estudios más clásicos de estado estacionario. Por consiguiente, el ingeniero ha de conocer los criterios de estabilidad y los métodos de operación para tener éxito en el funcionamiento del sistema.

## 1.2 VALOR DEL ANÁLISIS Y SIMULACIÓN DE PROCESOS

Existen ciertas características de los procesos industriales que las diferencian de otros tipos de industrias, debido esencialmente a que hay una compleja estructura de muchas etapas, cada una de las cuales consta a su vez de numerosos subcomponentes. Las ecuaciones que describen las relaciones entre las variables importantes oscilan desde unas muy sencillas hasta otras muy complicadas. Teniendo en cuenta que interviene un elevado flujo de materiales con un valor económico relativamente alto, se comprende que pequeñas modificaciones en las características de diseño y operación pueden tener una importante repercusión económica. Finalmente, las características de los subcomponentes del proceso todavía no son, en general, lo suficientemente bien conocidas como para permitir al ingeniero basarse exclusivamente en la teoría para proceder al diseño y control.

En última instancia, los ingenieros de las industrias de proceso se ocupan en dos principales tipos de trabajo: la operación de plantas ya existentes y el diseño de plantas nuevas o modificadas. Por lo que se refiere a la operación de instalaciones, tanto el control como la optimización constituyen las dos funciones más importantes de los ingenieros. Para que el ingeniero pueda desarrollar con eficacia su trabajo en estos campos debe estar en condiciones de poder realizar un análisis sofisticado del proceso en sí. Será preciso programar los sistemas de cálculo de forma que se puedan combinar las relaciones que describen las partes individuales de la instalación; habrá que evaluar los parámetros básicos de estas relaciones, y, por último, será preciso dar un contenido más cuantitativo a los aspectos cualitativos de los criterios de que se dispone. Por éstas y muchas otras razones con ellas relacionadas, el control y optimización tienen su base fundamental en el análisis de procesos.

El segundo tipo de trabajo de los ingenieros, que es el diseño, resulta en cierto modo más difícil. Por supuesto que los datos de la planta real *no* son conocidos de antemano, y, por esta razón, el ingeniero tiene que utilizar una parte importante de su criterio intuitivo. Por otra parte, cuando se modifican plantas existentes o se diseñan plantas similares a otras ya construidas, el ingeniero puede disponer de una importante experiencia.

De lo expuesto hasta aquí se llega a la conclusión de que la construcción de modelos matemáticos teóricos o semiteóricos constituye frecuentemente una necesidad preliminar.

Tanto el diseño como la operación se puede facilitar mediante la simulación del proceso o de sus partes. En primer lugar, es muy difícil que la dirección de la empresa permita a los ingenieros introducir arbitrariamente cambios en una instalación que opera satisfactoriamente por el simple hecho de ver qué es lo que ocurre. Además, los modelos matemáticos de los procesos se pueden manipular mucho más fácilmente que las plantas reales. Por ejemplo, se puede simular la operación fuera de las condiciones o intervalos normales y también se puede hacer «reventar» la planta con el fin de encontrar las condiciones de operación prohibidas.

Desde un punto de vista más general, el análisis y simulación de procesos presenta las ventajas que se señalan a continuación.

1. *Experimentación económica.* Es posible estudiar procesos existentes de una forma más rápida, económica y completa que en la planta real. La simulación puede aumentar o reducir el tiempo real de una forma análoga a como una cámara cinematográfica acelera o retarda las imágenes; de esta forma se puede observar más fácilmente la operación del sistema.

2. *Extrapolación.* Con un modelo matemático adecuado se pueden ensayar intervalos extremos de las condiciones de operación, que pueden ser impracticables o imposibles de realizar en una planta real. También es posible establecer características de funcionamiento.

3. *Estudio de conmutabilidad y evaluación de otros planes de actuación.* Se pueden introducir nuevos factores o elementos de un sistema y suprimir otros antiguos al examinar el sistema con el fin de ver si estas modificaciones son compatibles. La simulación permite comparar distintos diseños y procesos que todavía no están en operación y ensayar hipótesis sobre sistemas o procesos antes de llevarlos a la práctica.

4. *Repetición de experimentos.* La simulación permite estudiar el efecto de la modificación de las variables y parámetros con resultados reproducibles. En el modelo matemático se puede introducir o retirar a voluntad un error, lo cual no es posible en la planta real.

5. *Control de cálculo.* La simulación constituye una importante ayuda material para el estudio de los sistemas de control con lazos abiertos y cerrados.

6. *Ensayo de sensibilidad.* Se puede ensayar la sensibilidad de los parámetros de costes y los parámetros básicos del sistema; por ejemplo, un incremento de un 10 por ciento en la velocidad de alimentación podrá tener, según los casos, un efecto mínimo o un efecto muy importante sobre el funcionamiento de la instalación.

7. *Estudio de la estabilidad del sistema.* Se puede examinar la estabilidad de sistemas y subsistemas frente a diferentes perturbaciones.

Por estas razones, y otras que se verán más adelante, se puede concluir que el análisis de procesos constituye un elemento muy importante para tomar una decisión más científica y responsable.

Un breve examen de la bibliografía revela numerosos ejemplos en los que se pone de manifiesto la utilidad práctica del análisis de procesos. En un artículo de Armstrong y Olson<sup>1</sup> se estudian las mejoras obtenidas por simulación en la operación de una planta de 150 tm/día de amoniaco. Encontraron que era posible un aumento del 10 por ciento de la producción, a partir de una mejor operación, *sin* ningún coste adicional correspondiente a un mayor número de controles. La razón real para el estudio fue el planeamiento de una ampliación de la fábrica. En el artículo se estimó que el incremento de producción utilizando simulación de procesos daba lugar una capacidad de un 50 por ciento más elevada que la que sería posible utilizando técnicas convencionales de diseño. El coste total de la investigación, que ascendió a aproximadamente ocho hombres-año de esfuerzo técnico, era amortizado en seis meses con las mejoras introducidas en la operación de la planta.

Un ejemplo anterior de Woods<sup>2</sup> describe la optimización de los sistemas de control en una columna de fraccionamiento de monoetilenglicol. En este caso no se utilizó un modelo matemático como tal, sino relaciones estrictamente empíricas. La columna era perturbada mediante una entrada de escalón con el fin de obtener sus características dinámicas. El ahorro conseguido se estimó en unos 1750 dólares anuales.

Finalmente, se presenta un ejemplo descrito por Peiser y Grover.<sup>3</sup> Los experimentos sobre las dificultades de operación se llevaron a cabo en una torre de fraccionamiento, originadas por un deficiente control del componente más ligero en el producto de colas. También se producía perturbación procediendo a la inundación de la torre. Los habituales cálculos de estado estacionario no arrojaron ninguna luz sobre estos problemas, y, por esta razón, se procedió a efectuar un análisis dinámico, incluyendo los aspectos hidrodinámicos de los platos. Mediante simulación de la torre con el modelo se encontraron y corrigieron las dificultades con modificaciones de diseño relativamente sencillas. Se encontró que después la columna operaba satisfactoriamente.

### 1.3 PRINCIPIOS GENERALES DEL ANÁLISIS DE PROCESOS

Para planificar, organizar, evaluar y controlar los complejos procesos de la moderna tecnología es preciso conocer los factores fundamentales que influyen

<sup>1</sup> G. M. Armstrong y L. R. Olson, *Chem. Eng.*, **69**, 135 (1962).

<sup>2</sup> F. A. Woods, *Control Eng.*, **5**, 91 (1958).

<sup>3</sup> A. M. Peiser y S. S. Grover, *Chem. Eng. Progr.*, **58**, No. 9, 65 (1962).

en el funcionamiento del proceso. Una forma de conseguir esto consiste en construir una réplica real, a pequeña escala, del proceso y efectuar cambios en las variables de entrada mientras se observa el funcionamiento del proceso. Una técnica de este tipo no solamente lleva tiempo y resulta cara sino que además puede resultar imposible de llevar a cabo en la práctica. Con frecuencia resulta mucho más conveniente y económico emplear (hasta donde sea posible) un método de representaciones conceptuales del proceso. Este hecho recibe el nombre de «construcción del modelo».

Para un proceso y un problema determinados, el analista trata de establecer una serie de relaciones matemáticas, juntamente con las condiciones límite, que son isomórficas con las relaciones entre las variables del proceso. Debido a la complejidad de los procesos reales y las limitaciones matemáticas, el modelo desarrollado no deja de ser siempre altamente idealizado y generalmente sólo representa con exactitud unas pocas propiedades del proceso. El primer modelo es con frecuencia sencillo pero poco realista. Tomando como base este primer modelo, el analista intenta encontrar sus principales deficiencias y construir otro modelo que corrija las deficiencias seleccionadas y que al mismo tiempo siga siendo lo suficientemente sencillo para su tratamiento matemático. El ingeniero ensaya distintos modelos antes de encontrar uno que represente satisfactoriamente aquellos atributos particulares del proceso que tienen interés. El ensayo de los modelos es caro pero la construcción de procesos a pequeña o gran escala resulta todavía más costosa.

Es evidente que la representación conceptual de un proceso real no puede abarcar todos los detalles del proceso, a pesar de los avances de las modernas técnicas de cálculo y de los métodos del análisis matemático. Tal como se ha indicado, solamente se pueden determinar algunos atributos y relaciones del sistema, especialmente aquellos que son fáciles de medir y tienen importancia desde el punto de vista de su efecto sobre el proceso. Por consiguiente, el analista está interesado en el desarrollo de modelos de procesos que pueden ser fácilmente manipulados, que sirven para un elevado número de variables e interrelaciones y que tienen una cierta seguridad de representar el proceso físico real con un razonable grado de confianza.

La estrategia general del análisis de procesos complejos sigue un camino relativamente bien definido, que consta de las siguientes etapas:

1. Formulación del problema y establecimiento de objetivos y criterios; delimitación de las necesidades de operación.
2. Inspección preliminar y clasificación del proceso con el fin de descomponerlo en subsistemas (elementos).
3. Determinación preliminar de las relaciones entre los subsistemas.
4. Análisis de las variables y relaciones para obtener un conjunto tan sencillo y consistente como sea posible.

5. Establecimiento de un modelo matemático (en los casos en los que sea aplicable) de las relaciones en función de las variables y parámetros; descripción de los elementos que solamente se pueden representar en forma incompleta mediante modelos matemáticos.

6. Evaluación de la forma en la que el modelo representa al proceso real, utilizando el juicio crítico personal para acoplar las representaciones matemáticas con las no matemáticas.

7. Aplicación del modelo; interpretación y comprensión de los resultados.

Estas etapas están concebidas para desarrollar un método de estructuración y análisis de procesos, siempre que sea posible, por medio de modelos matemáticos. Este método permite un análisis más riguroso y tiende a que los criterios subjetivos (cuando son precisos) sean más metódicos y completos. La Fig. 1.3-1 indica la naturaleza crítica de estas etapas.

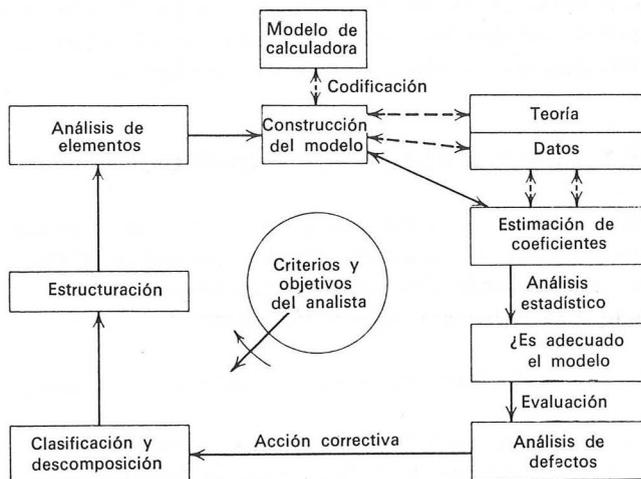


FIG. 1.3-1 Construcción del modelo

Los problemas reales están generalmente mal definidos y no se prestan bien a una especificación precisa. En algunos casos la solución del problema es obvia («máximos beneficios»), pero es en la forma de llegar a la solución donde se presentan las dificultades reales.

Una premisa fundamental que interviene en todo análisis de procesos es que el proceso global se puede descomponer en subsistemas diferentes (elementos) y que existen relaciones entre los subsistemas que, cuando se integran en un todo, pueden simular el proceso. Por ejemplo, se puede desarrollar un modelo de reactor considerando sucesivos subreactores perfectamente agitados, aunque de he-

cho tales unidades no existan en el reactor real. Veremos que en el desarrollo de un modelo los subsistemas hipotéticos pueden resultar igualmente útiles que los subsistemas reales.

La única razón para dividir el proceso en partes para el análisis se debe a que el proceso es tan complejo que no es posible conocerlo y describirlo con propiedad como un todo. Mediante una adecuada manipulación y ajuste de los subsistemas se intenta obtener una representación razonablemente correcta del proceso total basada en principios relativamente sencillos y bien conocidos para las partes. Aunque este tratamiento puede ser objetado desde un punto de vista filosófico, resulta válido para la simulación y predicción aunque algunas partes de la subestructura sean ficciones o estén incorrectamente descritas. Es natural que, puesto que la representación global del proceso real es una simplificación, sea de esperar una cierta diferencia entre la operación real y la prevista para el proceso, aunque, afortunadamente, esta diferencia se puede disminuir para los atributos importantes del proceso de forma que se mantenga la utilidad práctica del modelo. Aunque el criterio y la experiencia pueden compensar las simplificaciones a que se someten los modelos, el mejor método consiste en efectuar un tratamiento tan definitivo y objetivo como sea posible.

#### 1.4 MODELOS Y CONSTRUCCIÓN DEL MODELO

Los modelos se utilizan en todos los campos: biología, fisiología, ingeniería, química, bioquímica, física y economía. Puesto que seguramente es imposible incluir dentro de una sola definición las diferentes acepciones de la palabra «modelo», se presentan a continuación algunas de las más frecuentes:

1. Modelos físicos (modelos de barcos, plantas piloto y maquetas de edificios)
2. Modelos analógicos (eléctricos, electrónicos y mecánicos)
3. Teorías provisionales (modelo de la gota de líquido para la nucleación)
4. Gráficos y mapas
5. Enunciados matemáticos y modelos en forma de símbolos.

Para nuestro propósito resulta más conveniente la definición de un modelo sobre una base conceptual en vez de física. Aquí se considerará fundamentalmente el tipo de modelo correspondiente al número 5, y no los numerados de 1 a 4. Es decir, se estudiarán sobre todo las descripciones matemáticas planteadas para ayudar a analizar y comprender procesos físicos complejos.

Supongamos que el ingeniero desea construir un modelo matemático de un proceso real. ¿Cómo deberá de proceder en este caso? Se pueden preparar tres tipos de modelos y sus combinaciones:

*Modelos de fenómenos de transporte.* Utilización de principios físico-químicos (se tratan en el Capítulo 2).

*Modelos del balance de población.* Se utilizan balances de población (se consideran en el Capítulo 4).

*Modelos empíricos.* Utilización de datos empíricos ajustados (se estudian en el libro de Himmelblau).<sup>4</sup>

Ejemplos de tipos de modelos de fenómenos de transporte son las ecuaciones fenomenológicas de variación, es decir, las ecuaciones que describen la conservación de materia, cantidad de movimiento y energía. Las distribuciones de tiempo de residencia y otras distribuciones temporales constituyen ejemplos de modelos de balance de población. Finalmente, los polinomios utilizados para ajustar datos empíricos por el método de «mínimos cuadrados» son ejemplos típicos de modelos empíricos.

¿Cómo se puede evaluar el modelo? En primer lugar el ingeniero puede recoger datos y ver la forma en que dichos datos se ajustan a las predicciones del modelo. Se han desarrollado métodos estadísticos muy precisos para comprobar la exactitud del ajuste, que resultan muy satisfactorios cuando se trata de modelos sencillos. Si el ingeniero dispone de dos series de datos (una correspondiente al proceso real y la otra al modelo) para un modelo relativamente poco complicado, suele ser preciso introducir una cantidad considerable de subjetividad en el análisis a la hora de establecer la concordancia entre las dos series de datos. En cualquier caso, si la respuesta del modelo concuerda satisfactoriamente con los resultados experimentales, aumenta la confianza del ingeniero en la aptitud de las descripciones matemáticas. Si la concordancia es mala, tal vez convenga revisar el modelo o bien intentar otro método de ataque. Otros criterios a considerar, además de la fidelidad, para evaluar un modelo son: exactitud, reproductibilidad, coste, tiempo, complejidad, capacidad y posibilidad de aplicación.

Cuando el proceso que se ha de evaluar no se puede ensayar en una forma totalmente operacional (debido al coste, tiempo, riesgo, etc.), la base de evaluación debe desplazarse hacia ensayos de algunas aproximaciones del sistema, estudios en planta piloto, o bien los ensayos se pueden llevar a cabo modificando las condiciones de operación del proceso real. Tales simulaciones dan lugar a nuevos problemas.

<sup>4</sup> D. M. Himmelblau, *Process Analysis by Statistical Methods*, Wiley, Nueva York.

## 1.5 PRECAUCIONES QUE SE DEBEN TOMAR EN LA CONSTRUCCIÓN DE MODELOS Y EL ANÁLISIS DE PROCESOS

De acuerdo con lo que se ha dicho en la sección 1.3 puede parecer que todo lo que necesita el ingeniero para efectuar el análisis de procesos es seleccionar la complejidad necesaria de la descripción, expresar las ecuaciones para cada parte del equipo, y, posteriormente, resolver el sistema de ecuaciones que resultan, para distintas condiciones de operación, hasta que se alcanzan las condiciones óptimas. Por supuesto que, en la práctica, todo esto no es tan fácil como puede parecer a primera vista. Se requieren muchas horas de trabajo para realizar toda esta tarea y, a cada paso, el ingeniero ha de superar grandes obstáculos.

Es preciso reconocer que el análisis de procesos tiene algunas limitaciones importantes. La primera de ellas reside en la disponibilidad y exactitud de los datos; es decir, el éxito del análisis de procesos depende grandemente de la información básica disponible para el análisis. Los estudios que se pueden realizar con el sistema son solamente tan exactos como los datos físicos y químicos que se introducen en el modelo. En muchos casos el ingeniero se encuentra con una relativa insuficiencia de datos y, una vez que ha planteado el modelo, una de sus principales tareas consiste en evaluar los parámetros del modelo a base de datos experimentales. En diversos tipos de operaciones básicas casi todo el esfuerzo se dirige hacia una estimación más exacta de los parámetros de unos modelos cuyas formas están ya bien establecidas.

Uno de los campos de gran importancia para los ingenieros químicos es el de la cinética de procesos, y en él existe una gran incertidumbre sobre la «verdadera cinética» del proceso. Generalmente estos coeficientes cinéticos se obtienen operando en un reactor a pequeña escala, de forma que los efectos secundarios pueden ser muy importantes. La falta de información sobre estos efectos secundarios puede conducir a unos coeficientes inadecuados para el diseño del reactor comercial. Otro problema también frecuente consiste en que las impurezas presentes en la planta industrial no siempre se encuentran en el laboratorio, lo cual puede dar lugar a sorpresas en la eventual operación de la planta.

En algunos procesos de separación, tales como destilación, absorción y evaporación, la eficacia de los aparatos es muy incierta, y la mayor parte de los modelos macroscópicos que se han desarrollado y que se encuentran descritos en los manuales más frecuentes resultan de poca utilidad si no se dispone de una razonable estimación de la eficacia. Por ejemplo, al calcular el número de platos perforados que debe tener una torre de destilación, la exactitud de los métodos de cálculo del número de etapas teóricas de equilibrio es muy superior a la exactitud de los métodos disponibles para estimar la eficacia de una etapa real en comparación con la etapa teórica. La eficacia de los platos depende de propiedades del sistema tales como difusividades en las fases líquida y gaseosa,

densidades y viscosidades de ambas fases, velocidades de flujo de masa y relaciones de equilibrio. Esto no quiere decir que la eficacia dependa exclusivamente de estas variables ni que las mismas afecten siempre a la eficacia, puesto que las características reales de mezcla y transferencia de materia en la columna dependen de otras variables imposibles de medir sobre una base macroscópica.

Estas consideraciones dan una idea de las dificultades que se presentan en la aplicación real de los modelos matemáticos. Los modelos se aplican tanto al paso de escala desde los datos de laboratorio a planta piloto como en el análisis de una planta comercial. La exactitud con la que es preciso conocer los parámetros depende en cierto modo de su influencia sobre el proceso global. En una forma general se puede establecer que el conocimiento debe de ser tanto más exacto cuanto mayor sea su influencia.

La segunda limitación reside en los recursos disponibles para la manipulación de los planteamientos matemáticos que componen el modelo. En general, estos recursos son de origen matemático, que ya de por sí son limitados. Hay estructuras que son fáciles de definir y describir matemáticamente pero que no se pueden manipular con los conocimientos matemáticos actuales, debido a limitaciones teóricas o de las técnicas de cálculo. En estas condiciones, aunque el modelo esté bien definido y resulte adecuado para la situación real, no resultaría un método razonable para el desarrollo de predicciones.

Además de las dos limitaciones anteriormente descritas, si no resultan físicamente realizables los bloques de construcción para el modelo, cabe el peligro de que un concepto introducido simplemente como una técnica de análisis pueda

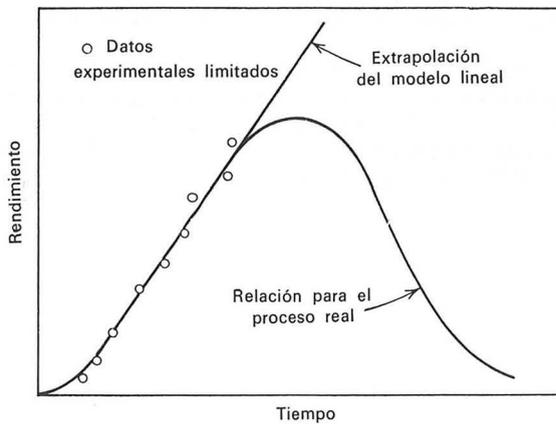


FIG. 1.5-1 Ilustración del peligro de extrapolación fuera del intervalo de las variables para el que ha sido diseñado el modelo; rendimiento de un reactor químico frente al tiempo

llegar a asimilarse con una realidad física no pretendida por el constructor del modelo y para la cual no existe evidencia. Se puede así adjudicar al modelo una validez general que en realidad no posee, lo cual constituye uno de los fallos de los modelos matemáticos. Modelos, originalmente sometidos a drásticas simplificaciones, se utilizan a veces como si su validez estuviese comprobada *a priori*, lo que evidentemente no ocurre. Este riesgo es evidente cuando una simplificación se transforma en una supersimplificación, aún cuando se suele prestar poca atención a esta posibilidad.

Otro peligro en la utilización de modelos consiste en suponer que representan al sistema real fuera del intervalo de las variables para el que el modelo ha sido originalmente propuesto. Dicha extrapolación puede constituir un aspecto valioso del modelo pero puede conducir también a errores. En la Figura 1.5-1 se presenta un caso exagerado de extrapolación, mediante un modelo lineal, en una región exterior a los datos experimentales, para una reacción química que alcanza un valor máximo. Estos peligros que acabamos de citar se pueden poner de manifiesto utilizando constantemente el sentido común en la interpretación de los resultados matemáticos.

#### REFERENCIAS SUPLEMENTARIAS

- Bertalanffy, L., y Rapoport, A., eds., *General Systems*, Vol. 1 (1956) y Vol. 2 (1957), Yearbooks of the Society of General Systems Research.
- Eckman, D. P., ed., *Systems: Research and Design*, Wiley, Nueva York, 1961.
- Ellis, D. O., y Ludwig, F. J., *Systems Philosophy*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, Nueva Jersey, 1962.
- Gosling, W., *The Design of Engineering Systems*, Wiley, Nueva York, 1962.
- Hall, A. D., *A Methodology for Systems Engineering*, D. Van Nostrand, Princeton, Nueva Jersey, 1962.
- Hughes Dynamics Corp., *Methodologies for System Design*, AD 434749, 24 de febrero de 1964. (Se puede obtener del Office of Tech. Services, Dpt. Commerce, Washington, C.C.)
- Mesarovic, M. D., *Views on General Systems Theory*, Wiley, Nueva York, 1964.
- Schaeffer, K. H., *The Logic of An approach to the Analysis of Complex Systems*, Stanford Research Institute Project No. IMU-3546, abril de 1962.

**Parte I**  
**Modelos**



# Modelos basados en los principios de los fenómenos de transporte

El intento de los hombres para encontrar una explicación unificada de los fenómenos naturales es, sin duda, muy antigua. Los jónicos trataron de explicar totalmente tales fenómenos en función de la modificación del comportamiento de una sustancia básica, tal como agua o aire. Consideremos lo que habitualmente denominamos propiedades de la materia, por ejemplo, los conceptos de calor específico, conductividad calorífica, viscosidad, coeficiente de difusión, resistencia, presión y temperatura. Una de las principales diferencias entre la actitud de un físico y un ingeniero frente a estas propiedades reside en la forma en la que tratan estos conceptos

Un físico no está satisfecho debido a que estos conceptos no son suficientemente elementales. Su actividad está dirigida hacia el intento de explicar estos conceptos por medio de un número reducido de otros conceptos más elementales tales como núcleos, átomos y electrones. Tampoco el ingeniero se encuentra satisfecho, pero por razones totalmente diferentes. Para la mayor parte de los problemas ingenieriles estos conceptos de propiedades son demasiado elementales. En vez de tratar de encontrar subelementos más pequeños, como le ocurre al físico, el ingeniero desearía integrarlos en conceptos más elaborados. Aunque estos conceptos pueden parecer sencillos, en la práctica no ocurrirá así puesto que el ingeniero los utilizará en una u otra forma según resulten más convenientes. El problema básico del ingeniero consistirá en considerar aspectos particulares que describan de una forma precisa y conveniente el comportamiento de los procesos macroscópicos.

TABLA 2.0-1 ESTRATO DETALLADO DE PRINCIPIOS FISCOQUÍMICOS

Estrato de descripción fisicoquímica	Utilización por los ingenieros	Designaciones temáticas	Parámetros típicos para análisis
Atómico y molecular	Formación fundamental	Trata entidades discretas; mecánica cuántica, mecánica estadística, teoría cinética	Funciones de distribución; integrales de colisión
Microscópico	Aplicable solamente a casos especiales	Fenómenos de transporte laminar, teorías estadísticas de la turbulencia	Coefficientes fenomenológicos; coeficientes de viscosidad, difusión, conducción calorífica; coeficiente de Soret
Gradiente múltiple	Aplicable solamente a casos especiales	Fenómenos de transporte laminar y turbulento; transporte en medios porosos	Coefficientes de transporte «efectivo»
Gradiente máximo	Utilizado para sistemas de flujo continuo; «flujo de pistón»	Fenómenos de transporte laminar y turbulento, diseño de reactores	Coefficientes de transporte de interfase, constantes cinéticas
Macroscópico	Utilización muy amplia	Ingeniería de procesos, operaciones básicas, termodinámica y cinética clásicas	Coefficientes de transporte de interfase; constantes cinéticas macroscópicas; factores de fricción

Esto no quiere decir que el ingeniero deba apartarse de las ciencias fundamentales, puesto que constituyen el fundamento de su trabajo, y, en muchos casos, deberá utilizar conocimientos directamente obtenidos por físicos y químicos. Por ejemplo, a temperaturas elevadas la capacidad calorífica de gases se puede predecir a partir de consideraciones de mecánica estadística, en circunstancias en las que sería más difícil obtener datos empíricos. Pero los ingenieros tratan más frecuentemente con conceptos y propiedades de tipo compuesto, así como también con variables, que son las variables de manipulación, aunque pueden no ser las variables verdaderas de un proceso. El ingeniero realiza el mismo tipo de análisis que el físico: toma un conjunto de datos, los analiza y elabora reglas, pero se mueve en una escala diferente dentro del mundo real.

El *objetivo* de este capítulo es presentar brevemente los modelos que se obtienen a partir de los principios fisicoquímicos (principios de los fenómenos de transporte). Corresponden a la primera categoría de modelos mencionados en el Capítulo 1, y constituyen el núcleo fundamental de los modelos utilizados por los ingenieros. Aquí se clasifican los modelos de acuerdo con la estructura de la Tabla 2.0-1, en la cual la primera columna muestra los distintos niveles de des-