

DESARROLLO DEL SIMULADOR DINÁMICO DE UN REACTOR BATCH CON FINES DIDÁCTICOS

BUILDING A DYNAMIC SIMULATOR OF A BATCH REACTOR FOR EDUCATIONAL PURPOSES

Mario Luis Chew Hernández

Tecnológico Nacional de México / TES de Coacalco, México
mario@tesco.edu.mx

Tagle Raúl Gómez Gómez

Tecnológico Nacional de México / TES de Coacalco, México
raul.iqu@tesco.edu.mx

Guadalupe Bosques Brugada

Tecnológico Nacional de México / TES de Coacalco, México
g.bosques.ige@tesco.edu.mx

Diana Elena Ruvalcaba Vargas

Tecnológico Nacional de México / TES de Coacalco, México
diana_ruvalcaba.iqu@tesco.edu.mx

Recepción: 31/octubre/2021

Aceptación: 20/diciembre/2021

Resumen

En este artículo se muestra el desarrollo del simulador dinámico de un reactor químico por lotes. Se describen las ecuaciones básicas del sistema a las que se llega mediante principios de conservación, los métodos numéricos empleados y la implementación del simulador como un macro que corre en Excel. El simulador está provisto de una interface de usuario amigable que incluye botones y cuadros de diálogo, documentos de ayuda y barras de avance de la simulación. Si bien ya existen simuladores comerciales con estos elementos, la idea es mostrar el desarrollo de un simulador usando un software libre y principios universalmente conocidos, a fin de que las instituciones de educación superior consideren la construcción de sus propios simuladores en oposición a comprar licencias.

Palabras Claves: Educación, ingeniería química, simulador de procesos.

Abstract

This article shows the development of the dynamic simulator of a batch chemical reactor. It describes the basic equations of the system, derived from basic

conservation principles, the numerical methods used and the implementation of the simulator as a macro that runs in Excel. The simulator has a user-friendly interface that includes buttons and dialog boxes, help documents, and simulation progress bars. While there are commercial simulators having these elements, this work aims to demonstrate the development of a commercial-looking simulator from universally known principles and widely available, free software, so that higher education institutions may consider building their own simulators instead of purchasing software licenses.

Keywords: *Chemical engineering, dynamic simulators, education.*

1. Introducción

La carrera de ingeniería química, impartida en el Tecnológico Nacional de México, incluye la materia “simulación” en sus últimos semestres [TECNM, 2020]. Una de las competencias de esta materia consiste en que el alumno se familiarice con el uso de simuladores comerciales, tanto dinámicos como estacionarios. Si bien algunas escuelas cuentan con recursos para comprar las licencias de simuladores comerciales, este no es el caso de las instituciones públicas, donde los recursos económicos son limitados. Ante la prohibición de usar software ilegal en actividades de enseñanza, se puede recurrir al software de licencia libre (free-ware) entre los que se hallan simuladores de procesos en estado estacionario confiables (por ejemplo, [COCOSIMULATION, 2020]), pero no simuladores dinámicos. Afortunadamente, la mayoría de las instituciones de educación superior cuentan con las capacidades humanas en programación básica para desarrollar simuladores. En este trabajo se muestra, a manera de ejemplo de lo anterior, el desarrollo del simulador de un reactor por lotes usando el lenguaje Visual Basic, que acompaña al Excel.

En relación con la revisión literaria, el uso de la simulación de procesos en estado transitorio para optimizar procesos químicos es bien conocida, con revisiones literarias presentadas en [Renotte, 2001] sobre la aplicación de redes neuronales en la simulación de procesos químicos y bioquímicos y en [Adams, 2019] sobre la modelación de sistemas energéticos. Ejemplos de aplicaciones específicas de la

simulación los constituyen [Bauer, 2004] que aplican simulación para optimizar el diseño de plantas respecto al objetivo ambiental y, más recientemente, [Huang, 2016] que incorpora la dinámica de la presión a la simulación de una planta ciclo combinado de gasificación, [Idzham, 2018] que simulan una planta de tratamiento de aguas residuales de la petroquímica, [Yu, 2018] quienes abordan un desalinizador basado en la energía del oleaje, [Meshalkin, 2019] que optimizan el proceso de secado de pellets de fosfato y [Silviana, 2020], quienes estudian la destilación de benceno-tolueno-xileno enfatizando el aprovechamiento de energía. Sobre el software empleado para ejecutar las simulaciones reportadas en la literatura, recientemente se ha incrementado el uso de ambientes de simulación (por ejemplo: ASPEN) y/o lenguajes de alto nivel con rutinas que facilitan el desarrollo de las simulaciones (por ejemplo, MATLAB), en oposición al uso de lenguajes de uso general (por ejemplo, C++ o Fortran). Por ejemplo [Khodadoost, 2011] estudiaron secuencias de torres de destilación aplicando Aspen Dynamics y Matlab Simulink, [Kuzmić, 2015] simularon un reactor de polimerización mediante ChemCAD y [Partono, 2018] estudiaron un reactor con recuperación de calor con Aspen HYSYS. Por su parte [Patan, 2018] emplearon Matlab y COSMOL Multiphysics para simular la catálisis heterogénea, [Wanotayaroj, 2020] aplicaron Aspen Dynamics al estudio del control de un sistema de combustión en ciclo, [Calise, 2020] modelaron un proceso de lodos activado usando INSEL (Integrated Simulation Environment Language) y [Li, 2021] utilizaron ASPEN y Matlab para evaluar su propuesta de control predictivo de plantas de absorción de CO₂. En lo relativo a usos didácticos de la simulación dinámica [Joao, 2017] muestran el uso de Aspen HYSIS para formar ingenieros en el uso de métodos estadístico para analizar sistemas de destilación y [Puskás, 2018] aplicaron el software Honeywell Unisim Design para desarrollar un simulador de una planta de alcohol isopropílico para el entrenamiento de operadores.

En lo relativo al desarrollo y programación de simuladores de procesos para fines didácticos, se encuentra [Riachi, 2014] que diseñaron un simulador en estado estable para uso didáctico de tipo freeware, al que terceros podría realizar adiciones en un esquema de wiki, llamado Lazarus y desarrollado en lenguaje UML, mientras

que [Lona, 2000] y [Cartaxo, 2014] diseñan un software con objetivos educativos para analizar el comportamiento dinámico de redes de intercambiadores. Finalmente, [Lee, 2017] usan un simulador en línea para entrenar operadores para el manejo de la sobre presión en sistemas de gas natural, [Granjo, 2020] presentan la evaluación de la plataforma LABVIRTUAL que contiene materiales educativos de ingeniería química, incluyendo simuladores y [Molina, 2021] desarrollan un simulador dinámico en base a Matlab, con interfaz amigable, para reactores químicos. De la revisión anterior se observa que en los reportes previos sobre el desarrollo de simuladores dinámicos para uso didáctico se usan lenguajes cuyo uso requiere comprar una licencia (por ejemplo, Matlab), lo que reduce su utilidad para instituciones educativas limitadas económicamente. En contraste con dichos reportes, en este trabajo se desarrolla un simulador usando Macros de Excel, los que son ampliamente accesible de forma gratuita.

2. Métodos

Para el desarrollo del simulador presentado en este trabajo, se aplicaron los siguientes métodos:

- Aplicación de los principios de conservación de la materia y la energía para desarrollar las ecuaciones que rigen la dinámica del proceso.
- Método de Euler implícito para integrar sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias y método de Newton-Raphson para resolver sistemas de ecuaciones algebraicas no-lineales.
- Escritura del pseudo-algoritmo del problema y codificación en lenguaje de programación Visual-Basic.
- Diseño de la interface para interactuar con el simulador, usando las herramientas de desarrollador proporcionadas por Microsoft Excel.

3. Resultados

Descripción del proceso

El reactor simulado se basa en el caso abordado en [Jana, 2011], el cual cuenta con una chaqueta de calentamiento con vapor a la temperatura T_S y un serpentín de

enfriamiento, figura 1. En el reactor ocurren las reacciones consecutivas $A \rightarrow B \rightarrow C$. La reacción $A \rightarrow B$ tiene cinética de segundo orden, mientras que la reacción $B \rightarrow C$ es de primer orden, siendo el componente B el producto deseado.

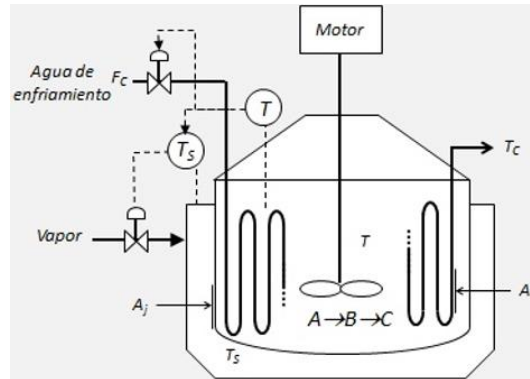


Figura 1 Reactor Batch.

Las suposiciones usadas para desarrollar el modelo son

- El reactor está aislado térmicamente y perfectamente mezclado
- Temperatura del agua en el serpentín se describe por valor promedio T_c .
- El vapor condensado se descarga a su temperatura de condensación
- El volumen de reacción (V) y la capacidad calorífica (C_p) son constantes.
- El coeficiente de transferencia de calor de la chaqueta de calentamiento U_j es constante y el correspondiente del serpentín de enfriamiento U_j^* depende del flujo de agua de enfriamiento F_c según la ecuación 1.

$$\frac{1}{U_c} = \frac{1}{4550F_c^{0.8}} + \frac{1}{10.8} \quad (1)$$

Un balance de especies químicas y de energía permite llegar a las ecuaciones diferenciales 2 a 4, que describen el comportamiento dinámico del modelo.

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A^2 \quad (2)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = k_1 C_A^2 - k_2 C_B \quad (3)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{(-\Delta H_1)}{\rho C_p} k_1 C_A^2 + \frac{(-\Delta H_2)}{\rho C_p} k_2 C_B + \frac{U_j A_j}{\rho C_p V} (T_s - T) - \frac{U_c A_c}{\rho C_p V} (T - T_c) \quad (4)$$

Donde C_A y C_B son las concentraciones de las especies A y B, $(-\Delta H_1)$ y $(-\Delta H_2)$ las entalpías de las reacciones $A \rightarrow B$ y $B \rightarrow C$, ρ y C_p son la densidad y capacidad calorífica del líquido, U_j y U_c son los coeficientes globales de transferencia de calor de la chaqueta de calentamiento y el serpentín, los cuales tienen un área de transferencia respectivamente de A_j y A_c . La relación entre las constantes de reacción k_1 y k_2 y la temperatura T está dada por las ecuaciones 5 y 6.

$$k_1 = \alpha_{10} \exp\left(\frac{-E_1}{RT}\right) \quad (5)$$

$$k_2 = \alpha_{20} \exp\left(\frac{-E_2}{RT}\right) \quad (6)$$

Siendo E_1 y E_2 son las energías de activación de las reacciones y α_{10} y α_{20} sus correspondientes factores de frecuencia.

Si el reactor opera en ciclo cerrado, se manipula el flujo de agua al serpentín (F_c) y la temperatura del vapor en la chaqueta de calentamiento (T_s) para controlar la temperatura del reactor (T).

Para lograr un rendimiento máximo de B, el set-point (T_d) de la temperatura del reactor se ajusta dinámicamente siguiendo una trayectoria dependiente del tiempo (t) descrita por la ecuación 7.

$$T_d(t) = 54 + 71 \times \exp(-2.5 \times 10^{-3} t) \quad (7)$$

Como hay dos variables manipuladas, T_s y F_c , y una sola variable controlada T , el controlador calcula, mediante una lógica de control Proporcional-Integral, el valor de un parámetro u con el que se determina el valor de las variables manipuladas entre sus valores máximos y mínimos según las ecuaciones 8 y 9.

$$TS = (TS, \max - TS, \min)u + TS, \min \quad (8)$$

$$UC = (UC, \min - UC, \max)u + UC, \max \quad (9)$$

Se usa el método de Euler implícito para integrar el conjunto de ecuaciones diferenciales y se implementa el método de Newton-Raphson para resolver el conjunto de ecuaciones no lineales que debe ser resuelto en cada paso del método de Euler implícito.

Descripción del simulador

Los cálculos requeridos para correr las simulaciones fueron implementados como programas de Visual Basic, usando la funcionalidad de Macro en Microsoft Excel: En la pantalla de inicio la ruta de menús desplegables “Vista”→ “Macros”→ “Ver macros” → “Modificar” (Figura 2), da acceso a la interface de programación en Visual Basic, figura 3. Aquí se programan sub-rutinas para integrar ecuaciones diferenciales y resolver sistemas de ecuaciones no-lineales, así como de otras herramientas básicas, como multiplicación e inversión de matrices y resolución de sistemas de ecuaciones lineales.

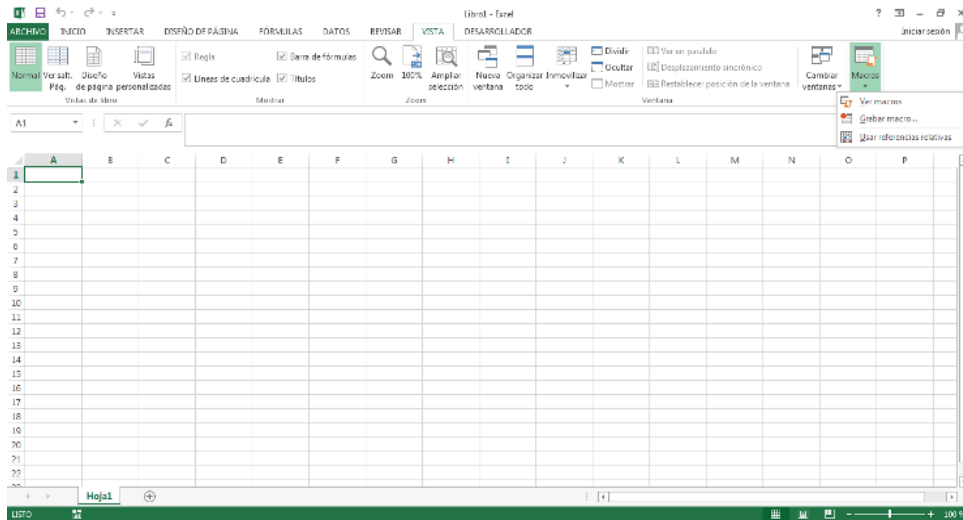


Figura 2 Apertura de la interfase de programación de Visual Basic.

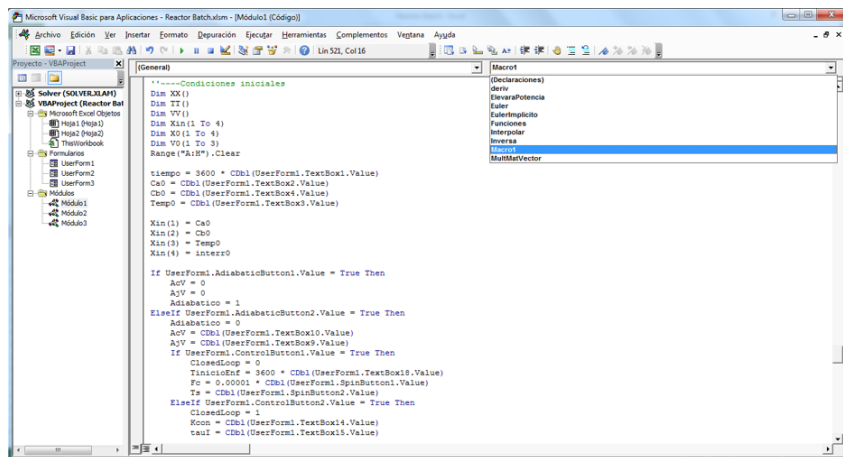


Figura 3 Interfase de programación de Visual Basic.

La creación de la interface amigable para el usuario se lleva a cabo con las herramientas mostradas en el menú desplegable “Desarrollador”, figura 2.

El simulador se le entrega al usuario como un archivo de Excel, cuya apertura produce la figura 4. Al hacer click en el botón “Reactor batch” se muestra la interface de usuario, figura 5.

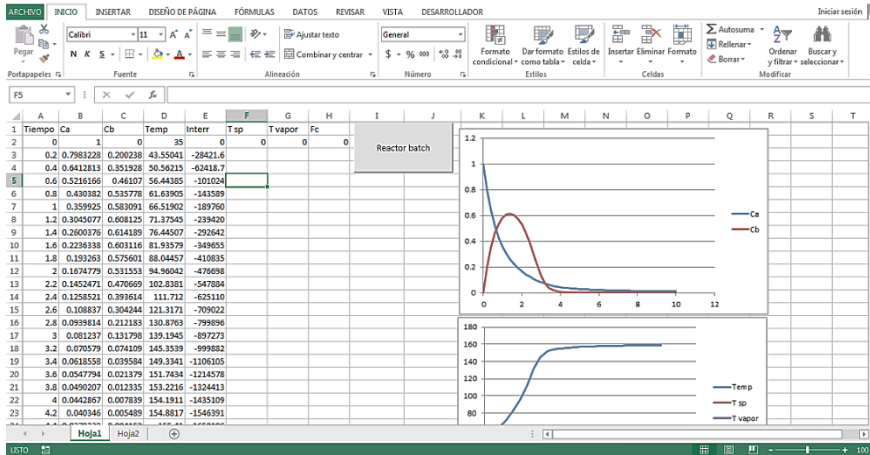


Figura 4 Imagen al abrir el archivo de Excel.

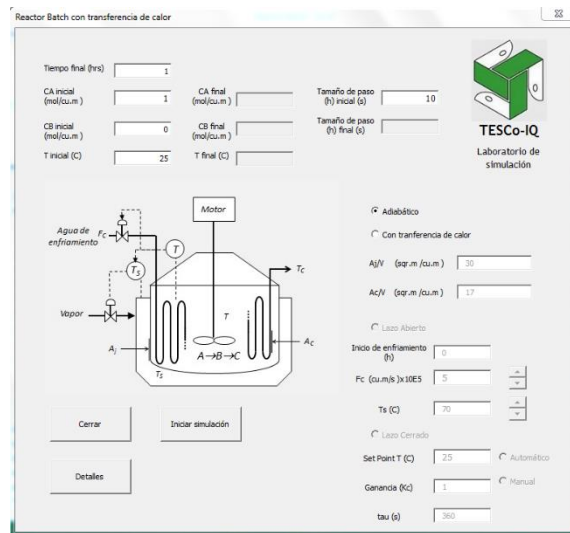
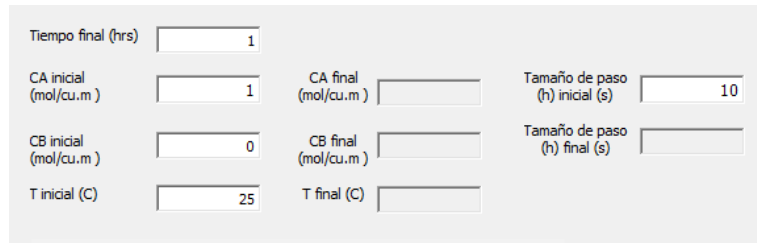


Figura 5 Interfase del usuario.

En la parte superior de la interface mostrada en la figura 6, se especifica el horizonte de simulación y las condiciones iniciales: concentraciones de A y B y la temperatura. Los valores finales de estas variables aparecerán en los cuadros de diálogo “CA

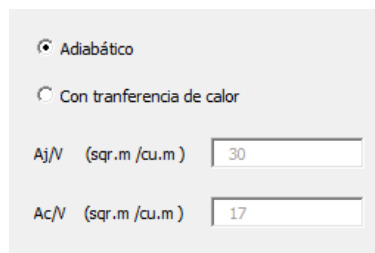
final”, “CB final” y “T final”. El usuario propone un tamaño de paso para el método de integración (en el ejemplo se especifica 10 segundos). Sin embargo, en caso de que el simulador no encuentre convergencia del método de integración para este tamaño de paso, el simulador lo reduce hasta hallar convergencia. El tamaño de paso usado por el sistema se mostrará en la casilla “Tamaño de paso (h) final (s)”.



The image shows a form for setting initial conditions. It includes input fields for: 'Tiempo final (hrs)' with value 1; 'CA inicial (mol/cu.m)' with value 1; 'CA final (mol/cu.m)' which is empty; 'Tamaño de paso (h) inicial (s)' with value 10; 'CB inicial (mol/cu.m)' with value 0; 'CB final (mol/cu.m)' which is empty; 'Tamaño de paso (h) final (s)' which is empty; 'T inicial (C)' with value 25; and 'T final (C)' which is empty.

Figura 6 Condiciones iniciales del sistema.

Del lado derecho de la interface mostrada en figura 7 se especifican detalles del sistema de calentamiento/enfriamiento. Si se selecciona “Adiabático” el simulador actúa sin transferencia de calor, si se selecciona “Con transferencia de calor”, se activan los cuadros de diálogo donde se debe especificar el área de transferencia de calor por unidad de volumen para el serpentín de enfriamiento y la chaqueta de vapor.



The image shows a form for specifying heat exchange equipment. It has two radio button options: 'Adiabático' (selected) and 'Con transferencia de calor'. Below these are two input fields: 'Aj/V (sqr.m /cu.m)' with value 30 and 'Ac/V (sqr.m /cu.m)' with value 17.

Figura 7 Especificación del equipo de intercambio de calor.

Cuando la opción “Con intercambio de Calor” está activa, se activan campos donde el usuario especifica el manejo del flujo de agua de enfriamiento y la temperatura del vapor. Si la opción “Lazo Abierto” esta seleccionada, el usuario debe especificar ambas variables mismas que se mantienen constantes en toda la simulación. Se puede especificar, además, el momento en que el enfriamiento comienza, si este no

ocurriera desde el inicio de la corrida, ver figura 8. Si se especifica “Lazo Cerrado” el usuario debe especificar el valor deseado “Set point” de la temperatura. Al seleccionar “Automático”, el set point de la temperatura sigue la trayectoria óptima, utilizando la ecuación 7. Si se selecciona “Manual”, el usuario especifica el valor deseado de la temperatura. Se debe, además, especificar la ganancia proporcional (K_c) y el tiempo integral (τ) del controlador de temperatura.

Figura 8 Especificación del controlador de temperatura.

Terminando con la descripción de la interface mostrada en la figura 5, el botón “Cerrar” la cierra, “Iniciar Simulación” comienza a integrar las ecuaciones diferenciales y “Detalles” despliega las pantallas mostradas en las figuras 9 y 10 con información sobre el sistema en tres pestañas.

Figura 9 Pestaña de ayuda “Termodinámica y cinética”.

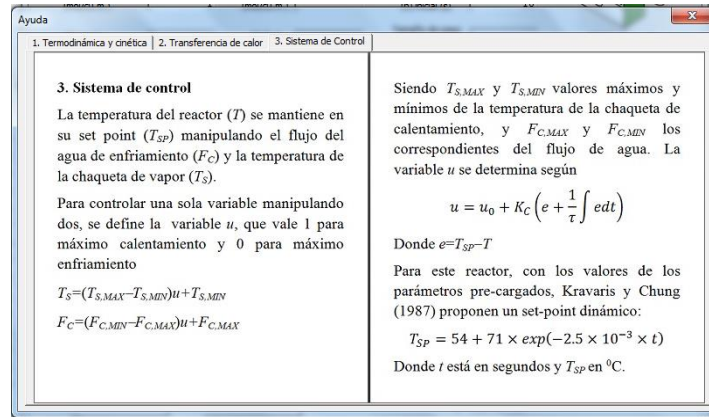


Figura 10 Pestaña de ayuda “Sistemas de control”.

Dando click al botón “Iniciar Simulación” la interface se oculta y aparece una barra de avance, mostrando el progreso de la simulación, ver figura 11. Las columnas A-F de la hoja de Excel se borran, pues aquí se colocarán los nuevos resultados.

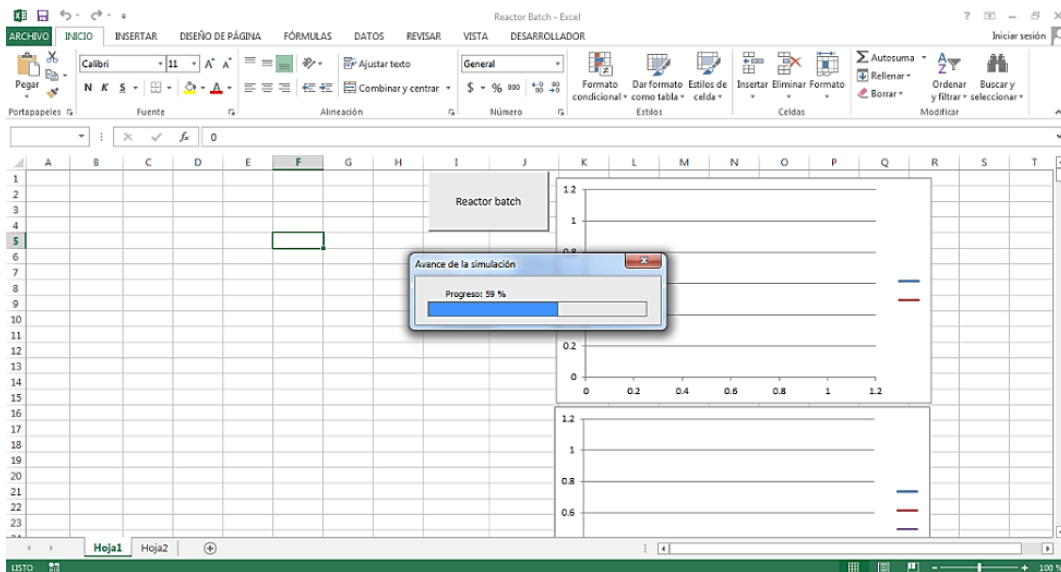


Figura 11 Indicador de avance de simulación.

Al final de la simulación, la interface de simulación re-aparece y un cuadro de diálogo pregunta si se quiere graficar el resultado de la simulación, figura 12. Si se contesta “Si”, los resultados se colocan en la hoja de cálculo, y las gráficas se actualizan, ver figura 13. Si se responde “No” el cuadro de diálogo desaparece, y el usuario puede ver las concentraciones y temperaturas al final de la simulación.

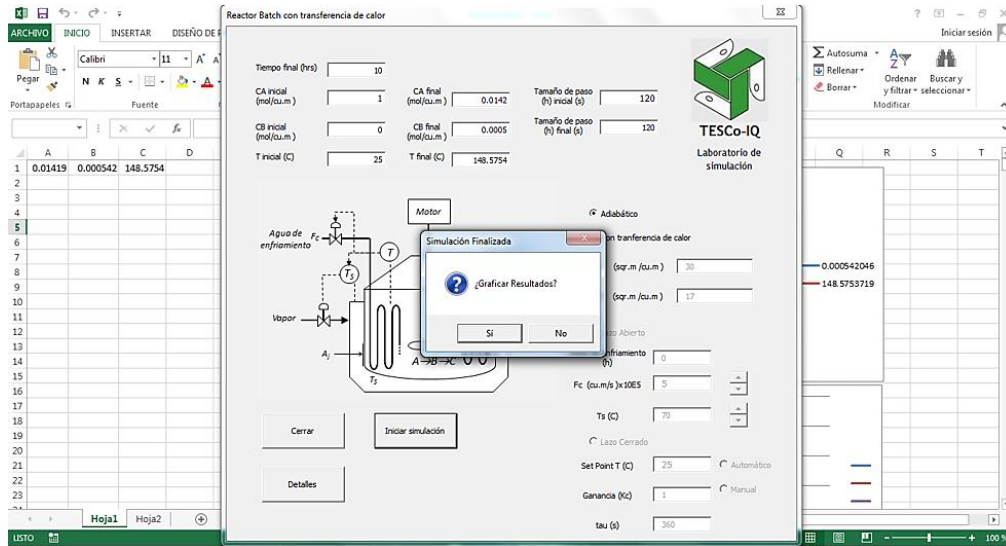


Figura 12 Cuadro de diálogo de simulación terminada.

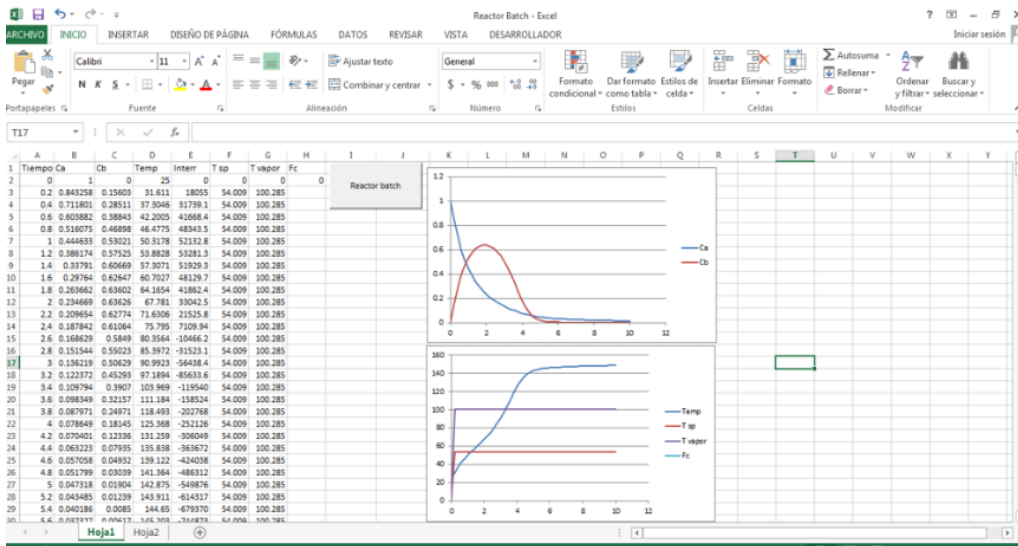


Figura 13 Gráficas actualizadas al final de la simulación.

4. Discusión

El objetivo de la interface de simulación desarrollada en este trabajo es permitir que un interesado, con formación en procesos químicos, pueda estudiar el comportamiento de un reactor por lotes bajo distintas condiciones sin requerir de habilidades computacionales o numéricas por encima de su perfil profesional. En la sección anterior se muestra qué para este simulador, una vez abierto el archivo de Excel y arrancado el macro que viene en el programa, el usuario utiliza la

herramienta mediante cuadros de diálogo, ventanas, botones y otros medios que favorecen una interacción amigable. Se incluyen, además, interfaces de ayuda accesibles igualmente por botones.

5. Conclusiones

Dado que las Instituciones de Educación Públicas reciben recursos estatales, estas tienen la obligación de aplicar sus recursos de forma eficiente, minimizando gastos que sean percibidos como innecesarios o superfluos. Ante esto, algunas instituciones han optado por evitar la compra de licencias de simuladores de procesos, lo que impide que sus estudiantes adquieran las competencias relacionadas con la interacción con este tipo de software.

En lo que toca a la simulación de procesos químicos en estado estacionario, esto ha podido ser solventado mediante al uso de simuladores descargables legalmente de forma gratuita, algunos de los cuales ya han sido validados extensamente. No es el caso, sin embargo, de la simulación de procesos en estado dinámico o transitorio, donde no se cuentan con simuladores gratuitos que hayan sido suficientemente probados.

Sin embargo, las instituciones de educación superior en nuestro país tienen la capacidad humana necesaria para producir sus propios simuladores de proceso. En este trabajo se presenta el desarrollo del simulador de un reactor químico por lotes, con interface amigable y con los elementos típicos de un simulador comercial, desarrollado enteramente usando macros de Visual Basic accesibles desde Microsoft Excel. Se espera que esto sirva para animar a más instituciones a desarrollar este tipo de software.

6. Bibliografía y Referencias

- [1] Adams T. A., Special Issue: Modeling and Simulation of Energy Systems, Processes, 7(8), 523, 2019.
- [2] Bauer P. E. y Filho R., Incorporation of environmental impact criteria in the design and operation of chemical processes, Brazilian Journal of Chemical Engineering, 21(3), 405-414, 2004.

- [3] Calise F., Eicker U., Schumacher J. y Vicidomini M., Wastewater Treatment Plant: Modelling and Validation of an Activated Sludge Process, *Energies*, 13(3925), 2020.
- [4] Cartaxo S. J. M, Silvino P. F. G. y Fernandes F. A. N., Transient analysis of shell-and-tube heat exchangers using an educational software, *Education for Chemical Engineers*, 9(3), e77-e84, 2014.
- [5] COCOSIMULATION, (2020). COCO: The Cape-Open to Cape Open Simulator, disponible en www.cocosimulator.org.
- [6] Granjo J. F. O y Rasteiro M. G., Enhancing the autonomy of students in chemical engineering education with LABVIRTUAL platform, *Education for Chemical Engineers*, 31, 21-28, 2020.
- [7] Huang D., Zhang H., Weng S. y Su M., Modeling and Simulation of IGCC Considering Pressure and Flow Distribution of Gasifier, *Applied Sciences*, 6(10), 292, 2016.
- [8] Idzham A., Mohd F. y Mardhiyah B., Dynamic Simulation of Petrochemical Wastewater Treatment Using Wastewater Plant Simulation Software, *Matec Web of Conferences*, 203, 03005, 2018.
- [9] Joao I. M. y Silva J. M., Designing Solutions by a Student Centred Approach: Integration of Chemical Process Simulation with Statistical Tools to Improve Distillation Systems, *International Journal of Engineering Pedagogy*, 7(3), 4-18, 2017.
- [10] Khodadoost M. y Sadeghi J., Dynamic Simulation of Distillation Sequences in Dew Pointing Unit of South Pars Gas Refinery, *Journal of Chemical and Petroleum Engineering*, 45(2), 109-116, 2011.
- [11] Kuzmić S. y Jukić A., Dynamic Simulation of Batch Polymerization Reactor and Sensitivity Analysis of Styrene Homopolymerization, *Kemija u industriji*, 64(3-4), 151-167, 2015.
- [12] Patan A. K, Mekala M. y Thamida S. K., Dynamic Simulation of Heterogeneous Catalysis at Particle Scale to Estimate the Kinetic Parameters for the Pore Diffusion Model, *Bulletin of chemical reaction engineering and catalysis*, 13(3), 420-428, 2018.

- [13] Jana A. K., *Chemical Process Modelling and Computer Simulation*, Segunda Edición, Phi Learning, 2011.
- [14] Lee Y., Ko C., Lee H., Jeon K., Shin S., y Han C., (2017). Interactive plant simulation modeling for developing an operator training system in a natural gas pressure-regulating station, *Petroleum Science*, 14(3), 529-538, 2017.
- [15] Li Q., Zhang W., Qin Y. y An A., Model Predictive Control for the Process of MEA Absorption of CO₂ Based on the Data Identification Model, *Processes*, 9(183), 2021.
- [16] Lona M. F., Fernandes F. A. N., Roque M. C. y Rodrigues S., Developing an educational software for heat exchangers and heat exchanger networks projects, *Computers & Chemical Engineering*, 24(2-7), 1247-1251, 2000.
- [17] Meshalkin V., Bobkov V., Dli M. y Dovì V., Optimization of Energy and Resource Efficiency in a Multistage Drying Process of Phosphate Pellets, *Energies*, 12(17), 3376, 2019.
- [18] Molina R., Orcajo G., Segura Y., Moreno J. y Martínez F., KMS platform: A complete tool for modeling chemical and biochemical reactors, *Education for Chemical Engineers*, 34, 127-137, 2021.
- [19] Partono A. T. y Iqbal P. M., (2018). Process Stability Identification Through Dynamic Study of Single-bed Ammonia Reactor with Feed-Effluent Heat Exchanger (FEHE), *Matec web of conferences*, 156, 03003, 2018.
- [20] Puskás J., Egedy A. y Németh S., Development of operator training simulator for isopropyl alcohol producing plant, *Education for Chemical Engineers*, 22, pp. 35-43, 2018.
- [21] Renotte C., Vande Wouwer A., Bogaerts Ph. y Remy M., Neural Network Applications in Non-Linear Modelling of (Bio)Chemical Processes, *Measurement+Control*, 34, 10-15, 2001.
- [22] Riachi M. S., Duarte M. y Scortechini J. A., Diseño de un simulador de procesos químicos para uso colaborativo y didáctico, *Revista Electrónica formación y calidad educativa*, 2(1), pp. 71-82, 2014.
- [23] TECNM, (2020). Tecnológico Nacional de México, temarios de licenciatura, disponible en <https://www.tecnm.mx/?vista=Licenciaturas>.

- [24] Silviana S., Dalanta F., Qurrota A. D., Khoiriyah L., Rousan N. P. y Fahrizal A.M., Design simulation and economic optimization of a benzene-toluene-xylene system distillation process upon the energy cost, E3s web of conferences, 202, 10003, 2020.
- [25] Wanotayaroj T., Chalermssinsuwan B. y Piumsomboon P., Dynamic simulation and control system for chemical looping combustion, Energy Reports, 6, 32-39, 2020.
- [26] Yu Y.-H. y Jenne D., Numerical Modeling and Dynamic Analysis of a Wave-Powered Reverse-Osmosis System, Journal of marine science and engineering, 6(4), 132, 2018.