

El simulador "Flowtran" de procesos químicos

Jaime Aguirre Cardona*

* Profesor Titular - Departamento de Procesos Químicos
Universidad Nacional de Colombia - Sede Medellín
E-mail: jaguirre@perseus.unalmed.edu.co

ABSTRACT

This paper presents a general introduction to the simulation of chemical engineering processes and an application with the FLOWTRAN simulator developed by Monsanto Company. The reader will can appreciate how works this package and the interest in using it in undergraduate courses.

RESUMEN

Este artículo presenta una introducción general a la simulación de procesos en ingeniería química y una aplicación con el simulador FLOWTRAN desarrollado por la compañía Monsanto. El lector podrá apreciar como trabaja este programa y el interés de usarlo en los cursos de pregrado.

KEY WORDS: Simulation, Chemical processes, Flowtran.

PALABRAS CLAVE: Simulación, Procesos químicos, Flowtran.

1. INTRODUCCIÓN: La simulación en Ingeniería Química.

La tecnología de los computadores ha tenido cambios impresionantes en los últimos años y ha conllevado a que la informática se introduzca con fuerza en las diferentes etapas del desarrollo y funcionamiento de la industria química. La posibilidad de obtener "hardware" y "software" modulares convierten un simple computador personal en un sistema de amplia capacidad gráfica y capaz de realizar simulaciones que implican la solución de miles - e incluso cientos de miles - de ecuaciones lineales y no lineales provenientes de los balances de materia y energía del sistema. Esto va teniendo una profunda influencia sobre la forma como el ingeniero químico de hoy debe realizar

su trabajo y como las universidades deben enfocar sus esfuerzos para actualizar sus programas de enseñanza.

La experiencia ha demostrado que la computación ofrece la posibilidad de cubrir mas material de estudio que los medios tradicionales, y de analizar problemas mucho mas complicados: el dibujo de equipos y de disposición en planta de estos, por ejemplo, es algo largo y tedioso de hacer, pero si se realiza en computador con ayuda del "software" apropiado, esta tarea se vuelve agradable y eficiente. Si se requiere, además, realizar cálculos largos y repetitivos, y graficar resultados, el estudiante, después de haber entendido el principio y la mecánica de cálculo, puede dejar que el computador trabaje solo y dedicarse a la búsqueda de una solución mejor basado en los datos que este vaya aportando.

En este sentido la enseñanza de la ingeniería química debería ser implementada de manera que los egresados tengan mas aceptación en el mercado laboral y mas éxito en sus iniciativas personales de promover empresas. Se listan a continuación algunas recomendaciones para el ingeniero en formación respecto al uso de la tecnología de la computación:

- Familiarizarse con un sistema operacional dado, tanto para computadores personales como de mayor tamaño (D.O.S., V.M.S.,...).
- Ser competente en el uso de al menos un lenguaje de programación científico (Fortran, Pascal,...).
- Tener experiencia en la adquisición y procesamiento de información por medio del computador, como también en el manejo de un procesador de palabras, y de programas para la generación de gráficos y la presentación de informes.

- Aprender a evaluar y verificar programas realizados por otro, puesto que la selección de "software" es una responsabilidad de gran importancia para el Ingeniero Químico de hoy.
- Obtener experiencia en correo electrónico y bases de datos externas dada la facilidad de acceso a redes como Internet, Bitnet,...
- Fundamentar los principios y conceptos de análisis numérico - incluyendo convergencia y estabilidad - y de programación no numérica
- Ser hábil en el manejo de software matemático para solucionar problemas complejos generalmente de tipo iterativo (Mathcad, Derive, Matlab,...).
- Usar correctamente un simulador de procesos químicos, comercial o educativo, ya que además de proporcionar una visión sistémica de las plantas industriales, permitirá ambientarse fácil y rápidamente a una amplia diversidad de entornos reales de producción.

En relación con la última recomendación, son muchos los autores, entre ellos Naylor y colaboradores, que coinciden en que la importancia de la simulación de procesos químicos se debe a que:

- Puede ser usada como recurso pedagógico tanto en la enseñanza de conocimientos básicos como en el análisis teórico de sistemas bajo situaciones diversas plausibles de ocurrir en el mundo real.
- Hace posible estudiar y "experimentar" las complejas interacciones que ocurren al interior de un sistema frente a diferentes patrones de comportamiento.
- Permite conocer la importancia relativa de cada una de las variables independientes de proceso

- Conduce a través de la observación detallada del sistema a una mejor comprensión del mismo.
- Contribuye a disminuir el tiempo y los costos en el estudio de "procesos experimentales" y además posibilita estudiar muchas mas variables que lo que permitiría el objeto real.
- Obliga a entender todos los aspectos a que hace relación el proceso, llevándolo a conclusiones menos susceptibles de parcialidad y mas posibles de ser practicables dentro de una configuración real.
- Facilita al ingeniero de diseño prever el comportamiento de una planta química y le ayuda a solucionar problemas relacionados con: La puesta en marcha y/o parada de un proceso, la influencia de perturbaciones y/o fluctuaciones y la falla de uno o varios equipos.

En la fase de concepción de una industria química pueden diferenciarse cuatro etapas principales: síntesis del proceso (elección e interconexión de equipos), análisis del sistema (modelización, particionado, rasgado y ordenamiento), evaluación de diversas configuraciones de planta (costos, consumos, materiales y energéticos, aspectos ambientales,...) y optimización de la alternativa seleccionada (criterios económicos, ecológicos, políticos, sociales, entrópicos, ...). A excepción de la primera etapa mencionada, en todas las restantes la informática ha facilitado enormemente la realización del trabajo de cálculo, no solo en la fase de concepción del proceso, sino también, y de una manera importante, en la instalación, puesta en marcha, operación y apagado del mismo. Dejando tiempo para el ingeniero para que pueda dedicarse a tareas mas reflexivas.

- En cuanto a generación automática de secuencias de separaciones de mezclas, redes de intercambio calórico, trayectorias de

- reacciones químicas, y sistemas de control no se han hecho avances definitivos pero si una abundante investigación que ha permitido aplicaciones en numerables casos de diseño de plantas químicas.

Esfuerzos por disponer de paquetes de simulación de uso industrial vienen realizándose desde hace mas de 40 años:

- En los años 60 los paquetes de simulación se caracterizaban por realizar únicamente balances de materia y de energía de procesos en estado estable. Parte de la buena acogida que estos paquetes tuvieron - como el PACER y el CHESS - Ver tabla N°1 - se debió a que al mismo tiempo aparecieron métodos generales y de fácil programación para obtener propiedades físicas - entre ellas las correlaciones de Chao-Seader y Grayson-Streed.
- En la década del 70 hubo mejoras metodológicas, lo que influyó notoriamente en la calidad de la simulación que ha llegado a ser hoy en día muy estable, sofisticada, versátil, e incluso dirigida a usuarios no calificados. Aparecieron algoritmos que mejoraban la convergencia en el cálculo de equipos de procesos y en redes de recirculación, a la vez que se incorporaron tipos mas variados de procesos. Se añadieron facilidades para el manejo de esquemas y de materiales comunes en la industria química y comenzaron a utilizarse métodos y criterios de optimización.
- En la actualidad existe una gran variedad de paquetes de simulación de características en general poco diferentes -ver tabla N° 2- ya que casi todos se ajustan a una estructura de árbol, de tipo abierto, conteniendo procesadores, programas ejecutivos y módulos de impresión; dentro de las librerías existen los bancos de datos para cientos de compuestos orgánicos e

inorgánicos, bloques de diseño y costeo de equipos (Separadores "flash", absorbedores, torres de destilación, intercambiadores de calor, evaporadores, reactores,...), métodos de predicción de propiedades (termodinámicas, de transporte,...), etc. Las diferencias en los simuladores actuales residen propiamente en su capacidad de almacenamiento y manejo de información, los esfuerzos se centran, por lo tanto en desarrollar algoritmos de análisis de sistemas más potentes y a generalizar los programas de diseño y de desempeño, de manera que involucren operaciones con sólidos (cristalizadores, lechos fluidizados, secadores,...), reactores (catalíticos, tubulares homogéneos,...) y mejores métodos de estimación de propiedades (fases sólidas, componentes polares, polímeros,...).

También se han incluido métodos que permiten buscar los valores óptimos de parámetros y variables de procesos en estado estacionario mientras se busca simultáneamente la solución del conjunto de ecuaciones. Es el caso de PROCESS y ASPENPLUS, quienes anunciaron hace poco la implementación de métodos de optimización para sus programas de simulación basados en la técnica "Successive Quadratic Programming" (SQP), la cual permite optimizar funciones no-lineales y desigualdades para mas de 100 variables. Igualmente, y también usando SQP, el profesor L.T. Biegler desarrolló un programa de optimización para el FLOWTRAN.

Tabla Nº 1.

SIMULADORES DE PROCESOS QUÍMICOS (Años 50 y 60)

- | | |
|-------------------------------|----------------------------|
| - Material Balancing Program. | - Chiyoda's Capes Program. |
| - Kellog Flexible Flowsheet. | - Concept |
| - Pacer. | - Prospro |
| - Flowtran (Monsanto). | - Chess |
| - Exxon's Code. | - Chevron Heat |
| - Union Carbide's Ipes. | - Flowpack |
| - Du Pont's Cpes. | |

Tabla Nº 2.

SIMULADORES DE PROCESOS QUÍMICOS (Años 70 en adelante)

- | | |
|---------------|---------------------|
| - Ucan II. | - Pro/II. |
| - Prosim. | - Hysys. |
| - Lsp II. | - Design II. |
| - Ascend II. | - Aspen. |
| - Aspen plus. | - Chemcad III. |
| - Dyna plus. | - Speed-up. |
| - Hextran. | - ChemEng Software. |

2. EL SIMULADOR "FLOWTRAN"

2.1 HISTORIA Y ESTRUCTURA.

La palabra "Flowtran" viene del inglés "Flowsheet Translator". Este software fue concebido en 1961 por el Departamento de Matemáticas Aplicadas de la compañía Monsanto; en 1964 se conformó en grupos de seis personas, que luego se incrementó notablemente, para trabajar en la estructuración del simulador. Su desarrollo terminó en abril de 1966, requirió más de 60 hombres-año de trabajo y cerca, en ese entonces, de 2 millones de dólares.

A inicios de 1969 el "Flowtran" fue comercializado y 3 años después ya contaba con unos 70 usuarios industriales.

En 1972 *CACHE* (Computer Aids for Chemical Engineering - USA) realizó un estudio de aquellos simuladores de procesos químicos, potencialmente utilizables para uso académico, y encontró que el "Flowtran" se adecuaba especialmente bien como herramienta educativa en las carreras de ingeniería química dada la posibilidad de ser usado en cursos de balances de materia y energía, termodinámica, diseño de reactores, operaciones unitarias y diseño de procesos. En diciembre de 1973 la Compañía Monsanto anunció su intención de permitir a las universidades obtener la licencia de uso docente del "Flowtran" la cual fue oficializada a principios de 1974. Numerosas universidades de Estados Unidos, el Canadá y otras partes del mundo, utilizan este simulador hoy en día de manera corriente.

El conjunto de programas del simulador está escrito en Fortran lo cual facilita al usuario la introducción de bloques nuevos. Consta de cuatro pre-procesadores a saber:

INF: Almacena y/o recupera información sobre propiedades de 180 compuestos, de los archivos público y privado (pesos moleculares, propiedades críticas, capacidades caloríficas, parámetros de solubilidad, factor acéntrico,...).

PROPTY: Calcula propiedades no existentes en los archivos a través de correlaciones particulares (presiones de vapor con las ecuaciones de Antoine o Cavett, fugacidades de líquidos con Chao-Seader, Grayson-Streed o Praunitz-Shair entre otros, entalpías de vapor,...).

VLE: Correlaciona datos empíricos a través de modelos para equilibrios líquido-vapor y líquido-líquido, para obtener el coeficiente de actividad en la fase líquida. (Soluciones ideales, Wilson, Renon,...).

FT: Es el simulador de procesos propiamente dicho, lleva a cabo programas de desempeño, y algunos de diseño, además de la evaluación económica de inversión en equipos e incluso calcula la rentabilidad del proceso. Consta de 72 archivos distribuidos en 5 tipos de bloques:

- *Operación y diseño:* Hay subrutinas conteniendo vectores de información relacionados con corrientes másicas y térmicas, parámetros de equipos, etc. Las subrutinas o "bloques" como IFLSH ("flash" isotérmica), FRAKB (destilación rigurosa por el método KB), EXCH1 (intercambiador de calor) y ADD (suma de corrientes) aparecen suficientemente documentadas de forma que el ingeniero pueda adentrarse en el programa fácilmente.
- *Costos:* contiene varios programas permitiendo calcular el valor económico de los diferentes equipos contenidos en la librería; por ejemplo, el bloque CASBR evaluaría el costo de un absorbedor empacado.

- **Recirculación:** solo dispone una subrutina (SCVW) que permite manejar ciclos con información insuficiente, para ello utiliza el método de Wegstein.
- **Control:** se encarga de ajustar los valores de aquellas variables que deben ser conocidas pero que es difícil de especificar desde el inicio de la simulación debido a la alta dependencia de otras variables. La relación de reciclo (R) en destilación es un ejemplo concreto de este problema. Se dispone para ello de los bloques CNTRL, PCVB, DSPLT y RCNTL.
- **Reporte:** bloques como TABLE y CURVE, permiten variaciones en la presentación del informe de resultados.

2.2. EJEMPLO DE UNA SIMULACIÓN

- A continuación, y a título de ejemplo, se presenta un caso de simulación de separación de mezclas en el que el Flowtran fue utilizado - (Software instalado en un micro vax II de la Universidad Nacional, sede Medellín).

Una corriente líquida de hidrocarburos será fraccionada utilizando dos técnicas de destilación: los métodos de Edminster y de Winn-Underwood (W-U).

La composición de la mezcla es la siguiente:

Benceno	: 325 lbmol/h
Tolueno	: 150 lbmol/h
O-Xileno	: 75 lbmol/h
Total lbmol/h	: 550
T = 205 °F	P = 20 psia
Fracción mol vapor	: 0

DATOS ADICIONALES:

- * Se tomará para W - U como componente clave pesado al tolueno con una relación de fracción real de residuo a fracción mol de destilado de 0,7 y como componente clave liviano al benceno con una relación inversa a la anterior - igual a 0,999.
- * El número de platos, sin contar el evaporador y el condensador, es de 16. Se introduce el alimento en el plato noveno.

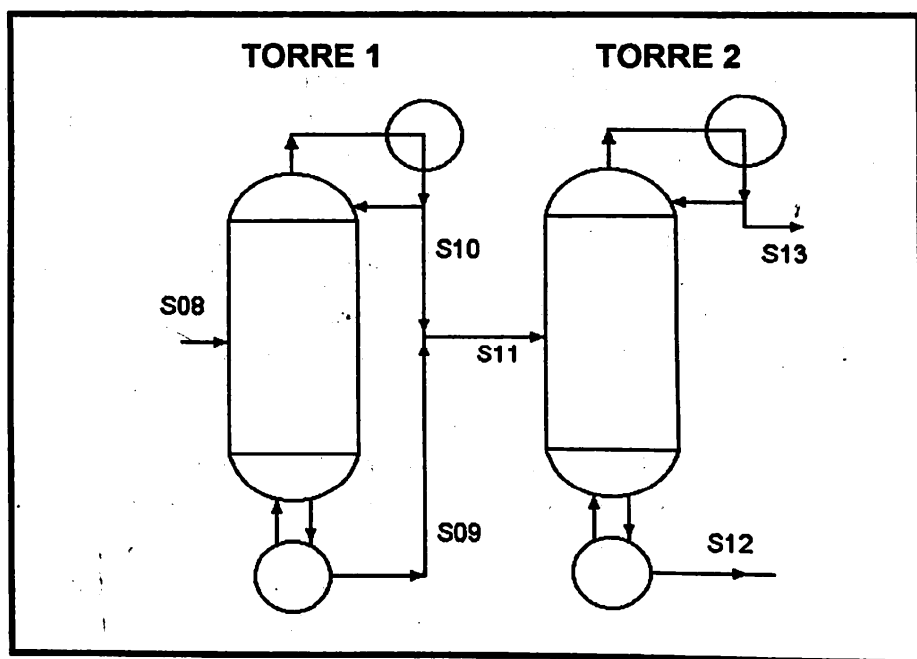


Figura 1. Diagrama de proceso equivalente

SOLUCION

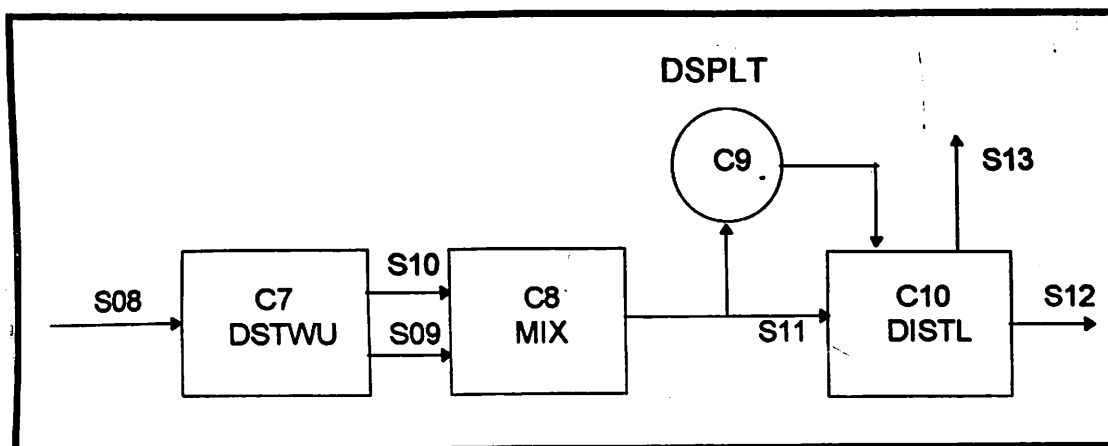


Figura 2. Diagrama de flujo de información

- * El condensador es total.
- * La relación de reflujo inicial, como dato "semilla", será el de dos veces el número mínimo de platos para Winn-Underwood. En el caso de Edminster se fijará en $R = 2$.
- * La presión en el condensador es de 14,7 psia y en el evaporador de 16 psia.
- * La fracción de benceno en el destilado es igual a 99,55% del benceno en el alimento (caso de Edminster); este valor será de 0,901% para el tolueno.

Calcular, por cada uno de los métodos, la relación de reflujo (cuando no es fijada) y las corrientes de destilado y de fondo. Evaluar también las cargas calóricas en el evaporador y en el condensador.

Nota: El usuario tendrá entre sus objetivos el observar las diferencias resultantes comparando S10 con la S13 y la S09 con la S12.

Se aprecian, en la figura N° 2, los bloques de separación de mezclas DSTWU y DISTL, el

bloque de mezcla de corrientes MIX y un bloque de control DSPLT. DSTWU utiliza el método de Winn-Underwood para calcular las corrientes superior e inferior en columnas simples con condensados parciales o totales; la correlación de Gilliland sirve para calcular la relación de reflujo correspondiente a un número teórico de platos. El bloque DISTL utiliza la técnica de Edminster para separación de multicomponentes, e igual que en DSTWU el condensador puede ser total o parcial; es necesario especificar la relación de reflujo, el número de platos y punto de alimentación y composición, las presiones superior e inferior en la torre, la fracción de alimento que saldrá como destilado y el tipo de condensador. Respecto al bloque MIX, éste puede calcular la composición de la mezcla resultante y su temperatura, bajo la condición que no hay cambio de fase; puede manejar hasta 7 corrientes. Finalmente DSPLT es el bloque de control predictivo que permite tener un manejo directo de la fracción de alimento presente en el producto mas liviano.

La instrucción PROPS indica la presencia de 3 compuestos, según el orden dado por RETR (Benceno, Tolueno y Orto-xileno), los números

PROGRAMA "FLOWTRAN"

```
TITLE  DESTILACION "FLOWTRAN"
PROPS  3 2 1 1 2
PRINT  TABLES
RETR   BZ TOL O-XYL
BLOCK  C7 DSTWU S08 S09 S10
PARAM  C7 1 2 1 99.9 70 3*0 14.7 16 0
BLOCK  C8 MIX S09 S10 S*0 S11
BLOCK  C9 DSPLT S11 C10 6
PARAM  C9 1 0.9955 0.00901
BLOCK  C10 DISTL S11 S12 S13
PARAM  C10 1 2 16 9 14.7 16
MOLES  S08 1 0 0 325 150 75
TEMP   S08 205.37
PRESS  S08 20
END CASE
END JOB
```

siguientes informan sobre las opciones a utilizar en la predicción de la presión de vapor (2: ecuación de Cavett), la fugacidad del vapor (1: gas ideal), fugacidad fase líquida (1: presión de vapor o Chao-Seader si supercrítica) y el coeficiente de actividad en la fase líquida (2: solución regular). Esta instrucción es fundamental y supone un buen conocimiento de la fisicoquímica del proceso; una mala selección llevará de todas maneras a un resultado carente de valor.

BLOCK DSTWU (C7): ordena las corrientes - para el destilador Winn-Underwood - como alimento, residuo y destilado respectivamente. Igual ocurre en el block DISTL (C10).

PARAM C7 lista los parámetros siguientes (excluyendo el primer número (1) siempre fijo): Número del componente clave pesado (tolueno) y número del componente clave liviano (benceno) (según el orden en RETR), relación de fracción mol en el destilado a fracción mol en el residuo

para el benceno, relación de fracción mol en el residuo a fracción mol en el destilado para el tolueno, los tres siguientes datos - calidad de alimento, relación de reflujo y número de platos teóricos deseados - se toman como cero (0) por defecto, el simulador procede entonces a calcularlos tomando para los últimos el reflujo que conlleve a dos veces el mínimo número de etapas ideales; los dos números a continuación fijan la presión en los extremos de la torre y el cero (0) al final indica que el condensador es total. La instrucción **PARAM C10** procede de manera similar pero acomodándose, claro está, a las particularidades del método.

El bloque **block MIX** mezcla las corrientes S09 y S10 que salen de la torre N°1 de manera que S11 sea idéntica a S08 y poder iniciar la destilación en la columna N° 2.

DSPLT (C9) controla la corriente S11 del bloque C10, el número seis (6) al final indica la ubicación

del parámetro que se está controlando dentro del bloque DISTL. En PARAM C9 solo aparece el uno (1) inicial, por construcción en la programación, y las fracciones molares del benceno y tolueno en el alimento; el bloque permite especificar 23 componentes más, en el presente caso son tomados como cero (0) y no requieren escribirse por estar al final.

Hay otras subrutinas como MOLES, PRESS y TEMP que no requieren explicación.

Entre END CASE y END JOB podrían variarse, conservando al misma estructura, aquellos parámetros que se consideren necesarios para simular diversas situaciones.

INFORMACIÓN DE SALIDA

Los resultados entregados por el simulador aparecen a continuación. No requieren de comentarios adicionales dada la claridad con que estos son presentados.

```

C7  (DSTWU)  FEED=S08  OVD=S10  BOT=S09
      HVY KEY COMP. NO.      4.000 LT. KEY COMP. NO.      3.000
      SPLIT FOR LT. KEY      99.900 SPLIT FOR HVT KEY      70.000
      QUALITY OF FEED        0.000

      TOP PRESS. PSIA        14.700 BOTTOM PRESS. PSIA      16.000
      CONDENSER TYPE         0.000

      MIN. NO. THEO. STAGES AT TOTAL REFLUX      10.05
      MINIMUM REFLUX AT INFINITE STAGES          1.01
      NO. STAGES ABOVE FEED AT TOTAL REFLUX      4.25
      ACTUAL REFLUX                              1.28
      NO. OF THEO. STAGES AT ACTUAL REFLUX        20.10
      CONDENSER TEMP, DEG F      176.96
      REBOILER TEMP, DEG F      250.42

C8  - MIX - OUTLET = S11
      INLETS = S09  S10

C9  SET D/F VALUE OF CONTROLLED COLUMN TO  0.5907

C10  - DISTL - TOTAL CONDENSER
      FEED = S11 , BOTTOMS = S12 , OVERHEAD = S13
      REFLUX RATIO= 2.00, NO. OF PLATES = 16., FEED_PLATE= 9.
      FRAC OVHD = 0.591, FEED FRAC VAPOR= 0.000
      CONDENSER DUTY= 0.1455E+08BTU/HR, TEMP= 176.86F, PRES= 14.70PSIA
      REBOILER DUTY= 0.1455E+08BTU/HR, TEMP= 250.33F, PRES= 16.00PSIA

```

STREAM NAME:	S08	S09	S10	S11	S12
	LBMOL/HR	LBMOL/HR	LBMOL/HR	LBMOL/HR	LBMOL/HR
1 BENZENE	325.000	2.22337	322.777	325.000	2.23333
2 TOLUENE	150.000	146.949	3.05122	150.000	147.822
3 O-XYLENE	75.0000	75.0000	0.00004	75.0000	74.9999
TOTAL LBMOL/HR	550.000	224.172	325.828	550.000	225.111
TOTAL LB/HR	47167.2	21674.6	25492.6	47167.2	21750.2
1000 BTU/HR	-5039.80	-1705.37	-3189.23	-4894.61	-1713.42
DEGREES F	205.37	250.42	176.96	212.03	250.33
PSIA	20.000	16.000	14.700	14.700	16.000
DENSITY, LB/FT3	49.4605	47.7513	50.7466	49.2137	47.7554
MOLE FRAC VAPOR	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

STREAM NAME:	S13
	LBMOL/HR
1 BENZENE	322.711
2 TOLUENE	2.17772
3 O-XYLENE	0.00012
TOTAL LBMOL/HR	324.889
TOTAL LB/HR	25407.0
1000 BTU/HR	-3180.35
DEGREES F	176.86
PSIA	14.700
DENSITY, LB/FT3	50.7509
MOLE FRAC VAPOR	0.0000

**
 C7 (DSTWU) FEED=S08 OVD=S10 BOT=S09
 ITR TOP TEMP BOT TEMP MIN THEO STGS
 1 193.804 223.804 10.036
 2 176.958 250.422 10.049
 MINIMUM REFLUX 1.008
 C8 - MIXES 2 STREAMS - TEMP= 212.0F, PRES= 14.7PSIA
 C9 - FRACTION OVERHEAD =0.5907
 C10 - OVD T= 176.9F, FD T= 193.2F, BTM T= 250.3F
 **END OF HISTORY

AGRADECIMIENTOS

A la compañía *Monsanto* y a *Cache Corporation* por la donación en octubre de 1987 del Flowtran al Departamento de Procesos Químicos de la Facultad de Minas.

BIBLIOGRAFÍA

DOUGLAS, JAMES. *Conceptual design of Chemical Process*. Mc Graw-Hill, 1988. 601 p.

SEADER, J.D.; SEIDER, W.D. and PAULS, A.C. *Flowtran Simulation - An Introduction*. Cache, 1987. 438 p.

WESTERBERG, A.W. et al. *Process Flowsheeting*. Cambridge University Press, 1979. 250 p.

NAYLOR, T.H. et al. *Técnicas de Simulación en Computadoras*. Limusa, 1982. 390 p.

GLUECR, A.R. *Simulation of Chemical Process*. En: *Chemical Engineering Progress*. Vol. 69, N° 101 (October, 1973); p. 95-97.

SHACHAM M. and CUTLIP, M.B. *Computer-based instruction: Is there a future in Chemical Engineering Education ?*. En: *Chemical Engineering Education*. (1981); p. 78-84.

WOLFE, R. KENNETH. *Role of computers in process development*. En: *Chemical Engineering*. Vol. 72 (November, 1964); p. 221-224.

PEREA, JAVIER. *Diseño por ordenador de plantas de proceso*. En: *Ingeniería Química*, Julio de 1992, pp 97-102