

IMPORTANCIA DE LOS MÉTODOS NUMÉRICOS EN LA SIMULACIÓN DE

PROCESOS QUÍMICOS

Proyecto Matemática Aplicada a la Ingeniería de los Alimentos
Universidad Tecnológica Nacional – Facultad Regional Rosario

Dr. Alejandro S. M. Santa Cruz
Dr. Nicolás J. Scenna



La Simulación como Herramienta para Resolver Problemas Típicos de IQ

- La simulación digital constituye una poderosa herramienta para la resolución de las ecuaciones que describen a los sistemas en ingeniería química. Las principales dificultades que se plantean son dos, a saber:

1. Encontrar la solución de un sistema de ecuaciones algebraicas no lineales (que usualmente se efectúa mediante un método iterativo).
2. Efectuar la integración numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias y en derivadas parciales (mediante ecuaciones discretizadas en diferencias finitas que aproximan a las ecuaciones diferenciales continuas). Siempre debe tenerse presente que el algoritmo de integración afecta la exactitud y la estabilidad numérica de la solución.



15/05/2007



Importancia de los Métodos Numéricos
A. S. M. Santa Cruz y N. J. Scenna

Algoritmos

- En la literatura respectiva se han propuesto muchos algoritmos: Algunos de ellos trabajan mejor que otros sobre determinados problemas (por ejemplo, más rápido y por consiguiente son menos costosos para un grado especificado de exactitud).
- En los últimos tiempos se han desarrollado paquetes para simulación digital. Éstos relevan al ingeniero de adquirir conocimientos acerca de los métodos de integración numérica. En teoría, estos paquetes facilitan al ingeniero la formulación y resolución de los problemas que se le plantean. En la práctica, estos lenguajes de simulación tienen una utilidad limitada; en su puja por generalizar, usualmente, se vuelven ineficientes.
- Desafortunadamente no existe un algoritmo que funcione en forma óptima para todos los problemas que se plantean. No obstante, conviene remarcar, que el algoritmo explícito de Euler (EDO's) de primer orden es el mejor para un gran número de aplicaciones en ingeniería.
- El tiempo computacional de ejecución para resolver un problema real de ingeniería con uno de estos simuladores o paquetes de simulación es usualmente más largo que con un programa ad-hoc escrito en lenguaje FORTRAN, BASIC o PASCAL.



15/05/2007



Importancia de los Métodos Numéricos
A. S. M. Santa Cruz y N. J. Scenna

Uso de Paquetes Informáticos para Simulación de Procesos

- Argumento en favor de la utilización de estos paquetes para simulación digital:
 - El tiempo de formulación y de resolución de problemas que se plantean en ingeniería de procesos se reduce.
- Objeción:
 - La experiencia demuestra que es mucho mejor para el estudiante o ingeniero desarrollar un programa específico para el problema que se desea resolver. No sólo es computacionalmente más eficiente sino que además garantiza el conocimiento de cómo funciona el programa y cuáles son las hipótesis realizadas y las técnicas utilizadas. Esta metodología permite:

1. La supervisión del programa cuando éste no funciona.
2. Su modificación para manejar mucho más fácilmente nuevas situaciones que se planteen.
3. El uso de subrutinas especiales para efectuar cálculos específicos (Numerical Recipes, IMSL, IBM, etc.).



15/05/2007

Importancia de los Métodos Numéricos

A. S. M. Santa Cruz y N. J. Scenna

¿Qué son los Métodos Numéricos?

- Son una clase de métodos para resolver una amplia variedad de problemas.
- Estos problemas se plantean a partir de la modelización matemática de fenómenos o procesos fisicoquímicos.
- Estos métodos son especiales en el sentido en que únicamente emplean operaciones lógicas y aritméticas; por consiguiente, pueden implementarse sobre computadoras digitales.



¿Qué es una Computadora Digital?

- En rigor de verdad, el dedo de una mano sobre un ábaco puede considerarse una computadora digital.
- Sin embargo, esta expresión se utilizará aquí para indicar a dispositivos electrónicos que realizan operaciones especificadas en un conjunto de instrucciones llamado programa y cuyo uso ha ido en creciente aumento desde mediados de la década de los 50.



Métodos Numéricos + Computadoras Digitales



Poderosa Herramienta para el Análisis Matemático

Permiten el manejo de:

1. *No linealidades.*
2. *Geometrías complejas.*
3. *Grandes sistemas de ecuaciones acopladas.*

15/05/2007



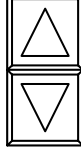
Importancia de los Métodos Numéricos
A. S. M. Santa Cruz y N. J. Scenna



7

Los métodos numéricos han desplazado al análisis matemático clásico en muchas aplicaciones industriales y de investigación, dado que:

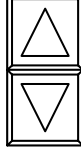
- **Son fáciles de emplear.**
- **Son poco costosos (en tiempo de ejecución y dinero).**
- **Frecuentemente se dispone de ellos en programas computacionales enlatados (IBM, IMSL, Numerical Recipes, etc.).**



¿Existe algún límite a la capacidad de cálculo de los métodos numéricos?

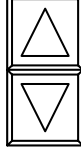
- La respuesta es afirmativa.
- Punto de vista de muchos de científicos e ingenieros:

Si un problema no puede resolverse analíticamente, lo mejor es ponerlo en una computadora (mediante un algoritmo adecuado). Este punto de vista se debe, sin lugar a dudas, al enorme poder de cálculo de los métodos numéricos.



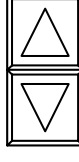
Desafortunadamente existen muchos problemas que son imposibles de resolver utilizando métodos numéricos:

- Para algunos de estos problemas no se ha encontrado todavía un modelo matemático completo y seguro que permita encontrarles una solución numérica.
- La dimensión de otros problemas es tan grande que su solución está más allá de los límites prácticos en términos de la tecnología computacional disponible.



La cuestión depende de cuánto uno está dispuesto a pagar para obtener una respuesta.

- **Algunos problemas son tan importantes que las industrias y los gobiernos están dispuestos a invertir millones de pesos para hacer práctica la resolución de problemas que antes no resultaba práctica.**
- **Todavía restan muchos problemas que resolver, tanto desde el punto de vista de la modelización de los sistemas fisicoquímicos como de la capacidad computacional.**



Algunos argumentos en contra del estudio sistemático de los métodos numéricos son:

- En los últimos años se han desarrollado grandes programas computacionales para simular el comportamiento de sistemas fisicoquímicos complejos. Estos programas se han diseñado para ser utilizados por aquellos profesionales de la ingeniería e investigadores científicos sin un conocimiento extensivo de su funcionamiento interno.
- Existen bibliotecas en continua expansión de subrutinas que utilizan sofisticados métodos numéricos para realizar una amplia variedad de tareas matemáticas.



El ingeniero o científico que espera utilizar un programa empaquetado o una subrutina de una biblioteca para resolver un problema matemático determinado se desengañará.

- La selección y aplicación de un método numérico en una situación específica es más una actividad propia de un arte que de una ciencia.
- Por consiguiente, el usuario de computadora que no tenga la habilidad ni el conocimiento para seleccionar y utilizar un método numérico para aplicar a un problema específico y efectuar la programación del método, encontrará una severa restricción en el rango de problemas que puede manejar.

- Cuando se disponga de programas empaquetados o subprogramas que han sido probados y demostrado su buen funcionamiento lo más



Las dificultades en la utilización de programas enlatados y/o subrutinas tienen diversas causas, entre ellas:

- 1) Una situación física no compleja puede ser simulada exactamente por un modelo matemático.**
 - 2) La aplicación de un método numérico no está completamente libre de dificultades en su implementación.**
 - 3) No está completamente libre de errores.**
 - 4) No es óptimo en todas las situaciones en las que se puede utilizar**
- En general puede existir superposición entre las situaciones (2), (3) y (4).**

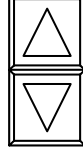
Dificultades más comunes que se presentan con la utilización de programas enlatados y/o subrutinas de cálculo:

- *Suministran resultados erróneos.*
- *Existe una abrumadora variedad de programas que se pueden aplicar para resolver un problema dado.*
- *El material descriptivo rara vez dará una indicación sobre la eficiencia de la subrutina para resolver un problema específico o de su adaptabilidad para resolver el particular problema que se*

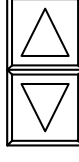
plantas 

15/05/2007

Importancia de los Métodos Numéricos
A. S. M. Santa Cruz y N. J. Scenna

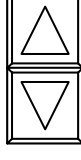


- *El usuario con algunos de estos problemas pero sin un conocimiento cabal de los métodos numéricos deberá buscar a alguien con la información necesaria, si es que existe alguien a quien consultar.*
- *Ante una situación de esta naturaleza puede ser dificultoso para el usuario formular las preguntas correctas y para el consultor dar las respuestas adecuadas, dado que el background de los dos puede ser muy diferente.*



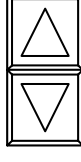
Conclusiones

- Existe una fuerte justificación para que el ingeniero o científico adquiriera conocimiento acerca del funcionamiento de los métodos numéricos.
- Este conocimiento permitirá al usuario de computadora, seleccionar, modificar y programar un método adecuado para cualquier tarea específica, ayudarse en la selección y uso de programas empaquetados y en subrutinas de bibliotecas y posibilitar la comunicación con un especialista en una forma inteligente y eficiente toda vez que busque ayuda para resolver un problema particularmente difícil.
- No se debe dejar de reconocer el desarrollo de métodos numéricos aplicables a procesos en ingeniería es efectuado por ingenieros y científicos y no por analistas de sistemas.



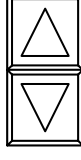
Lenguajes de Computación

- Lenguajes de bajo nivel o lenguajes de máquina.
- Lenguajes compiladores.
- Lenguajes de alto nivel.



Lenguajes de Alto Nivel

- Independientes de la computadora sobre la cual se corre el programa.
- A través del uso de un programa de computadora llamado compilador (o traductor), los programas de alto nivel pueden convertirse a lenguaje de máquina (código de máquina) sobre el que el realmente el programa se ejecutará.



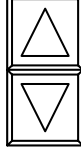
Lenguajes de Alto Nivel para Propósitos Científicos:

- **FORTRAN:** Con sus múltiples versiones, Fortran IV, Fortran 77, Fortran Lahey, Fortran 90, etc.
- **PASCAL**
- **ALGOL:** Raramente utilizado por los científicos computacionales de la actualidad, pero es ampliamente utilizado como lenguaje universal de algoritmos descriptivos.
- **BASIC:** Bastante popular como lenguaje en sistemas de tiempo compartido, utilizándose para tareas de programación relativamente simples.
- **APL:** Ampliamente utilizados en sistemas de tiempo compartido y adecuados para tareas que van de relativamente simples a altamente sofisticadas).
- **MAD:** Lenguaje obsoleto parecido al ALGOL.
- **PL-1:** Lenguaje poderoso de interés de los científicos computacionales.

15/05/2007



Importancia de los Métodos Numéricos
A. S. M. Santa Cruz y N. J. Scenna



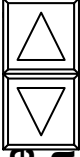
20

El Problema de la Verificación

- Una de las tareas más difíciles que debe efectuarse al obtenerse una solución numérica de un problema de ingeniería es verificar si el programa computacional y la solución final son correctos.
- El proceso de verificación se lleva a cabo en dos etapas:
 1. Determinando si el programa funciona como el programador desea (por ejemplo, si la codificación es correcta). Este proceso se cumplimenta:
 - a) Imprimiendo resultados intermedios.
 - b) Efectuando manualmente verificaciones puntuales o mediante calculadoras de escritorio.

2. Determinando si el algoritmo empleado suministrará la solución correcta. La verificación, dado que la solución del problema no se conoce de antemano, es indirecta. Esta verificación podría consistir, por ejemplo, en:

- a) Analizar los casos límites del problema para los cuales muchas veces pueden encontrarse soluciones analíticas.

- b)  el caso de programas o subrutinas de biblioteca  proceso de verificación  pero de una manera más extensiva y cuidadosa.

15/05/2007

¿Cometen Errores las Computadoras?

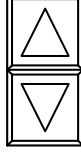
- En un sentido o en otro, las computadoras pueden cometer errores, y de hecho lo hacen.
- Sin embargo, la gran mayoría de los errores encontrados en computación provienen de los usuarios. A veces resulta difícil de aceptar que un error que se resiste a ser detectado provenga de uno mismo.
- Por consiguiente, el procedimiento más eficiente que debe seguirse para descubrir errores es suponer que invariablemente éstos provienen del usuario hasta que esa posibilidad sea esencialmente eliminada.



Errores de Computación

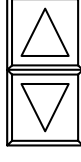
En el caso en que sean detectados errores de computación, éstos pueden deberse a:

- 1) Errores de hardware (máquina).**
- 2) Errores de software (programa).**
- 3) Una combinación de ambos.**



Errores de Hardware:

- Relativamente raros.
- No los discutiremos en esta presentación.



Errores de Software:

1) Errores del sistema de ejecución de la computadora (sistema operativo). Estos errores provienen de interacciones imprevistas de un programa con otro. Consecuencia:

1.a) Falla total del sistema.

1.b) Comportamiento errático y resultados incorrectos.

2) Errores del compilador, que resulta en códigos incorrectos del programa objeto (programa de máquina).

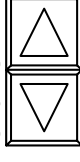
3) Errores de las subrutinas de las bibliotecas.



15/05/2007

Importancia de los Métodos Numéricos

A. S. M. Santa Cruz y N. J. Scenna



25

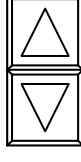
Consideraciones Acerca del Uso de los Métodos Numéricos

- En este punto crucial se hace necesario afirmar que para comprender a los métodos numéricos no basta con estudiarlos sino que los mismos deben ser utilizados en la resolución de problemas prácticos.
- Por consiguiente, resulta de vital importancia que el estudiante resuelva los problemas que se plantean en el ámbito de la ingeniería química utilizando los métodos más adecuados.

15/05/2007



Importancia de los Métodos Numéricos
A. S. M. Santa Cruz y N. J. Scenna



26