

Modelado de un reactor húmedo de acetileno utilizando herramientas estocásticas

Yanelys Cuba Arana
0000-0002-9535-8253

Yalina Afonso Delgado
0009-0004-2705-2473

Ramón Quiza Sardiñas
0000-0003-1293-6044

Onell Hernández Ramírez
0000-0002-6252-6564

Marcelino Rivas Santana
0000-0002-0305-515X

Resumen

En la industria química, la digitalización y automatización suelen ser bastante elementales, así como el monitoreo de las variables de procesos debido a la carencia de herramientas adecuadas de modelación, análisis e interpretación, las cuales necesitan modelos que reflejen el carácter estocástico de los procesos industriales reales para la simulación y control de los mismos. En la presente investigación se propone el modelado estocástico de un reactor húmedo de acetileno teniendo en cuenta no sólo la reacción fundamental del carburo de calcio con el agua, sino también la existencia de impurezas en la materia prima. Se emplea el método de Monte Carlo para la evaluación de la temperatura de salida del acetileno, en dependencia de la cantidad de agua suministrada, teniendo en cuenta la variabilidad de la composición química de la materia prima y se entrena una red de densidad mixta para modelar la distribución de probabilidad de la temperatura de salida del acetileno. El modelo obtenido permite no solo predecir el valor esperado de dicha temperatura, sino también los respectivos límites de confiabilidad, lo que contribuye a una toma de decisiones más realista durante el control de la operación del reactor.

Palabras claves: Modelado estocástico. Método de Monte Carlo. Redes de densidad mixta.

Abstract

In the chemical industry, digitization and automation are often quite elementary, as well as the monitoring of process variables due to the lack of adequate modeling, analysis and interpretation tools, which require models that reflect the stochastic nature of real industrial processes for their simulation and control. In the present investigation, the modeling of a wet acetylene reactor is proposed. It is carried out taking into account not only the fundamental reaction of calcium carbide with water, but also the existence of impurities in the raw material. Based on the chemical and energy balance models, the Monte Carlo method was used to evaluate the acetylene outlet temperature, depending on the amount of water supplied, taking in to account the variability of the chemical composition of the raw material. Finally, a mixture density network was used to model the probability distribution of the acetylene output temperature. The model obtained allows not only to predict the expected value of said temperature, but also the respective reliability limits, which contributes to a more realistic decision making during the control of the reactor operation.

Keywords: Stochastic modeling. Monte Carlo method. Mixed density networks.

1 Introducción

En los últimos años el mundo ha experimentado un sorprendente crecimiento en las tecnologías digitales de la información y comunicación que ha dado paso al inicio de la cuarta revolución industrial conocida como Industria 4.0 (VanDerHorn, E., y Mahadevan, 2021; Guo y Lv; 2022). En Cuba, principalmente en la industria química, la digitalización y automatización suelen ser bastante elementales, así como el monitoreo de las variables de procesos debido a la carencia de herramientas adecuadas de modelación, análisis e interpretación, lo cual ha obstaculizado el desarrollo dirigido a minimizar las pérdidas, aumentar la eficiencia y avanzar hacia objetivos sostenibles.

El método de Monte Carlo constituye una herramienta de modelación estocástica que proporciona soluciones aproximadas a una variedad de problemas matemáticos mediante la ejecución de experimentos (simulaciones) con muestreo estadístico a través de ordenadores (Stevens; 2023). Puede aplicarse para resolver dos tipos principales de problemas: aquellos en los que los datos construidos mediante números aleatorios se utilizan para generar variables de salida puramente deterministas, y aquellos en los que se utilizan para generar distribuciones de probabilidad de variables de salida estocásticas, dominando así muchas áreas de la ciencia y la ingeniería, en gran parte debido a su capacidad para tratar problemas complejos que antes solo podían abordarse mediante métodos deterministas simplificados (Avila et al., 2022; Da Silva., 2021).

Las redes de densidad mixta son un tipo de redes neuronales artificiales cuya salida, en lugar de ser un valor puntual, es una densidad de probabilidad. Dado que está descrita por un modelo mixto, se pueden representar adecuadamente distribuciones de probabilidad de diferentes formas. En consecuencia, estas redes se pueden utilizar para modelar varios fenómenos con un fuerte componente aleatorio (Avila et al., 2022; Brusafferri et al., 2022).

Entre los métodos de obtención de acetileno se encuentra el método de generación húmeda en el que se obtiene el acetileno con un gran exceso de agua, en dichos generadores el factor más importante es el consumo de agua, este utiliza entre 8 y 10 litros por cada kilogramo de carburo, la reacción es fuertemente exotérmica donde se disipa calor (Orsula; 2015).

La mayoría de las plantas químicas necesitan modelos que reflejen el carácter estocástico de los procesos industriales reales para la simulación y control de los mismos que permita una toma de decisiones más realistas y contribuya a aumentar la eficacia del proceso. Tal es el caso de la Unidad Empresarial de Base Gases Industriales Matanzas, la cual se encarga del procesamiento, producción, distribución y comercialización de gases industriales y medicinales, fundamentalmente acetileno y oxígeno gas de marcada importancia en el país.

2 Objetivo

El objetivo de la presente investigación es diseñar y ajustar un modelo estocástico que describa el funcionamiento de un reactor húmedo de acetileno que

permita aumentar la eficiencia y toma de decisiones más realista durante el control de la operación del reactor.

3 Marco Teorico

El llamado método de Montecarlo se refiere a un enfoque para resolver problemas complejos mediante el uso de números aleatorios. Puede aplicarse para resolver dos tipos principales de problemas: aquellos en los que los datos construidos mediante números aleatorios se utilizan para generar variables de salida puramente deterministas, y aquellos en los que se utilizan para generar distribuciones de probabilidad de variables de salida estocásticas(Rivera et al., 2021).

A pesar de su antigüedad, el método de Monte Carlo sigue siendo ampliamente usado para la simulación de fenómenos estocásticos dentro de la industria química y de procesos (Horcas et al., 2022; Postma et al., 2022) Dicho método se puede utilizar para resolver problemas de ingeniería complejos porque puede manejar una gran cantidad de variables aleatorias, varios tipos de distribución y modelos de ingeniería altamente no lineales (Marzouk et al.,2018).

Resolver un problema con el Método Monte Carlo consiste en realizar una simulación matemática o experimento matemático del fenómeno físico de interés en lugar de resolver la ecuación o conjunto de ecuaciones que lo gobiernan. Por lo tanto, cualquier cálculo de Monte Carlo comienza con la creación de un modelo que represente el sistema real de interés (da Silva et al., 2021).

Las redes de densidad de mezcla (MDN) son un tipo de redes neuronales artificiales que dan, como salida, una distribución gaussiana de mezcla en lugar de un valor único (Avila et al., 2022;; Zhu et al., 2022).

Las redes de densidad mixta son un tipo de redes neuronales artificiales cuya salida, en lugar de ser un valor puntual, es una densidad de probabilidad. Dado que está descrita por un modelo mixto, se pueden representar adecuadamente distribuciones de probabilidad de diferentes formas. En consecuencia, estas redes se pueden utilizar para modelar varios fenómenos con un fuerte componente aleatorio (Brusafferri et al., 2022; Pang et al., 2022).

La combinación del método de Monte Carlo y las redes de densidad mixta, con las ecuaciones de balance de masa y energía son una poderosa herramienta para la modelación estocástica de procesos industriales.

4 Método

La metodología del modelo estocástico consiste en un algoritmo de cuatro etapas fundamentales. A continuación, se describe cada etapa del procedimiento de la investigación.

4.1. Caracterización tecnológica del proceso

El primer paso se centra en la descripción del proceso tecnológico, haciendo énfasis en el reactor húmedo de acetileno que es donde se lleva a cabo el modelo, con el fin de analizar su funcionamiento para la posterior modelación del reactor.

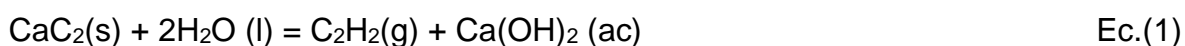
Dicho proceso de obtención de acetileno se basa en el método de generación húmeda, siendo su capacidad de diseño de 90 m³/h. La obtención del

acetileno tiene lugar dentro de un generador de capacidad de 85 m³/h mediante la reacción química entre el carburo de calcio y el agua.

El generador contiene agua hasta cubrir las ¾ partes de su capacidad y dicha reacción entre el carburo de calcio y el agua hace ascender la temperatura hasta un valor entre 333 y 343 K (60 y 70 °C).

4.2. Modelación del reactor húmedo de acetileno

Se lleva a cabo la modelación del reactor húmedo de acetileno con el objetivo de implementar un modelo analítico a partir de los balances de masa y energía, las cuales constituyen la base para el diseño, desarrollo, análisis y optimización de los procesos que ocurren en el mismo. Dicha modelación se implementa en MATLAB R2020a (versión 9.8.0.1323502). Para los balances de masa y energía se necesitan un grupo de propiedades termodinámicas como el calor de formación, la capacidad calórica y la masa molar. El reactor opera con un gran exceso de agua y 100% de conversión y su principal reacción Ec.(1) es la generación de acetileno a partir de carburo de calcio y agua, mostrada a continuación.

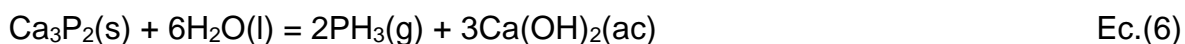
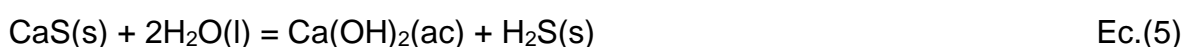
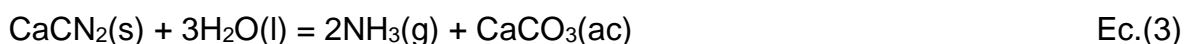


En ella se da por conocida la masa de acetileno generado $m(\text{C}_2\text{H}_2)$. A partir de la ecuación anterior se obtienen las expresiones de balance de masa para el CaC_2 , H_2O y $\text{Ca}(\text{OH})_2$ empleando la Ec. (2)

$$m(x) = m(y)M(y)/M(x) \quad \text{Ec.(2)}$$

donde x e y son dos sustancias cualesquiera que intervengan en la reacción química, mientras m hace referencia a la masa y M a las masas molares respectivas.

En nuestro modelo se tuvo en cuenta la variabilidad de las impurezas presentadas en el carburo de calcio mostradas en las reacciones correspondientes Ec.(3), Ec.(4), Ec.(5) y Ec.(6).



A partir de los valores calculados en cada balance, se determina el gasto de agua reaccionante, el exceso de agua y el hidróxido de calcio generado mediante las Ec.(7), Ec.(8) y Ec.(9).

$$m(\text{H}_2\text{O})_r = \sum_{i=1}^4 m(\text{H}_2\text{O})_i \quad \text{Ec.(7)}$$

$$m(\text{H}_2\text{O})_e = m(\text{H}_2\text{O}) - m(\text{H}_2\text{O})_r \quad \text{Ec.(8)}$$

$$m(\text{Ca}(\text{OH})_2) = \sum_{i=1}^4 m(\text{Ca}(\text{OH})_2)_i \quad \text{Ec.(9)}$$

Se desarrollan los balances de energía correspondientes, para obtener la temperatura de salida que debe ser controlada para el funcionamiento óptimo del proceso, y la posterior obtención de sus distribuciones de probabilidad. En cada uno de los balances se determina la energía generada o consumida en la reacción mediante la Ec.(10).

$$E(i) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{H(i)m(i)}{M(i)} \quad \text{Ec.(10)}$$

Con los valores de las energías involucradas en cada reacción, se calcula la energía total generada en el reactor mediante la Ec.(11).

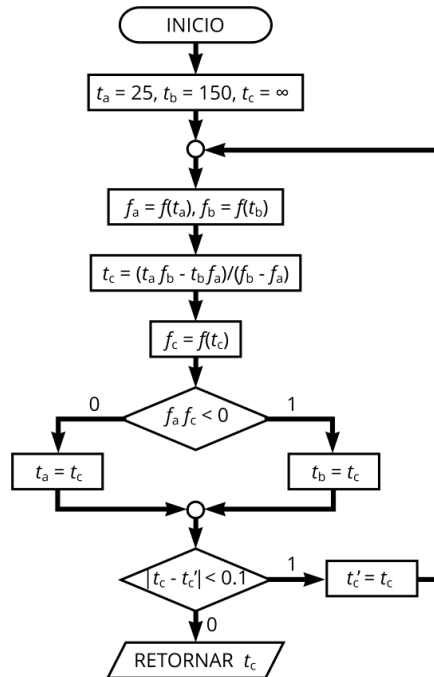
$$E = E_1 + E_2 + E_3 + E_4 + E_5 \quad \text{Ec.(11)}$$

A partir de la energía generada durante el proceso, se calcula la temperatura de los productos de salida, mediante la Ec.(12) donde i representa cada uno de los productos.

$$t = t_{amb} + \frac{E}{\sum_i C_{pi}m_i / M_i} \quad \text{Ec.(12)}$$

Como las propiedades de algunas de las sustancias dependen de la temperatura, se procede iterativamente, asumiendo una temperatura inicial igual a la ambiental ($t = 25 \text{ }^\circ\text{C}$) y actualizándolo con el valor calculado, hasta que la diferencia entre ambos valores sea menor que $0,1 \text{ }^\circ\text{C}$ (que es un valor de precisión aceptable para una planta industrial). El algoritmo se muestra en la Figura 1

Figura 1 Algoritmo del balance de energía



4.3. Aplicación del método de Monte Carlo

Para la determinación de la distribución de probabilidad de la temperatura de salida del reactor, para diferentes valores de flujo de agua, se generaron 100 combinaciones de composiciones de entrada, cada una de ellas, con una distribución aleatoria uniforme, en los intervalos reportados como admisibles para cada una de las sustancias

Estos valores se generaron para cada uno de los valores de flujo de agua, desde 2 000 kg/h hasta 4 000 kg/h, divididos en 40 intervalos regulares. Para cada uno de estos conjuntos aleatorios, se realizan los balances de masa y energía, calculando las correspondientes temperaturas de salida.

4.4. Modelación con redes de densidad mixta

Con los valores de las temperaturas de salida, calculadas para los diferentes flujos de agua de entrada, se ajusta un modelo de red de densidad mixta. Para ello, se utilizaron modelos gaussianos con cinco centros, ajustados por el método de las k-medias con cinco iteraciones. La red de densidad mixta se construyó con 25 neuronas en la capa oculta, y se entrenó durante 100 iteraciones, sin otro criterio de parada.

5 Resultados y discusión

En esta sección se exponen, analizan y comparan los resultados obtenidos en el marco de la investigación enfocados tanto a la modelación del reactor como a la estimación de la distribución de la probabilidad de la temperatura de salida, para diferentes valores de flujo de agua de entrada.

5.1. Resultado de las simulaciones

Como resultado de la aplicación del método de Monte Carlo, se realizaron las simulaciones correspondientes a las 100 variantes aleatorias de la composición de la materia prima, para cada uno de los valores de flujo de agua en toneladas. Se obtuvieron los valores de temperatura de salida para cada una de ellas, los cuales se muestran en la Figura 2.

Como se puede observar, existe una clara tendencia a la disminución de la temperatura con el aumento del flujo del agua, lo cual está en correspondencia con el hecho de que, al existir una mayor cantidad de agua, esta es capaz de absorber más calor, por lo tanto, aumenta menos la temperatura.

También se puede observar que, como consecuencia de la variabilidad en los datos de entrada, se produce una variación en los valores de temperatura predichos. Esta variación es mayor para flujos menores de agua y va disminuyendo según aumenta dicho flujo.

Figura 2 Valores simulados de temperatura de salida

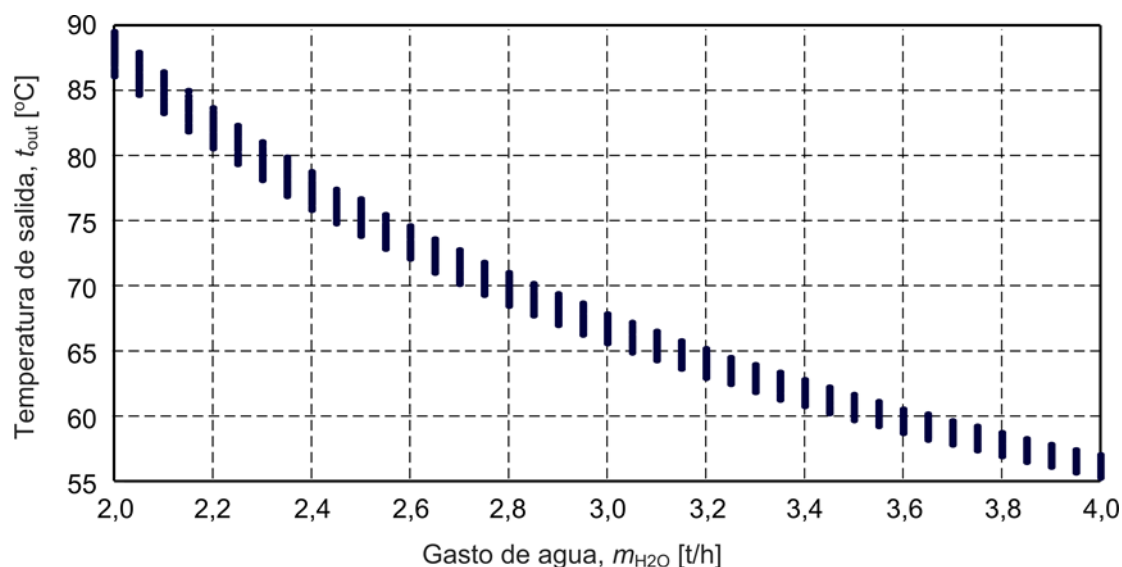
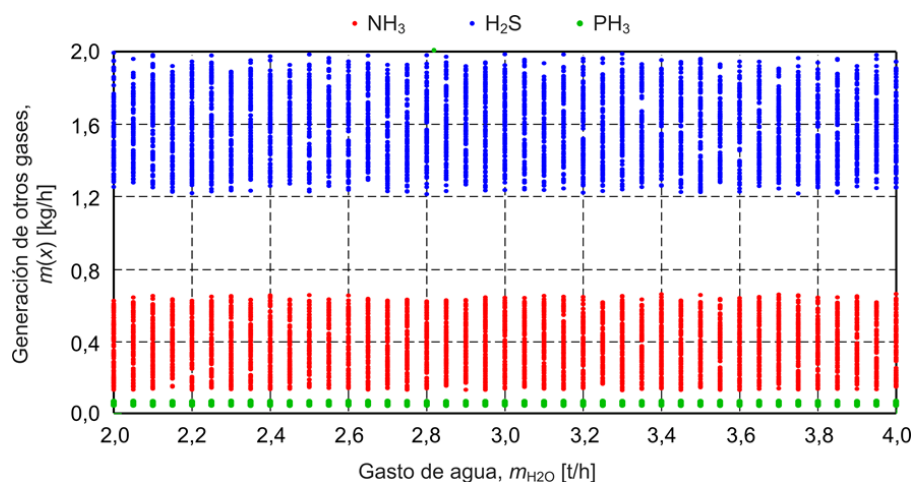


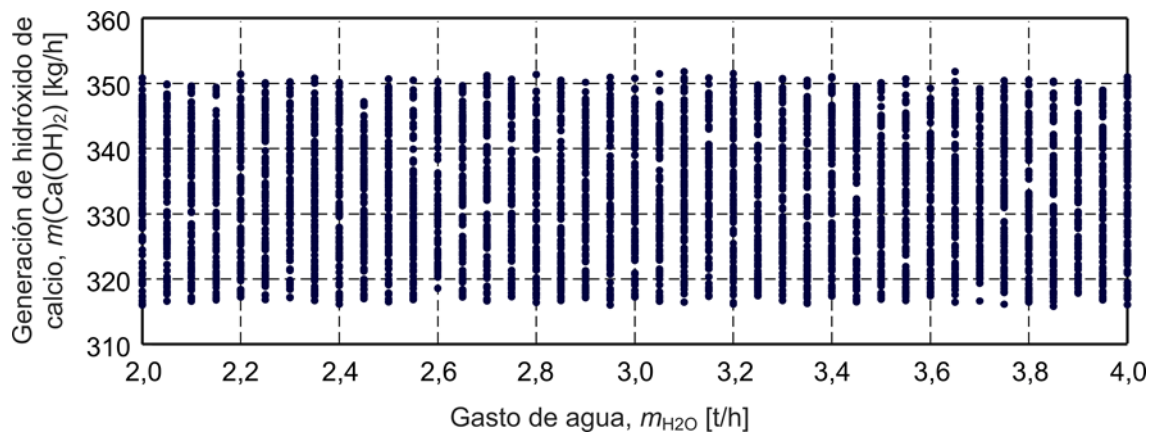
Figura 3 Valores simulados de gases de impurezas generados



De forma similar, se obtuvieron las masas de impurezas gaseosas generadas (NH₃, H₂S y PH₃). Como se puede observar (ver Figura. 3), en cada una de ellas se muestra variación en sus valores aunque, a diferencia de lo que ocurre con la temperatura, la cantidad de agua introducida en el proceso no tiene una influencia significativa en la densidad de probabilidad de dichas variables.

En la Figura 4 se muestra el comportamiento para la pureza del acetileno generado donde la pureza varía en el intervalo del 97,2 al 98,5%, lo que corresponde con los parámetros de diseño de la planta. Al igual que para la masa de gases generados, la distribución de probabilidad de la pureza no varía con el gasto de agua.

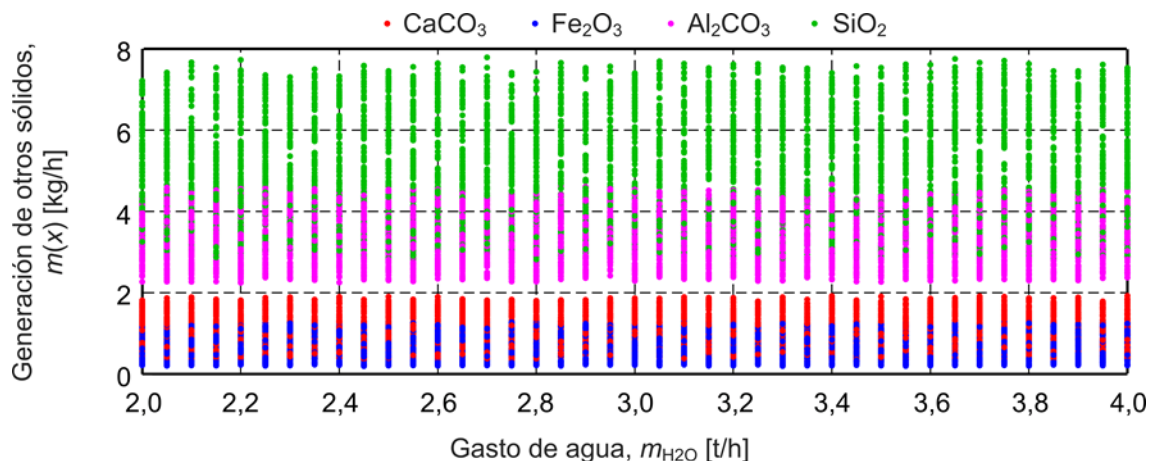
Figura 4 Valores simulados de hidróxido de calcio generado



En ambos casos, esto se debe a que el incremento del gasto de agua, por encima de las 2,0 t/h, es un exceso que no influye en las reacciones químicas sino, únicamente en el balance de energía.

Adicionalmente, también se simularon los valores de masa de sólidos residuales (Ca(OH)_2 , CaCO_2 , Fe_2O_3 , Al_2O_3 y SiO_2) que se generan (ver Figura. 5). Como se puede observar, también en estos casos la variabilidad de la masa de dichos sólidos no cambia con el incremento del gasto de agua.

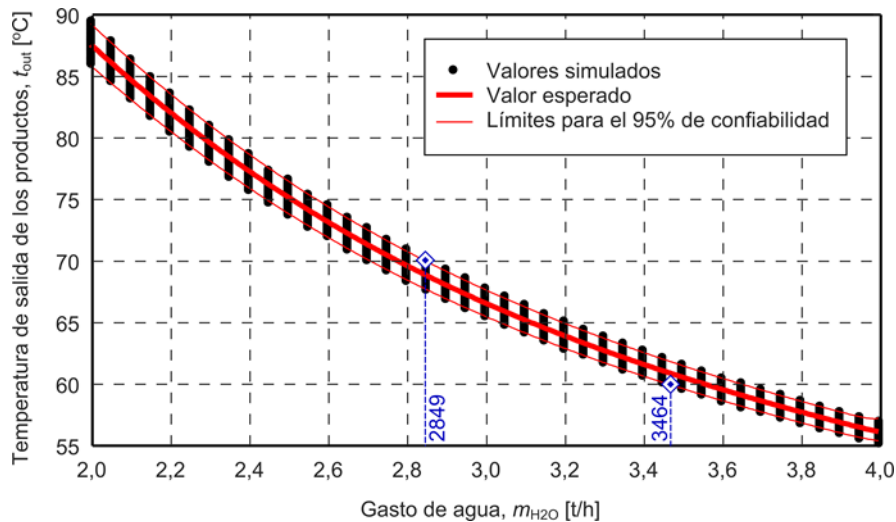
Figura 5 Valores simulados de otros sólidos generados



5.2. Resultado de la modelación con redes de densidad mixta

A partir de los valores predichos de temperatura de salida t_{out} (ver Fig. 2), se ajustó el modelo basado en la red de densidad mixta, donde mediante las funciones de densidad de probabilidad predichas por la red, se determinan tanto los valores esperados (valores por debajo de los cuales está el 50% de la probabilidad acumulada) como los límites para el 95% de confiabilidad. Como se puede observar (ver Figura 6), el valor esperado, disminuye según aumenta el valor del flujo de agua. También, el intervalo del 95% de confiabilidad disminuye según aumenta el flujo de agua. Ambos comportamientos están en perfecta concordancia con los datos simulados.

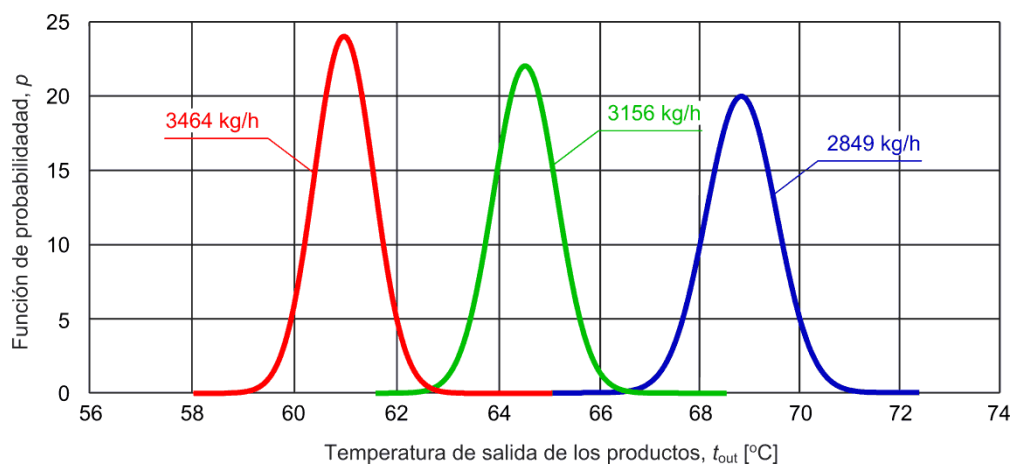
Figura 6 Valores esperados y límites de confiabilidad predichos por la red de densidad mixta



Si se desea conocer valores límites del flujo de agua, que garantice que la temperatura de salida esté en el intervalo previsto por las especificaciones técnicas del reactor (60 a 70 °C), se deben seleccionar, respectivamente, los valores de los límites superior e inferior del intervalo de confiabilidad (2 849 y 3 464 kg/h, respectivamente).

Nótese que el intervalo que se obtendría, de haber trabajado únicamente con el valor esperado, es mayor, pero que, para los valores de sus extremos, la confiabilidad de obtener valores de temperatura en el intervalo especificado, sería solo del 50%. Lo anterior evidencia la ventaja del uso del enfoque propuesto, al trabajar con distribuciones de probabilidad, en lugar de hacerlo solo con los valores esperados.

Figura. 7 Probabilidades de distribución para diferentes valores de temperatura de salida



En la Figura 7 se muestran las distribuciones de probabilidad para los dos valores extremos (2 849 y 3 464 kg/h) y para el punto medio (3 156 kg/h) del intervalo admisible de flujo de agua. A medida que aumenta el flujo de agua disminuye la temperatura y disminuye el ancho de las campanas, o sea, no solo disminuye la temperatura sino también la dispersión de ella en función de la variabilidad de los datos.

Como se puede ver, la campana es más ancha y baja según aumentan los valores de la temperatura (y disminuye el flujo de agua), lo que indica que aumenta el intervalo de confiabilidad.

6 Consideraciones finales

Como resultado de la investigación se tiene que, la combinación del método de Monte Carlo y de las redes de densidad mixta, permitió la modelación de un reactor húmedo de acetileno, prediciendo su comportamiento ante la variabilidad aleatoria de la composición química de la materia prima y la variación controlada del régimen de operación, dado por el consumo de agua. Los valores calculados, a partir de los balances de masa y energía, para la temperatura de salida de los productos y para la pureza del acetileno generado, están en los rangos de diseño para ambos parámetros, lo que constituye una validación preliminar del enfoque propuesto. El modelo de predicción de la función de densidad de probabilidad predichas por la red de densidad mixta, permitió determinar el rango de gasto de agua que garantiza que, con un 95% de confiabilidad, la temperatura de salida de los productos esté en el intervalo de 60 a 70 °C, establecido para diseño de la planta para esta variable, lo que constituye una herramienta de apoyo a la operación de la planta, con potencial para ser extendida a la optimización de su sostenibilidad y de su seguridad y a otras plantas del país.

Referencias

- AVILA, D., QUIZA, R., & MARICHAL, G. N. (2022). An approach for evaluating the stochastic behaviour of wave energy converters. *Applied Ocean Research*, 129, 103372. <https://doi.org/10.1016/j.apor.2022.103372>
- BRUSAFERRI, A., MATTEUCCI, M., SPINELLI, S., & VITALI, A. (2022). Probabilistic electric load forecasting through Bayesian Mixture Density Networks. *Applied Energy*, 309, 118341.
- BRUSAFERRI, A., MATTEUCCI, M., SPINELLI, S., & VITALI, A., *Probabilistic electric load forecasting through Bayesian Mixture Density Networks*. *Applied Energy*, 309, 118341. (2022). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2021.118341>
- DA SILVA, A. F., MARINS, F. A. S., DA SILVA OLIVEIRA, J. B., & DIAS, E. X., *Multi-objective optimization and finite element method combined with optimization via Monte Carlo simulation in a stamping process under uncertainty*. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 117(1), 305-327. (2021). DOI: <https://doi.org/10.1007/s00170-021-07644-9>
- GUO, J., & LV, Z., *Application of Digital Twins in multiple fields*. *Multimedia Tools and Applications*, 81(19), 26941-26967. (2022). DOI: <https://doi.org/10.1007/s11042-022-12536-5>
- HORCAS, J.-M., GALINDO, J. A., HERADIO, R., FERNANDEZ-AMOROS, D., & BENAVIDES, D. (2022). A Monte Carlo tree search conceptual framework for feature model analyses. *Journal of Systems and Software*, 111551. <https://doi.org/10.1016/j.jss.2022.111551>
- MARZOUK, M., AZAB, S., & METAWIE, M. (2018). BIM-based approach for optimizing life cycle costs of sustainable buildings. *Journal of Cleaner Production*, 188, 217-226. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2018.03.280>
- ORSULA, I., LEHOCKY, M., & STELTENPOHL, P., *Simulation of calcium acetylide and acetylene production*. *Acta Chimica Slovaca*, 8(2), 91-96 (2015). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.psep.2019.09.003>
- PANG, H., MENG, H., WANG, H., FAN, Y., NIE, Z., & JIN, Y. (2022). Lost circulation prediction based on machine learning. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 208, 109364. <https://doi.org/10.1016/j.petrol.2021.109364>
- POSTMA, J. I., FERRARI, A., & BÖTTGER, A. J. (2022). Monte Carlo simulations of surface segregation to discover new hydrogen separation membranes. *International Journal of Hydrogen Energy*. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.10.057>
- RIVERA, P. A., WOOLLAM, M., SIEGEL, A. P., & AGARWAL, M. (2021, 7-10 June 2021). Gaussian Process Regression and Monte Carlo Simulation to Determine VOC Biomarker Concentrations Via

Chemiresistive Gas Nanosensors. 2021 IEEE International Conference on Design & Test of Integrated Micro & Nano-Systems (DTS),
STEVENS, A., *Monte-Carlo simulation: An Introduction for engineers and scientists*. CRC Press. (2023). DOI: <https://doi.org/10.1201/9781003295235>
VANDERHORN, E., & MAHADEVAN, S., *Digital Twin: Generalization, characterization and implementation*. Decision Support Systems, 145, 113524. (2021). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.dss.2021.113524>
ZHU, H., DU, J., ZHOU, C., & LI, Y. (2022). A Review: Modeling of pH Probability Density Distribution in Zinc Hydrometallurgy Based on Gaussian Mixture Model. *JOM*, 74(3), 1237-1247. <https://doi.org/10.1007/s11837-021-05141-8>