

Curso de Postgrado de Actualización

# MODELADO, SIMULACIÓN Y SINTESIS DE PROCESOS

**S. Benz, A. Santa Cruz, N. Scenna**

**Centro de Aplicaciones Informáticas en el Modelado de  
Ingeniería**

**UTN - Facultad Regional Rosario**

**2008**

## BIBLIOGRAFIA

- Scenna N. J. y otros, *Modelado, Simulación y Optimización de Procesos*, UTN, 1998. 2º Edición [www.modeladoingenieria.edu.ar](http://www.modeladoingenieria.edu.ar)
- Biegler, L.T., Grossmann, I. E. and Westerberg, A.W., *Systematic Methods of chemical Process Design*, Prentice Hall, Inc., EEUU (1997).
- Douglas J., *Conceptual Design of Chemical Processes*, Mc Graw-Hill Co. (1988).
- Jimenez Gutierrez, A. *Diseño de Procesos en Ingeniería Química*, Ed. Reverté, España (2003)
- Linnhoff, B. y col. , *User Guide on Process Integration for the Efficient use of Energy*, The Institute of Chemical Engineers, London, 1982.
- O'Neill, P. V., *Advanced Engineering Mathematics*, 3ra. Ed., Wadsworth, Inc., USA (1991).
- Perry, J. H., *Chemical Engineers Handbook*, McGraw-Hill, New York (1994).
- Smith, R., *Chemical Process: Design and Integration*, Wiley (2005)
- Westerberg, A. W., H. P. Hutchinson, R. L. Motard y P. Winter, *Process Flowsheeting*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, England (1979).
- Apuntes de la Cátedra y Sitios recomendados con bibliografía básica y específica, disponibles en el sitio [www.modeladoingenieria.edu.ar](http://www.modeladoingenieria.edu.ar)

UTN - CAIIM - Facultad Regional Rosario

- Abril 2008

# Clase 1

- Diseño de procesos: Motivaciones
- Concepto de Síntesis de Procesos. Elementos
- Estado actual y tendencias del desarrollo de la síntesis de procesos
- Naturaleza del problema de síntesis

UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008

## Origen de las necesidades del Diseño de Procesos

- Necesidad de producir productos químicos nuevos y/o con características mejoradas para diversos usos, que se obtienen debido a:
  - Trabajos de investigación de químicos, bioquímicos, e ingenieros para satisfacer requerimientos de clientes.
  - Por accidente (ej: Teflón (tetrafluor-polietileno)).

UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008

- Disponibilidad de una nueva fuente de materias primas económicamente atractiva
- Los productos químicos surgen en un amplio espectro de industrias:

petroquímicos	petróleo
gases industriales	alimentos
fármacos	polímeros
recubrimientos	materiales electrónicos
productos bioquímicos	etc.

UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008

- La experticia del ingeniero propende la generación de:
  - Nuevos productos químicos.
  - Nuevos procedimientos para obtener productos químicos existentes.
- Particularmente, debido a la concientización pública, muchos proyectos de diseño implican el “rediseño”, o el “retrofitting”, de procesos químicos existentes para solucionar problemas ambientales y adherir a estándares de seguridad más estrictos.

UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008

## El Diseño de Procesos en relación a los Productos

Las prioridades y objetivos diferirán considerablemente de acuerdo a:

- Tipo de producto químico según el mercado de venta al que acceden.
- Ciclo de vida útil del producto– Patentes- Secreto
- Valor agregado del producto
- Escala de producción

UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008

## Clasificación de los productos químicos

- **Commodities o químicos a granel:** Éstos se producen en grandes volúmenes y se comercializan sobre la base de su composición, pureza y precio.

Ej: ácido sulfúrico,  $N_2$ ,  $O_2$ ,  $C_2H_4$  y  $Cl_2$ .

UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008

**De la química fina:** Éstos se producen en pequeñas volúmenes, con alto valor agregado y se comercializan sobre la base de su composición, pureza y precio.

Ej: óxido de Cl-propileno, (usado para producción de resinas epóxi, resinas de intercambio iónico, y otros productos), dimetil formamida (se usa por ej., como solvente, medio de reacción e intermedio en la producción de fármacos), ácido n-butírico (usado en aromatizantes, fragancias, etc); titanato de Ba en polvo (usado para la fabricación de capacitores electrónicos).

UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008

➤ **Especialidades o químicos funcionales:** Éstos se producen en volúmenes pequeños con un alto valor agregado y se comercializan debido a su efecto o función, más que su composición química. Ej: fármacos, pesticidas, desecadores, perfumes, aromatizantes, saborizantes, etc.

UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008

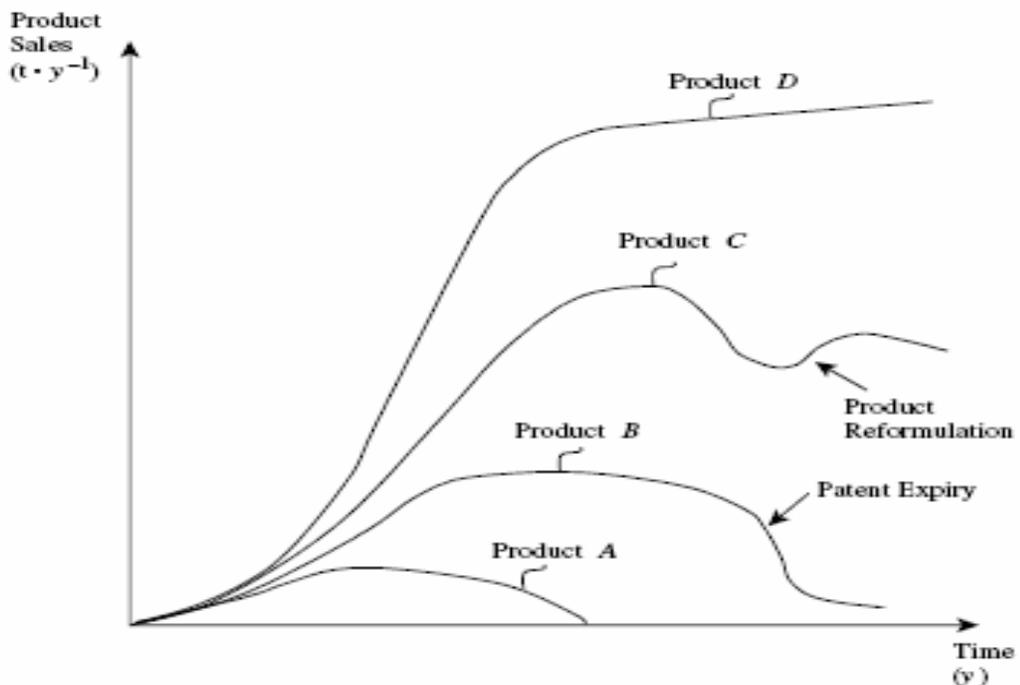
## Los Productos se comercializan sobre la base ....

- De su composición: **INDIFERENCIADOS**
- De su función: **DIFERENCIADOS**

### Indiferenciados vs Diferenciados..... Valor relativo

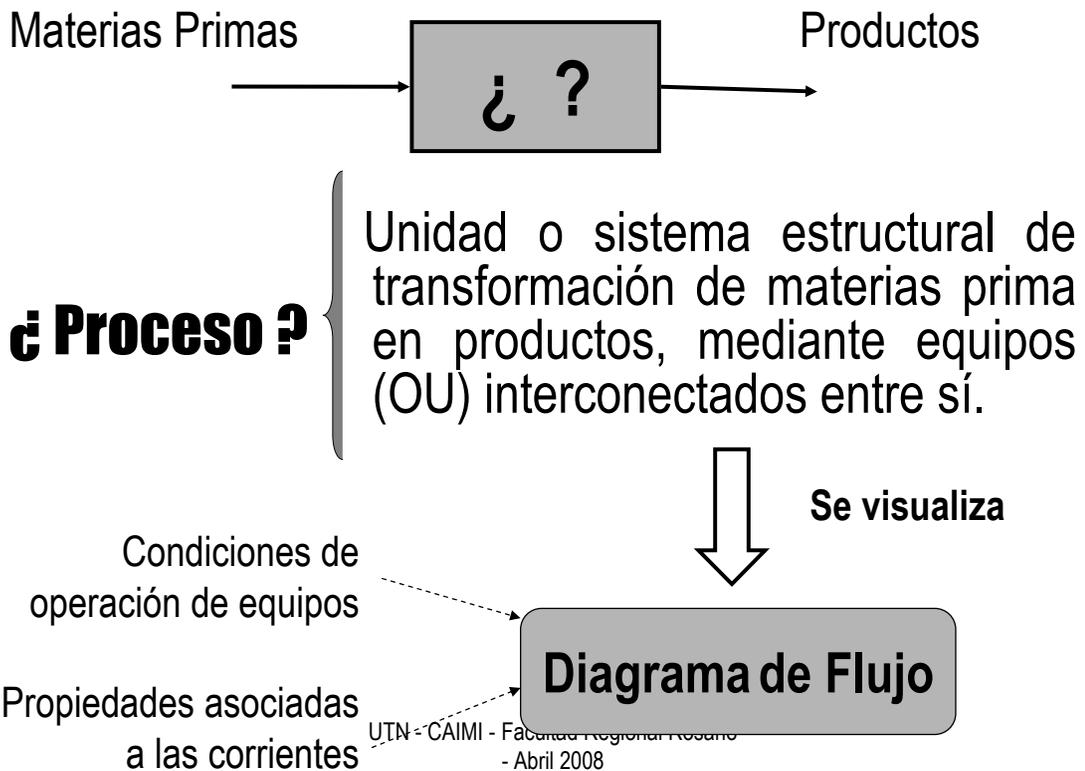
	Producto Indiferenciado	Producto Diferenciado
Commodities	Tienen especificaciones de pureza. Ejemplo 1: ácido acrílico al 99,9 % pureza).	Satisfacen además especificación s/ impurezas máximas (ppm < VL), que pudiesen interferir con alguna reacción en su uso. Pueden establecer alguna diferenciación
Especialidades	El ácido acetil salicílico, puede ser indiferenciado y la diferencia entre fabricantes se debería al precio y estrategias de distribución. UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario - Abril 2008	<b>En general se consideran Diferenciados</b>

## Ciclo de vida útil de un producto



UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008

# Elementos en el Diseño de Procesos



## a- La elección de un proceso:

El producto puede obtenerse por distintas rutas, correspondientes a procesos diferentes.

## b- La elección de la capacidad:

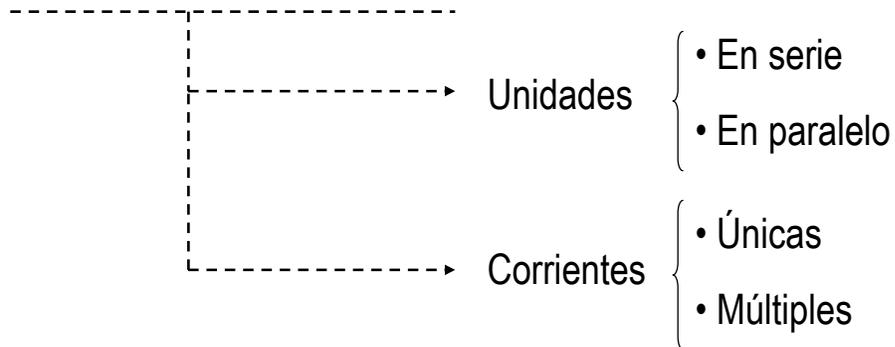
La capacidad de producción de la planta varia según la fuente de información o sea en el Valor Base:

- Se adecua a las ventas esperadas del producto.
- Se basa en las dimensiones estándar de los equipos

### c- La elección de la topografía:

Interconexión de varias unidades en una red. -----> **Proceso total**

Decidir en que orden se realizan



UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008

### d- La elección de las condiciones del proceso:

Elegido el proceso, la capacidad de planta y la red del proceso, se optimizan las condiciones de operación:

Temperaturas / Presiones / Tiempos de residencia / % de recuperación / Etc.

### e- Las siguientes etapas involucradas son:

- La selección inicial de equipos
- Política de reemplazo
- Control
- Seguridad
- Lay out

UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008

# Actividades en la Tarea de Diseño de una Planta

## 1- Etapa de investigación:

Búsqueda de:

- Nuevos productos
- Nuevas rutas hacia productos existentes

## 2- Etapa de desarrollo:

Estudio preliminar que permite concluir que el producto es económicamente viable (rentable)

Obs: Si no está adecuadamente organizado puede converger a flow sheet que revelen ignorancia de la realidad económica

## 3- Etapa de diseño conceptual:

Aquí se establecen las relaciones entre los equipos, las condiciones básicas de operación de los mismos, los servicios auxiliares, entre otros aspectos. Básicamente se consolida una estructura (flowsheet) y se resuelven los balances de materia, energía y cantidad de movimiento (presiones).

UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008

## 4- Etapa de ingeniería básica:

Dimensionamiento de los equipos tal que tengan la capacidad y superficies adecuadas para realizar las funciones del proceso

También se define el sistema básico de control, y el piping asociado (diagramas de cañerías e instrumentos o P+I).

## 5- Etapa de ingeniería de detalle:

Una vez definido el proceso conceptual, y superada la etapa de ingeniería básica, se desarrolla el detalle de todo el proceso, los detalles constructivos de los equipos, las cañerías, el layout, etc.

## 6- Construcción:

UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008

## Definiciones de “Síntesis de Procesos”

- Involucra la generación de alternativas en todas las etapas de la ingeniería de procesos dentro del proceso innovativo. [Sirola, 1972]
- Determinar y generar el conjunto de alternativas estructurales posibles capaces de cumplir objetivos especificados. [Umeda, 1980 / Stephanopoulos, 1983].
- SPC es un actividad discreta de toma de decisiones para conjeturar (i) cuál de las muchas equipos y compuestos debieran usarse, (ii) cómo deberían interconectarse [Westerberg (1980)].
- Especificar transformaciones químicas y físicas y la selección de los equipos y sus interconexiones que permiten implementarlas, para convertir las materias primas disponibles en determinados productos finales en escala de producción industrial [Morari, 1983]

Sin considerar el tipo de definición, las tareas de diseño son comunes a todas las metodologías de diseño

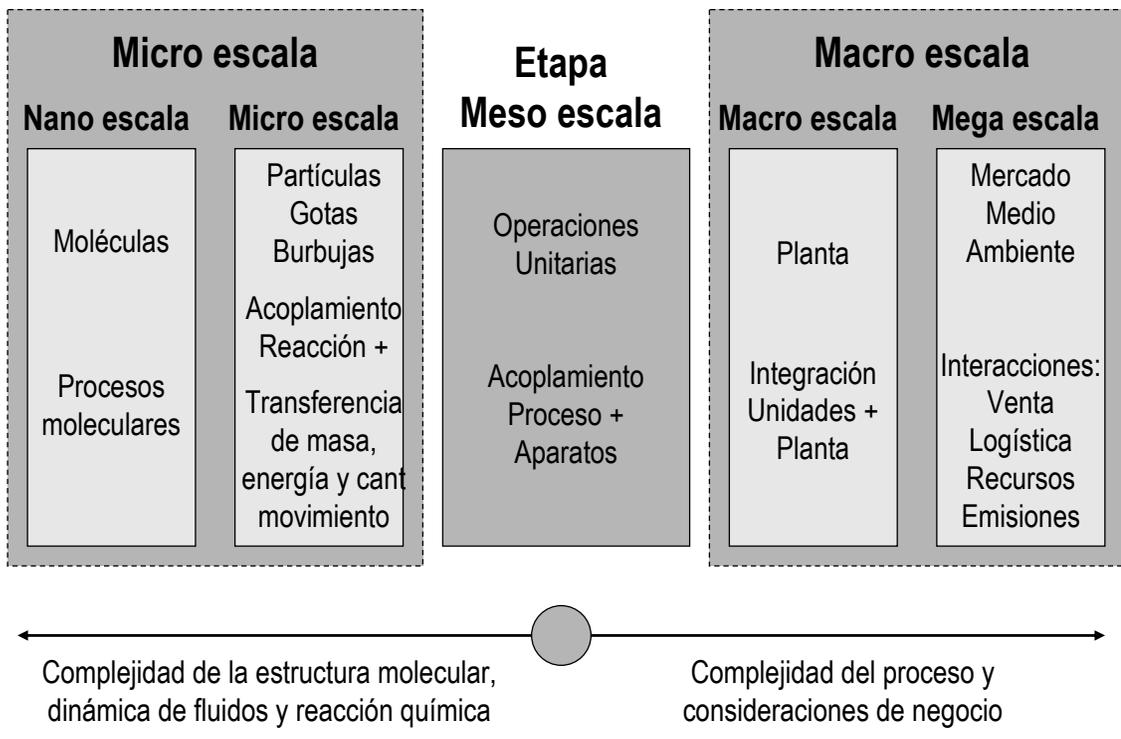
UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008

## Niveles de Análisis en el Desarrollo de la Síntesis de Proceso Conceptual (Amundson, 1988)

- Meso escala (1960-1980):
  - Concepto de Operación Unitaria
  - Acoplamiento: Proceso-Equipos
- Macro Escala (1990's):
  - Integración,
  - Interacciones con el mercado y la logística
- Micro escala (1995):
  - Partículas, acoplamiento reacc+energía+transp
  - Diseño molecular

UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008

**Niveles de Análisis en el Desarrollo de la Síntesis de Proceso**



UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008



## Posición del SPC en el Ciclo de Vida de Proyectos Industriales

Etapas Ciclo/Vida	Involucra:
1) Síntesis Camino de Reacción	a) Desarrollo de los pasos/etapas de síntesis química b) Selección de los mejores pasos de síntesis.
2) SPC	a) Función Integración b) Selección heurística de Operaciones Unitarias y estructura de recicló c) Optimización de superestructura
3) Desarrollo del Proceso	a) Experimentos por cinética, datos físicos. b) Test de reacción y separación. c) Planta piloto. d) Ensayos de escalado
4) Ingeniería de proceso	a) Definición de todos los equipos y control para evaluación económica exacta.
5) Integración en sitio	a) Conexión de flujos de masa y energía con otros procesos y servicios.
6) Ingeniería de detalle	a) Definición de todos los detalles de proceso necesarios para compra y construcción
7) Operación de la planta	-----
8) Fin de vida	a) Encontrar un segundo uso

- Abril 2008

## Motivaciones para el desarrollo de Proyectos de Síntesis de Procesos

- Desarrollo de procesos
- Optimización de la cadena de suministros
- Desarrollo de catalizadores
- Estrategia de IP
- Planificación de I&D
- Nuevos productos

UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008

## Retos para la SPC o Limitaciones

- Recursos limitados
- Definición de lo entregable
- Cooperación interdisciplinaria
- Manejo de la información....

UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008

## Los tres problemas de la SPC

- El problema de la **Representación**: ¿Es posible desarrollar una representación que sea lo suficientemente rica (en información) que permita incluir todas las alternativas y suficientemente “inteligente” para ignorar automáticamente opciones ridículas?
- El problema de la **Evaluación**: ¿Es posible evaluar en forma efectiva las alternativas de manera de poder compararlas?
- El problema de la **Estrategia**: ¿Puede desarrollarse una estrategia que localice las mejores alternativas sin enumerar total y exhaustivamente todas las opciones

UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008

Considerando los desarrollos recientes y las investigaciones emergentes en SPC existen nuevos problemas

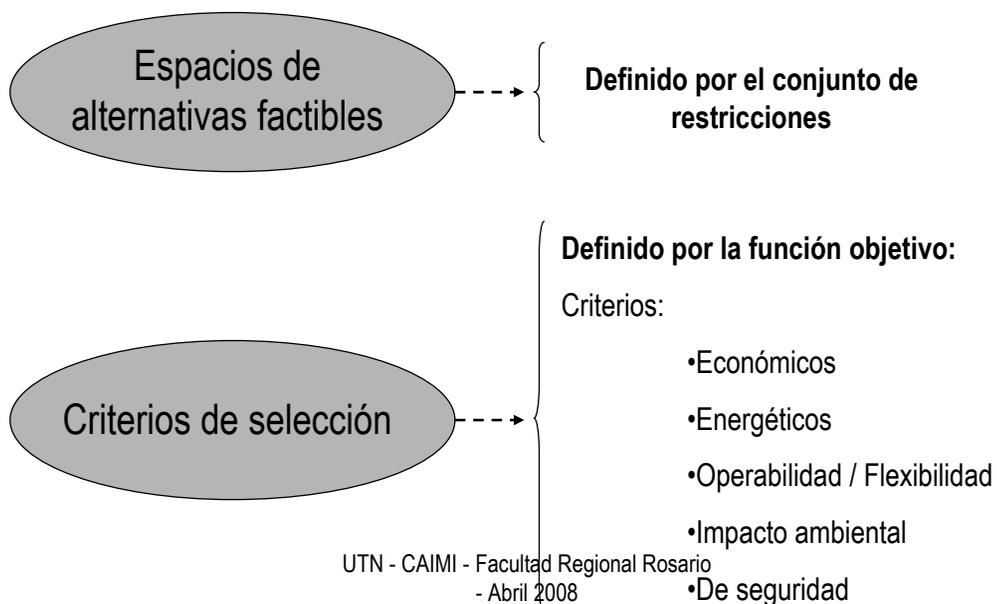
- ¿Puede desarrollarse una representación que permita la generación de nuevas unidades y caminos de proceso?
- ¿Pueden diferentes alternativas ser efectivamente evaluadas usando el concepto de ciclo de vida y requerimientos multiobjetivos?
- ¿Puede una estrategia ser desarrollada para que rápidamente ubique las mejores e innovadoras alternativas sin enumerar totalmente todas las opciones?

Las soluciones efectivas dependen de la naturaleza de las metas de diseño

UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008

## La tarea de síntesis

Seleccionar dentro de un **espacio de posibilidades** aquellas **alternativas** que en base a algún **criterio de selección** predeterminado, satisfagan los **objetivos deseados**



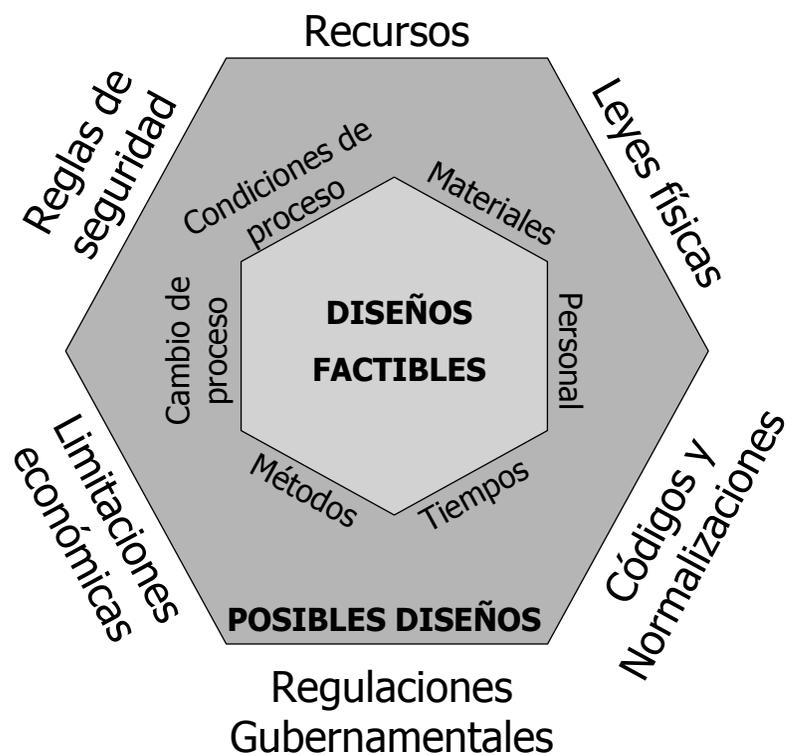
UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008

# Restricciones al diseño

Cuando se consideran posibles caminos para llegar al objetivo, se deberán considerar muchos factores, los cuales delimitarán el número de posibles soluciones, pero, raramente habrá solo una solución al problema (solo un diseño). Posiblemente se deberán considerar varios caminos alternativos para llegar al objetivo, varios diseños serán buenos, dependiendo de la naturaleza de las restricciones.

UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008

## Restricciones al diseño

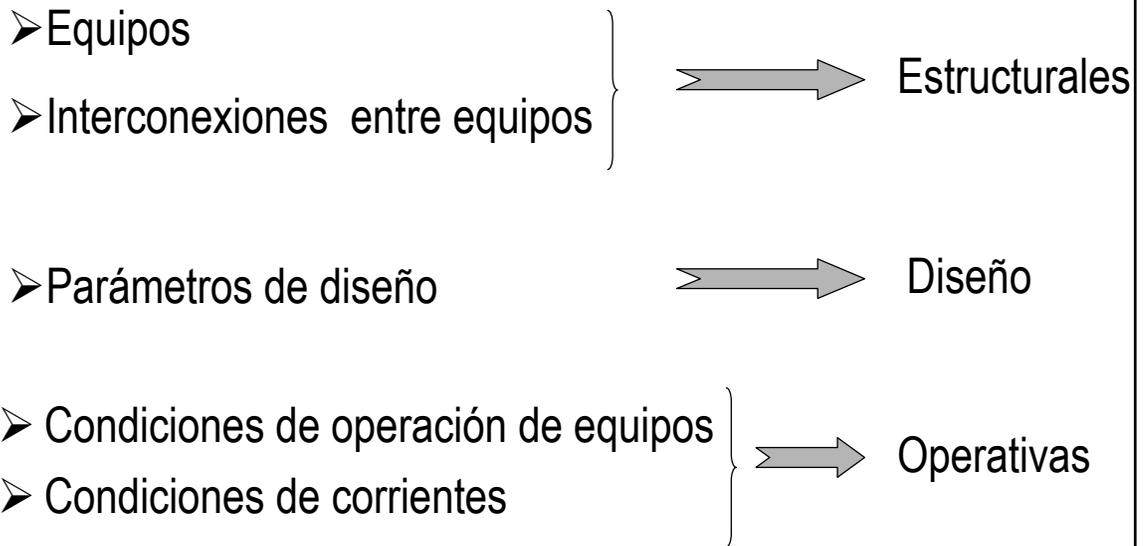


UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008

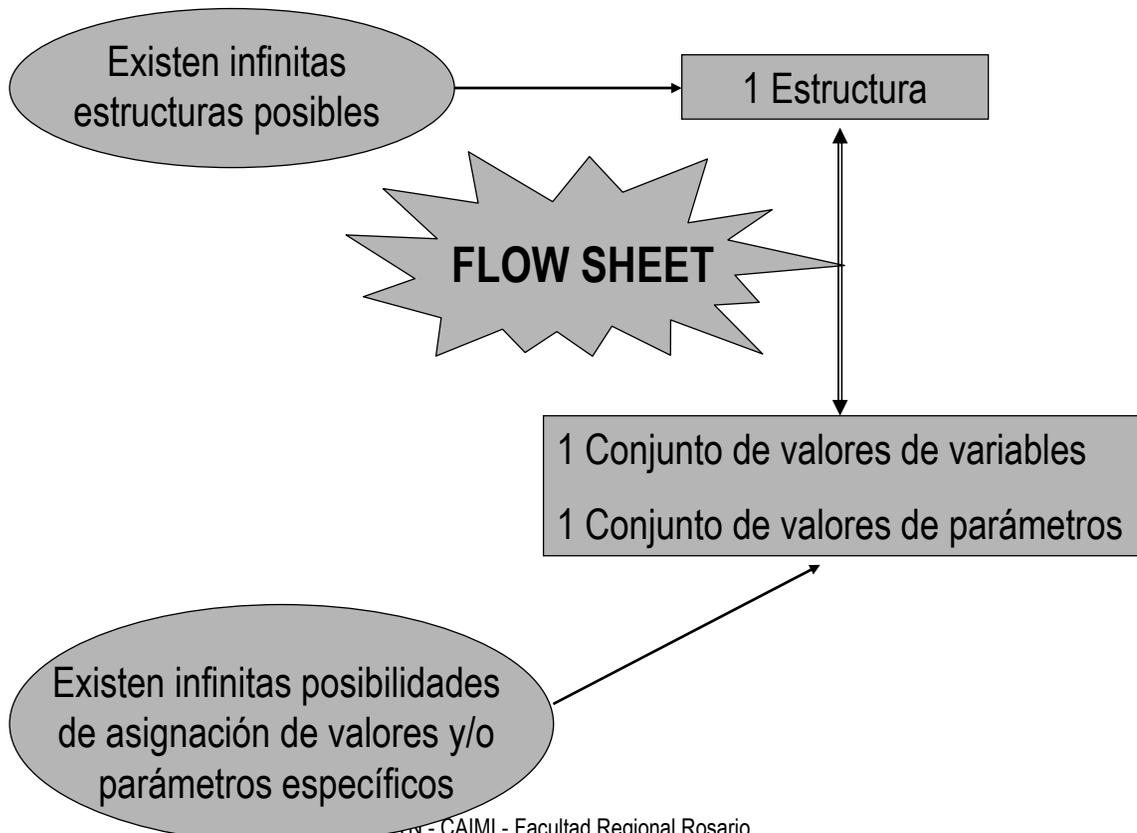
## ¿ Como se describe el Diagrama de Flujo ?

Y ...

## ¿Que tipo de variables están involucradas?



UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008



UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008

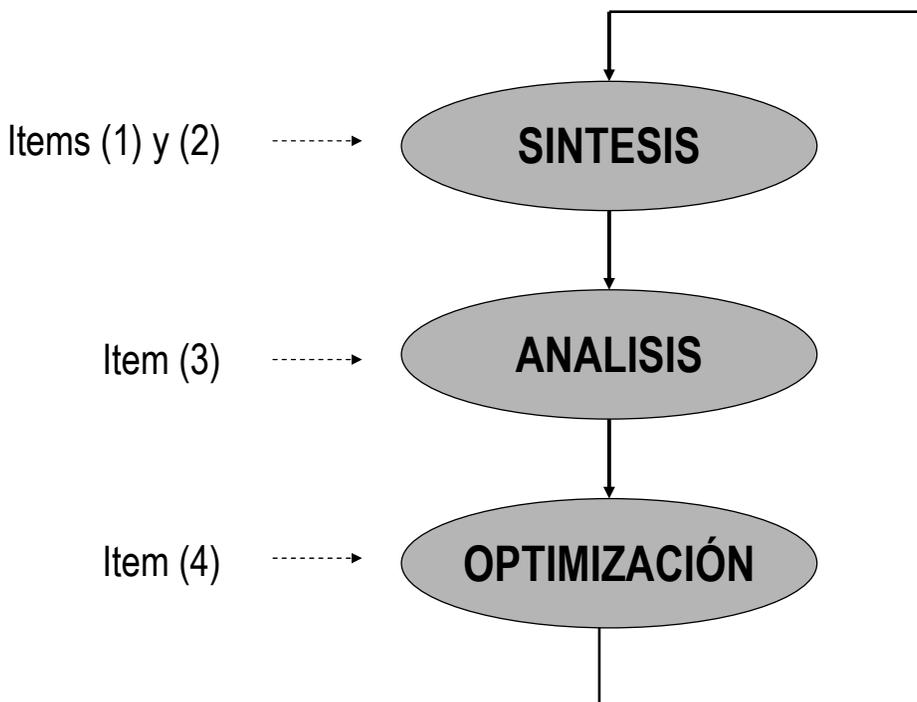
# Características de la tarea de diseño

Dada la magnitud y complejidad del problema de diseño, las actividades secuenciales aconsejadas son:

1. Definición del “problema de diseño” (región factible)
2. Establecimiento de criterios de selección (Función objetivo)
3. Generación del conjunto de alternativas estructurales posibles
4. Reducción del espacio de alternativas

UTN - CAIWI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008

Conclusión de la tarea de diseño

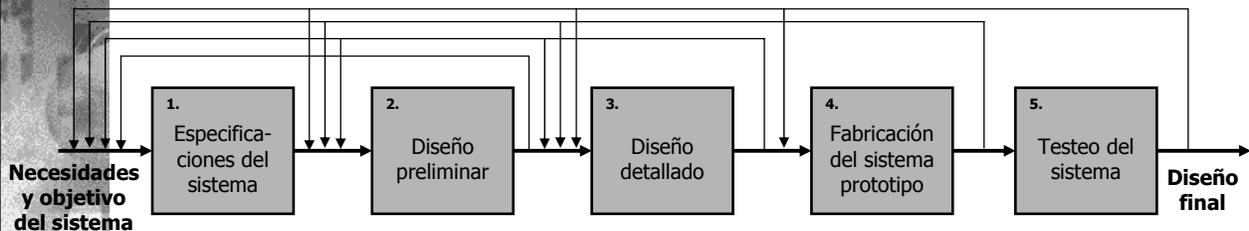


**Lazo “síntesis – análisis – optimización”**

UTN - CAIWI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008

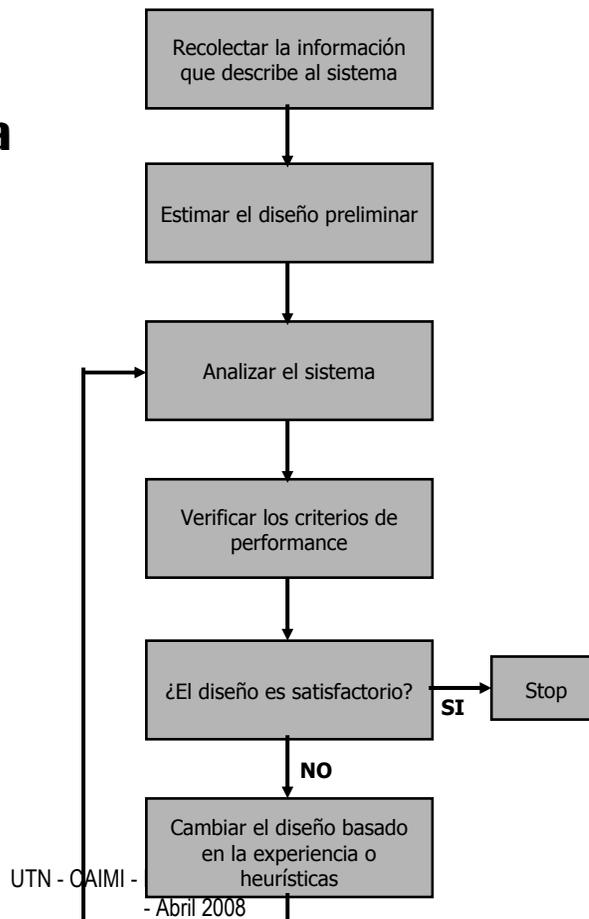
# Metodología iterativa de diseño

## Ciclo de vida, diseño real



UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008

## Metodología iterativa (diseño conceptual)



UTN - CAIMI -  
- Abril 2008

# Métodos de SPC

- Métodos basados en el conocimiento.
  - **Heurísticos:** diseños basados en el conocimiento de la experiencia y la práctica industrial.
  - **Evolucionarios:** El diseño comienza con un buen diseño caso-base, sobre el que se introducen cambios para mejorar el diseño en forma incremental.
  - **Termodinámicos.**
- Métodos de optimización (algorítmicos).

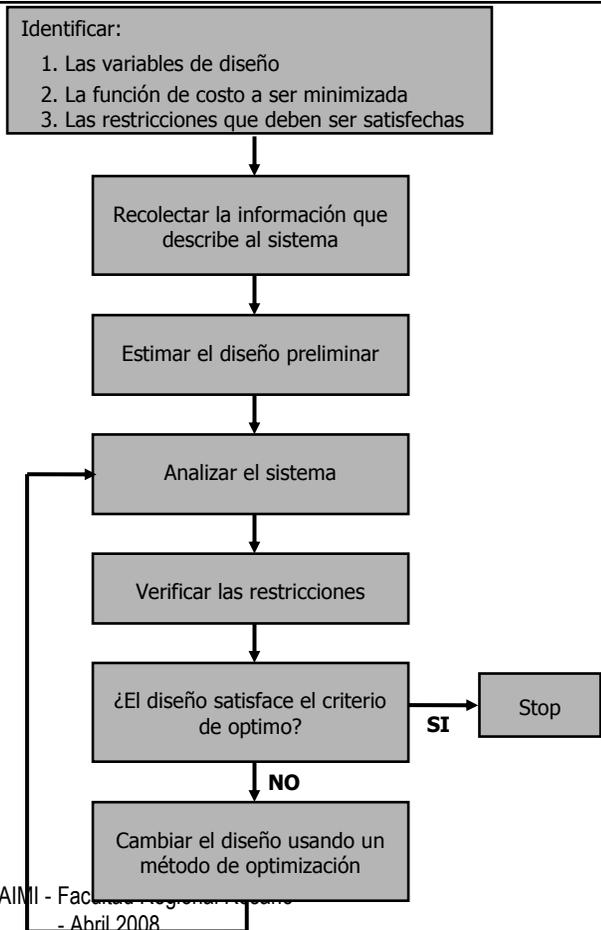
UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008

# Introducción al diseño óptimo

- Varios sistemas generalmente pueden lograr la misma tarea, y algunos son mejores que otros.
- Cualquier problema en el que ciertos parámetros necesiten ser determinados para satisfacer restricciones se puede formular como problema de **“diseño óptimo”**
- El diseño de procesos químicos puede ser formulado como un problema de optimización donde una (o varias) medida (s) de performance se optimiza (n) mientras se satisfacen las restricciones.

UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008

# Proceso de diseño optimo



UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008

## Diseño convencional vs diseño optimo

Diseño convencional	Diseño optimo
No esta definida una función objetivo que mida la performance del sistema	Fuerza al diseñador a identificar explícitamente un conjunto de variables del diseño, una función de costo a ser minimizada (una función de performance que se optimizará), y las funciones de restricciones del sistema (formulación matemática apropiada del problema de diseño)
No se calcula la información de tendencia tomar decisiones de diseño que mejoren el sistema	Usa información de tendencia para tomar decisiones
La mayoría de las decisiones se toman basadas en la experiencia de los diseñadores y en la intuición	Ayudado por la interacción del diseñador

UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008

## Formulación de problemas de diseño óptimo

- La formulación de un problema de diseño óptimo involucra la transcripción de una descripción verbal de un problema en un planteo matemático bien definido.
- La formulación correcta de un problema toma un 50% del total del esfuerzo requerido para resolverlo

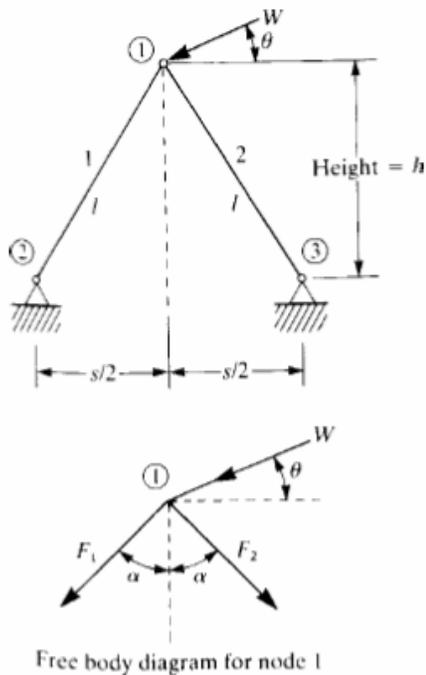
UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008

## Formulación del problema

- Paso 1: proyecto / planteo del problema
  - ¿Están claras las metas del proyecto?
- Paso 2: Recolección de datos e información
  - ¿Esta toda la información disponible para resolver el problema?
- Paso 3: identificación / definición de las variables de diseño
  - ¿Cuáles son estas variables que describen el sistema?
  - ¿Cómo los identifico?
- Paso 4: identificación de un criterio (función objetivo) a ser optimizado
  - ¿Cómo sé que mi diseño es el mejor? (para juzgar si es o no un diseño dado mejor que otros)
- Paso 5: identificación de las restricciones
  - ¿Qué restricciones tengo en mi diseño (el sistema)?

UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008

## Ejemplo: diseño de una estructura de dos barras



### DESCRIPCIÓN DEL PROBLEMA

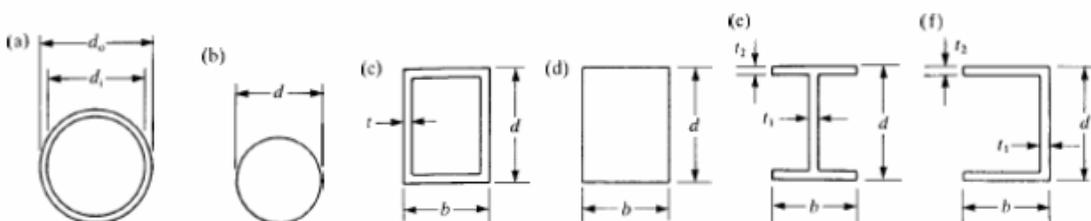
- Problema: diseñe un soporte del dos miembro para soportar una fuerza  $W$  sin que falle la estructura (dado el material)
- Objetivo: reduzca al mínimo la masa mientras que también de satisfagan ciertas limitaciones de fabricación y de espacio
- Datos: material del soporte,  $W, \sigma, \theta$

UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008

Ejemplo: diseño de una estructura de dos barras

## VARIABLES DE DISEÑO

- Primer paso en una formulación apropiada: identificar las variables de diseño (parámetros elegidos para describir el diseño de un sistema)
- Variables de diseño para la estructura de dos barras: forma de la sección transversal,  $h, s, d_{o1}, d_{i1}, d_{o2}, d_{i2}$  ?



UTN - CAIMI - Facultad Regional Rosario  
- Abril 2008



**MUCHAS GRACIAS**

**POR SU ATENCIÓN !!**