

Diseño, Simulación, Optimización y Seguridad de Procesos (DSOySP)

2024

Profesor: Dr. Nicolás J. Scenna
Profesor: Dr. Néstor H. Rodríguez
JTP: Dr. Juan I. Manassaldi

Características y Modo de dictado de la Asignatura

Ex Integración IV

- ***Extensa.***
- ***Integra conocimientos en múltiples Niveles***
- ***Involucra Clases teóricas, teórico-prácticas, trabajos prácticos, informes sobre los mismos, Clases de consultas, entre otras actividades.***
- ***Es importante el seguimiento continuo por parte del alumno***
- ***Existe abundante material de apoyo tanto de la cátedra como en la literatura abierta.***

Regularidad y Aprobación Directa

- *Regularidad*

- ✓ *Asistencia a clases.*

- ✓ *Aprobar los trabajos prácticos.*

- *Aprobación Directa*

- ✓ *Cumplir con los requisitos de regularidad.*

- ✓ *Aprobar los dos parciales (se puede acceder a un recuperatorio).*

DSOySP: Diseño (síntesis, simulación y optimización de procesos químicos)

Se orienta al estudio de herramientas utilizadas en la ingeniería de procesos, generadas mediante el modelado de procesos y la resolución de los modelos resultantes mediante métodos computacionales apropiados.

Síntesis, simulación y optimización aplicadas al diseño sistémico o a la operación de procesos químicos.

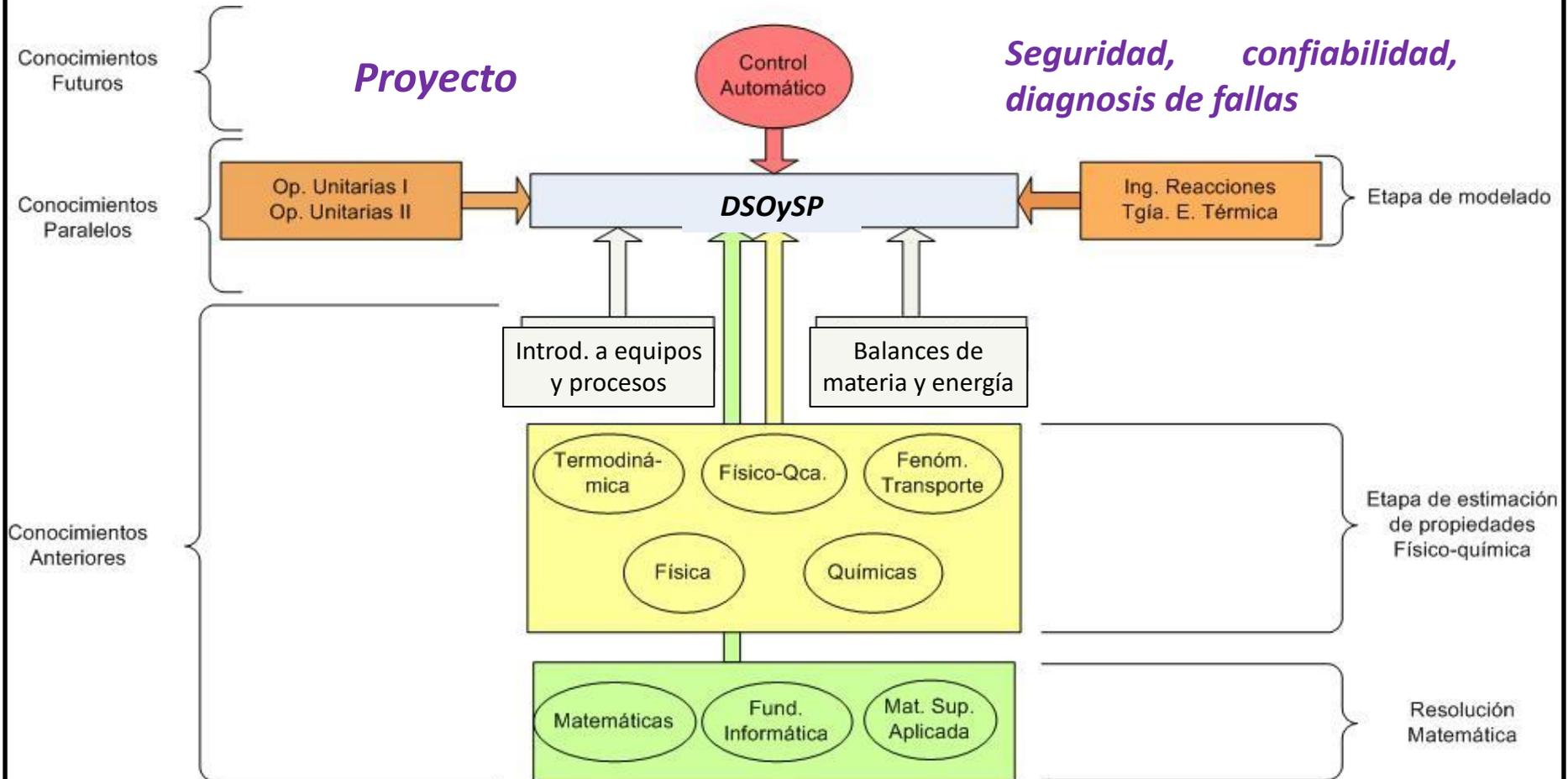
- ***Process System Engineering: Ingeniería Sistémica de Procesos. Enfoque actual que comprende:
Diseño y Operabilidad de Procesos.
Diseño Seguro. Operación Segura de los Procesos***
- ***Síntesis: métodos para optimizar la estructura óptima (flowsheet-diagrama de flujo) de un proceso***
- ***Simulación. Dados el diagrama de flujo, equipos, condiciones de operación, emular el comportamiento del proceso.***
- ***Optimización. De todas las alternativas posibles, hallar la óptima, definiendo la función objetivo.***

Importancia de la materia en la carrera

- *Para el ejercicio de la profesión es indispensable el manejo de simuladores comerciales y herramientas de síntesis, simulación, optimización y diseño..y..*
- *el manejo de métodos para el análisis y la evaluación del riesgo. Su Aplicación a la seguridad y la Operabilidad de los Procesos.*
- *El principal OBJETIVO es adquirir habilidades suficientes para un adecuado planteo de problemas (diseño, optimización, simulación, control, supervisión/diagnosis de fallas, entre otros), confeccionar modelos y hallar sus soluciones mediante herramientas computacionales.*

Inserción de la materia en la carrera

Es necesario integrar los conocimientos adquiridos previamente y otros impartidos en paralelo con dictado de esta asignatura.

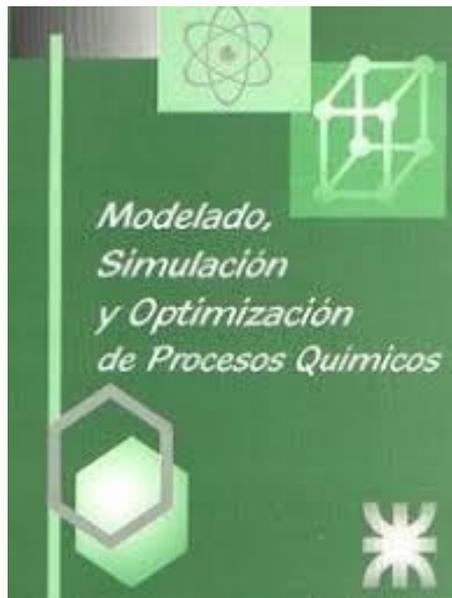


Contacto y Material de la Cátedra

- *Se dispone de un sitio web en el cual se acumula material de la cátedra en función de los años de dictado. El que se corresponde a la Asignatura Integración IV contiene el material correspondiente hasta el año 2023. En general, coincide con lo dictado en el primer cuatrimestre de esta nueva asignatura.*
- *Para ésta se dispone, dentro del mismo sitio web, de un apartado independiente.*

DSOySP

Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos



Inicio

CAIMI

Cátedras

Descargas

Links

Contacto

Libro

Apuntes

Software

Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos

DSOySP

- Contactos

Dr. Nicolas J. Scenna (nscenna@yahoo.com.ar)

Dr. Nestor H. Rodriguez (nestorhugo_r@yahoo.com)

Dr. Juan I. Manassaldi (jmanassaldi@frro.utn.edu.ar)

- Sitio Web

<https://www.modeladoeningenieria.edu.ar/>



Apuntes

- **Existe gran variedad de apuntes complementarios a los temas desarrollados en dicho libro, o respecto de las problemáticas abordadas en clase, los trabajos prácticos propuestos, entre otros.**
- **Nota: el Libro fundamentalmente versa sobre simulación de procesos. Los apuntes complementan al libro e introducen a la Ingeniería de la Confiabilidad. Se concentra el dictado en el 2do cte.**
- **Por ejemplo, con respecto a esta clase introductoria, en el sitio de la ex Integración IV, se aloja un apunte abordando conceptos y cuestiones fundamentales que profundizan/complementan esta introducción “Tecnología, Ingeniería Química e introducción a la Ingeniería de Procesos.**
- **En esta nueva asignatura, éste se modifica, incorporando temáticas en función de los nuevos temas a dictar (en particular análisis de riesgos y operabilidad de procesos). El mismo (y sus distintas partes y secciones), se alojan en el sitio de la asignatura DSOySP**

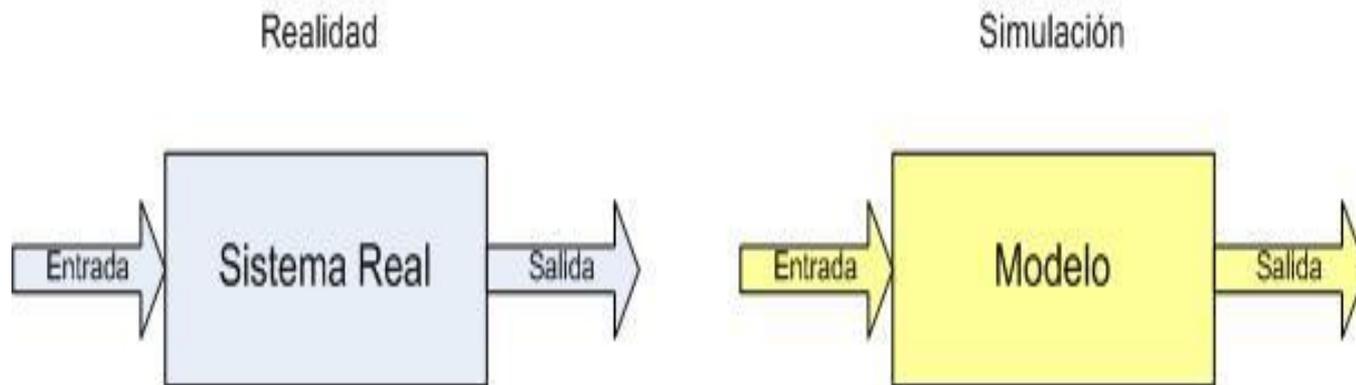
Introducción: ¿Simulación de Procesos?

- ***La simulación de procesos es una herramienta para el desarrollo, diseño y optimización de procesos en la industria, tales como química, petroquímica, farmacéutica, de producción de energía, procesamiento de gases, ambiental, alimentaria, etc.***
- ***Se basa en una representación/emulación de las operaciones unitarias básicas componentes de los procesos utilizando modelos matemáticos, que básicamente plantean los balances de materia y energía.***

Introducción a los conceptos básicos que se desarrollan en la asignatura

- ***Ingeniería de Procesos***
- ***Diseño de Procesos***
- ***Síntesis, Simulación y Optimización de Procesos***
- ***Operabilidad de Procesos***
- ***Diseño Seguro de Procesos***
- ***Operación segura de los Procesos***
- ***Análisis de Riesgos***

Simulación / Simuladores



- **Simulación de un proceso químico:**

Cálculo de balances de materia, energía y cantidad de movimiento de un proceso cuya estructura y datos preliminares de los equipos que lo componen, son conocidos. Ello, entre otras cosas, permite “estimar” dadas la estructura y el vector de entrada, la salida del proceso real

¿Modelado de procesos o de las Operaciones Unitarias?

Cada Operación Unitaria obviamente se diseña según un modelo adecuado, que “representa” su comportamiento en la realidad, con la calidad, eficacia, que permitan el conjunto de hipótesis adoptadas para confeccionar el modelo. No solo los balances, también la estimación de las propiedades fisicoquímicas/termodinámicas

Más Exactitud, más complejidad, mayor dificultad de resolución, los modelos son altamente no lineales, deben aplicarse métodos numéricos.

Un proceso es un arreglo, un conjunto de unidades conectadas según una disposición. Modelar un proceso requiere modelar todas las operaciones, y “considerar” el arreglo estructural que las une...

Introducción

El desarrollo de la simulación de procesos comenzó en la década de 1960, cuando desde las ciencias de la computación se desarrolló masivamente el hardware y software apropiado para integrar el notable conocimiento existente sobre el modelado para la estimación de propiedades termodinámicas (equilibrios de fase, equilibrios de reacción, cinética de reacción), el modelado de las operaciones unitarias específicas, y el cálculo numérico para resolver sistemas de ecuaciones de elevada dimensión.

Los simuladores tienen en común que son tan buenos como lo sean sus módulos fisicoquímicos (y los correspondientes parámetros) y los modelos de las operaciones unitarias disponibles.

Existen numerosos procesos industriales.

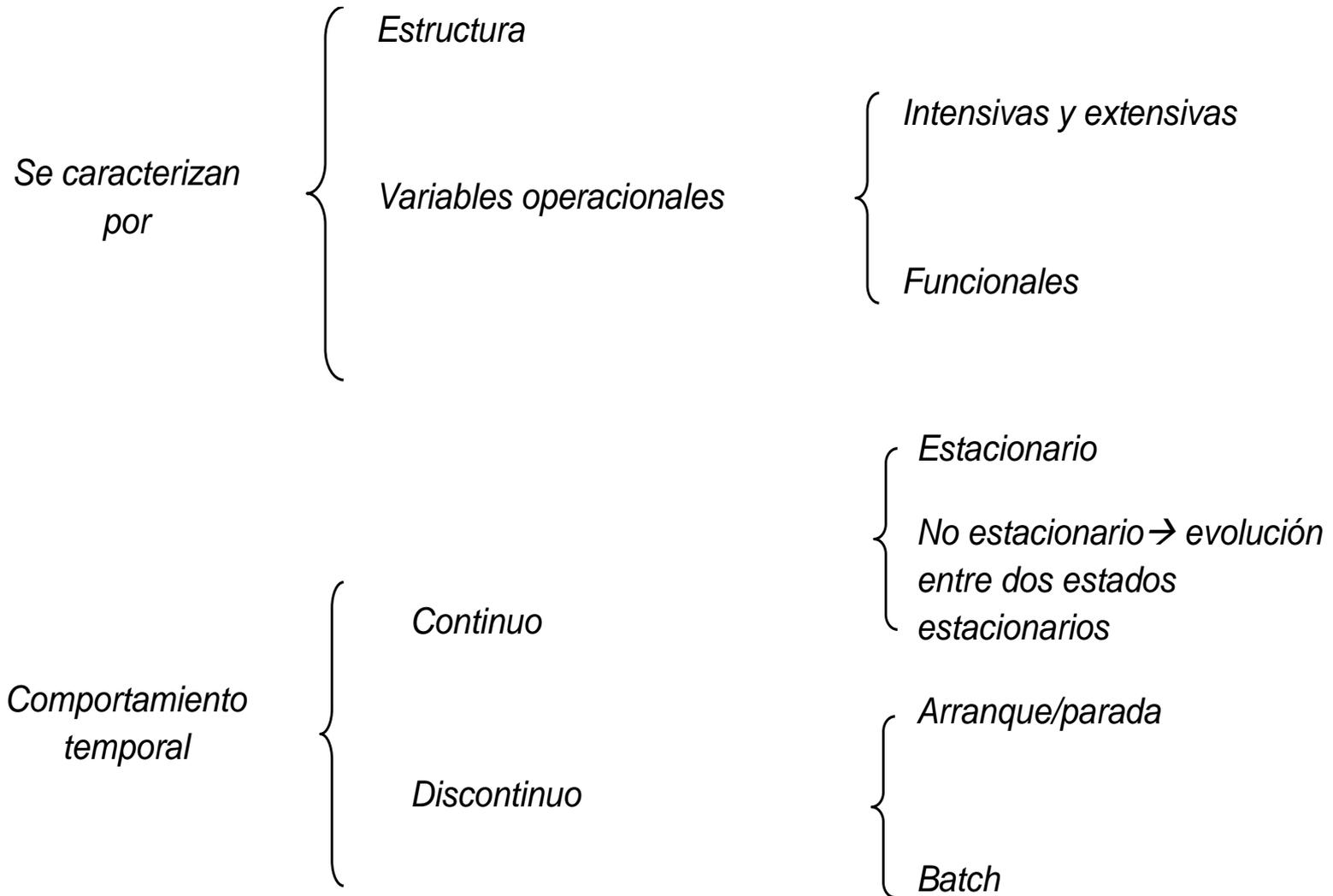
No todos pueden simularse fácilmente mediante simuladores comerciales.....

- ***Petroquímica,***
- ***Sistemas y Procesos de obtención de Energía***
- ***Procesos biotecnológicos, biogás, biocombustibles, entre otros***
- ***Bioreactores, Reactores complejos,***
- ***Procesos metalúrgicos, siderúrgicos,***
- ***Alimentos, Aceite por extracción /prensado ,***
Procesos de remediación ambiental, etc..
- ***Procesos con reacciones nucleares,***
- ***.....***

Tipo de Procesos y Modelos, Variables Asociadas

- ***La estructura (Flow del Proceso)***
- ***Procesos continuos y discontinuos (dinámica, procesos batch..)***
- ***Modelos de las Operaciones Unitarias / Equipos***
- ***Balances de Materia y Energía***

Características de los distintos tipos de procesos



Simulación de Proceso según sus características

Simulación de procesos continuos

Estacionario

Sistema de ecuaciones algebraicas

Dinámico

Modelo de sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias más algebraicas acopladas

Simulación de Procesos discontinuos

Simulación de eventos discretos más evoluciones semi-continuas

Modelos Híbridos: sistemas de ecuaciones diferenciales más ecuaciones algebraicas más operadores lógicos que describen el evento

Una visión Sistémica. Proceso químico. Definiciones

Conjunto de etapas o fases de procesamiento, dispuestas según una estructura que conecta diversos equipos, que permiten transformar materias primas en productos y subproductos, en general demandando servicios auxiliares, con el objetivo de agregar valor a los materiales de partida.

Proceso químico

Sistema formado por “dispositivos” (operaciones unitarias), interconectados en forma tal que producen cambios físicoquímicos, biológicos, electromagnéticos o de otra índole, a escala macro, micro o nano, para lograr productos o sistemas de interés.

Materias Primas e Insumos

Elementos de origen natural y/o artificial, que incorporados a un proceso, mediante transferencia de energía, de materia o cantidad de movimiento, son transformados en los productos deseados (con la producción eventual de distintos subproductos), efluentes, desechos....

“Nuevos” Requerimientos

- ✓ ***Sustentabilidad. Amigable con el ambiente (tratamiento de efluentes, evitar contaminación, operación correcta, Análisis de Ciclo de vida, etc.)***
- ✓ ***Calidad, Medio Ambiente y Seguridad***
- ✓ ***Confiabilidad. Análisis de Riesgos, Mantenimiento adecuado - Disponibilidad (diseño inherentemente seguro, diseño basado en riesgos)***
- ✓ ***Requerimientos normativos***
- ✓ ***Buena práctica ingenieril***
- ✓ ***.....***

Visión Sistémica de la Ingeniería de Procesos

- ***Estudio sistémico, integral de los procesos***
- ***Síntesis de procesos (variable estructural),***
- ***Simulación de Procesos (resolución de balances de materia y energía),***
- ***diseño óptimo de procesos (optimización)....***
- ***Diseño Inherentemente mas seguro, Diseño basado en Riesgos. Filosofías de Diseño que contemplan no superar valores “tolerables” de riesgo, a lo largo de todo el proceso o etapas del proyecto de diseño (desde la ingeniería básica o conceptual, hasta la de detalle)***

Ingeniería de Procesos

Diseño de Procesos Industriales

- *Ingeniería Conceptual*
- *Síntesis, Simulación, Diseño, Optimización*
- *Diseño inherentemente seguro*

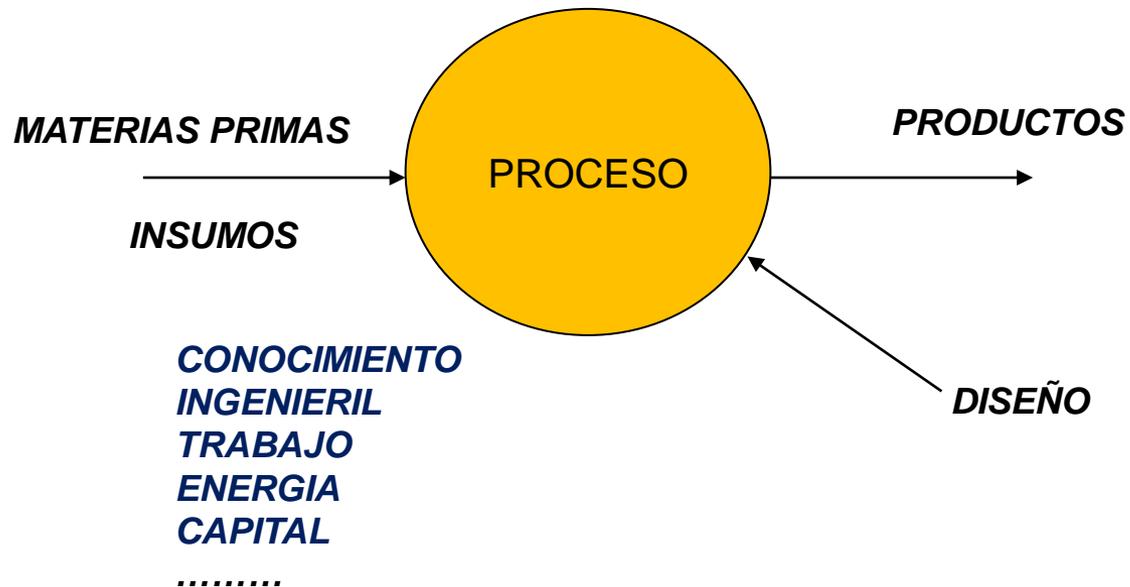
- *Ingeniería de Detalle*

Operación de Procesos

Arranque, parada, mantenimiento.

Supervisión del Proceso, Diagnóstico de Fallas...

¿Cómo presentamos esquemáticamente a un Proceso químico Industrial?



¿Cómo presentamos esquemáticamente a un Proceso químico Industrial?

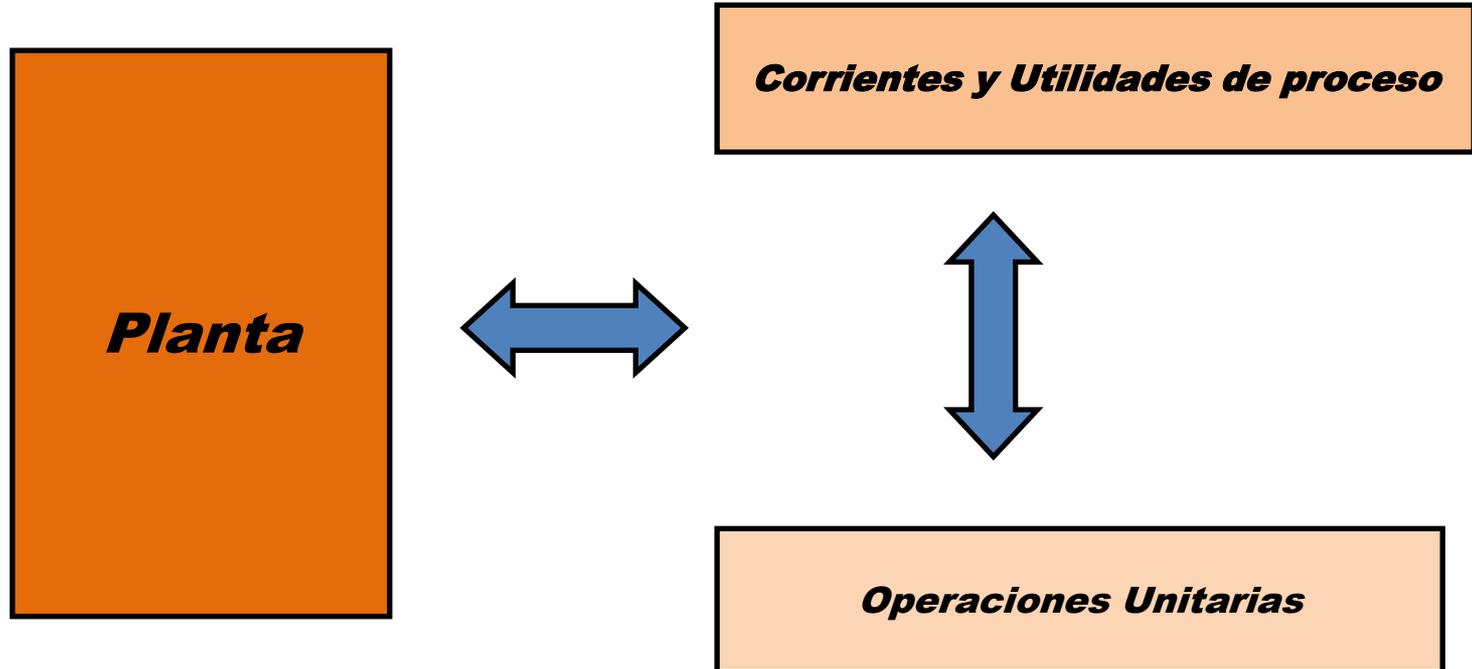
- *En primer lugar debemos diferenciar el tipo de procesos.*
- *Si bien existen características en común para todos ellos, también diferencias importantes. Por ejemplo, procesos continuos vs Batch*
- *Profundizaremos en la asignatura sobre los primeros, aunque analizaremos las diferencias entre los mismos*

Representación de los Procesos.

Detección y Caracterización de algunas características sistémicas de los procesos continuos

Análisis Sistémico Estructural de los Procesos Continuos.

Representación Genérica, Diagrama en Bloques



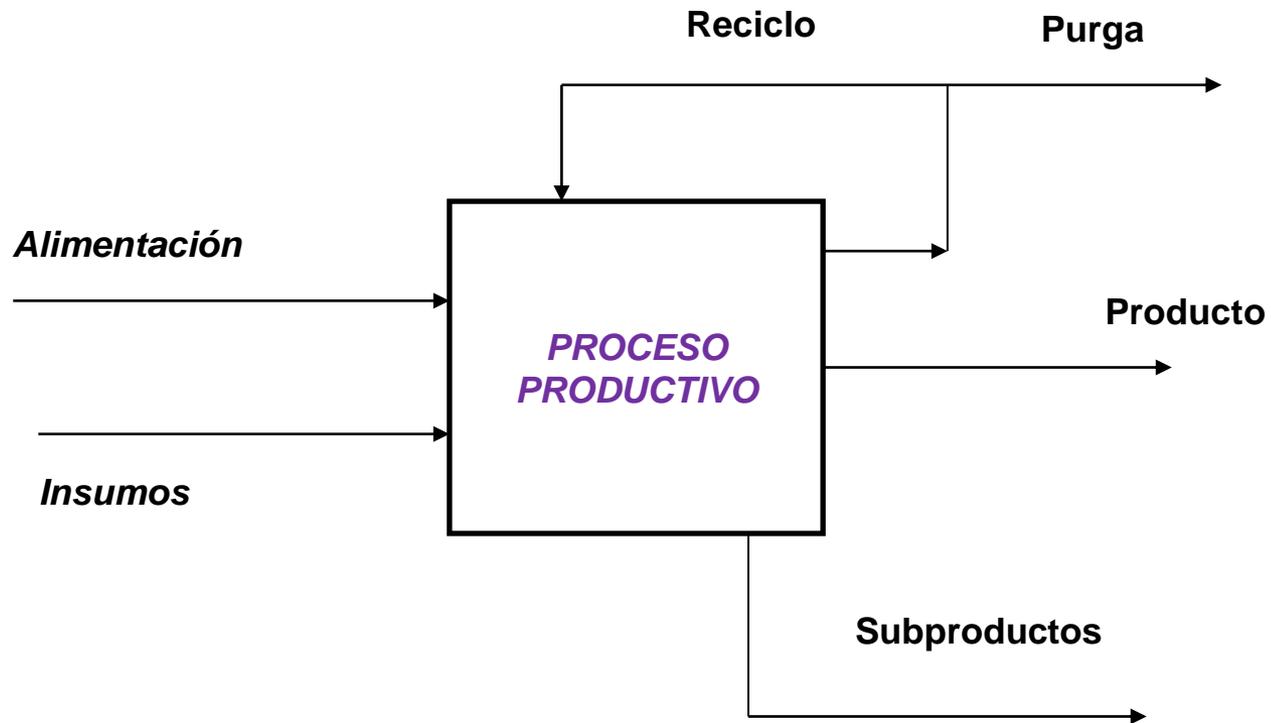
Procesos continuos

Diferenciamos los siguientes tipos de variables:

- Estructurales*
- Funcionales, Operacionales:*
 - intensivas (T, P)*
 - extensivas (M, V..)*

Procesos continuos

Estructura de Entrada y de Salida del Diagrama de Flujos



Procesos continuos

Etapas típicas (no las únicas) de un Proceso Químico

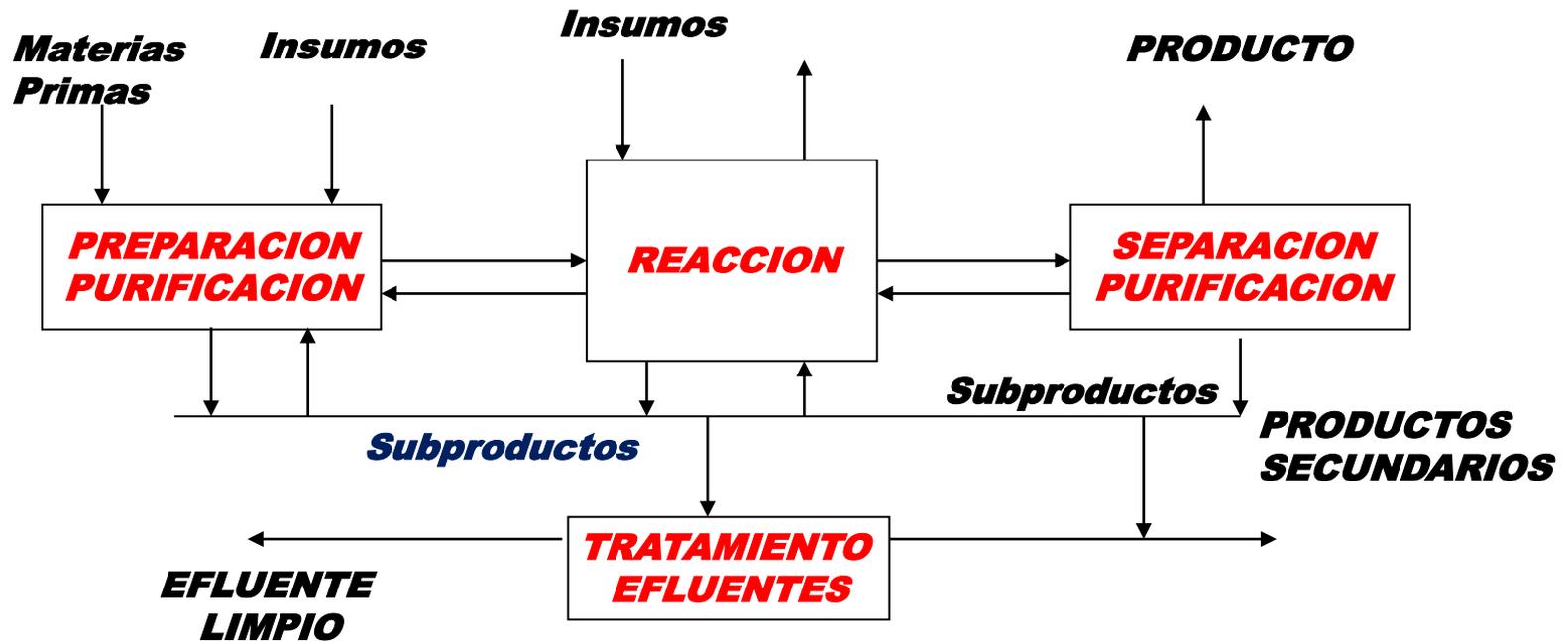


*Operaciones
/sistema
de
acondicionamiento*

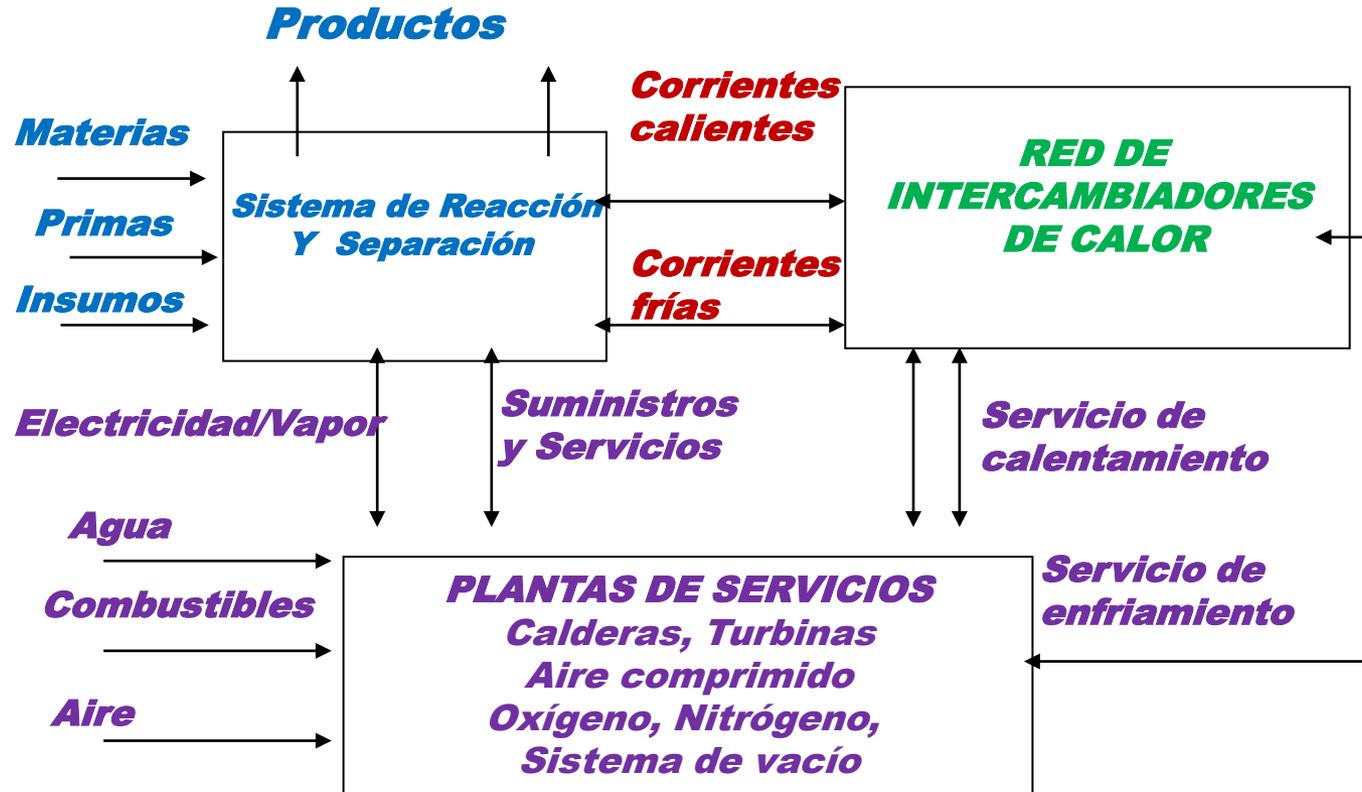
*Operaciones / sistema
de
Separación y purificación*

Procesos continuos

Síntesis o generación de la estructura



Sistema o Proceso Químico. Componentes



Sistema o Proceso Químico

Los Servicios, como los otros componentes o bloques, en general son muy numerosos y provienen de otras plantas, o bien se generan (otro proceso) en el complejo industrial:

- Agua (de proceso, refrigeración, calderas, limpieza, sanitaria, contra incendio)***
- Vapor (alta, media o baja presión)***
- Condensados***
- Fluidos térmicos (aceite, sales disueltas, otros)***

Sistema o Proceso Químico

Tipos de Servicios, según los procesos específicos

- ***Combustibles (carbón, fuel oil, gas oil, gas natural, energías limpias, otros)***
- ***Electricidad, generación propia, tomada de la línea o bien ambas coexisten***
- ***Aire comprimido (instrumentación, servicio) (seco, sin aceite)***
- ***Gases inertes (nitrógeno, etc.)***
- ***Efluentes (tratamiento “in situ”)***

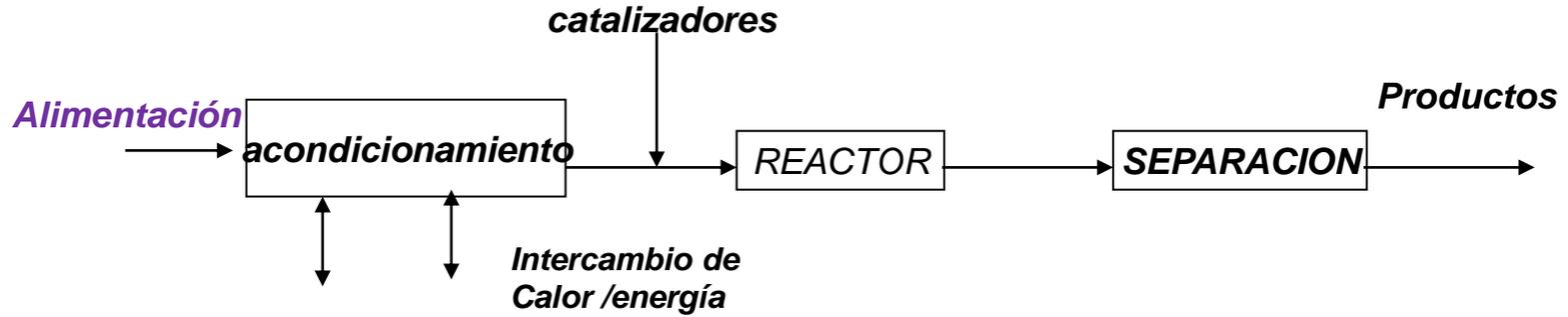
Diseño de Procesos Industriales

Tipos *de Procesos:*

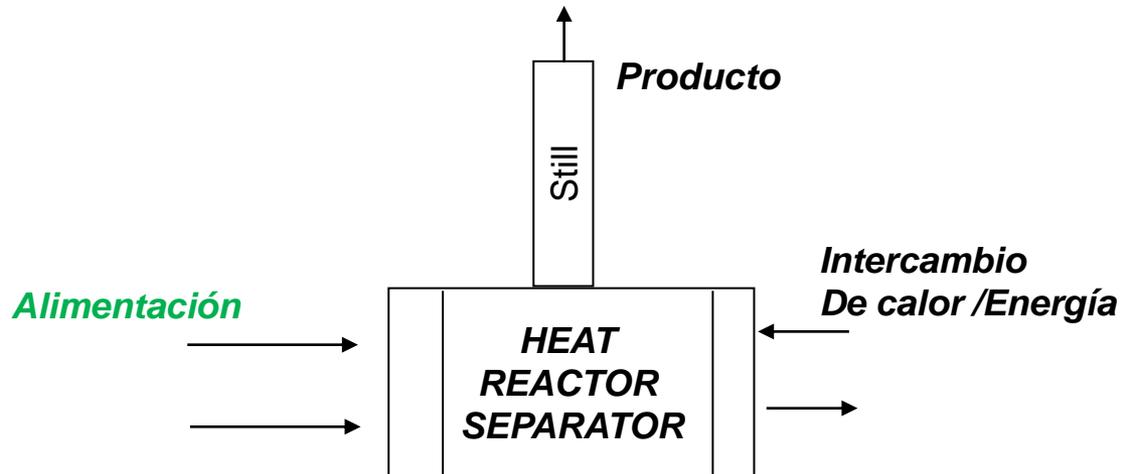
Continuo / Discontinuo (batch)

Diseño de Procesos Industriales

Procesos Continuos



Procesos Discontinuos/Batch



Diferencias entre Proceso continuo y Batch

- **Por sus naturalezas, se pueden destacar diferencias fundamentales tales como:**
- **Diagrama de procesos diferentes**
- **Modelado característico (variables discretas y sistemas dinámicos)**
- **Métodos y herramientas para la síntesis, simulación y optimización, distintos**
- **Representación de la información diferente**
- **Importa además de la representación estructural, la planificación temporal de las etapas de producción, o “Receta”.**
- **Métodos de Supervisión y Análisis de Riesgos adaptados a las características.**

Diferencias entre Proceso continuo y Batch

Supongamos un caso genérico, proceso “típico” basado en una reacción química, y separación de productos con recicló.

Producción de los productos PC y PD,

A partir de la transformación de las materias primas de partida (A y B). La reacción es la indicada en la figura.

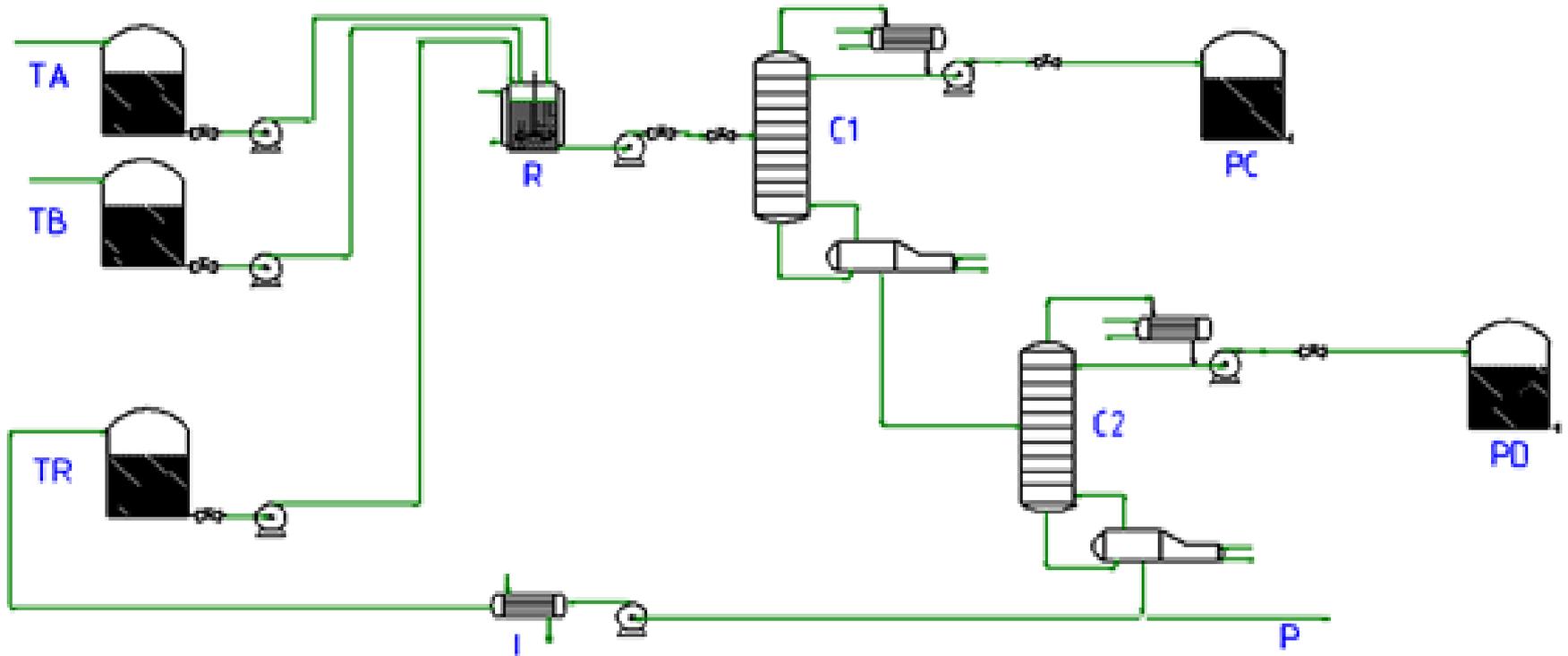
El proceso estacionario propuesto es deducible de modo general con observar el diagrama de flujos, en el cual se indican los recipientes de almacenamiento de los reactantes A y B, las líneas de alimentación al reactor y los elementos de bombeo para A, B, y además para R, el recicló, que involucra a los reactivos sin reaccionar, dado que la reacción es reversible.

La salida del Reactor R se alimenta al tren de separación, columnas de destilación C1 y C2.

Por el tope de la primera se obtiene el producto C, y la corriente del fondo se alimenta a la columna C2. En ella, por tope se obtiene el producto D, y por fondo la mezcla no reaccionante se recicla al tanque TR y al reactor.

El recicló es acondicionado térmicamente, previo al depósito en el tanque TR. También se indica una corriente de purga, para evitar la acumulación de inertes en el proceso (P).

Proceso Continuo (estado estacionario)

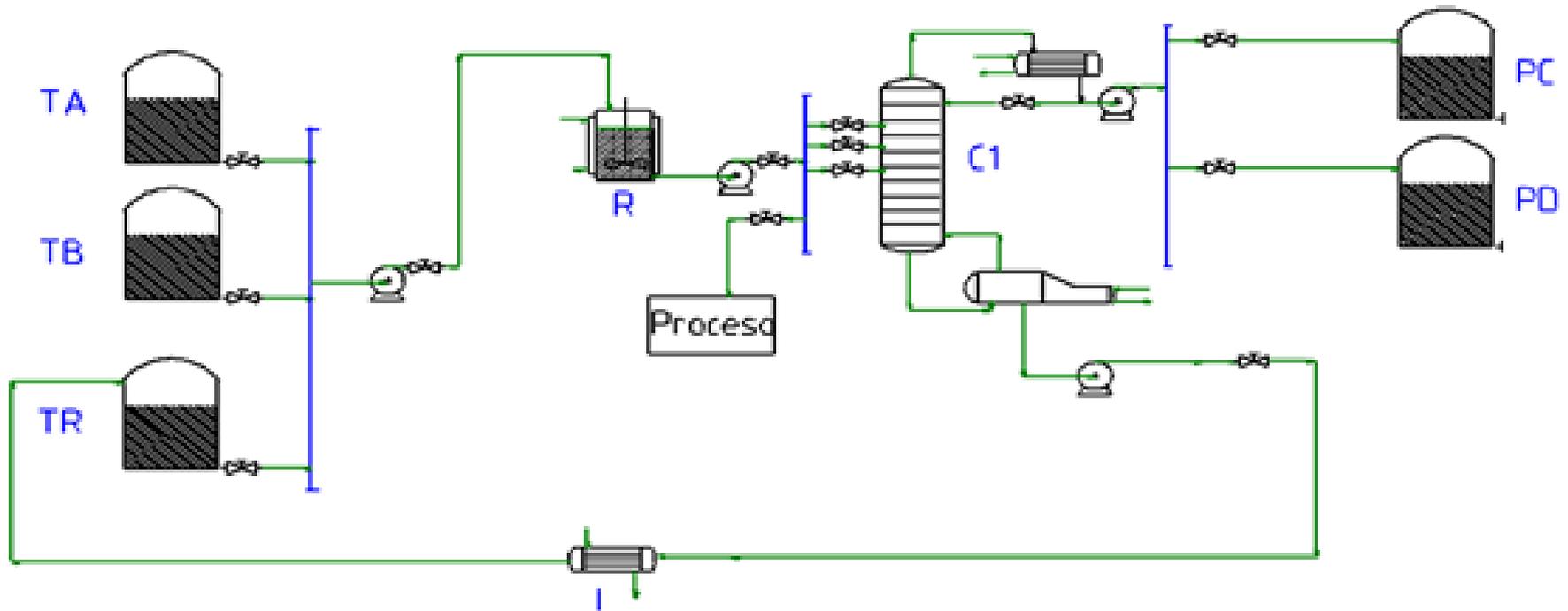


Diferencias entre Proceso continuo y Batch

Cómo sería el mismo proceso, en modo Batch?

Se realiza (cada operación o etapa de procesamiento) secuencialmente, según una receta de producción dada....

Proceso Batch



Proceso Continuo (transientes). Puesta en Marcha y Parada

$$A + B \equiv C + D$$

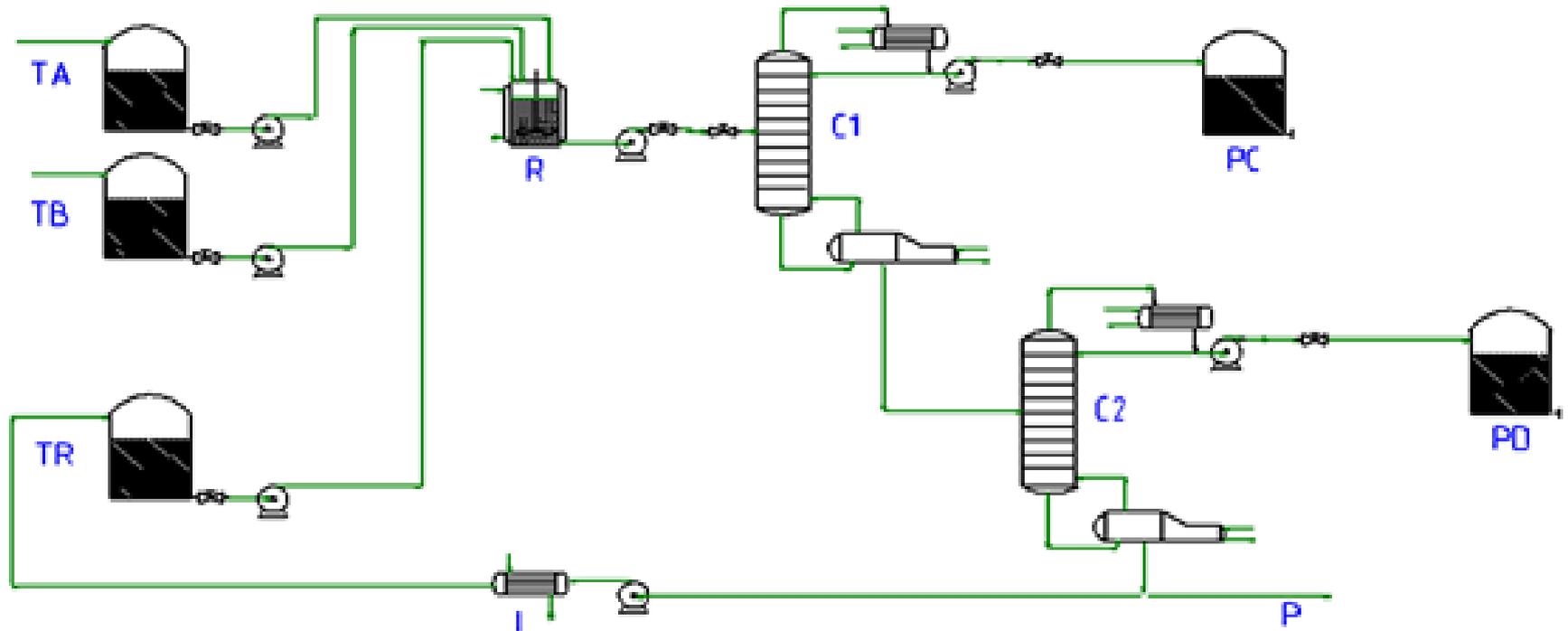


Diagrama de Gant (secuencia temporal de tareas)

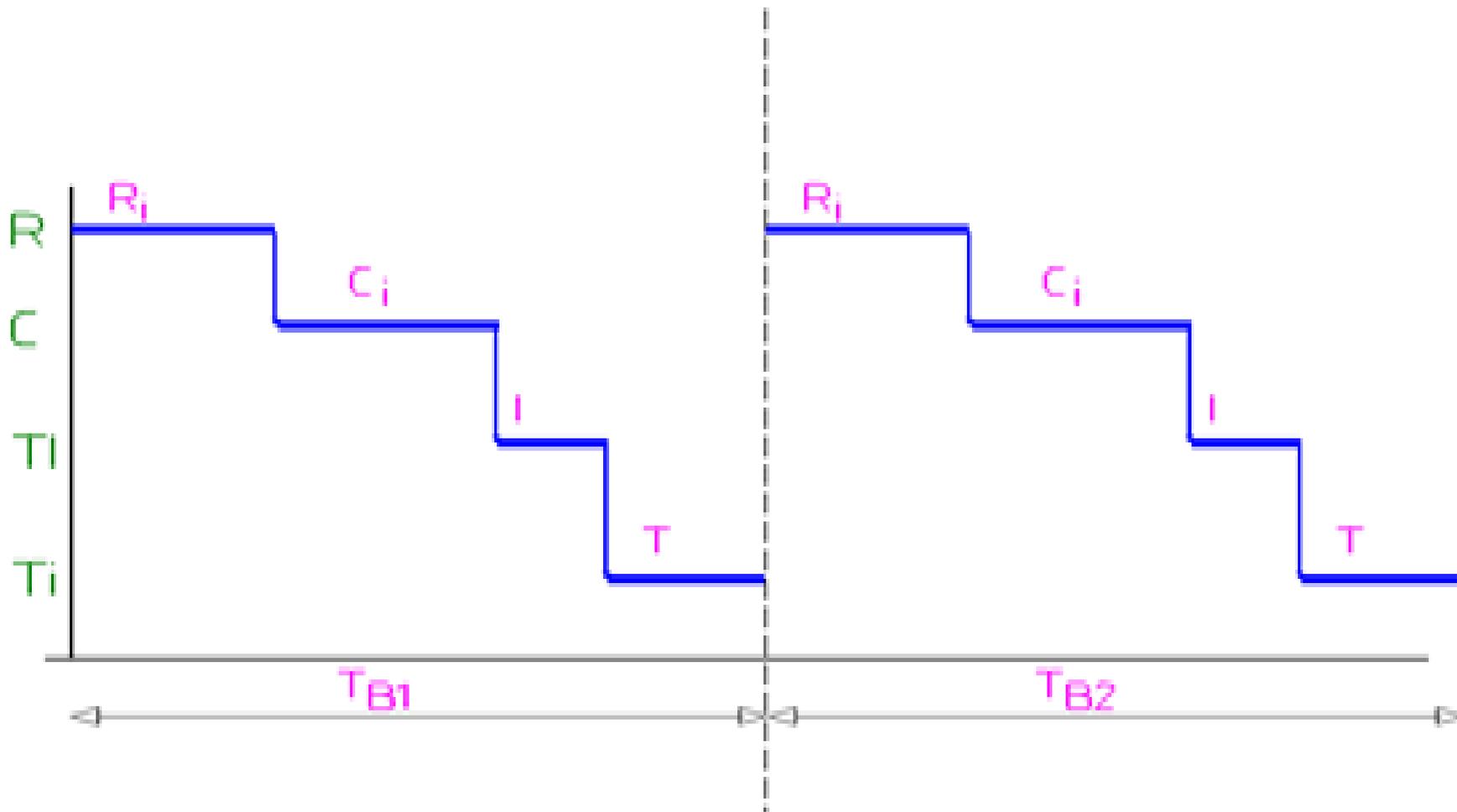


Diagrama de Gant (secuencia temporal de tareas)

**¿Cómo reducir el tiempo de ciclado?
Mediante el solapamiento entre etapas o tareas**

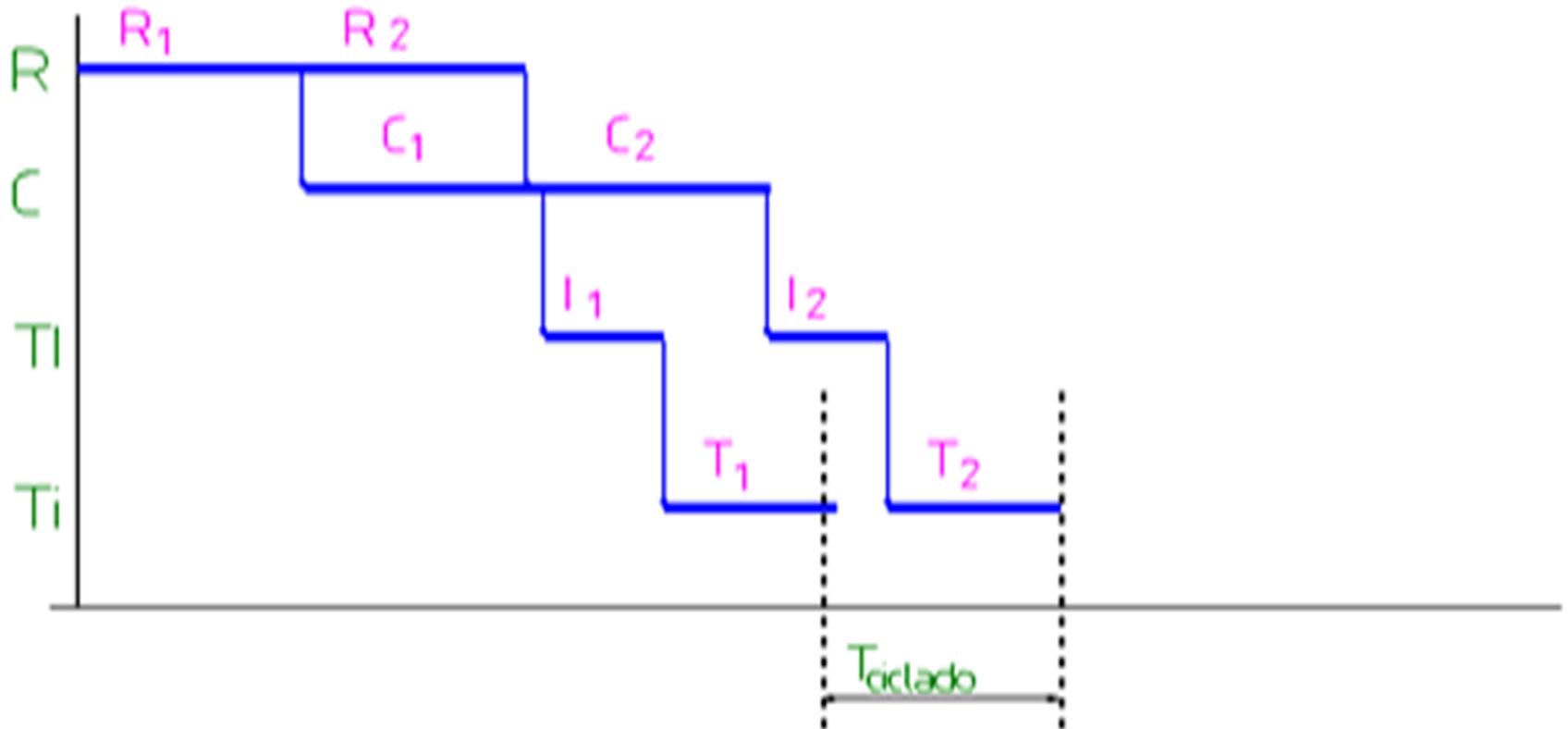
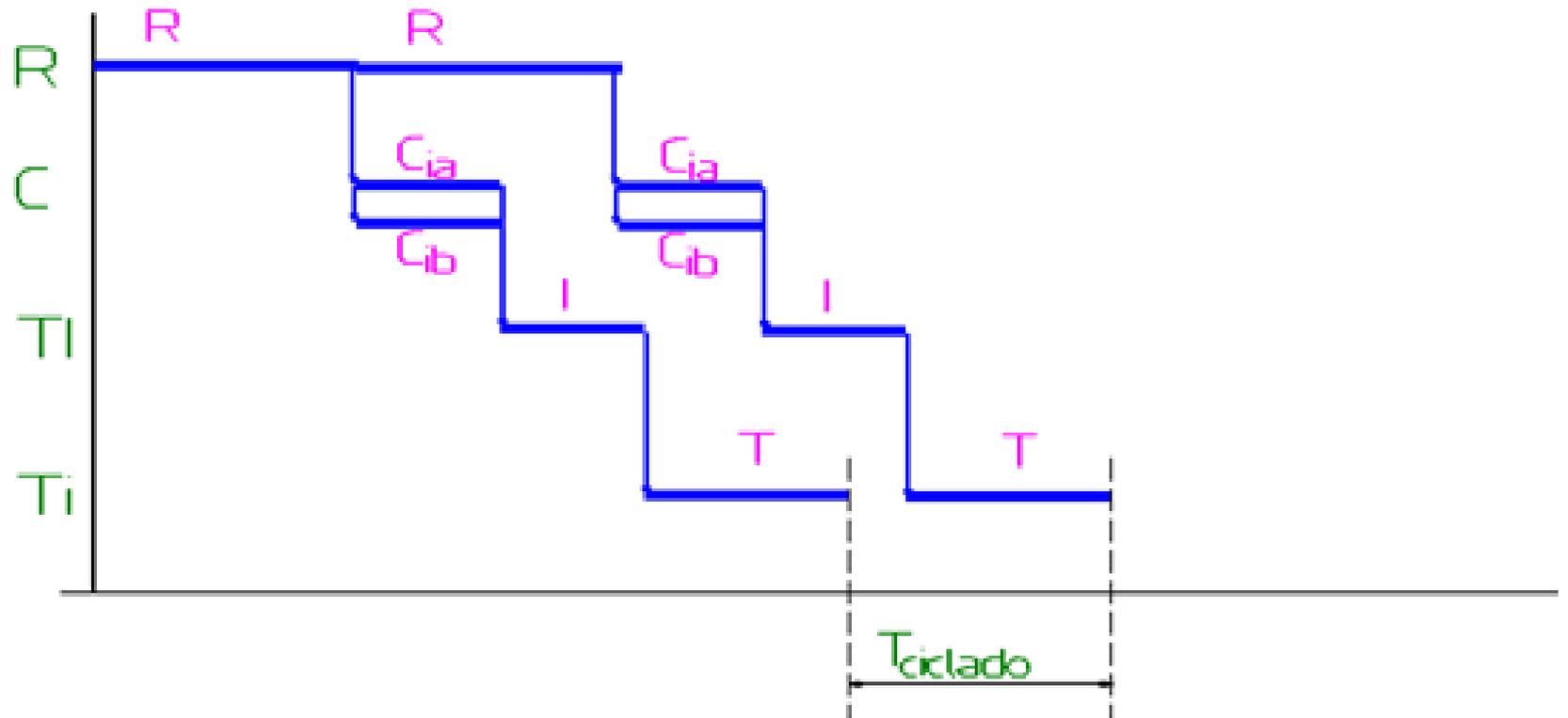


Diagrama de Gant (secuencia temporal de tareas)

Dividir en 2 etapas en paralelo la operación destilación implica que en la planta debe de haber disponible una nueva columna.



Procesos Estacionarios Vs Batch

Características/diferencias según la producción o el mercado

Escala de producción:

Batch (gramos...hasta~Kg) .. Los productos de la química de las especialidades/ química fina, cuya escala de producción es mucho menor, tienen un precio de elevado a muy elevado por tonelada producida.

Continuos, generalmente a escalas mucho mayores (miles de toneladas mensuales.. Por ejemplo.) Generalmente la producción masiva (petroquímica, alcohol, materias primas a granel) tienen un precio relativo bajo por unidad de producto (tonelada)

Procesos Estacionarios Vs Batch

Proceso continuo

- **Condiciones de operación estacionarias**
- **Gran escala de Producción**
- **Cada equipo realiza una operación o función específica.**
- **Flujos importantes**

Proceso discontinuo (Batch)

- **Funcionamiento intermitente/cíclico, discontinuo**
- **Ciclos de operación**
- **Pequeña escala de producción**
- **Plantas flexibles, multiproducto y multi-propósito**
- **Grandes tiempos de procesamientos o residencia**
- **Flujos pequeños**

Procesos Estacionarios Vs Batch

Proceso continuo

- **Calidad del producto constante**
- **Velocidad de producción constante**
- **Poca mano de obra**
- **Alta automatización**

Proceso discontinuo (Batch)

- **Productos de calidad variable**
- **Velocidad de producción variable**
- **Mayor mano de obra Relativa**
- **Procedimientos de síntesis complejos**
- **Condiciones de control muy estrictas.**
- **Mas complejos de automatizar.**

Procesos Industriales

¿Qué se entiende por Ingeniería?.

(es una profesión, se nutre de diversas disciplinas según la rama de la ingeniería que se trate)

Hoy la característica es la aceleración del tiempo Histórico, que presiona sobre la formación de los futuros profesionales.

Ingeniería Química.

....

Ingeniería de Procesos?

(Diseño, proyectos, Operaciones de plantas)

Diseño de procesos

(desde las primeras ideas, pasando por la ingeniería conceptual, la de detalle, hasta la etapa de la construcción)

Gerenciamiento / Operaciones

(arranque, parada, estado estacionario..Control y Supervisión), Mantenimiento, Seguridad, Ambiente, Calidad..

Qué se entiende por Ingeniería ? Cómo Evoluciona?

La ingeniería, como profesión, está íntimamente ligada a la tecnología

Ingeniería y Tecnología

Es ciencia en conjunción o fusión con la técnica

La Tecnología es la herramienta por medio de la cual se transforma el mundo natural en artificial

El ingeniero, es hacedor o gestor de tecnologías.

- ***La Tecnología evoluciona rápidamente, en una suerte de “aceleración histórica” cuyas consecuencias son difíciles de pronosticar.***
- ***No es neutra como la ciencia. Tiene impactos sociales, culturales, económicos, políticos, militares, éticos, etc...***
- ***Impacta sobre el medio natural, o sea, la naturaleza, el hombre,*
...**

La tecnología

- *Es una actividad de conjunto. Multidisciplinaria*
- *Son las empresas, públicas o privadas, o las instituciones, las que, siguiendo las reglas del mercado, o en el marco del mismo, producen, adaptan, compran y venden tecnología.*
- *El mercado, es el veredicto para que una tecnología sobreviva o sea reemplazada por otra.*

La tecnología y la profesión ingenieril

- *DESDE LA INVENCION a LA INNOVACION, la tecnología:*
- *Se crea, se proyecta, se diseña*
- *Se construye, se usa (pone en funcionamiento),*
- *Se vende, se compra, se “alquila” o licencia...*
- *Es un bien más, transable en el mercado..*

La tecnología y la profesión ingenieril

No existe una única tecnología para cada necesidad:

- ***según la cultura,***
- ***la región geográfica,***
- ***la disponibilidad de materias primas,***
- ***el entorno,***
- ***la organización social y política, entre otros factores.***

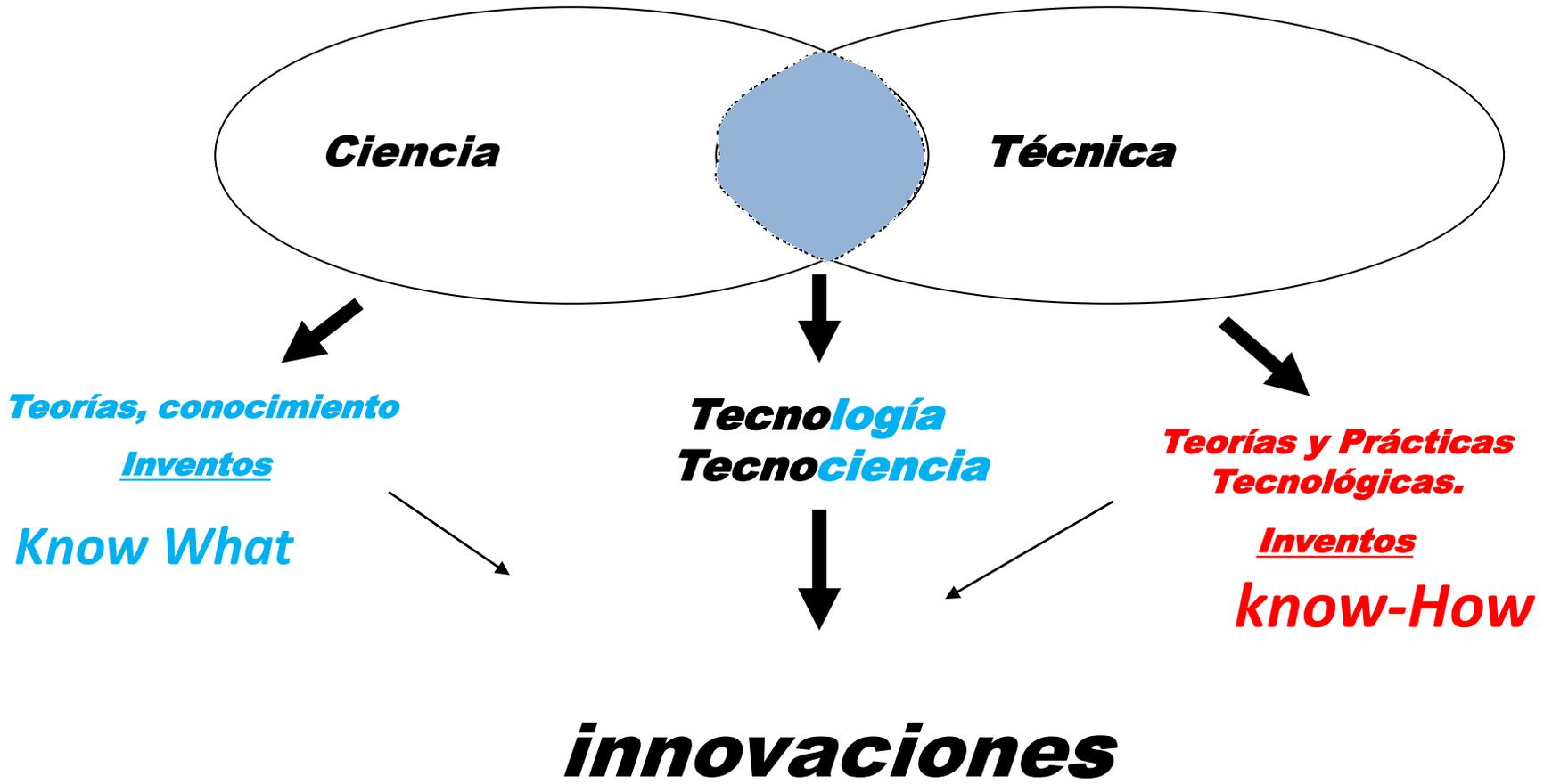
Esto implica que existen tecnologías apropiadas para cada necesidad

Invención, Innovación, Diseño...Ingeniería.....

Procesos y Tecnologías

- *Las maquinarias, operaciones unitarias, dispositivos, los procesos, los procedimientos, los planos, son tecnologías /productos tecnológicos que permiten su uso para un fin dado.*
- *Tienen valor teórico, práctico, comercial, y se protegen (patentes, marcas, etc...)*
- *La actividad de diseño es fundamental para la creación de tecnologías*
- *También el diseño de los procedimientos operativos para hacerlas funcionar (que cumplan el/los objetivo(s)) según diseño o como responder ante anomalías, fallas.*
- *Los planos y esquemas permiten visualizar y comprender el proceso, los procedimientos operativos, la supervisión, y toda otra cuestión relativa al mismo...*

La intersección que sustenta la tecnología...



Ya no se trata de una opinión...

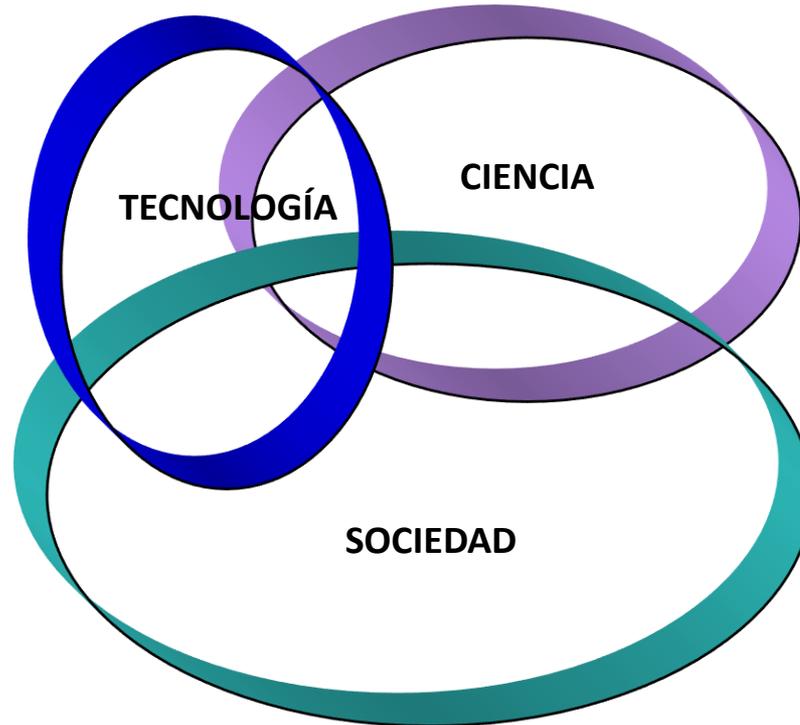
La ciencia, la tecnología, pueden modificar incluso la especie, la naturaleza humana, tal como la conocemos.....

No obstante, cuál sería el impacto sobre la ingeniería química?..Para una estimación o prospectiva, debemos primero realizar un repaso con perspectiva histórica..

***Una visión de la Tecnología
(y por ende...de la ingeniería)***

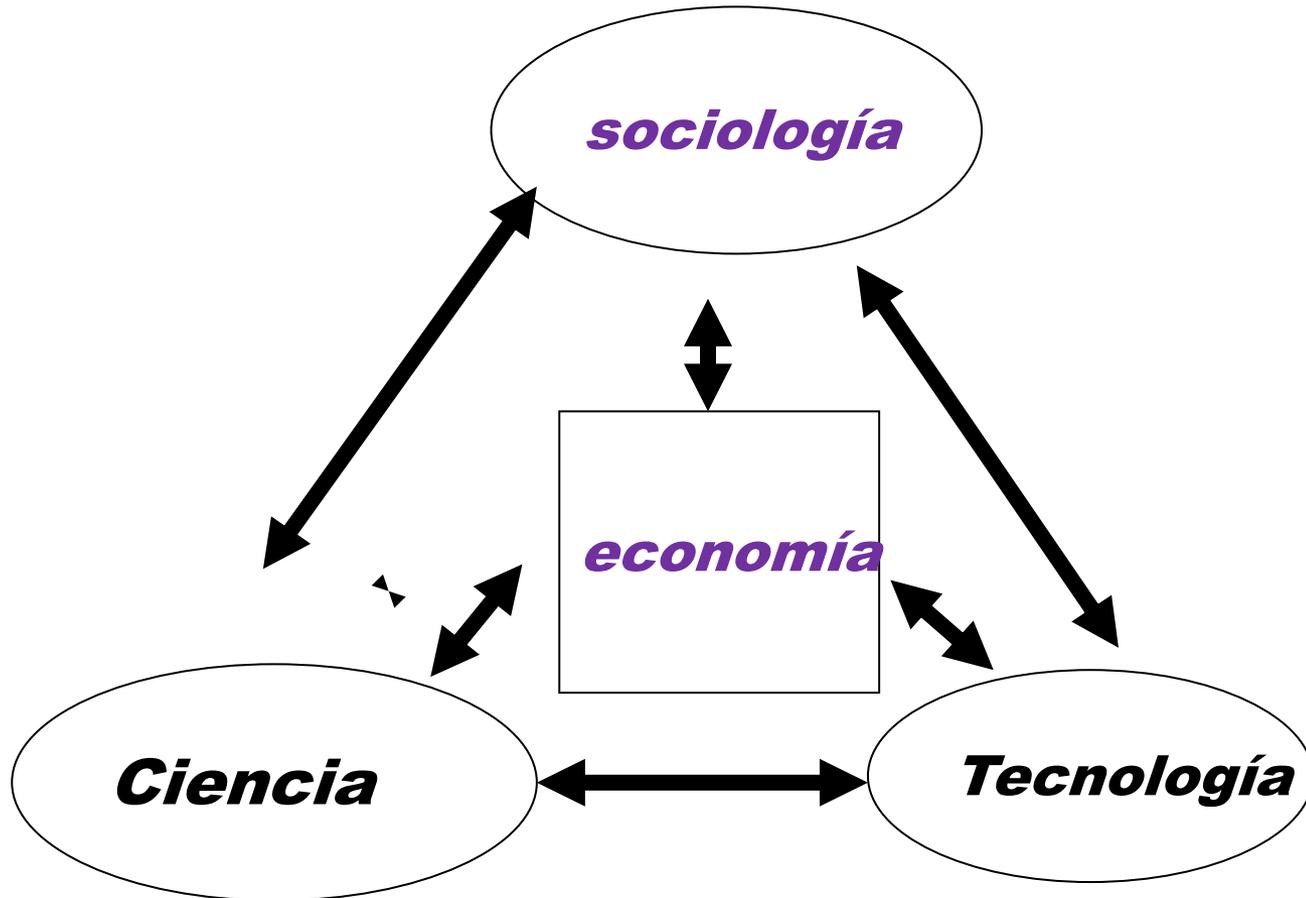
CIENCIA TECNOLOGÍA Y SOCIEDAD (cts)

Pueden existir desequilibrios en cualquiera de los componentes de esta compleja relación



CIENCIA TECNOLOGÍA Y SOCIEDAD (cts)

RELACIONES CONCEPTUALES Y FACTICAS



La tecnología

Existe consenso en que la “aceleración histórica”, se debe a una fusión entre la ciencia y la tecnología,

Surge como consecuencia de conclusiones de distintas disciplinas tales como:

- Filosofía de la ciencia*
- Filosofía de la tecnología*
- Epistemología de la ciencia*
- Epistemología de la tecnología*
- Sociología de la ciencia*
- Sociología de la tecnología*
- Antropología*
- Historia de la Ciencia, la Técnica y la Tecnología*

TENDENCIAS ¿Nuevos Procesos?

El fenómeno de la “aceleración” es compartido por las otras áreas de la ciencia y la tecnología, por ejemplo:

- ***Genética (clonación,)***
- ***Biología molecular***
- ***Biotecnología (cultivo de células animales, tejidos, células madre.....)***
- ***Neurociencias, nuevas drogas...***
- ***Bioelectrónica, biomecánica, híbridos (biochip, cybors.....)***

En este contexto...de evolución acelerada...

Relacionemos este ambiente evolutivo acelerado con las características, conocimientos necesarios, habilidades y competencias (normativamente las incumbencias) asociadas a la profesión del Ingeniero Químico..

Específicamente a la Ing. de Procesos..

al diseño Conceptual... de detalle y la Operación de procesos....

al Diseño Seguro, el Análisis de Riesgos, la Operación Segura, El mantenimiento, etc..

Entonces, los Procesos: Se venden, se compran, se “alquilan” o licencian...

***Cómo **se obtiene** o se adquiere un Proceso?
Como se “licencia” un proceso químico?***

solo el “proceso” (los documentos que lo describen tales como planos, manuales), y/o también la planta construida, su instalación, incluyendo asesoramiento por parte del proveedor en la puesta en marcha y en la operación (el know-how).... o sin ello?

Qué significa el proceso entonces?

Será un listado de instrucciones y manuales, o bien planos tales como el diagrama de flujo, y los P+I+D junto a toda la documentación descriptiva...

tiene importancia el know-how o el Know What)?

Procesos: Se vende, se compra, se “alquila” o licencia...

Puede ser que el vendedor solo transfiera los planos y manuales por un lado, y la construcción sea realizada por la empresa compradora, o encargada a un tercero?

Como se comunican entre sí los distintos actores?. Cual es la documentación oficial que se adopta?.

Cuáles son las etapas o fases de un proyecto para la construcción e instalación de una planta nueva?

Planos: ¿Cómo se representa un Proceso?

Documentación Pertinente, Respaldatoria, descriptiva?

-Manuales del sistema de instrumentación – y control,

-Manuales descriptivos del Proceso y los equipos,

-Manuales de puesta en marcha y parada,

***-Manuales con los procedimientos de operación,
mantenimiento crítico., etc***

-Planos del proceso

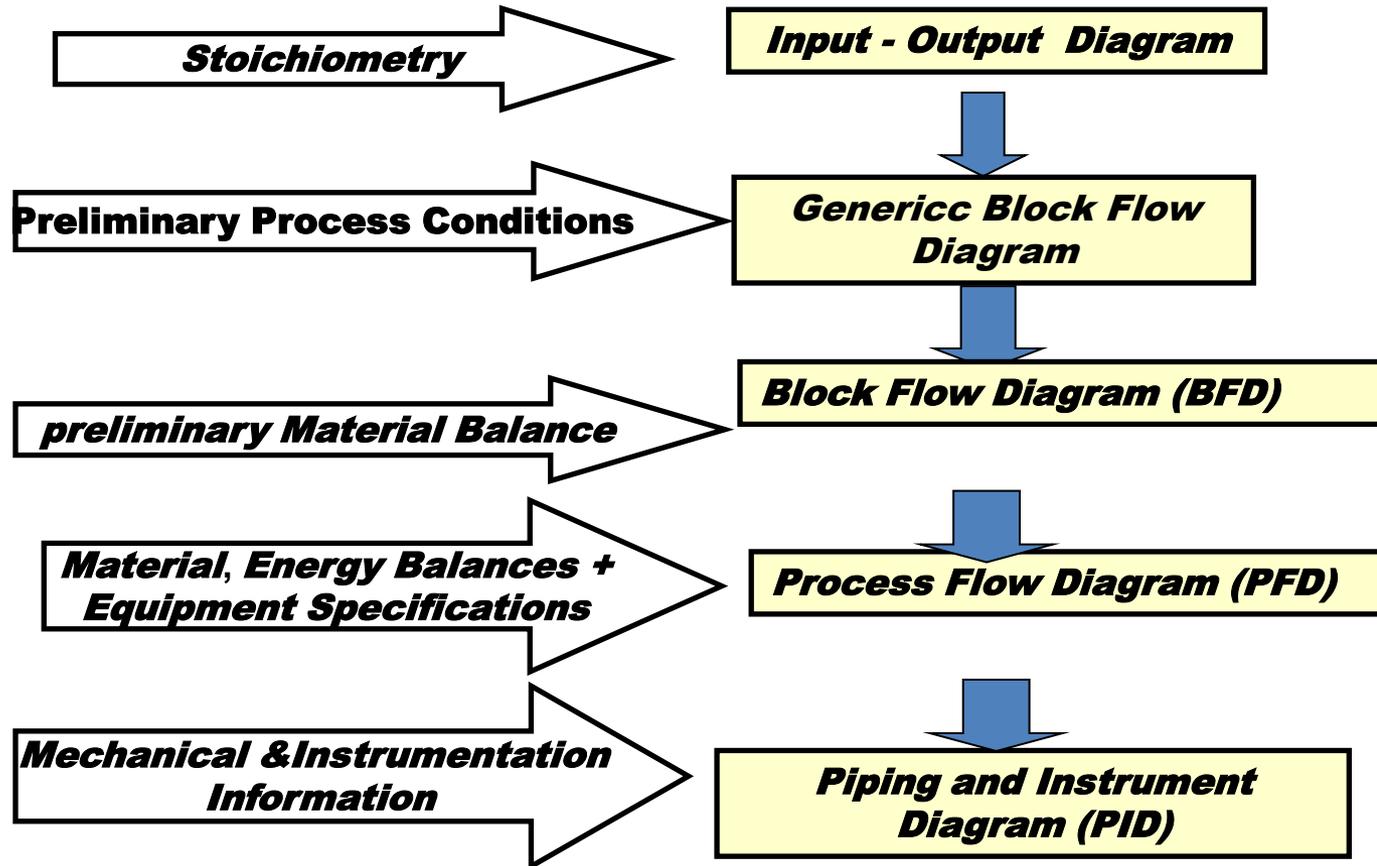
Sistema o Proceso Químico

Dado que las combinaciones de procesos son enormes, es necesario una forma de representación de los procesos químicos específicos de forma inequívoca, normalizada, y de fácil diagramación.

¿ Como se representa un proceso químico?. Planos Característicos

- *Mediante planos que tienen distintos grados de complejidad y de profundidad de detalle*
- *Diagrama de bloques de Proceso (DBP)*
- *Diagrama de Flujo de Procesos (DFP)*
- *Diagrama de Cañerías e Instrumentación P+I+D*
- *Diagramas Isométricos (cañerías y equipos)*

Chemical Process Diagrams De Menor a Mayor Detalle



Sequence of Process Design

***Diagrama de Bloques
de Proceso
(DBP)***



***Diagrama de Flujos
Del Proceso
(DFP)***

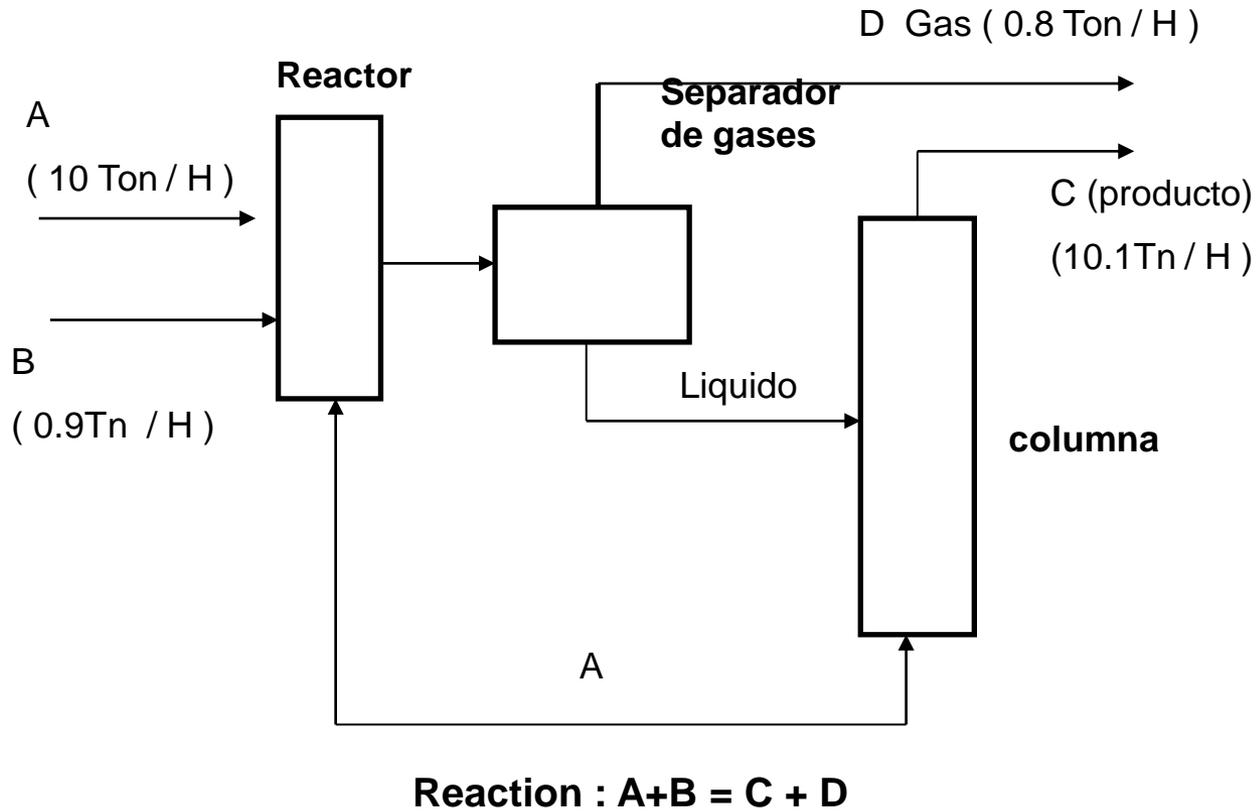


***Piping and Instrumentation
Flow Diagram
(P+I+D)***

Principales Convenciones para los Diagramas de Bloques

- **Operaciones: se representan por bloques**
- **corrientes de flujo principal: se representan por líneas orientadas en la dirección del flujo**
- **Flujos: desde izquierda a derecha del diagrama**
- **corrientes gaseosas: en la parte superior del diagrama,**
- **líquidos o sólidos: parte inferior (segregar por densidad).**

Diagrama en Bloques



Convenciones para los Diagramas de Bloques

- ***Se incluye la información crítica para entender el proceso***
- ***Si las líneas se cruzan, las horizontales se mantienen y las verticales se cortan***
- ***Se incluye un balance de masas y energía simplificado en forma de una tabla.***

DIAGRAMA DE FLUJO DE PROCESO (DFP) (flowsheet)

Algunas Convenciones

Se representan TODOS los equipos junto con su descripción. NUMERARLOS Y DENOTARLOS

- ***NUMERAR las corrientes de proceso***
- ***incluir las condiciones (temperatura, presión), flujos y composición química ya sea en el diagrama o en una TABLA adjunta.***

Algunas Convenciones

- ***Se deben representar TODAS las corrientes de servicios (vapor, aire, calefacción, etc.) que se asocian a cada corriente del proceso.***
- ***Se deben representar los lazos de control básicos que aseguran la estabilidad de las condiciones del proceso durante la operación normal.***

Diagrama de Flujo

TK-101
TOLUENE
STORAGE

P-101A/B
TOLUENE
FEED PUMPS

E-101
FEED
PREHEATER

H-101
HEATER

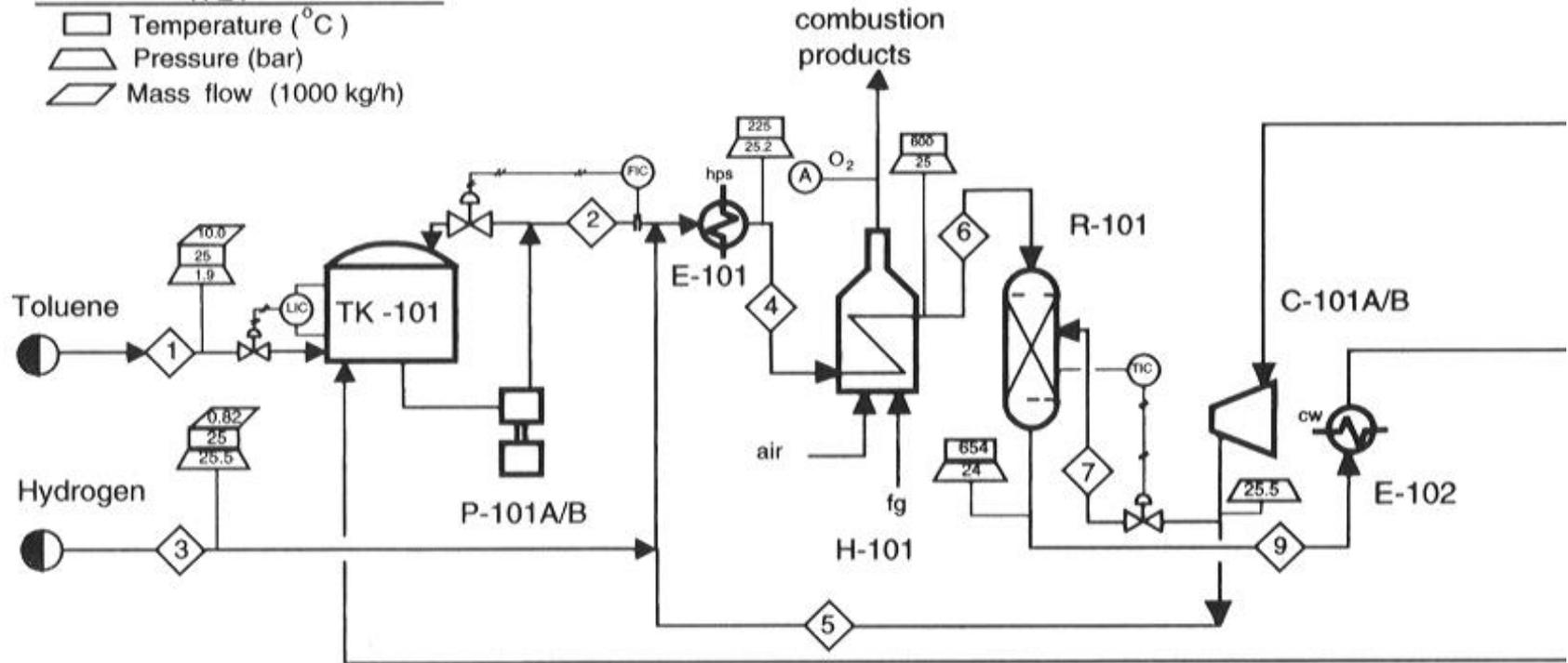
R-101
REACTOR

C-101 A/B
RECYCLE
GAS
COMPRESSOR

E 102
REACTOR
EFFLUENT
COOLER

KEY

- Temperature ($^{\circ}\text{C}$)
- Pressure (bar)
- Mass flow (1000 kg/h)



Benzene process flow diagram (PFD) for the production of benzene via the hydrodealkylation of toluene.

DIAGRAMA (P & ID) o bien P+I+D

P&ID: Piping and Instrumentation Diagram

Un P+I+D (diagrama de tuberías e instrumentación o P&ID) muestra las tuberías y los componentes relacionados al diagrama del flujo de un proceso.

Convenciones

- ***Los P+I+D incluyen todos los detalles mecánicos de la planta (con algunas excepciones).***
- ***Dado el nivel de detalle mayor, por cada DFI, se requieren varios P+I+D para poder referenciar los datos y detalles necesarios.***

Convenciones P+I+D

- ***Para equipos incluir***

Unidades en Paralelo

Detalles de cada unidad

- ***Para el piping incluir todas las líneas, drenajes, conexiones para muestreo, especificando***
 - ***Dimensiones***
 - ***espesores***
 - ***Materiales de construcción***
 - ***Aislaciones (tipo y espesores)***

P+I+D

- ***Para la instrumentación Identificar***
 - ***indicadores***
 - ***registradores***
 - ***Controladores***
 - ***Mostrar líneas de instrumentación***

- ***Para los Servicios Identificar***
 - ***Las entradas***
 - ***Las salidas***
 - ***Salidas de todos los desechos***

Datos para las corrientes de Proceso

Como mínimo:

- ***Número de la corriente***
- ***Temperatura (°C)***
- ***Presión (bar)***
- ***Fracción vapor***
- ***Flujo total másico (Kg/h)***
- ***Flujo molar total (Kmol/h)***
- ***Flujo molar para cada componente (Kmol/h)***

Importancia de los P+I+D

Son la última etapa del proceso de diseño

Son la guía para los responsables del diseño final mecánico, fundaciones, etc., y las construcción final.

Basados en el P+I+D :

- Los Ing Mecánicos y Civiles diseñarán e instalarán los equipos y accesorios.***
- Los instrumentistas especificarán, instalarán y chequearán los sistemas de control correspondientes.***
- Los ingenieros de procesos diseñarán el layout, el piping, los diagramas de cañerías, isométricos, entre otros..***
- Los proyectistas proyectarán y planificarán la construcción..***
- Los Ing de Operaciones chequearán la planta y procederán al arranque, parada, y otras pruebas estandar..***

P+I+D

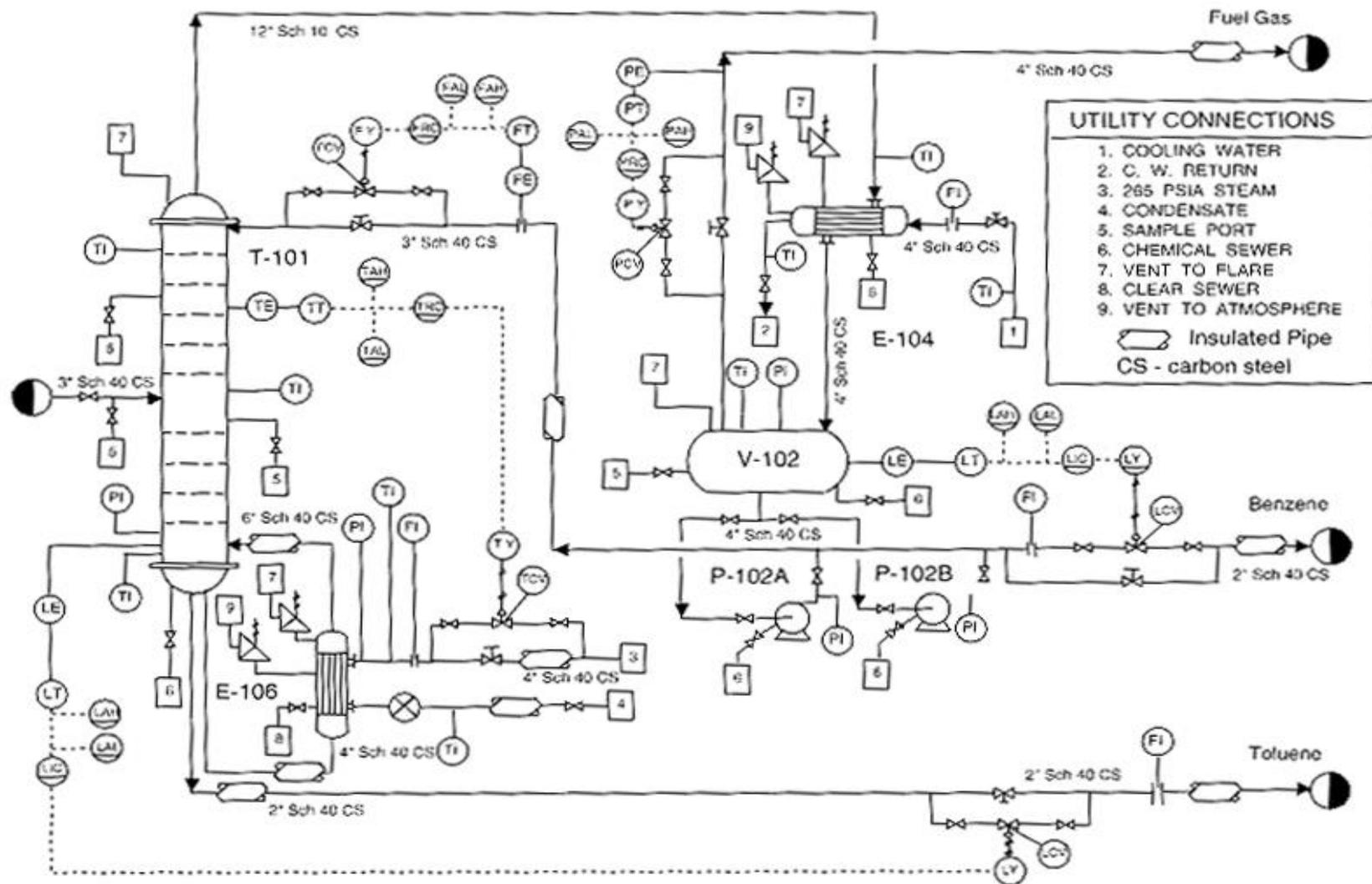


Figure 1.7 Preliminary piping and instrumentation diagram for benzene distillation. (Adapted from Kauffman, D., *Process Sheets and Diagrams*, AIChE Modular Instruction, Series G: Design of Equipment, series editor J. Beckman, AIChE, New York, 1986, vol 1, Chapter G.1.5, AIChE copyright, © 1986 AIChE, all rights reserved)

P+I+D

*Los **P+I+D** representan el último paso del diseño de procesos*

SE DEBE COMENZAR CON EL DIAGRAMA DE FLUJO DEL PROCESO COMPLETO Y APROBADO

Los P & ID's son documentos claves para la construcción y operación de un proceso

Fuente indispensable para el análisis de riesgo y seguridad, el arranque, la operación de rutina, el mantenimiento, los revamping, modificaciones operativas, etc...

Un proceso no puede ser construido y operado adecuadamente sin disponer de correctos P & ID's

Simulación de Procesos

- *Hemos comentado que existen diversos tipos de procesos. En particular*
- *Procesos continuos*
- *Procesos semicontinuos*
- *Procesos Batch*
- *En este curso nos centraremos en procesos continuos (estacionarios, o en estado dinámico)*

Diseño Conceptual y Simulación de Procesos

Hemos realizado una pequeña introducción a la representación de los procesos según distintos grados de detalles (no dejan de ser “modelos” los distintos planos analizados). El proceso de diseño (preliminar, conceptual, finalizando con la ingeniería de detalle, permiten plasmar cada uno de los planos mencionados, finalizando con el P+I+D.

En lo siguiente analizaremos las actividades de diseño que nos llevan a poder realizar tal representación, y las herramientas que se utilizan, en particular la simulación de procesos.

Operación de Procesos y Simulación de Procesos

- *Proceso de diseño (las etapas que permiten desde el Diagrama de Bloques al Diseño Conceptual (DFP), y por último llegar a una Ingeniería de detalle (**P+I+D**)*
- *Diseñar procedimientos, diseño de los sistemas de gerenciamiento de la seguridad, calidad, cuidado del medioambiente, entre otros.*

Operaciones

Gestión del Proceso: Logística, Control, Supervisión del Proceso en funcionamiento

Gestión del Riesgo, Operación Segura de los Procesos, Mantenimiento..

Uso del Simulador. Diseño Conceptual O Diseño Básico.

- ***puede utilizarse tanto en el diseño del proceso, en particular cuando se tiene definido un esquema preliminar (como mínimo un diagrama de Bloques o bien una propuesta del Diagrama de Flujos...)***
- ***Se lo utiliza también para el revamping, para modificaciones operativas (cambio de condiciones de alimentación, ampliación, entre otras...)***
- ***O bien para ensayar procedimientos, entrenamiento de personal, supervisión del proceso, etc. Simulación Dinámica***
- ***Para Optimizar Procesos.***

Clasificación de los Simuladores

Una primera clasificación de los Simuladores responde a los procesos a los que se pueden aplicar

- *Según el tipo de proceso:*

Batch

Continuos

- *Según el tiempo:*

Estacionarios

Dinámicos

- *Variables que manejan:*

Determinísticos

Estocásticos

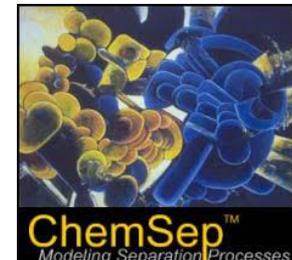
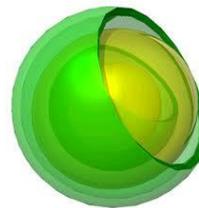
*Cualitativos o cuantitativos,
continuos o discretos.*

Simuladores empaquetados

- *Simuladores comerciales:* HYSYS, ASPEN PLUS, PROSIM, CHEMCAD, UNISIM etc.



- *Simuladores gratuitos y/o abiertos:* DWSIM, COCO, ChemSep (solo destilación), etc.



Simuladores para El Análisis Cuantitativo Del Riesgo

Existen diversos simuladores (de libre disponibilidad o comerciales) para realizar estudios de vulnerabilidad del entorno dados accidentes en industrias de proceso.

Explosiones

Difusión de Tóxicos

Incendios

..entre otros escenarios.

Modelos de Procesos. Disponibilidad

- *Igualmente, en el caso de los estudios de disponibilidad de los procesos (fracción del tiempo realmente operado respecto del planificado en el diseño –o tiempo total de operación planificado-), como se verá más adelante, se necesita disponer y representar la estructura del proceso –diagrama deflujo- , por medio de un modelo apropiado para tal representación.*
- *En este caso un diagrama que permita evaluar condiciones lógicas de operación (funciona – no funciona).*

ESTRUCTURA DE UN SIMULADOR MODULAR SECUENCIAL EN ESTADO ESTACIONARIO

Básicamente podríamos diferenciar tres funciones o secciones perfectamente diferenciadas:

- 1) Módulo de lógica central o lógica general del simulador.*
- 2) Módulo encargado de la estimación de las propiedades fisicoquímicas.*
- 3) Módulo o biblioteca de modelos de equipos, es decir cada uno de los módulos que representan el comportamiento de válvulas, intercambiadores, sistema de destilación, sumadores, divisores, flash, compresores, etc.*

lógica general o central o de administración, componentes

- *La sección de entrada*
- *La sección de salida de resultados*
- *La lógica general de administración*

La lógica general de administración es la que está encargada de administrar los distintos procesos que deben ejecutarse para lograr la simulación de un proceso dado.

Se deberá verificar y administrar los datos ingresados por el usuario y procesar el diagrama de flujos,

decidir si puede resolverse en una secuencia lineal o si existen reciclos,

seleccionar sobre cuáles variables deberá iterarse,

determinar en función de las corrientes de corte el orden en el cual serán resueltos los equipos, etc.

Deberá, a partir del DFI, manipular un banco de algoritmos que permitan realizar el rasgado, particionado y ordenamiento o secuencia de resolución.

Estrategia de simulación

Una vez definida la estrategia de simulación, se deberá decidir acerca de finalizar el proceso iterativo de acuerdo al criterio de convergencia definido por el usuario...

-Almacenar e informar sobre los resultados: todos los valores convergidos de las corrientes del proceso, los valores y parámetros internos de los equipos, por ejemplo los perfiles internos de torres, composiciones, caudales, temperatura y presiones de cada etapa, etc.

Si no se lograra convergencia luego de una cantidad de iteraciones previamente estipulada, la lógica central del simulador detendrá el proceso iterativo e informará al usuario, por medio del mensaje de error que corresponda.

El sistema de almacenamiento de información (por ejemplo un Administrador de Base de Datos), almacena los resultados de las diversas simulaciones para una misma planta, a los efectos de facilitar la presentación en forma gráfica de los resultados obtenidos, realizar la comparación entre las distintas alternativas simuladas, si fuera necesario.

Modelado y Simulación

Hemos ya mencionado que los módulos de equipos (que conforman el banco de módulos existente en el simulador) son muy simplificadaamente modelos de dichos equipos que se resuelven numéricamente, implementados/montados sobre un programa de computación.

O sea, sistemas de ecuaciones algebraicas (estado estacionario) o bien sistemas de ecuaciones diferenciales (simulación dinámica).

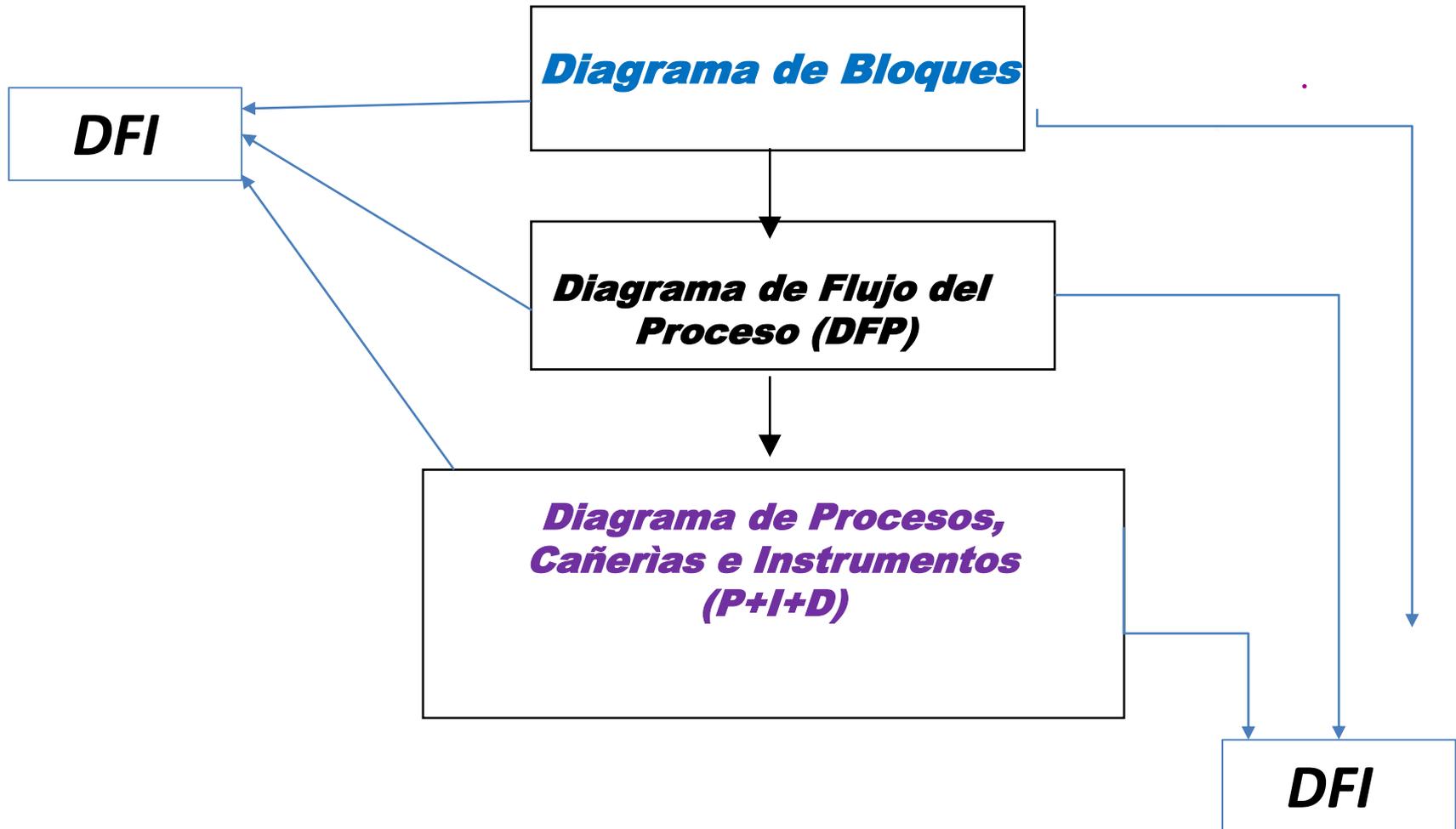
y el Diagrama de Flujos?

Modelos de Procesos

- *Hemos mencionado que los esquemas, planos son también modelos del proceso (al igual que una maqueta, o una representación 3D del mismo).*
- *Un simulador de procesos, para llevar a cabo la simulación del mismo, necesita disponer y representar la estructura del proceso – diagrama de flujo- , por medio de un modelo apropiado para tal representación.*

SIMULACION Y LA SECUENCIA DE DISEÑO DE PROCESOS

Necesitamos una representación Esquemática. El DFI.



Ingeniería Conceptual

Diseño de Ingeniería

**Diagrama de Bloques
del Proceso
(DBP)**



**Diagrama de Flujos
del Proceso
(DFP)**

Simuladores de Procesos

**Diagrama de
Flujo de
Información**



Modificación del Proceso. Análisis

*El diseño ha sido realizado,
por lo que se dispone de:*



***Diagrama
(P+I+D)***



***Diagrama de
Flujo de
Información***

Simuladores de Procesos

Ingeniería Conceptual

En todos los casos, la representación básica de la estructura del proceso, en el simulador, es el diagrama de flujo de información

Representación de la estructura del proceso según las convenciones del diseño conceptual en ingeniería de procesos

Representación de la estructura del proceso según las convenciones de modelado y confección de los simuladores (DFI)

***Diagrama de
Flujos del
Proceso***



***Diagrama de
Flujo de
Información***

Simulación cualitativa vs. Simulación cuantitativa

Simulación cualitativa

Relaciones causales y las tendencias temporales cualitativas de un sistema

Ej.: análisis de tendencias, supervisión y diagnosis de fallas, control estadístico de procesos, Evaluación de riesgos, entre otros

Simulación cuantitativa

Comportamiento de un proceso a través de un modelo matemático.

Resolución de balances de materia, energía y cantidad de movimiento, junto a las ecuaciones de restricción (funcionales y operacionales).

Análisis Cuantitativo de Riesgos

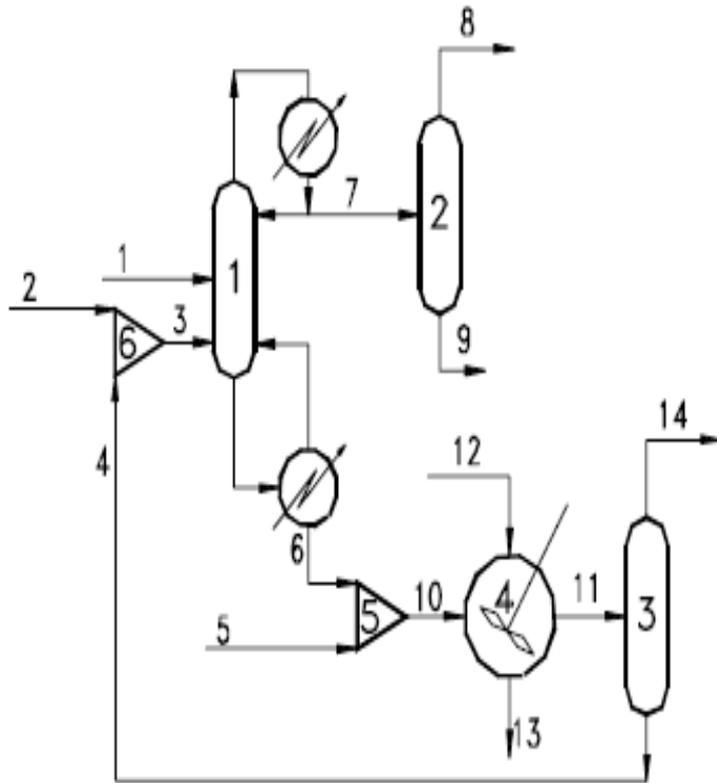
¿ Que es un DFI ?

Para comprender la definición de Diagrama de Flujo de Información, en el contexto de la simulación de procesos, es necesario introducirnos al modelado de procesos, la modelización de la representación estructural de los procesos, y su correspondencia biunívoca con el proceso (realidad) que se pretende representar (y por lo tanto, los errores que siempre existen en tal representación).

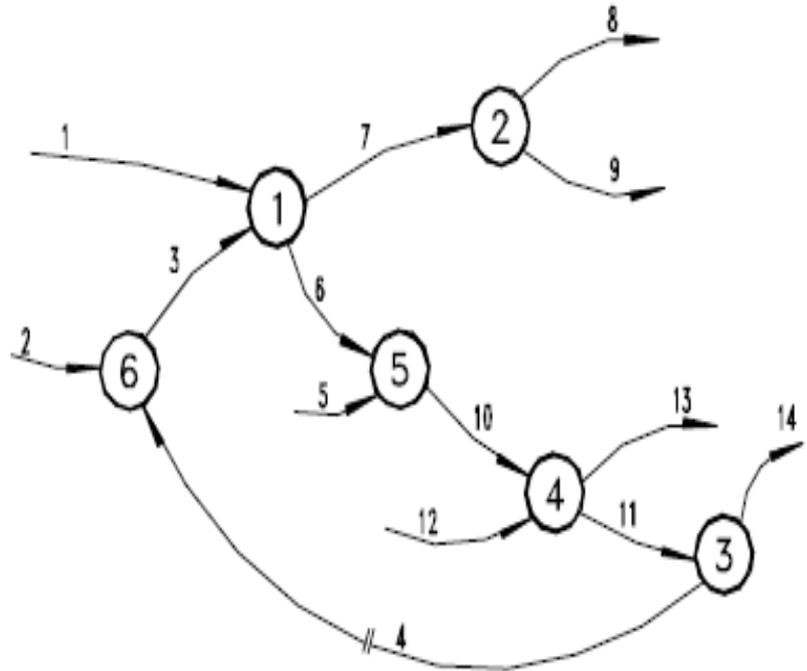
Grafo Dirigido

- ***Nodos***
- ***Arcos dirigidos conectando los nodos***
- ***Orden de conectividad***
- ***Cada nodo se corresponde con un equipo o unidad de proceso***
- ***Cada arco representa las corrientes de proceso que los vinculan***
- ***Esta entidad, un grafo, permite modelar el Diagrama de Flujos del Proceso, operar sobre el mismo en un “lenguaje” adecuado para la lógica de administración de las tareas y decisiones del programa o sistema de simulación***

¿Qué es un DFI ?

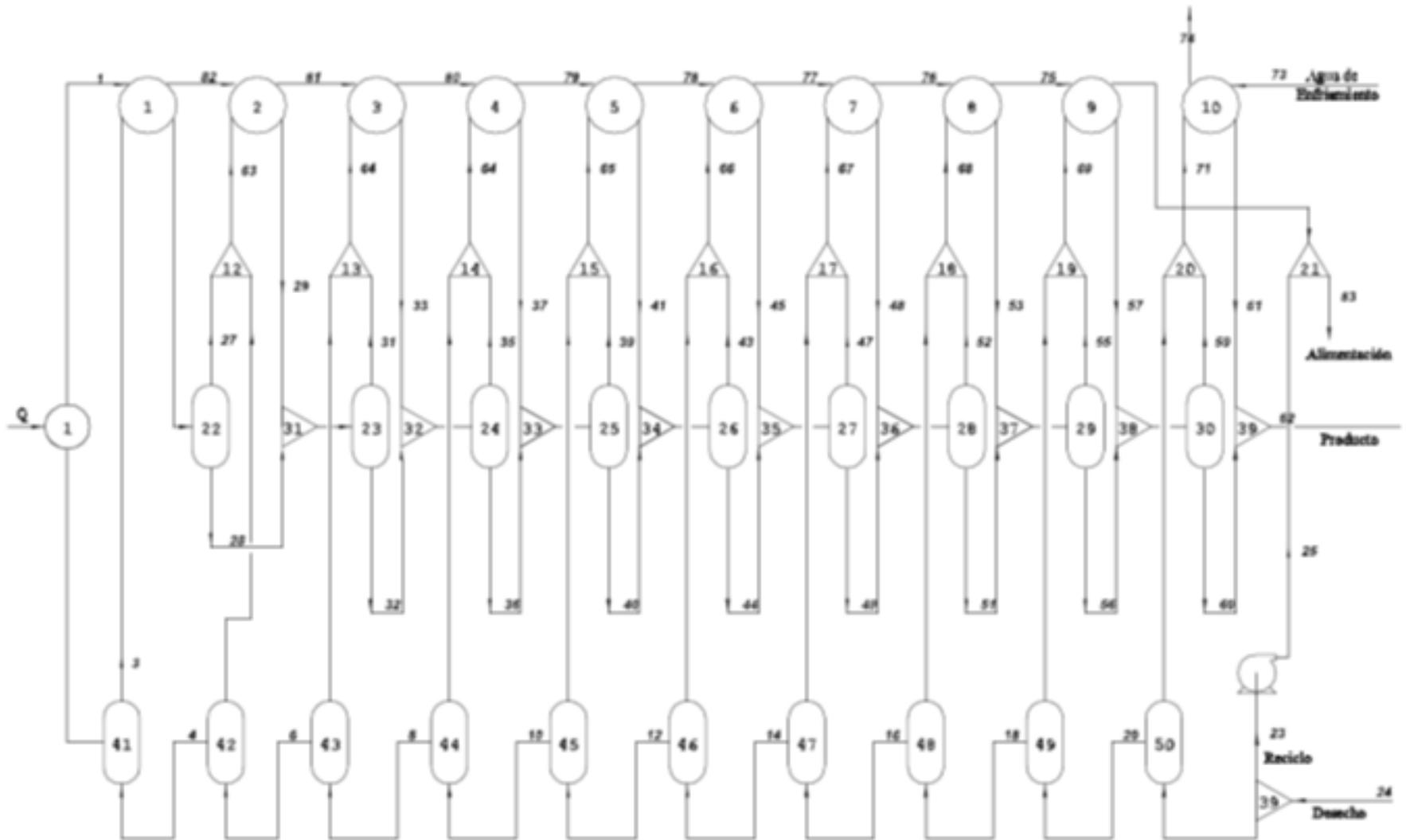


PROCESO



DFI

DFI (evaporador Múltiple Efecto)



Modelos (¿Qué es el modelado de procesos?)

Los modelos son construcciones abstractas que representan a un sistema real.

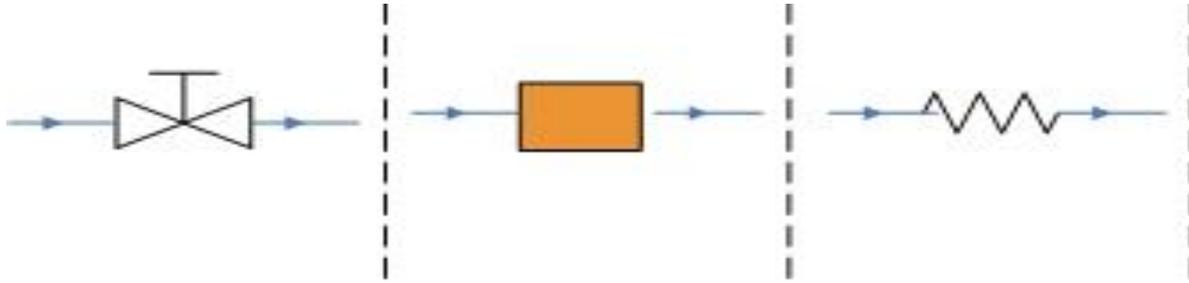
Hipótesis:

conjunto de decisiones/suposiciones/adopciones que ajustan el modelo a la realidad.

Tipos de modelos:

- ***Teóricos/Analíticos (primeros principios)***
- ***Experimentales (correlación, redes neuronales, etc)***
- ***Lineales***
- ***No lineales (más complejos de resolver...)***
- ***Digitales (a través de algoritmos informáticos)***
- ***Analógicos***

Modelos



$$Q = \frac{\sqrt{\Delta P}}{1/C_v}$$

*Circuito
hidráulico*

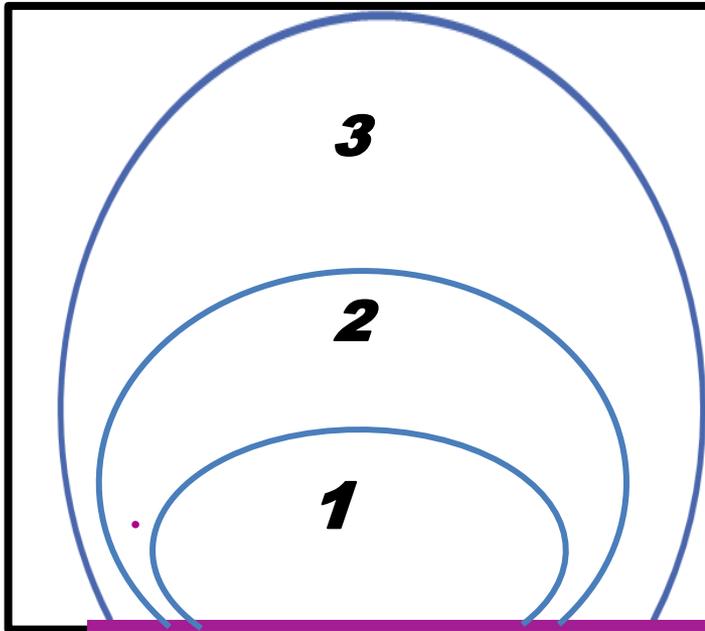
$$q = \frac{\Delta T}{\Delta x/kT}$$

*Proc. de transf.
calor*

$$i = \frac{V}{R}$$

*Circuito
eléctrico*

Modelado (sistematización, primeros principios, Fenómenos de Transporte..)



1- “Modelado hidráulico”. Condiciones para el transporte. Características del Recipiente contenedor. Configuración.

Cantidad de Movimiento (presiones)

Masa. Entradas, Acumulación y Salidas. Balance Global y Componentes.

Energía. Idem

2 . Equilibrio de Fases. Inertes.

3 - Reacción Química. Interacción con el medio

Al plantear las ecuaciones de balance, hay siempre un conjunto de hipótesis subyacente?

- *Normalmente utilizamos las hipótesis para simplificar y poder resolver en forma adecuada el modelo resultante, según nuestros objetivos*
- *Con respecto al CONTENIDO, hipótesis del estado (equilibrio o no, inertes etc..) respecto de su variación temporal o espacial, en la relación con el entorno, etc....*
- ***PERO necesitamos también hipótesis respecto al CONTENEDOR, esto es su estructura, características, la funcionalidad y modo de operación, entre otras, que no siempre son explicitadas o bien no son tenidas en cuenta. Este punto es fundamental en el modelado, simulación y el diseño de procesos.***

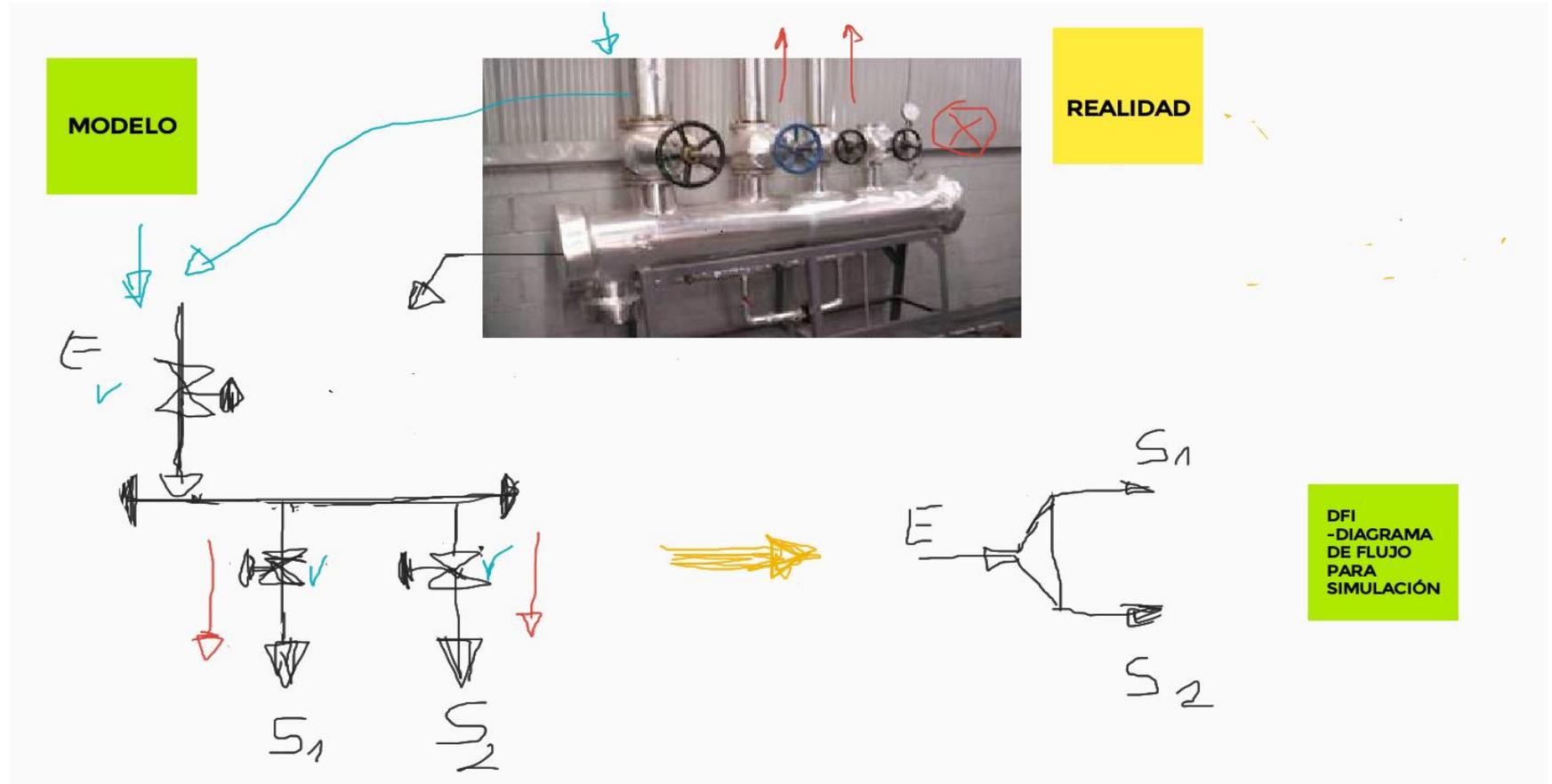
Modelado: Del equipo al modelo... un viaje de abstracciones, el modelado y el diseño...

- *Para todos los equipos y sus sistemas de conexión, regulación, servicios relacionados, ya sea individualmente o cuando se los ordena estructuralmente en un arreglo o proceso, existen distintos modos o niveles de rigurosidad para su representación por medio de un modelo.*
- *En general, para simplificar nos interesa enfocar, destacar, profundizar, solo aquello que es importante para el aspecto de la realidad que queremos analizar, y en las condiciones acotadas en que nos resulta necesario representar el funcionamiento del proceso.*

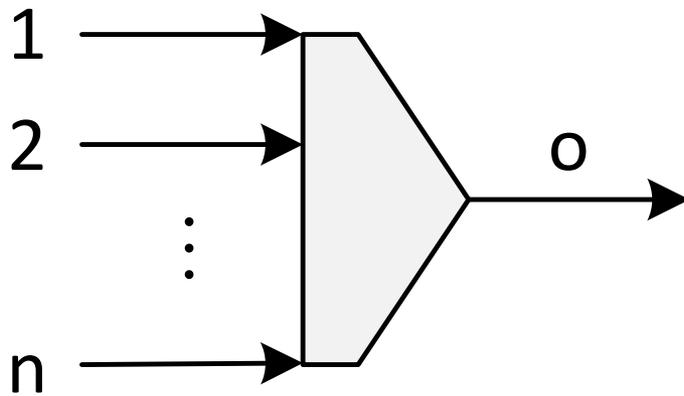
Ejemplo “sencillo”: Manifold en procesos industriales



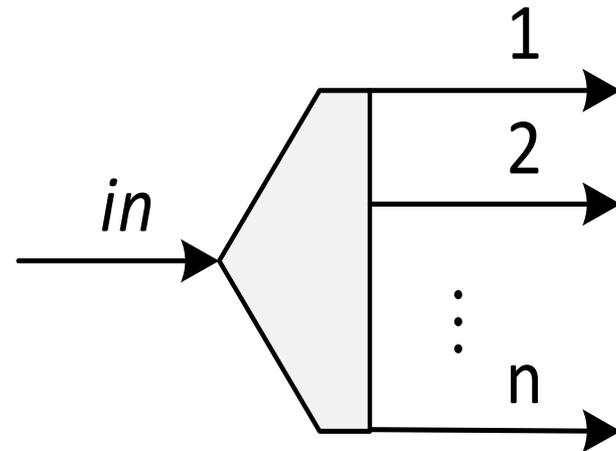
Modelado: Del equipo al modelo... un viaje de abstracción, el modelado y el diseño...



Nodo sumador



Nodo Divisor (splitter)



Y los tanques para depósito y contención en procesos?



Y los tanques para depósito y contención en procesos?

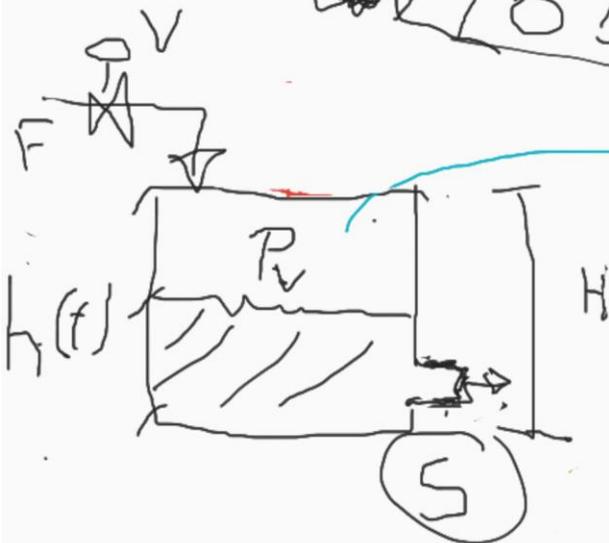


Y los tanques para depósito y contención en procesos?



$F?$
 \rightarrow Sim
 entradas?
 $S?$

"MODELOS"

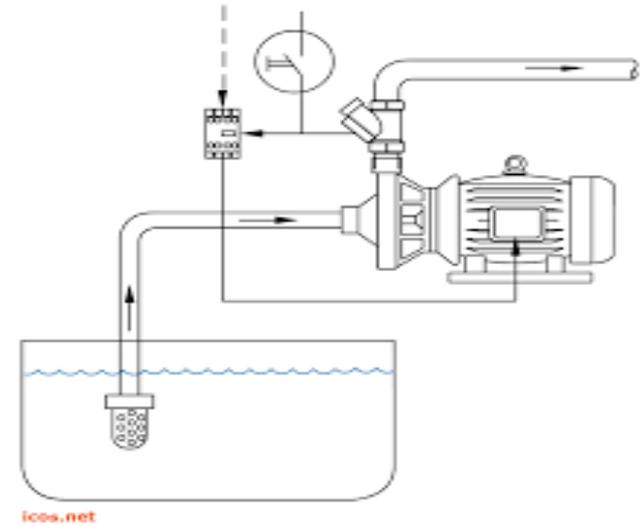


EQ L-V
 L-L

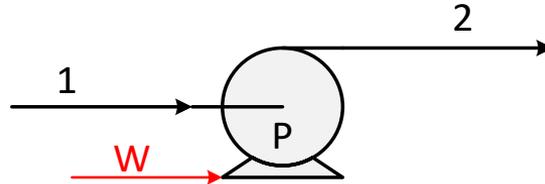


Cuidado con la geometría asumida...

Bombas Centrífugas



Hipótesis del Modelo de una bomba

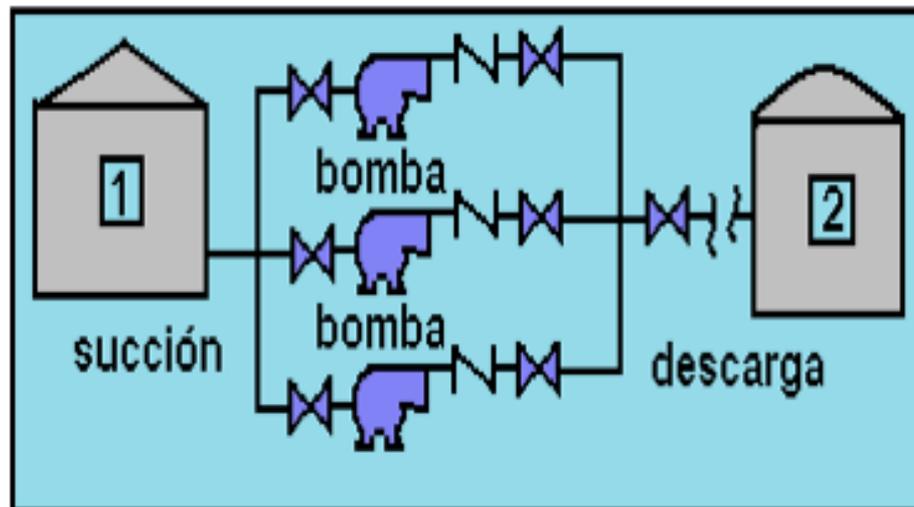
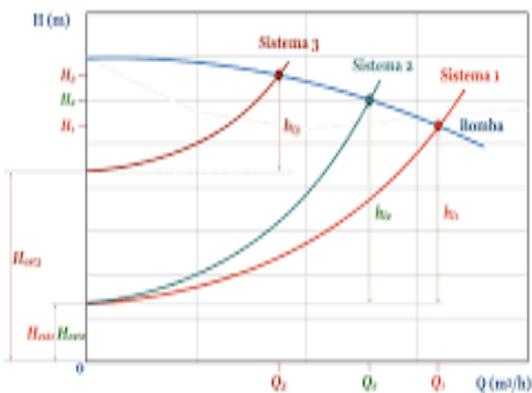


Hipótesis (ejemplo de un nivel de rigurosidad de cálculo):

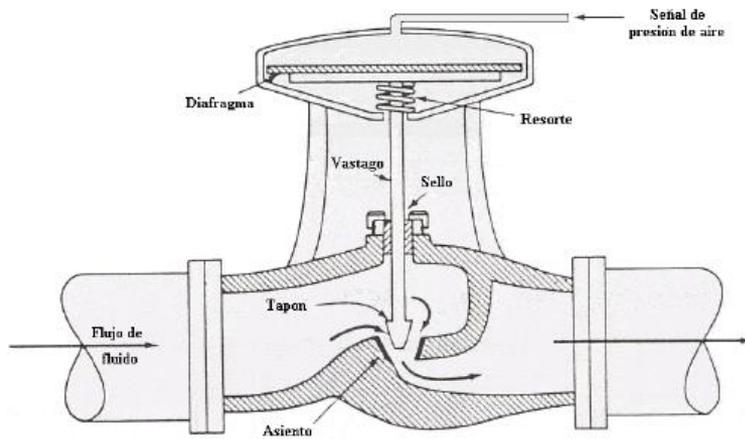
1. Estado estacionario.
2. El trabajo se calcula a partir del trabajo ideal de bombeado y la energía sobrante provoca el cambio de temperatura del fluido.
3. La compresión del fluido no produce cambio de fase.
4. Sin reacción química.

Bombas Centrífugas

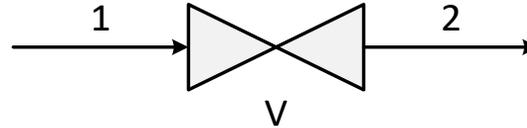
Bomba vs curva del sistema



Válvulas (de control, de regulación manual....)



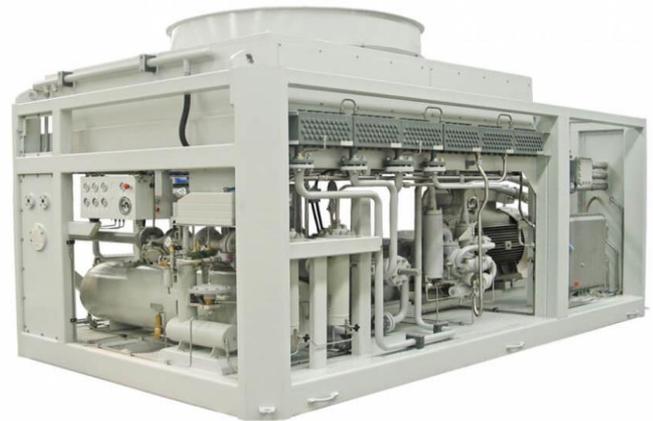
Hipótesis del Modelo de una válvula



Hipótesis:

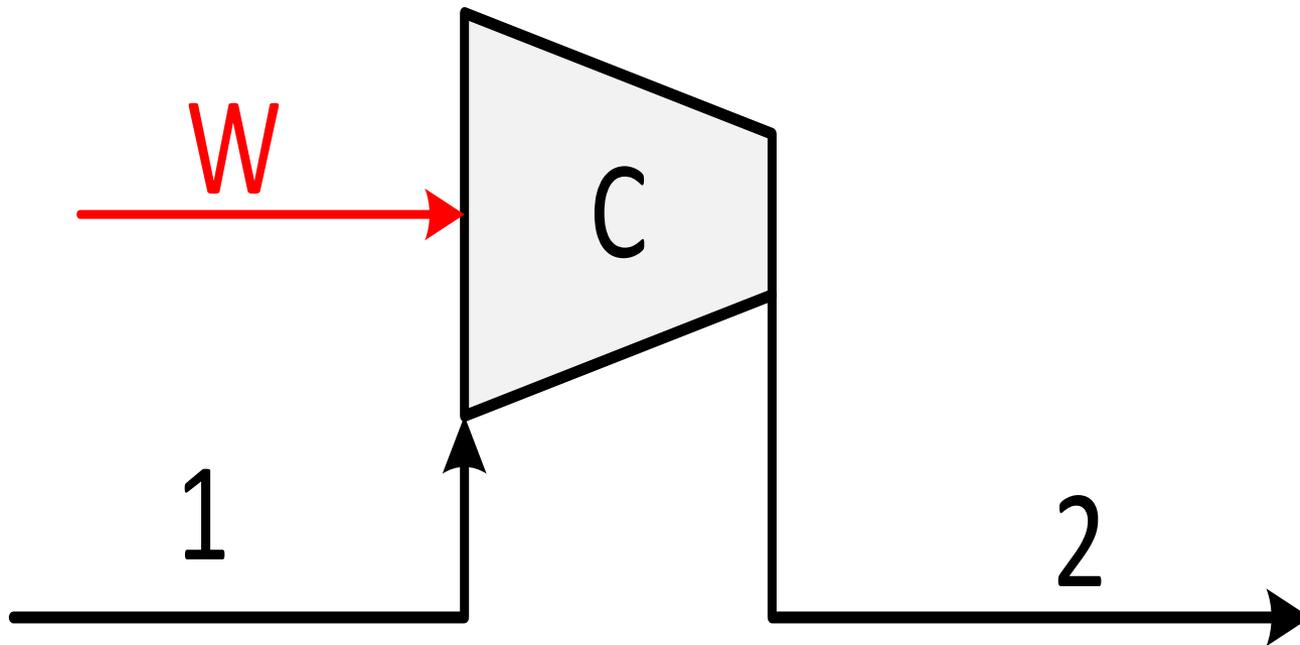
1. Estado estacionario.
2. Se considera isoentálpica.
3. El salto de presión del fluido no produce cambio de fase.
4. Sin reacción química.

Compresores



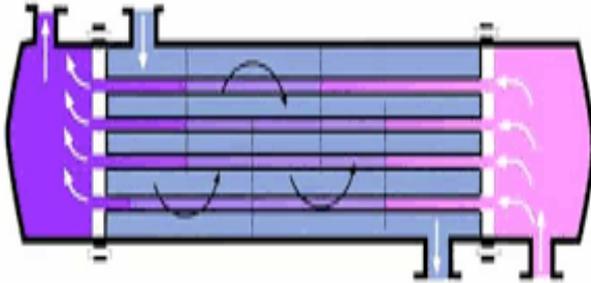
Símbolo de un compresor (y sus modelos asociados en el simulador)

En los simuladores comerciales existen diversos modelos disponibles, con distinta rigurosidad



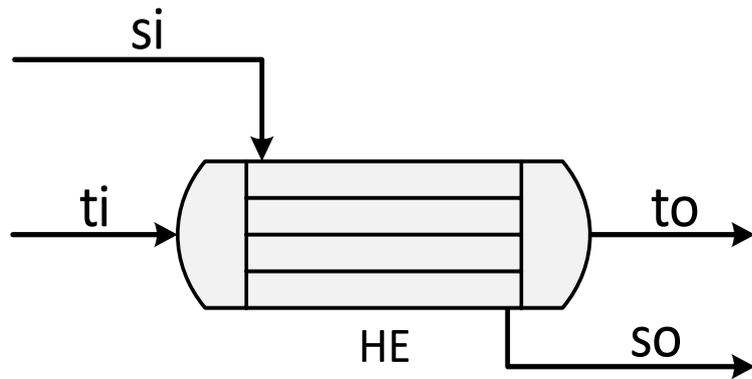
Intercambiadores de calor.

Igualmente, existen diversos arreglos o tipos de intercambiadores según las hipótesis asumidas en el modelo correspondiente



Intercambiadores de calor

En general se utilizan modelos sencillos en la etapa de resolución de balances de materia y energía. Luego pueden utilizarse modelos rigurosos para el diseño de los mismos.

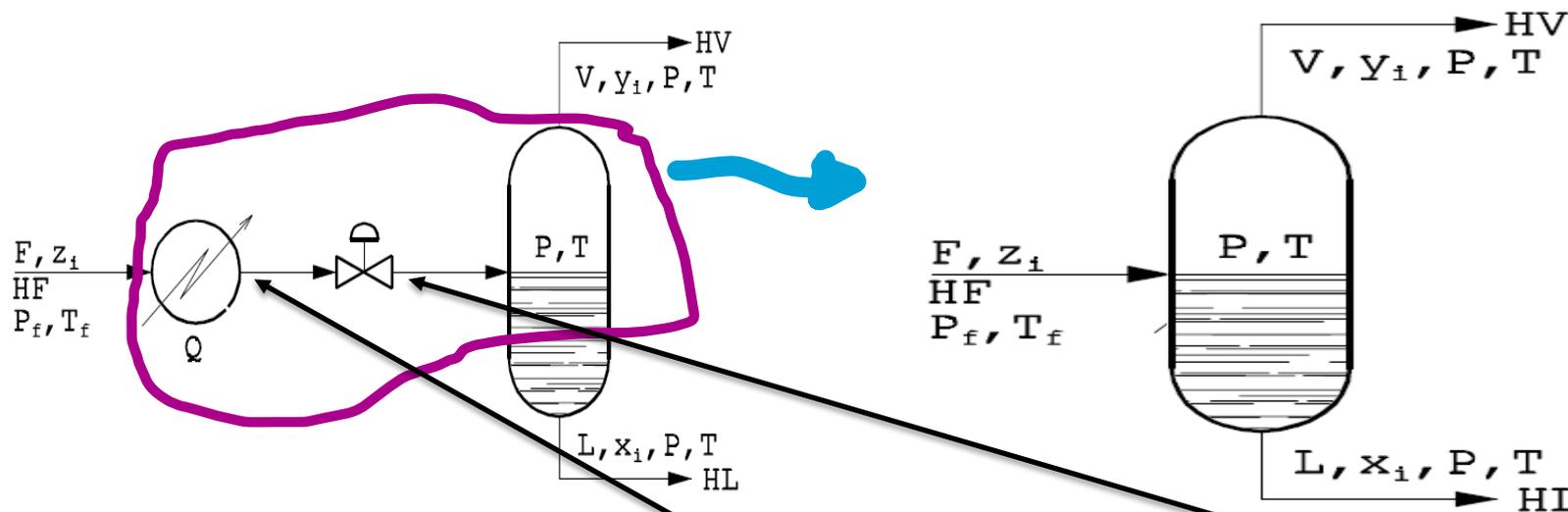


Separaciones por evaporación Flash



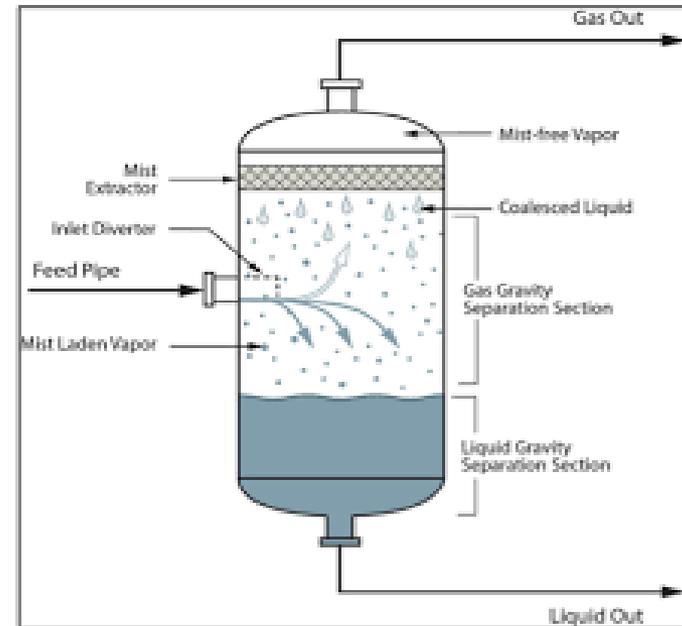
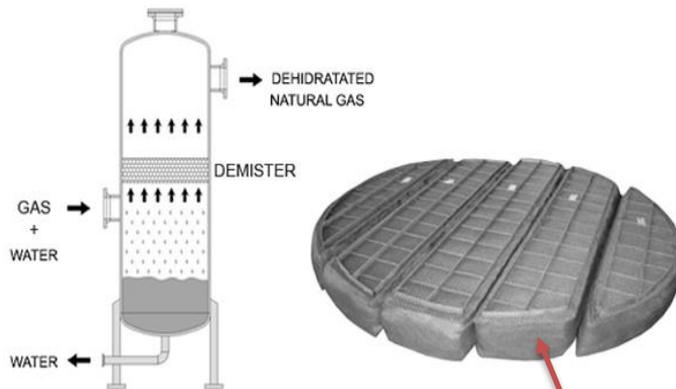
El Modelo engloba los elementos que actúan sobre los distintos cambios provocados sobre el fluido.

Existen diversos modelos para el Flash. Según sea el origen de la evaporación súbita. Por ejemplo, por caída de presión, o bien por incorporación de o extracción de calor. Todos los fenómenos se contemplan en el modelado de cada variante del equipo flash



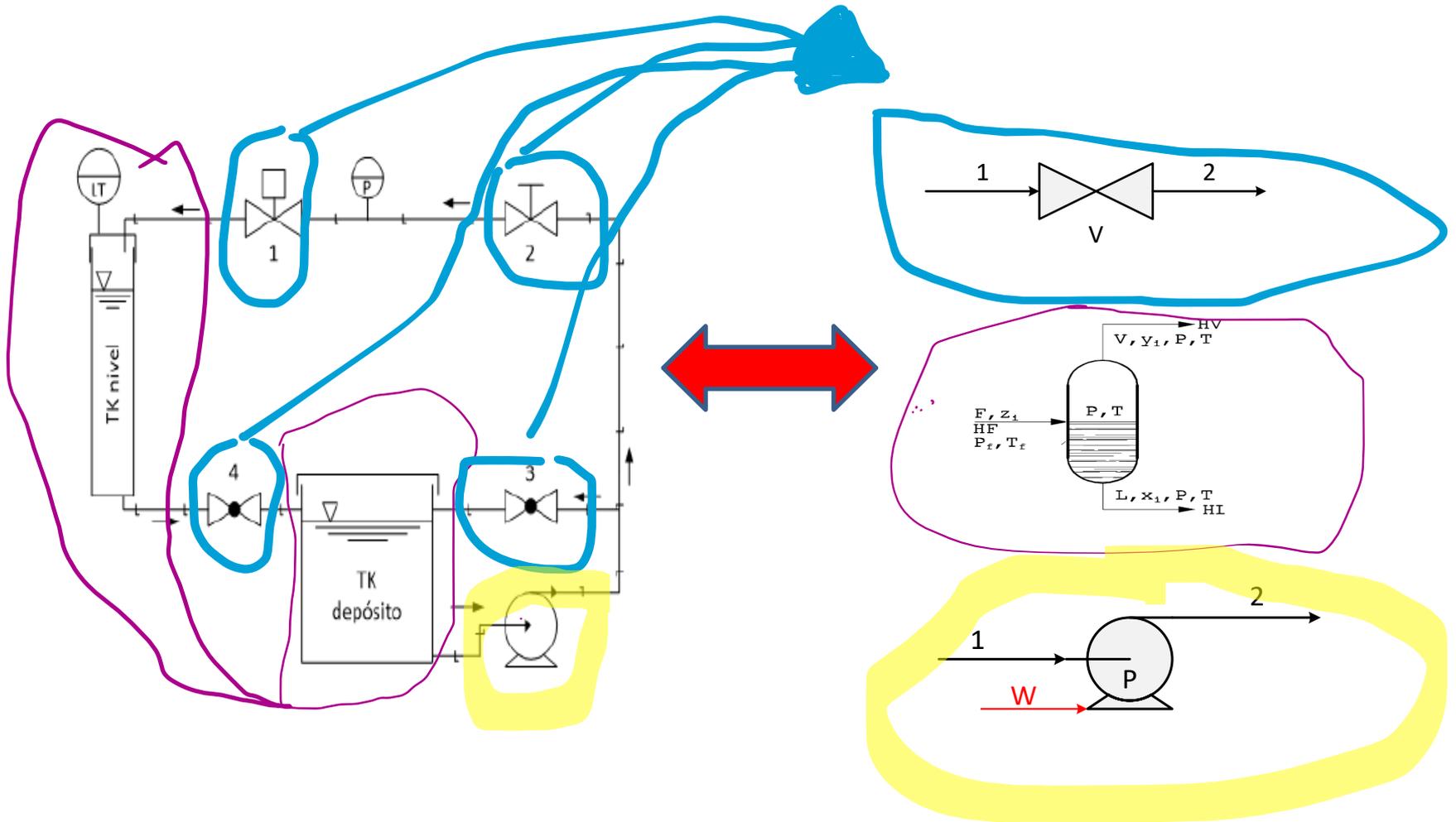
En cada caso, la fuerza impulsora o es la caída de presión que provoca la válvula (o alternativamente, la acción del intercambiador). En el caso de la válvula, el flujo aguas abajo es bifásico. El "flash" no debe asumirse solo como el "recipiente" separador..

Separador de Gotas (deminster)



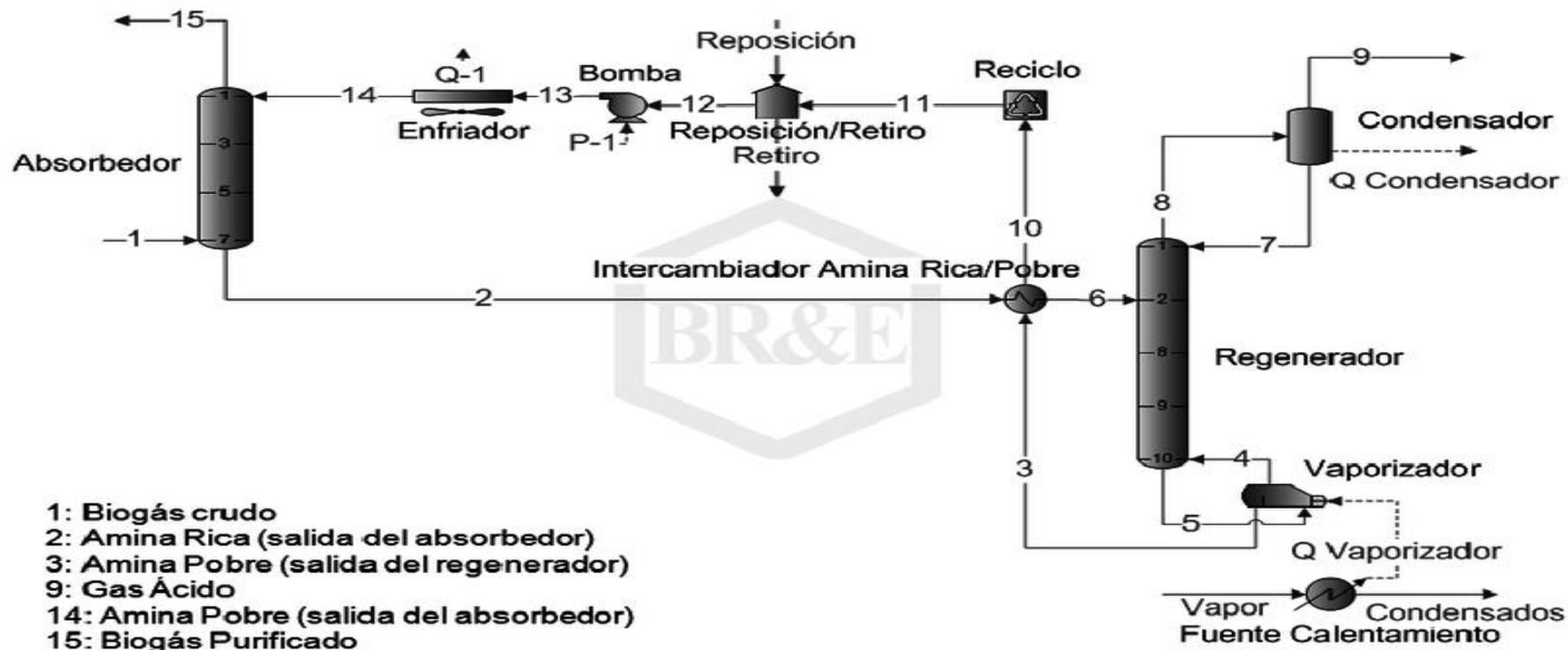
*En todos los casos, no deben confundirse los modelos de simulación y su nivel de rigurosidad, con el diseño final. A modo de ejemplo, para asegurar que el vapor no pierda pureza, el **deminster** evita el paso de gotas entre ambos espacios (líquido-vapor). Note en el esquema, los demás elementos del contenedor que deben ser diseñados en etapas posteriores del proyecto de diseño.*

Procesos. Flowsheet vs Diagrama de Flujo de Información



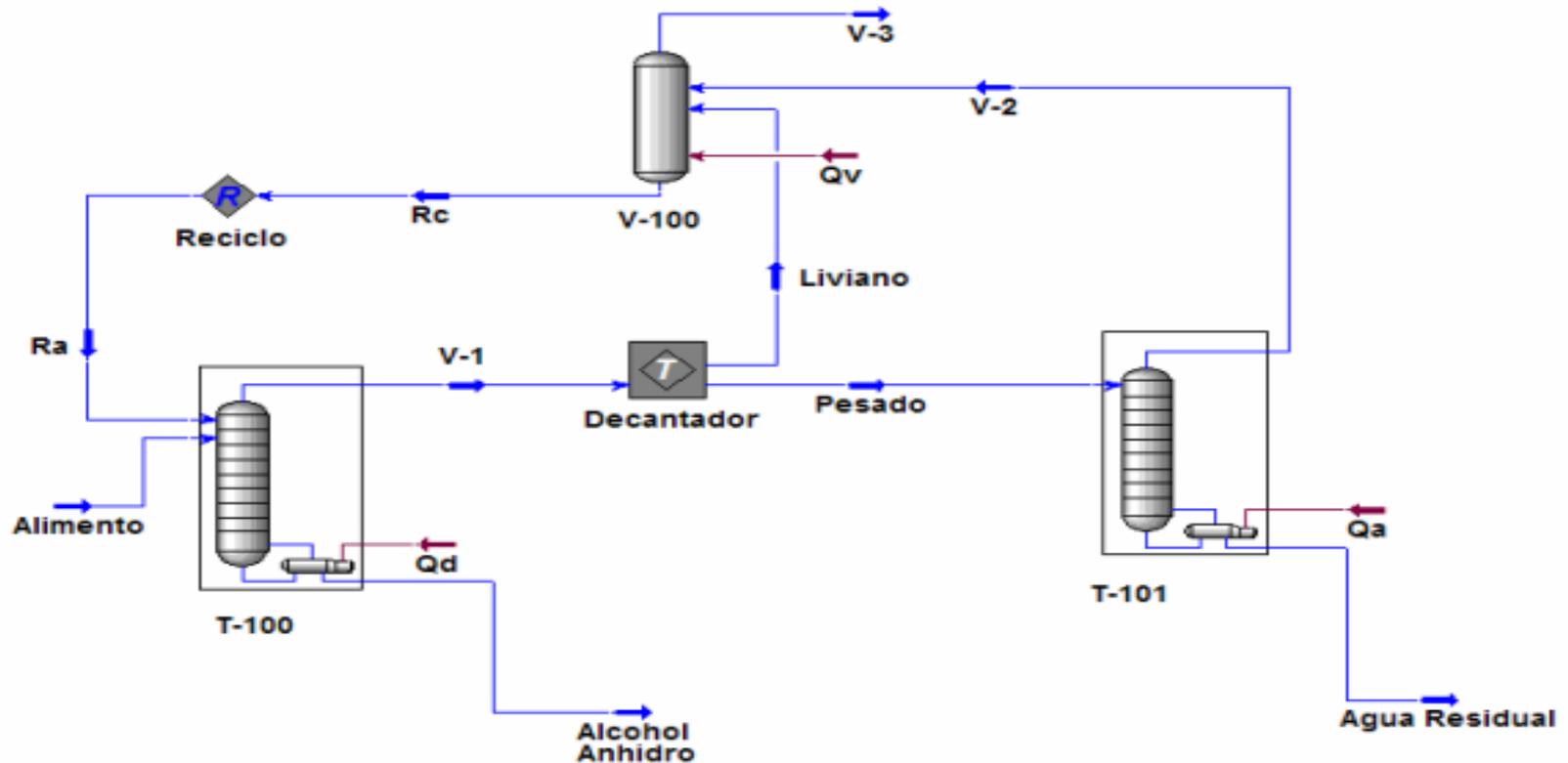
Ejemplo: DFI y esquema típico que muestra un simulador comercial. Proceso convencional de absorción-desorción para la purificación de biogás

Esquema del proceso convencional de absorción-desorción para la purificación de biogás. Simulación del Proceso de Absorción Química con Soluciones de Aminas para la Purificación Biogás. Betzabet Morero, Enrique A. Campanella



Ejemplo: Proceso de obtención de etanol puro

Parte de una planta para la obtención de etanol puro a partir de una solución en agua a concentración azeotrópica.



Ejemplo: Diagrama de proceso de obtención de Biodiesel. Deberá obtenerse el DFI correspondiente para incorporarlo a un simulador.

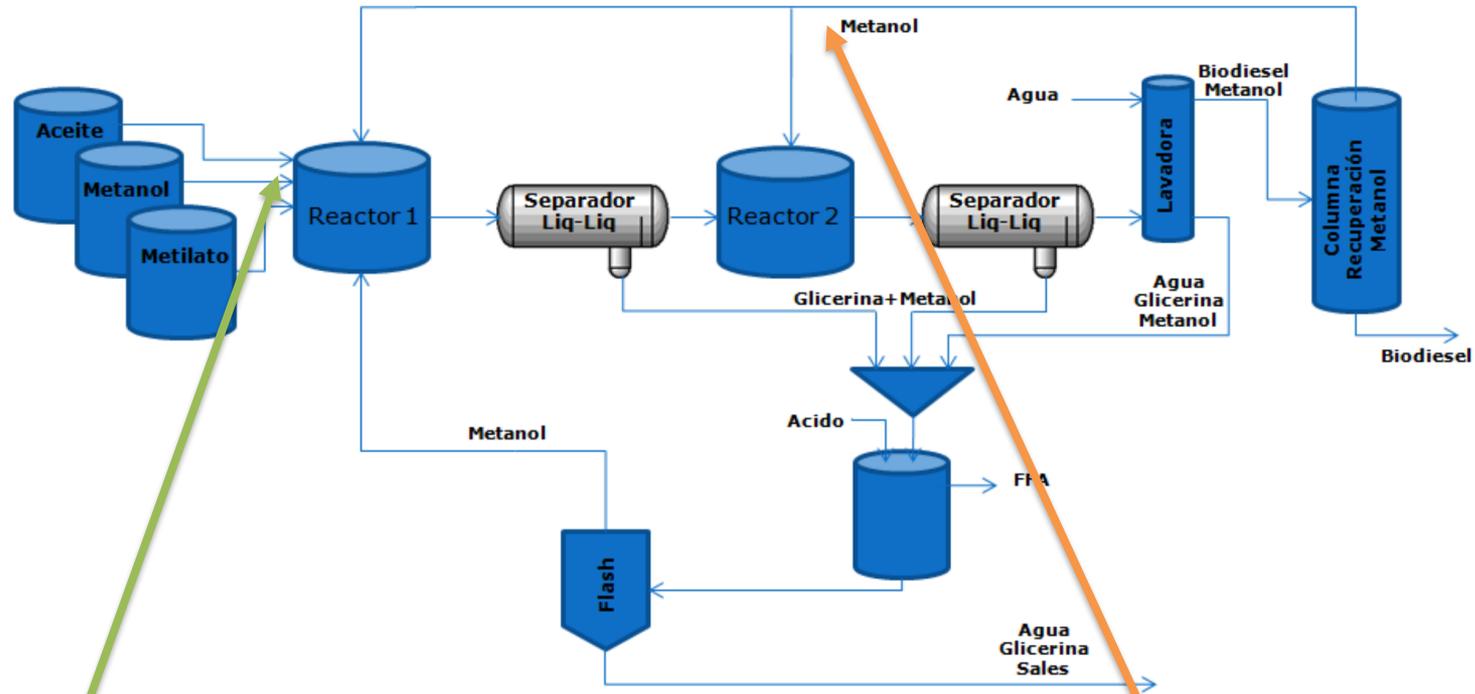


Fig. 1. Diagrama de flujo del proceso de producción de biodiesel.

Note por ejemplo que no están indicadas las bombas, tampoco está decidido si se simulan las bombas para el bombeo desde los tanques hacia el reactor, ya que pueden asimilarse como entradas fijas, entre otros puntos a decidir. Además, existen bifurcaciones a contemplar.

