

## CAPÍTULO II

# INTRODUCCIÓN AL DISEÑO DE PROCESOS QUÍMICOS. BREVES NOCIONES

Por  
**Nicolás J. Scenna y Sonia J. Benz**

### II.1 INTRODUCCIÓN

En el capítulo anterior se discutió someramente acerca de la existencia de distintos tipos de modelos y diferentes herramientas informáticas para implementar éstos. Se comentó que, para el diseño de equipos específicos o bien para la resolución de balances de materia y energía, por lo general, es suficiente aplicar procedimientos analíticos o numéricos apropiados para la resolución de sistemas de ecuaciones, ya sean algebraicas o diferenciales. Sin embargo, también se puntualizó que, cuando el problema es *crear* un proceso o diagrama de flujo para obtener ciertos productos a partir de determinadas materias primas (diseño del proceso), el conocimiento y el tipo de modelos a utilizar, son sustancialmente distintos.

La temática a abordar en los capítulos posteriores está centrada en resolver los balances de materia y energía. La simulación de los procesos químicos, tanto estacionaria como dinámica y, eventualmente, la optimización del sistema conforman el tema central de esta obra.

Por el contrario, el objetivo del presente capítulo radica en la introducción a la metodología de diseño de un proceso, incluso desde la generación de su diagrama de flujo (flowsheet) y estructura. Esto es importante, ya que no resulta apropiado simular u optimizar un proceso si paralelamente no nos cuestionamos acerca de la génesis del mismo o de las reglas que permiten en una forma sistemática, crear y evaluar diferentes alternativas para el diseño, de forma de poder decidir entre ellas de una manera adecuada.

La *síntesis de procesos* es una de las tareas más complejas y exigentes confrontada por el ingeniero químico. Desde un punto de vista pragmático, el uso de técnicas de síntesis de procesos se introdujo lentamente como consecuencia de las condiciones cambiantes en la producción industrial y el surgimiento de tremendos avances productivos y tecnológicos. En este punto, conviene aclarar que la mayoría de los procesos químicos en uso en la actualidad surgieron hace mucho tiempo, cuando no existían métodos sistemáticos para la generación de las estructuras óptimas de los mismos (camino de reacción, redes de intercambio, sistemas integrados, trenes

---

**Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos**

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

de separación, etc.). Resulta lógico pensar, por lo tanto, que estas innovaciones se fueron dando parcialmente, paso a paso, con el transcurso del tiempo. Desde este punto de vista, resulta ilustrativo el análisis de la evolución de las tecnologías utilizadas en los distintos procesos químicos (Rotstein y Stephanopoulos, 1979). En efecto, dado que en todo proceso químico existe la transformación fisicoquímica de materias primas en los productos deseados, se puede calcular el trabajo mínimo asociado (calculado termodinámicamente como un proceso ideal o reversible). Por lo tanto, se dispone de al menos un elemento de comparación, punto de referencia ideal u objetivo a alcanzar. Dicha magnitud sirve para comparar el consumo real de cualquier alternativa con respecto al trabajo mínimo. En este contexto, es interesante observar la evolución de diferentes procesos pertenecientes a diversos campos (no sólo a la industria química) que, mediante la incorporación de nuevos métodos y tecnología en el diseño, han avanzado hacia alternativas más interesantes y próximas a la óptima, respondiendo a la curva sigmoidea comentada en I.1.

Resulta complejo plantear en función de un esquema formal, la actividad de *diseño* en la ingeniería de procesos. En primer lugar y en forma simplificada, se podría afirmar que un proceso químico está vinculado al tratamiento de materiales, mediante transformaciones fisicoquímicas y/o biológicas, y/o procesos de separación física. En forma genérica, se denomina proceso a la *unidad o sistema estructural de transformación por medio del cual los materiales que ingresan se transforman en los productos deseados*. Esta unidad o sistema estructural está compuesto por módulos (equipos u operaciones unitarias), encargados de realizar tareas específicas (separación, calentamiento, reacción química, etc). Los equipos están conectados entre sí por medio de las corrientes que los vinculan, con el objeto de satisfacer la(s) tarea(s) especificada(s) de la mejor manera posible. Para utilizar un lenguaje común, se adopta un simbolismo esquemático que permite visualizar la topología (esquema estructural del proceso), que constituye el diagrama de flujo o *flowsheet*.

Sin embargo, éste poco puede aportar a menos que se especifiquen condiciones de operación (temperaturas, presiones, etc.) y las propiedades asociadas a las corrientes. Existen, por lo tanto, dos grandes grupos de variables que deben ser diferenciadas. En este contexto, llamamos *variables estructurales* a aquellas que están íntimamente ligadas a la estructura del *flowsheet*, es decir, que especifican la presencia de los distintos equipos y su diagrama de interconexiones. Por otro lado, están las *variables de operación* que representan condiciones operativas (temperatura, caudal, presión, etc.), y ciertas características funcionales de los equipos, como ser áreas, número de etapas, etc., por lo general identificadas como *parámetros de diseño*.

De hecho, existen numerosas variantes para el armado del diagrama de flujo de un proceso determinado, como así también, numerosas posibilidades para la asignación/especificación de las variables de operación y parámetros de equipo. El diseñador deberá optar por algún conjunto de ellas, de manera tal de optimizar la

estructura resultante en función de los distintos aspectos funcionales a considerar en la operación de plantas químicas. Nótese que cualitativamente, este problema no es distinto al que enfrenta un arquitecto al diseñar un edificio para ciertos fines, o un ingeniero eléctrico al diseñar un circuito para determinado objetivo.

Por consiguiente, la tarea de diseño lleva implícita *la necesidad* de *seleccionar* dentro de un espacio de posibilidades, aquellas alternativas que en base a un criterio predeterminado, cumplan con los objetivos deseados. En la búsqueda de lograr un planteo formal del problema de diseño, conviene plantear una *función objetivo* adecuada a ser optimizada. En este punto, conviene explorar los objetivos que se esperan de un proceso químico en general.

Es bien sabido que toda actividad productiva de bienes o servicios se encuentra permanentemente sujeta a un marco de referencia en función del cual se evalúa su factibilidad. Sin pretender analizar los distintos enfoques para cuantificar los beneficios de un proyecto (privado, social, micro-económico, macro-económico, etc.) el marco económico constituye la fuente cuyo *veredicto* resulta inevitable de contemplar en toda actividad de ingeniería. Por lo tanto, costos de operación, inversión, tasa de retorno, etc., son criterios que generalmente se tienen en cuenta en la función objetivo a optimizar.

Ahora bien, no es el factor económico el único componente que define la operabilidad de un complejo o proceso químico. En efecto, existen una serie de aspectos que necesariamente deben ser contemplados, como por ejemplo, *elasticidad* que se refiere a la habilidad del proceso para tolerar condiciones adversas tales como perturbaciones o variación en los parámetros, o *flexibilidad* que se refiere a la capacidad estructural y operativa del proceso para mantenerse funcionando con la mejor performance cuando las condiciones operativas corresponden a un rango de condiciones de diseño, o *controlabilidad*, *confiabilidad*, *impacto ambiental*, etc. Consecuentemente, el problema a resolver es multi-objetivo (Takama y Umeda, 1980). Estos problemas se caracterizan por no poseer una única solución. En efecto, se arriba a un conjunto mínimo de soluciones no dominadas. Por lo tanto, decidir entre las mismas, lleva implícito subjetivamente la *preferencia* del diseñador respecto de los objetivos.

Una característica muy importante a tener en cuenta respecto de la *función objetivo* a plantear en la tarea de diseño, refiere a su facilidad de ser representada (o modelada) matemáticamente. En efecto, si bien existen objetivos expresables como funciones matemáticas (ya sean continuas, discontinuas o discretas), existen aquellos que no pueden ser representados bajo esta perspectiva.

Dentro de este contexto, el problema completo, si es que puede formalizarse, podría ser formulado desde el punto de vista de la programación matemática como uno de optimización múltiple objetivo.

Optimice  $\{f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), \dots, f_N(\mathbf{x})\}$

### Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Sujeto a

$$\begin{aligned} h(\underline{x}) &= 0 \\ g(\underline{x}) &> 0 \end{aligned} \tag{1}$$

Las funciones  $f_1(\underline{x})$ ,  $f_2(\underline{x})$ , ..... y  $f_N(\underline{x})$  representan las N funciones objetivos a optimizar (minimizar o maximizar). Las funciones  $h(\underline{x})$  expresan generalmente, las restricciones correspondientes a los balances de materia y energía, mientras que las restricciones  $g(\underline{x})$  expresan zonas de operación factible, por ejemplo composiciones positivas, temperaturas positivas, restricciones propias del proceso, etc. El vector  $\underline{x}$  comprende variables o parámetros de operación y variables estructurales. Una simplificación que se suele adoptar consiste en expresar todos los objetivos en una “única medida”, que generalmente es económica. Obviamente, este enfoque, además de ser una simplificación, no siempre es posible. Por último, aún con una única función objetivo, se deben resolver aún los otros problemas, por ejemplo, cómo manejar la variable estructural.

En este contexto, debe encontrarse una metodología adecuada para resolver el problema matemático resultante. Por ejemplo, uno de los métodos propuestos para manejar las interrelaciones que vinculan los equipos entre sí y considerar las variables estructurales consiste en utilizar variables enteras (ceros y unos). Es decir que para considerar simultáneamente las variables estructurales (enteras) y las variables operativas (reales), se acude a la programación matemática mixta (Grossmann, 1985). Por otra parte, las funciones que describen los procesos químicos son por lo general fuertemente no lineales, por lo cual el programa matemático asociado, es obviamente no lineal. Otra característica, no menos compleja, asociada al vector de variables que debe considerarse en el modelado matemático del sistema, es el hecho que varias variables pueden tener un comportamiento aleatorio. Esto es, debido a características inherentes al proceso, factores climáticos o de mercado, etc., las variables de operación no tienen valores únicos y/o fijos sino que pueden fluctuar en torno a un valor estable, normal o nominal, admitiendo cualquier valor comprendido en un determinado rango de incertidumbre. Un ejemplo de esta problemática en la formulación de los problemas de síntesis de redes de intercambio calórico flexibles y de trenes de destilación integrados flexibles, puede verse en Galli (1990) y Benz (1991), respectivamente.

Cabe mencionar que más que interesados en analizar específicamente el problema de optimización, que será abordado en el Capítulo XI y XII, contemplando solo una serie de problemas simplificados relacionados con procesos a estructura dada, aquí nos interesa *bosquejar* la naturaleza del problema cuando es planteado en su forma global, y *resaltar* la dificultad inherente cuando se pretende modelar *todos* los aspectos a tener en cuenta en los procesos reales. Resulta redundante en este punto, afirmar que *en el estado del arte* actual, el problema de diseño planteado

previamente (esto es, optimización multi-objetivo no lineal, con variables de decisión tanto continuas como discretas, variables estructurales, variables aleatorias, funciones no lineales y funciones difícilmente expresables matemáticamente), resulta de solución prácticamente imposible.

Han sido muchos los intentos de resolver, aunque sea parcialmente, el problema global. Sin embargo, todos los métodos propuestos son sólo efectivos para casos de muy pequeña dimensión.

Para las funciones no expresables matemáticamente, así como para el tratamiento de la incertidumbre que involucra la toma de decisiones en áreas subjetivas por parte del diseñador, se están consolidando las herramientas que se basan en el concepto de inteligencia artificial y sistemas expertos, de los cuales una somera idea se ha desarrollado en el capítulo anterior. Sin embargo, si bien se ha avanzado enormemente, las herramientas más recientes sólo cubren aspectos parciales en la tarea de diseño, y no la problemática global en forma unificada.

## II.2 ETAPAS EN LA TAREA DE DISEÑO

Para modelar un problema complejo como el descripto, que no es posible resolver basándose en una herramienta o algoritmo matemático que involucre todos los aspectos a considerar en forma simultánea, resulta lógico recurrir a la metodología desarrollada en el campo de la *teoría general de sistemas* (Umeda 1982). En efecto, tal como se expuso en la sección I.4., dada la elevada magnitud y complejidad del problema que nos ocupa, es muy útil adoptar la estrategia de subdividirlo en subproblemas que sean factibles de ser abordados y, a partir de las soluciones parciales generadas, encontrar la solución al problema global.

Dentro de este contexto, las etapas secuenciales aconsejadas para realizar la tarea de diseño, comprenden: (1) la definición del problema, (2) el establecimiento de la función objetivo, es decir, la determinación de los criterios en función de los cuales deben seleccionarse alternativas, (3) la síntesis del sistema propiamente dicha, que implica la génesis del conjunto de alternativas estructurales posibles, y por último, (4) la reducción del espacio de alternativas, seleccionando aquellas que cumplan en forma óptima con las especificaciones establecidas. En consecuencia, *la etapa de síntesis* en el diseño del proceso es el paso creativo que implica la determinación y generación del conjunto de alternativas estructurales posibles capaces de cumplir con los objetivos especificados. Queda claro que la síntesis de un proceso involucra decisiones en dos espacios distintos: (a) el espacio de las diferentes alternativas estructurales, definidas por la topología y la naturaleza de las interacciones entre las unidades; (b) el espacio de los diseños alternativos para cada una de las unidades de operación que componen el sistema. En contraste con la etapa de síntesis, la *etapa de análisis* implica la investigación de las características de cada alternativa generada, por ejemplo, mediante la evaluación de las variables de salida, conociendo las características del sistema y las variables de entrada. Por lo general

se utilizan reglas heurísticas con las cuales es posible reducir el número de estructuras generadas en la etapa de síntesis. La *tarea de optimización* se plantea generalmente en la etapa de análisis, y permite seleccionar el mejor sistema entre las alternativas posibles. Por lo general, la optimización del sistema en el primer espacio de decisiones se formula como un problema de programación entera mientras la optimización en el segundo espacio resulta en un problema de programación continua, no-lineal. La naturaleza mixta entero-real del problema de optimización, su no linealidad y su alta dimensionalidad, crea un problema matemático difícilmente superable.

Dentro de este contexto, se comprende que el núcleo central de la tarea de *diseño en la ingeniería de procesos*, de acuerdo a la visión de la descomposición del problema global en sub-problemas o etapas independientes, está constituido por el lazo iterativo *síntesis/ análisis/ evaluación-optimización*. Consecuentemente, no resulta extraño desde una perspectiva histórica, la aparición cronológica de procedimientos o algoritmos para implementarlas, en general como instrumentos independientes. No obstante, aún hoy (y en el futuro a mediano plazo), el alcance de las herramientas o metodologías de implementación masiva propuestas resulta parcial. En efecto, no existe posibilidad práctica de implementar una herramienta efectiva o algoritmo de cálculo, o procedimiento secuencial, que contemple simultáneamente todas las etapas y variables que deben necesariamente ser tenidas en cuenta. Esto podrá revertirse en un futuro, pero dada la complejidad del problema, todavía habrá de dedicarse mucho esfuerzo de investigación al respecto y muy probablemente deberá esperarse bastante tiempo para lograrlo.

Debido a la elevada dimensión de los problemas asociados a la tarea de diseño, su elevado índice combinatorio (propios de la expansión en árboles como en el ejemplo analizado en la sección I.4) y la gran cantidad de información que debe manejarse, la única herramienta viable para tal fin resultan ser los métodos computacionales.

La *etapa de análisis* fue la primera en desarrollarse y manifestarse bajo esta óptica. En efecto, en la década del 70 comienza a consolidarse una línea de investigación que abarca los métodos computacionales en la ingeniería química; en particular la simulación de procesos por computadora o *process flowsheeting*, como una parte de una actividad más general, la actividad del diseño de procesos asistido por computadora (*Computer Aided Design-CAD*). En forma similar, con respecto a la *etapa de síntesis*, los conceptos utilizados para la construcción de algoritmos se nutren de los más variados campos del conocimiento. Programación mixta, álgebra booleana, termodinámica, computación, sistemas expertos, etc., son algunos de los basamentos conceptuales que dieron sustento teórico a los diversos algoritmos propuestos para la generación de estructuras y la selección de la óptima.

Complementando la idea expuesta más arriba, además de no existir *una herramienta computacional (programa o algoritmo) capaz de resolver el problema*

---

### **Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos**

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

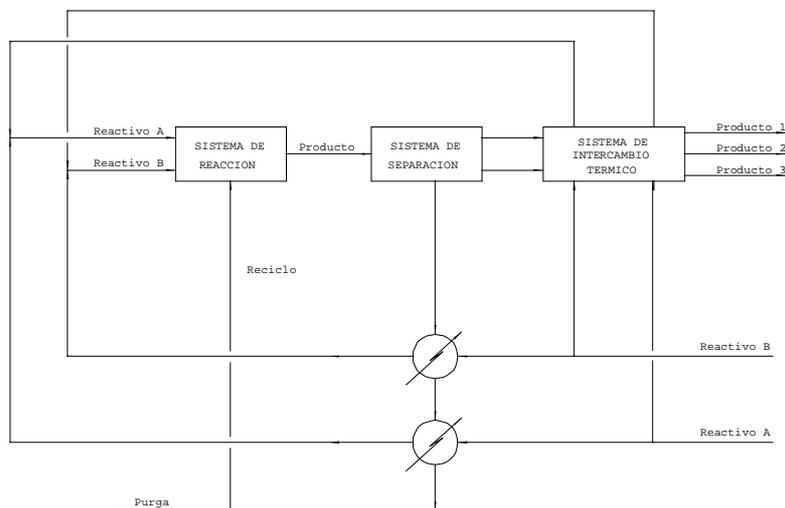
ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

*del ciclo completo de actividades en la tarea de diseño*, debido a la gran variedad de alternativas que deben contemplarse, *tampoco* existe algoritmo efectivo para la *síntesis de procesos genéricos completos*. A medida que se simplifica (particiona) el problema, es decir, se adoptan subsistemas del complejo a diseñar, los algoritmos propuestos se caracterizan por su mayor contenido formal y su robustez. Tal es el caso de la síntesis de trenes de destilación, con o sin integración energética, sistemas de control, redes de intercambio calórico, caminos de reacción, etc. Sobre estos métodos existe numerosa bibliografía, pudiéndose citar como revisiones relevantes los siguientes trabajos: Hendry y col. (1973), Hlavacek (1978), Nishida y col. (1981), Westerberg (1980), entre otros.

Para ejemplificar el problema, supongamos un proceso genérico que contempla una etapa de reacción a la cual ingresan dos corrientes que contienen los reactivos, y como producto se obtiene una corriente líquida. Como se indica en la Figura (II.1), los reactivos no reaccionados, al igual que los productos colaterales o secundarios deben ser separados de los productos finales. Además, por razones de economía, los reactivos no reaccionados se reciclan al sistema, ya que la conversión no es muy elevada y la reacción, que es exotérmica, está limitada por equilibrio. Dado que los productos deben enfriarse a temperatura ambiente, existe la necesidad de establecer un intercambio calórico para lograr tal objetivo. Con el objeto de recuperar energía, se utilizan las corrientes de productos para precalentar las corrientes que ingresan al reactor. En la Figura (II.1) se esquematizan las secciones genéricas del proceso, tales como el bloque o sección de reacción, el de separación, el de intercambio calórico (representado por los diversos intercambiadores indicados), etc. Este problema es el típico caso con el cual se ejemplifica la necesidad de optimizar una relación de reciclaje, ya que los tamaños relativos de los equipos en las diversas secciones, además de la conversión alcanzada y la extensión de las reacciones no deseables o secundarias, son función del mismo.

Dentro de este contexto, plantearse la síntesis del proceso completo implica la generación de las alternativas estructurales correspondientes a todos los bloques especificados. Más aún, se puede plantear además la posibilidad de nuevas materias primas, nuevos caminos de reacción, otras temperaturas o presiones de operación para minimizar reacciones secundarias, etc. Como se desprende y merece remarcar, el espacio de alternativas a explorar es sumamente extenso, aún para un problema sencillo como el planteado.

Si se particiona el problema global en sub-problemas, se puede plantear la síntesis del sistema de reacción, la del sistema de separación, la del sistema de intercambio calórico, y la de otros subsistemas en forma separada del resto. Este es el único enfoque factible hasta el presente al enfrentar un proceso genérico, y en la próxima sección se discutirán someramente algunos aspectos característicos.



Esquema en bloques de un proceso genérico.

Figura II.1

### II. 3 LA TAREA DE SÍNTESIS DE PROCESOS QUÍMICOS

Una vez analizado o introducido brevemente el problema general del diseño de procesos químicos, aquí nos ocuparemos de una de sus etapas, aquella en la cual debemos centrarnos principalmente en la generación de alternativas estructurales eficientes que satisfagan el/los objetivo(s) deseados para nuestro proceso.

El problema de síntesis puede ser definido simplemente como una tarea de invención de la estructura y la determinación de las condiciones operativas del proceso. El término fue definido originariamente por Rudd (1968). La importancia de las estrategias de síntesis de procesos pueden comprenderse tomando en cuenta el hecho que para cada nueva idea o nuevo producto, generalmente sólo menos del uno por ciento sobrevive para lograr el *status* de diseño definitivo o rentable. También es común que para la selección del *flowsheet* definitivo del proceso, se descarten más de  $10^{10}$  alternativas; esto es, durante el proceso de diseño se deben generar (y evaluar) ese número explosivo de opciones. Entonces, es muy fácil comprender la meta: generar herramientas para la síntesis de procesos que minimicen el esfuerzo para crear, evaluar y optimizar todas las alternativas posibles para el mismo, dados sólo unos pocos datos a partir de los cuales el diseño del proceso debe ser originado.

Obviamente, al igual que los heurísticos utilizados en el ejemplo de la sección I.4, deberán encontrarse procedimientos para evitar explorar todos los nodos en la expansión del árbol de alternativas correspondientes.

Más aún, el problema de diseño es *abierto* debido a que es muy difícil seleccionar una solución. Muy probablemente sea posible encontrar (con mayor esfuerzo) opciones competitivas para una solución que se presente como diseño final, ya que como mencionamos, existen múltiples objetivos simultáneos que deben considerarse.

De acuerdo a Westerberg (1980) la *síntesis de procesos* es la actividad de toma de decisiones para conjeturar, por ejemplo, (a) cual de las muchas partes componentes disponibles debieran usarse, o (b) como estas partes deberían interconectarse o ensamblarse para estructurar la solución óptima a un dado problema de diseño. El desafío puede plantearse tanto para crear un nuevo proceso o para mejorar de acuerdo a un dado objetivo, uno existente.

Según vimos, la tarea de diseño involucra un procedimiento iterativo, en el cual la etapa de síntesis está siempre seguida por una etapa de análisis, la cual determina si la estructura y los parámetros propuestos funcionarán como se espera (Stephanopoulos, 1981). Si las metas de diseño no se alcanzan, se requiere un nuevo paso de síntesis para crear o una solución factible o una solución mejorada.

Acerca de las metas u objetivos a alcanzar durante el diseño del proceso, puede mencionarse que la productividad y rentabilidad, además de la confiabilidad, controlabilidad y otros factores son siempre deseados, pero se sabe que son objetivos en competencia. Todos los procesos requieren, por ejemplo, flexibilidad para tener en cuenta el ensuciamiento, la desactivación catalítica, cambios en la alimentación, cambios en la demanda y en las especificaciones del producto, variaciones en la operación estacional, etc. Estas modificaciones en las condiciones operativas del proceso requieren modificaciones en el diseño de muchas unidades (por ejemplo intercambiadores de calor, reactores y separadores). Por otra parte, es necesario analizar la factibilidad del arranque y parada del proceso, dado que en muchos casos buenos diseños nominales deben abortarse debido a problemas insalvables en las citadas operaciones. Finalmente, existe una creciente necesidad de considerar restricciones ambientales en el diseño, dado que aun cuando algunas alternativas parecen prometedoras desde el punto de vista del costo y de la operabilidad, deben eliminarse cuando se analiza el problema de los efluentes. Resumiendo, cuando se plantean varios objetivos simultáneamente, por lo general, éstos se encuentran en conflicto entre sí, y debe adoptarse una técnica para la toma de decisiones óptima en cada caso. Además, para poder encontrar una respuesta válida, debe disponerse de herramientas apropiadas.

Definitivamente y debido a la complejidad del problema, la secuencia de la etapa de síntesis seguida por una de análisis es iterativa hasta que se encuentra un diseño satisfactorio. Ambos pasos pueden involucrar desde el uso de modelos muy

simples a bastante complejos; por ejemplo, técnicas auxiliares de computación que ayudan al ingeniero a manejar variables estructurales (generación de estructuras expandiéndolas en un árbol o método equivalente) y la evaluación de los costos (que involucra el diseño preliminar de los equipos y a su vez implica la resolución de los balances de materia y energía y a veces de cantidad de movimiento) para analizar su viabilidad técnica y económica. Para ello serán necesarias herramientas de simulación estacionaria y/o dinámica, programas de costeo, optimización, programas de diseño de equipos, etc., los cuales serán analizados en los capítulos siguientes.

El objetivo ideal, harto difícil de lograr, es incorporar y crear metodologías eficientes y métodos de diseño automatizados o asistidos por computadora, que contemplen todos estos aspectos en un modelo, implementado en un procedimiento, metodología o herramienta única.

### ***Descomposición del problema en sub-problemas***

Cuando se enfrenta un problema complejo, la experiencia y los postulados de la teoría general de sistemas aconsejan una división (partición) del mismo en sub-problemas más sencillos, con una determinada estrategia, para luego componer la solución a partir de las soluciones parciales.

Existen muchas alternativas de descomposición para elegir y lograr una solución adecuada para un problema dado, pero se requiere encontrar la mejor para cada diseño específico. La estrategia de descomposición óptima dependerá del problema de diseño a resolverse.

Las pautas señaladas por Westerberg y col. (1979), también contempladas en la llamada *estrategia de la cebolla* (Linnhoff y Townsend, 1982), (Shenoy, 1995) y el enfoque jerárquico de Douglas (Douglas, 1988) entre otros, son ejemplos de procedimientos de descomposición.

De las mencionadas, una de las estrategias más naturales y sencillas de comprender es la propuesta por Douglas (1988). En efecto, se propone que el problema de síntesis y análisis para el proceso completo, definido como una actividad creativa bajo la cual se generan las ideas y se traducen en los equipos y procesos para producir nuevos materiales, puede descomponerse en un enfoque jerárquico. Esta estrategia, como la actividad de un pintor haciendo un bosquejo preliminar, implica evolucionar hacia la solución a través de sucesivos refinamientos de una solución inicial aproximada. Se propone una estrategia de diseño desarrollando en principio, soluciones muy simples para luego agregar capas sucesivas de detalles.

El enfoque jerárquico descompone al problema completo en una serie de sub-problemas usando una jerarquía de decisiones. Para procesos petroquímicos, o procesos donde predominen los sistemas líquido-líquido o líquido-vapor, la jerarquía de decisiones puede sintetizarse muy someramente en los pasos de toma de decisiones secuenciales siguientes:

- Decidir entre procesos batch versus procesos continuos.

- Decidir la estructura de reacción.
- Adoptar la estructura de entrada-salida del proceso.
- Adoptar la estructura de ciclos del proceso (corrientes de recicló).
- Adoptar la estructura general del sistema de separación.
- Diseñar la estructura que permita la integración energética a los efectos de minimizar el consumo.

En el caso que se trate de procesos batch o procesos en los que debe manejarse sólidos, es necesario introducir otras secuencias de decisiones (ver Douglas, 1988).

Obviamente, dado que la jerarquía de decisiones es heurística en su naturaleza, es posible incorporar un nuevo orden o nuevos pasos en la estrategia o procedimientos de decisión, luego de acumular nuevas experiencias.

Debe notarse que se fija un orden de prioridades relativas al fijar la secuencia de sub-problemas a resolverse. Por ejemplo, se supone más conveniente preocuparse primero por la estructura de reacción y el flujo de materiales, que por la red de intercambio calórico. No obstante, muy probablemente cuando se llegue a la etapa de diseño de la red de intercambio, deban modificarse decisiones tomadas en etapas anteriores, lo cual implica el ya anticipado proceso iterativo, hasta lograr un diseño final conveniente. Cualquiera sea la estrategia elegida, es importante que cada solución parcial obtenida se verifique considerando el problema completo. Se debe por lo tanto implementar la retroalimentación de la información hacia los pasos anterior y posterior durante el ciclo de etapas de la tarea de diseño (lazo de iteración).

Otra metodología, el modelo de la cebolla - ver Figura (II.2)-, provee una especie de cuadro esquemático de la jerarquía adoptada para la partición del diseño de procesos en diversos subsistemas. Aquí, comenzando con síntesis de los caminos de reacción química, el corazón de la cebolla, se evolucionará hacia el *diseño de la red de reactores*, considerando la selectividad y capacidad. El diseño del reactor y las especificaciones de productos determinarán el *diseño del subsistema de separación (y recicló)*, que forma la tercer capa de la cebolla.

Las tareas de reacción y separación definen en gran parte los requerimientos de energía y, por lo tanto, la cuarta capa involucra la *síntesis de la red de intercambio energético o de intercambiadores de calor*. Dado que la recuperación de energía entre corrientes de procesos es generalmente insuficiente para encontrar las necesidades de energía total, se requiere de servicios auxiliares externos. Por lo tanto, la quinta capa de la cebolla es el diseño del sistema auxiliar. Para considerar cuestiones de operabilidad (como ser flexibilidad, controlabilidad, etc.) la capa final involucra el diseño del sistema de control. Como se remarcó más arriba, se debe enfatizar que ninguna "capa de la cebolla" puede diseñarse antes de especificar las capas internas. Simultáneamente, las capas internas no pueden lograrse sin diseñar la "cebolla completa" y considerar las interacciones.

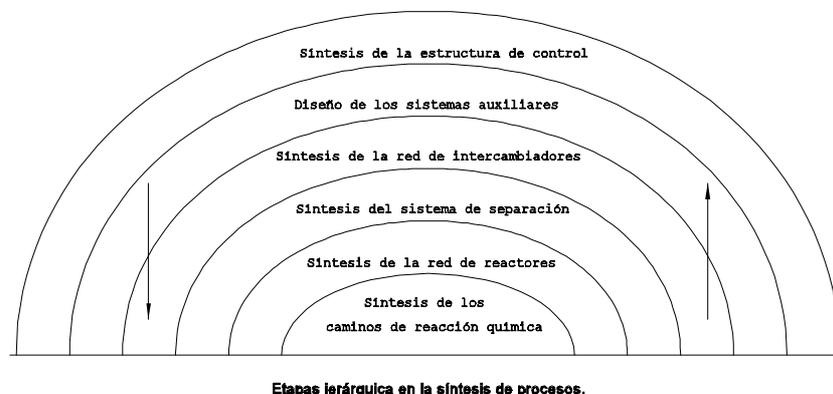


Figura II.2: Modelo de la cebolla

Consecuentemente, se necesitan estrategias *efectivas* -fáciles de usar y adecuadas para obtener las soluciones óptimas- para encarar la síntesis de todos los subproblemas o subsistemas arriba planteados, permitiendo reducir el esfuerzo y tiempo requeridos para completar el diseño completo, esto es, el recorrido ida y vuelta, iterativamente, por las capas jerárquicas indicadas.

De aquí se comprende la importancia de contar con procedimientos efectivos para la síntesis de subunidades de procesos, tales como redes de intercambio calórico, etapas o caminos de reacción, secuencias de destilación (con o sin integración energética), estructuras de control, sistemas de servicios auxiliares, sistemas integrados de generación de potencia y energía, etc.

En este contexto, una de las primeras contribuciones en el área fue la comprensión de los flujos energéticos en los procesos, a través de los trabajos debidos a (Hohmann, 1971), (Linnhoff y Flower, 1978) y (Umeda y col. 1979b) entre otros.

La segunda área fue la síntesis del sistema de separación, abarcando en un principio sólo los procesos basados en destilación de sistemas ideales para lograr, a partir de una mezcla dada, productos puros, a través de las contribuciones debidas a (Hendry y Hughes, 1972), (Rudd y col., 1973) y otros. Luego, el área se extendió hacia la síntesis de sistemas más complejos que incluyen mezclas no ideales, sistemas integrados, etc., según puede juzgarse a partir de los trabajos de (Koehler y col., 1992), (Kaibel y col., 1987) entre otros. Existen también metodologías que contemplan otras técnicas de separación como destilación extractiva, destilación reactiva, evaporación, cristalización, membranas, etc. Obviamente, a medida que se agregan opciones, la dimensión del problema se incrementa velozmente.

La síntesis de secuencias o caminos de reacción para producir un compuesto especificado (o varios) -esto es, la selección de las materias primas y la determinación

de la secuencia de reacciones químicas que transformen materias primas disponibles en el mercado en los productos deseados-, se relaciona con el problema de síntesis del sistema de reactores. Los reactores son el corazón del proceso. Así, la síntesis de este sistema es muy importante. En muchos casos prácticos, la síntesis de las etapas o caminos de reacción (de las diferentes materias primas a los productos deseados) se plantea en forma desarticulada respecto de la síntesis de la estructura de la red de reactores, debido a la complicación que conlleva el diseño unificado desde el punto de vista operacional.

### *Síntesis de caminos de reacción*

Para química fina y de las especialidades, al igual que otros productos, el camino de reacción es un punto clave para sintetizar un proceso factible. Para que un camino de reacción sea comercialmente conveniente debe ser técnica y económicamente eficiente; esto es, la reacción debe poder realizarse en condiciones normales y el valor del producto debe ser superior a los costos involucrados totales. Las principales incógnitas se refieren a la selección de las materias primas a ser utilizadas, a la secuencia en que deben introducirse las mismas y cuáles deberían ser las reacciones químicas a emplearse, para superar la diferencia en la naturaleza de las especies entrantes y salientes.

En la última década se desarrollaron muchas herramientas prácticas para la síntesis de diversos tipos de moléculas, como resultado del desarrollo de la química orgánica e inorgánica, la bioquímica, biología molecular y la biotecnología. (Corey y col., 1969), (Wipke, 1974), (Gelernter, 1973) entre otros, propusieron los primeros métodos para sintetizar moléculas orgánicas. Más tarde, con el objeto de mejorar la eficiencia de las estructuras de producción existentes, (May y Rudd, 1976), (Argnihotri y Motard, 1980), (Govind y Powers, 1981) entre otros, analizaron el mismo problema introduciendo la optimización de costos.

Al plantear el problema de síntesis de los caminos de reacción, se pueden identificar básicamente cuatro objetivos a optimizar:

- i.- los costos del sistema de producción resultante (minimizar),
- ii.- el número de los pasos de reacción requeridos (minimizar),
- iii.- la conversión y la producción (maximizar), y
- iv.- el uso intensivo de las materias primas básicas (maximizar), (por ejemplo, el carbón en la industria petroquímica).

Se ha avanzado considerablemente en el desarrollo de procedimientos efectivos para generar estructuras de pasos de reacción alternativos. Esas estrategias pueden clasificarse en dos categorías, según empleen métodos analíticos o basados en la información acumulada a través de la experiencia humana. Los métodos basados en el análisis son más recientes y utilizan representaciones rigurosas para la creación e innovación de secuencias de reacción alternativas previamente desconocidas, pero al mismo tiempo, generan un gran número de pasos de reacción obsoletos. Los

---

## **Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos**

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

métodos basados en la información acumulada en paquetes computacionales, permiten generar secuencias que si bien, son atractivas para el diseñador, suelen carecer de *imaginación*, ya que ellos simplemente organizan y sistematizan la química conocida. Sin embargo, con la mejora en los métodos basados en inteligencia artificial se logran herramientas cada vez más potentes y efectivas, tomando las ventajas de ambos enfoques.

#### ***Síntesis del sistema de reactores***

Una vez que se seleccionaron las reacciones químicas a realizarse en el proceso, debemos sintetizar el sistema de reactores. Esto es, qué tipo de reactores conviene utilizar, (por ejemplo, si son del tipo batch, reactores tanque agitados continuos, tubulares, de lecho fluidizado, etc.), cuántos reactores y cómo deben estar interconectados entre sí y/o con el proceso completo. Entonces, en base al número de pasos de reacción, interesan las interconexiones entre los reactores a ser usados, etc. (Umeda y Ichikawa, 1972). Este problema puede considerarse aislado o contemplando simultáneamente la integración del sistema de reactores al proceso completo desde un punto de vista energético. La síntesis conjunta con las redes de intercambio calórico y sistemas integrados de potencia y energía, o la integración a subsistemas de procesos que intercambian trabajo o energía, generalmente producen mayores reducciones en el consumo, pero son más complicados de resolver.

#### ***Síntesis de sistemas de control de procesos***

La síntesis de la estructura de control del proceso apunta a determinar cuáles variables deben ser medidas para monitorear completamente un proceso, cuáles variables deben ser usadas como variables manipuladas y cómo deberían relacionarse las variables medidas con aquellas manipuladas (lazos de control) de manera de lograr los objetivos propuestos.

En general, se trata de optimizar algún índice dinámico o estático, indicador de la performance del sistema de control, como por ejemplo, errores en estado estacionario, grado de interacción entre los lazos, velocidad de la respuesta transiente, suavidad de la respuesta, rango de operabilidad, etc. Por otra parte, se han ideado diversas estrategias para generar estructuras de control apropiadas. Por ejemplo, Govind y Powers (1978) plasmaron modelos simples del proceso en grafos causa-efecto y generaron todas las estructuras de control posibles basadas en lazos de control simple, simple entrada y simple salida. Morari y col. (1980) presentaron un desarrollo formal de todas las estructuras de control factibles a través del uso de conceptos generalizados de controlabilidad estructural.

Por otra parte, Umeda y Kuriyama (1978) en base a la descomposición del *flowsheet* del proceso, propusieron primero diseñar estructuras de control individuales para cada unidad y luego realizar sobre ellas los ajustes necesarios para reconciliar cualquier posible conflicto emergente del primer nivel de síntesis.

El espacio de los diseños de estructuras de control factibles se puede definir a través de rangos permitidos en las ganancias del proceso, tiempos muertos, constantes de tiempo, grados de interacción, etc.

Para la síntesis del sistema de control, es importante contemplar en lo posible técnicas que puedan utilizarse *durante* la etapa de diseño del proceso utilizando criterios de operabilidad y controlabilidad, contrariamente a las antiguas estrategias donde la síntesis del sistema de control *seguía* a la síntesis y al diseño del proceso.

Comentadas brevemente las características principales acerca de los métodos de síntesis de las sub-unidades sobre las cuales se han propuesto metodologías implementables, a los efectos de proceder una a una con las etapas descritas en el procedimiento iterativo de diseño, a continuación se describirán con mayor detalle algunos conceptos básicos acerca del problema de síntesis de redes de intercambiadores y de las secuencias o trenes de equipos de destilación, recomendando al lector interesado en complementar estos temas la bibliografía al final del capítulo.

### II.3.1 Síntesis de la Red de Intercambiadores

En un proceso, existente o a diseñar, usualmente es posible separar las operaciones tendientes a recuperar calor del resto de las operaciones (por ejemplo, transformaciones químicas, transformaciones físicas, separaciones, etc.). En otras palabras, aquí nos interesa diseñar o sintetizar la estructura *óptima* del bloque de intercambio calórico, estando determinadas las demás funciones del proceso.

Un problema de síntesis de redes de intercambio calórico se define típicamente como sigue:

Dado:

- i. Un conjunto de corrientes calientes a ser enfriadas y un conjunto de corrientes frías a ser calentadas.
- ii. Las velocidades de flujo y las temperaturas de entrada y salida de todas las corrientes.
- iii. La capacidad calorífica de todas las corrientes como una función de la temperatura.
- iv. Los servicios auxiliares disponibles y sus costos, además de los costos de capital (inversión en equipos).

Determinar la estructura que se corresponda con el costo total anual mínimo de la red (costos de capital anualizados y costos de servicios auxiliares para los

equipos de intercambio energético).

Notar en este caso que la definición propuesta para este problema basa el criterio de búsqueda en un factor económico (costo total anual), no considerando otras condiciones, como por ejemplo, operabilidad, flexibilidad, seguridad, etc.

Con el objeto de encontrar una formulación adecuada para resolver este problema, se debe elaborar alguna estrategia que permita generar e identificar las redes de intercambio calórico que minimicen tanto el consumo de servicios de calefacción y enfriamiento (costo operativo), como el área de intercambio calórico y el número de unidades (principales componentes que contribuyen al costo de capital fijo) en la red, todo esto sin recurrir a una enumeración exhaustiva de todas las posibilidades ya que de esta manera sería una tarea hartamente consumidora de tiempo de cómputo (piense en un problema con cientos o miles de corrientes a empalmar entre sí).

Dentro de este contexto, conforme a sus necesidades o disponibilidades energéticas, las corrientes materiales que intervienen en el proceso se pueden clasificar en frías y calientes. Esta clasificación no se basa en las temperaturas de las respectivas corrientes sino en las tareas que hay que efectuar sobre ellas. De este modo, se designan como corrientes calientes a aquéllas que deben liberar energía y como corrientes frías a aquéllas que deben recibir un flujo calórico. Conviene tener presente que de acuerdo con estas definiciones, algunas de las corrientes frías pueden tener mayor temperatura que otras clasificadas como calientes.

En la Figura (II.3) se representan dos corrientes calientes ( $C_1$  y  $C_2$ ) y dos corrientes frías ( $f_3$  y  $f_4$ ), y sus respectivas temperaturas de entrada y salida (metas). En la tabla asociada a la Figura (II.3), se indican además, los flujos de capacidad calorífica para cada corriente (el producto del caudal  $-F-$  por la capacidad calorífica  $C_p$  de cada corriente, en unidades acordes). Las temperaturas de entrada y salida ( $T_{i,e}$  y  $T_{i,s}$ ) de las corrientes calientes y las temperaturas de entrada y salida ( $t_{i,e}$  y  $t_{i,s}$ ) de las corrientes frías, determinan *intervalos de temperatura* entre dos valores consecutivos. Las flechas indican el sentido de evolución de la temperatura (calentamiento para las corrientes frías y enfriamiento para las corrientes calientes). El problema consiste en encontrar el conjunto de intercambiadores de calor a instalar entre las corrientes de forma que se alcancen las especificaciones de salida, detallando además, los intercambios intermedios (entre cuáles corrientes y en cuáles intervalos de temperaturas), los consumos de agua de enfriamiento y vapor de calefacción si los hubiere, etc., de tal forma que el costo total anualizado sea mínimo.

Por consiguiente, una vez identificadas las corrientes y sus propiedades, y las tareas a efectuar sobre el sistema de intercambio calórico, la solución para el problema de síntesis es encontrar la política de acoplamiento óptima usando intercambiadores de calor proceso-proceso ( $C_i, f_j$ ) y calentadores y/o enfriadores (consumo de servicios auxiliares, esto es, por ejemplo, vapor de calefacción o agua de enfriamiento).

Tipo y Número de Corrientes de Proceso	Temperatura de Entrada ( $^{\circ}\text{C}$ )	Temperatura de Salida Deseada ( $^{\circ}\text{C}$ )	Flujo de Capacidad Calorífica ( $\text{Kcal}/^{\circ}\text{C}$ )
1 (Caliente)	$T_{e,1}$	$T_{s,1}$	$FC_{p1}$
2 (Caliente)	$T_{e,2}$	$T_{s,2}$	$FC_{p2}$
3 (Fría)	$t_{e,3}$	$t_{s,3}$	$FC_{p3}$
4 (Fría)	$t_{e,4}$	$t_{s,4}$	$FC_{p4}$

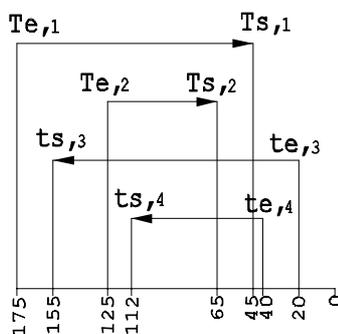


Figura II.3: Conjunto de corrientes y sus propiedades para la definición del problema de síntesis de intercambiadores de calor.

Es fácil comprender que ante un número grande de corrientes calientes y frías, el número de posibles combinaciones entre ellas (con la posibilidad de dividir algunas corrientes) es explosivo (similar al comportamiento en el ejemplo analizado en la sección I.4). Por lo tanto, se requiere generar una estrategia de síntesis adecuada.

La primera contribución para resolver el problema fue realizada por (Hohmann, 1971). Usando un diagrama (T-H), esto es temperatura versus calor intercambiado (o variación de entalpía), se determina en forma sencilla la mínima cantidad de servicios auxiliares (considerando su nivel térmico) necesaria para satisfacer la demanda energética de la red. En el diagrama T-H se representa la curva

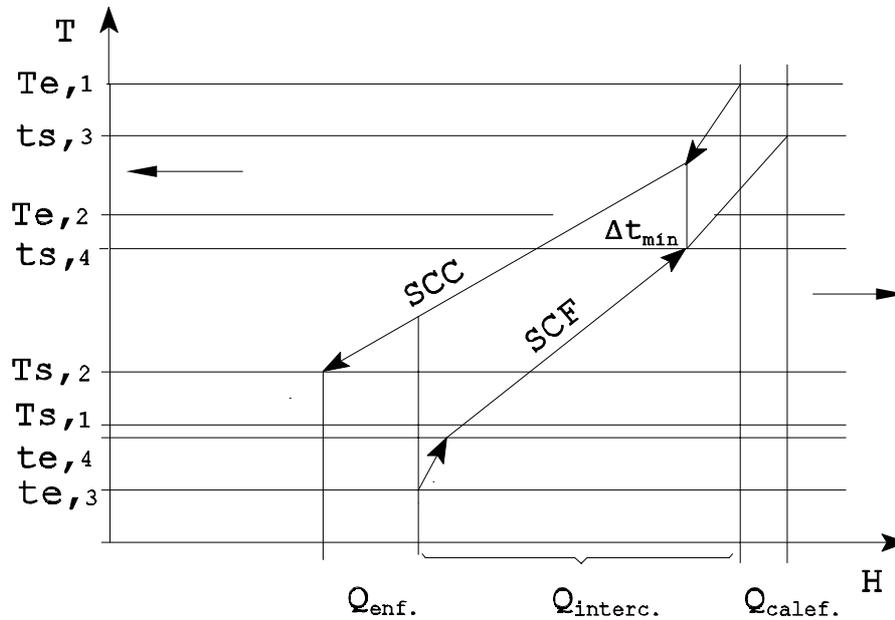


Figura II.4: Diagrama T-H para representar la evolución de las SCF y SCC.

de calentamiento de una corriente *compuesta* fría (llamada supercorriente fría - SCF-) y que engloba a todas las corrientes frías a ser calentadas en el proceso contra una curva de enfriamiento de la corriente *compuesta* caliente (supercorriente caliente, SCC) que engloba a todas las corrientes calientes a ser enfriadas. Ambas supercorrientes se obtienen, a lo largo de cada intervalo de temperaturas identificado, mediante la suma de todos los flujos de capacidades caloríficas de las corrientes individuales en cada intervalo. La importancia de esta definición radica en la posibilidad de representar sencillamente, a través de un esquema, los parámetros de la red total.

En la Figura (II.4) se puede observar una evolución cualquiera de ambas supercorrientes en el diagrama T-H, correspondiente al ejemplo de la Figura (II.3), tomando valores particulares para los flujos y capacidades caloríficas, así como temperaturas de entrada y salida para cada corriente. Para construir la figura basta con recordar que el calor intercambiado  $Q_{int} = \Delta H$ , es simplemente el producto de las diferencias de temperaturas por el flujo de capacidad calorífica (caudal másico por calor específico). Luego, la pendiente de la recta que representa la evolución en el

diagrama T-H es la inversa de esta última. Para cada intervalo de temperatura, las pendientes de las supercorrientes se obtienen como la sumatoria de los productos del flujo másico y la capacidad calorífica, tanto de todas las corrientes frías como las corrientes calientes en el intervalo, respectivamente.

Dado que el calor fluye desde una temperatura mayor hacia otra menor, es posible satisfacer la demanda de calentamiento de las corrientes frías con la energía disponible en las corrientes calientes, mediante el solapamiento de ambas corrientes (la SCC por encima de la SCF). Puede observarse que, la proyección sobre el eje de entalpía implica un intercambio de calor equivalente para ambas supercorrientes. Por lo tanto, si se adopta el máximo solapamiento posible y se define una aproximación de temperaturas mínima permitida  $\Delta t_{\min}$  (para asegurar una fuerza impulsora a la transferencia de calor), se puede calcular fácilmente la cantidad de calor que deberá ser agregada a la red mediante el servicio de calefacción (si no existiera disponible a través de la supercorriente caliente), y la cantidad de energía a ser extraída del sistema mediante el servicio de enfriamiento necesario (si no existiera disponible a través de la supercorriente fría), para llevar a las corrientes a la temperatura especificada.

En la Figura (II.5) se indican las proyecciones sobre el eje de entalpía que determinan el calor intercambiado entre dos supercorrientes cualquiera ( $Q_{\text{int}}$ ), y los servicios de calefacción ( $Q_{\text{cal}}$ ) y de enfriamiento ( $Q_{\text{enf}}$ ). También se indica el valor del acercamiento de temperaturas mínimo permitido ( $\Delta t_{\min}$ ).

En función de las hipótesis adoptadas, debe interpretarse que el intercambio de calor se lleva a cabo en una especie de *superintercambiador*, que involucra a las supercorrientes fría y caliente, al igual que los respectivos servicios. Debe notarse una propiedad interesante que surge de la forma en que se construye la Figura (II.5). En efecto, dado que el calor cedido o incorporado por una corriente puede medirse por la proyección del segmento determinado por la evolución entre la temperatura inicial y final ( $\Delta H$  en la Figura (II.5)), se observa claramente que cualquier desplazamiento hacia la derecha o izquierda no altera la cantidad de calor intercambiado *por cada supercorriente*. Sin embargo, resulta evidente que sí lo hace el calor intercambiado *entre las supercorrientes* ya que sólo cuando existe solapamiento entre ambas (en el sentido vertical) se puede asumir que el calor *cedido* por la SCC es *absorbido* por la SCF. De esta manera se evita la situación que representada en la Figura (II.5-a-) ya que al no existir solapamiento alguno, ambas supercorrientes deben satisfacer su demanda mediante el consumo de servicios auxiliares de enfriamiento y calefacción, respectivamente. Esta es la situación de máximo consumo y de mínima recuperación energética.

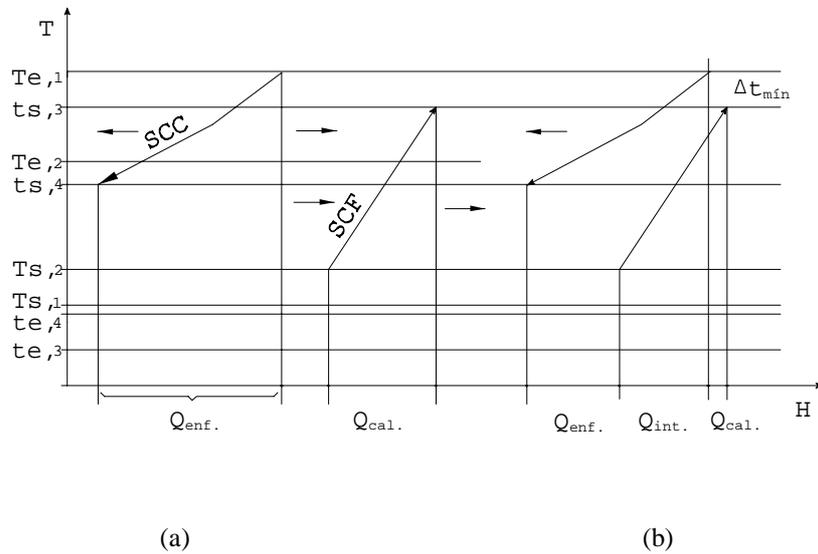


Figura II.5: Calor Intercambiado entre la SCC y la SCF en un diagrama T-H.  
 (a) No existe solapamiento (máximo consumo de servicios auxiliares).  
 (b) Máximo solapamiento (máxima recuperación energética).

Por lo tanto, si el objetivo es lograr mínima demanda de servicios auxiliares o, en forma equivalente, máxima recuperación entre corrientes, el mismo se obtiene cuando existe máximo solapamiento entre ambas curvas. Esta situación es sencilla de lograr en el diagrama T-H. Es suficiente desplazar lateralmente ambas supercorrientes, de forma de lograr máxima superposición entre curvas (Figura II.5b), considerando el mínimo acercamiento vertical permitido entre ambas curvas. Obviamente, existe una cota para la recuperación energética. Esto es, cuando  $\Delta t$  tiende a cero, no puede, en el límite, continuarse. Esto surge de dos restricciones. Por un lado, el segundo principio de la termodinámica postula que el calor fluye desde una temperatura mayor hacia otra menor (salto térmico,  $\Delta t \geq 0$ ), y por el otro, en todo sistema real la fuerza impulsora debe ser finita ( $\Delta t > 0$ ), ya que de lo contrario el proceso sería infinitamente lento.

Usualmente se designa al punto de mayor aproximación de las curvas, como el *pinch* del problema. (Linnhoff y Flower, 1978) y (Linnhoff y col., 1982) analizaron las características del *punto pinch* en el proceso de transferencia de energía. Al punto de contacto ( $\Delta t = 0$ , y por extensión también finito) entre ambas supercorrientes en el diagrama T-H se lo definió como punto *pinch*. Se ha probado que el punto *pinch*

divide al proceso en un sumidero de calor (temperaturas por encima del punto de *pinch*) y una fuente de calor (temperaturas por debajo del punto de *pinch*). Estos autores han probado que no debe existir flujo de calor (intercambio calórico) atravesando el punto *pinch*. Esto es, no debe transferirse calor desde las corrientes arriba del *pinch* hacia las corrientes debajo del mismo, ya que de hacerlo, debe incrementarse exactamente en la misma cantidad el consumo de ambos servicios auxiliares de calefacción y enfriamiento, por encima del mínimo requerido. El método de diseño *pinch* propuesto por (Hindmarsh y Linnhoff, 1983), reconoce este hecho y considera el diseño de dos problemas separados (debajo y arriba del *pinch*). Este procedimiento permite generar redes de máxima recuperación energética que cumplen con las metas especificadas.

Los costos operativos ( $C_{op}$ ) dependen de los requerimientos de energía y están dados por:

$$C_{op} = (c_{enf} Q_{enf, min}) + (c_{cal} Q_{cal, min}) \quad (2)$$

donde  $c_{enf}$  y  $c_{cal}$  son los costos unitarios de las cargas de servicios auxiliares de enfriamiento y calentamiento, respectivamente. La determinación de  $Q_{cal, min}$  y  $Q_{enf, min}$  puede realizarse a partir del diagrama T-H (ver Figura (II.4) y Figura (II.5)); o bien mediante procedimientos computacionales (ver Cerdá y col.(1983); Shenoy (1995)).

El costo total de la red a diseñar comprende básicamente los costos operativos y el costo de capital.

La evaluación del costo de capital total ( $C_{cap}$ ) se basa en la siguiente expresión genérica, correspondiente al cálculo del costo de un intercambiador de calor simple:

$$C_{cap} = a + bA_t^c \quad (3)$$

donde  $A_t = \sum A_i$ ,  $i$  indica el número de unidades utilizadas en la red, y  $a$ ,  $b$ , y  $c$  son los coeficientes asociados a la relación de estimación de costos en función del material de construcción, la presión de trabajo y del tipo de intercambiador. Debido a que se desconoce la distribución del área del *superintercambiador* (que engloba a todas las unidades de intercambio) entre los intercambiadores reales de la red, puede asumirse que todos los intercambiadores individuales son del mismo tipo y están contruídos con los mismos materiales. Además se asume que se logra el diseño de la red utilizando el mínimo número de unidades posible, ya que este factor también influye en el costo de la misma. De esta manera, el costo total de la red es proporcional al área total de intercambio utilizada.

Finalmente, para el cálculo del costo total ( $C_{tot}$ ), se deben sumar ambas contribuciones, considerando la vida esperada de la planta y la velocidad de retorno del capital invertido.

$$C_{tot} = C_{op} + C_{cap} \quad (4)$$

### Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

De la ecuación anterior se desprende que para minimizar el costo total se debe minimizar la inversión y el costo operativo.

En la Figura (II.5-b) se aprecia que, adoptado el parámetro  $\Delta t_{\min}$ , o acercamiento mínimo de temperatura permitido para el intercambio, se puede calcular los mínimos requeridos tanto para el vapor de calefacción como para el servicio de enfriamiento. En efecto, la máxima superposición (que implica empalme en sendos intercambiadores de las supercorrientes correspondientes) proyecta el mínimo consumo de servicios. De esta forma, de una manera muy sencilla y elegante pueden calcularse, para cada valor adoptado de  $\Delta t$ , los servicios mínimos requeridos.

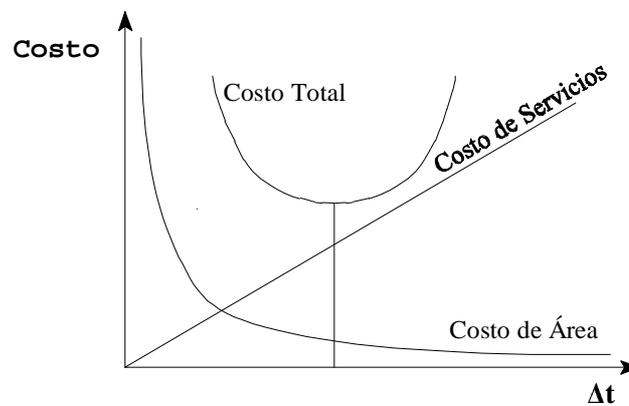


Figura II.6: Costo total anual en función del salto térmico mínimo permitido  $\Delta t$ .

Por otra parte, a medida que disminuye el parámetro  $\Delta t$ , también lo hace la necesidad de calefacción  $Q_{\text{cal, min}}$ , y la necesidad de agua de enfriamiento  $Q_{\text{enf, min}}$ . Esto, como vimos tiene un límite, que se alcanza cuando  $\Delta t_{\min}$  tiende a cero. En efecto, el consumo de servicios es el mínimo respecto de todos los posibles, pero simultáneamente, el área resulta infinita, ya que si se observa atentamente la Figura (II.6), la fuerza impulsora para el intercambio calórico es directamente proporcional al parámetro  $\Delta t$ . En efecto, como se sabe, el área de intercambio responde a la fórmula:

$$A_t = Q / (U \Delta t_{\text{ml}}) \quad (5)$$

en la cual  $\Delta t_{\text{ml}}$  (promedio logarítmico de la fuerza impulsora) es proporcional a la diferencia de temperaturas entre los extremos de intercambio, y tiende a cero cuando  $\Delta t_{\min}$  tiende a cero.

Por lo tanto, para cada asignación de  $\Delta t_{\min}$  tenemos por un lado un valor correspondiente del área total de intercambio, y por el otro, recurriendo a la superposición indicada, el valor mínimo de los servicios asociados. Con todos estos

---

**Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos**

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

valores resulta sencillo construir, paso a paso, con el solo expediente de variar  $\Delta t_{\min}$ , la Figura (II.6). En ella se indica la variación del costo de los servicios (Ecuación (2)) que resulta creciente con  $\Delta t_{\min}$ , la variación del área total de intercambio, que por el contrario se incrementa con la disminución del valor  $\Delta t_{\min}$ , y por último la suma de ambos (Ecuación (4)). Dada la forma de las curvas de los sumandos parciales, la curva de costo total generalmente presentará un óptimo para un valor determinado de  $\Delta t_{\min}$ . Este es el valor correspondiente al acercamiento óptimo para la red de intercambio a diseñar (Townsend y Linnhoff, 1983).

Por último, es necesario *desagregar el superintercambiador* en un conjunto de unidades de intercambio entre las corrientes individuales, tratando de minimizar su número, y diseñar los equipos de intercambio calórico con el objeto de minimizar el costo total. Existen varios procedimientos para lograr este objetivo, pero los mismos están fuera del alcance de esta introducción al tema, y se recomienda al lector interesado explorar las citas bibliográficas (Townsend y Linnhoff, 1983), (Linnhoff y Flower, 1978), (Linnhoff, 1994) entre otros, y la bibliografía recomendada que se encuentra al final de capítulo.

Obviamente, se han introducido en el planteo propuesto varias suposiciones. Por ejemplo, entre otras, el área de intercambio se calcula suponiendo un valor constante para el coeficiente pelicular de intercambio  $U$  en toda la red. Existen métodos para contemplar esta variación (Nishimura, 1980).

No obstante, resulta interesante destacar que la estrategia analizada es sumamente sencilla, aún para un número muy importante de corrientes frías y calientes en la red a diseñar. Además, los resultados logrados resultan realmente aproximados a la solución óptima global. Obviamente, para problemas que abarcan cientos o miles de corrientes, proceder manualmente para determinar el  $\Delta t$  óptimo, y luego la estructura de intercambiadores real, es prácticamente imposible. Es por ello que se han propuesto numerosos algoritmos implementados en computadora, como por ejemplo (Cerdá y col. 1983), (Grossmann, 1985), (Linnhoff y col. 1982). Además, existe en la actualidad software comercial que permite enfrentar el problema de la síntesis de la red de intercambiadores y su relación con las otras secciones del proceso, mientras que a su vez, tienen compatibilidad para integrar los resultados provistos con las entradas necesarias a un simulador de procesos, de tal forma de facilitar la tarea iterativa clásica de la síntesis del proceso global. Por otra parte, Galli y Cerdá (1991) entre otros, han desarrollado además una metodología de síntesis de redes de intercambio calórico flexibles, cuya topología le permite operar a la red con el mínimo costo operativo cuando las temperaturas de entrada y salida de las corrientes varían dentro de rangos dados.

#### ***Sistemas combinados de generación de potencia y recuperación energética***

A partir de las propiedades del punto *pinch*, (Hindmarsh y Linnhoff, 1983) analizaron la posibilidad de integrar adecuadamente la descarga de calor de máquinas

### **Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos**

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

térmicas a las redes de intercambiadores, utilizándolas como fuente de calefacción. En efecto, una máquina térmica consiste en un dispositivo que operando en ciclos produce alteraciones en el medio ambiente, que se traducen en intercambios calóricos y producción o consumo de trabajo, variables que se relacionan entre sí por medio de la primer y segunda ley de la termodinámica (eficiencia de Carnot). Considerando el proceso (red de intercambiadores) como parte del medio ambiente, se puede analizar la integración del sistema de generación de potencia (ciclos) con la red de intercambiadores, de tal forma de lograr una estructura óptima. (Linnhoff y Flowers, 1983) analizan las reglas para integrar ciclos productores de potencia (o consumidores) con la red, en base a las propiedades del punto *pinch*. Se prueba que no todas las posibilidades son adecuadas, y en las que lo son, se logra reducir el consumo energético del sistema integrado aumentando la eficiencia global. En efecto, se puede lograr en ciertos casos, que todo el calor consumido por la red de intercambio *pase* a través del ciclo produciendo trabajo con un rendimiento marginal del 100%.

Por otra parte, se han desarrollado otros enfoques para abordar el problema de síntesis de sistemas combinados de potencia y recuperación de calor, considerando por ejemplo, la generación de entropía del proceso como en el método de la *línea de operación* (Irazoqui, 1986). No obstante, no analizaremos aquí en profundidad el tema, remitiendo al lector a la bibliografía recomendada al final del capítulo.

### II.3.2 Síntesis de Sistemas de Separación

La necesidad de utilizar equipos de separación en los procesos químicos es bien conocida. En general, es necesario aislar los productos purificados, recuperar subproductos valiosos, preparar materias primas y/o evitar (separándolos de la mezcla que los contiene) materiales indeseables o tóxicos.

No sólo el costo de inversión y de mantenimiento, sino también el de operación (consumo de vapor de calefacción o de agua de enfriamiento) tiene un impacto significativo en la economía del proceso, ya que las operaciones de separación convencionales, por ejemplo la destilación, son consumidoras intensivas de energía. Resulta interesante entonces hallar métodos para minimizar los servicios auxiliares paralelamente a los costos de capital. El impacto que produce la reducción de energía es muy importante para procesos que involucran grandes volúmenes (commodities). Por ejemplo, debe tenerse en cuenta que en procesos de refinamiento de petróleo y similares, un gran porcentaje de la energía consumida se asocia con el sistema de separación.

Hay varias tecnologías para la separación de una mezcla, por ejemplo destilación, evaporación, absorción, membranas, destilación molecular, separación en un campo eléctrico, difusión térmica, cristalización, difusión por presión, extracción y muchas otras. Más aún, en la actualidad muchos de los esfuerzos de investigación se destinan a encontrar tecnologías viables que reemplacen a la destilación, la cual, si bien es una tecnología ya madura y por lo tanto confiable, consume mucha energía

ya que desde el punto de vista termodinámico por lo general se las opera en forma poco eficiente. Es por ello también, que se destina mucho esfuerzo para lograr metodologías de síntesis para la generación de estructuras y condiciones operativas óptimas desde el punto de vista de la eficiencia energética.

El primer paso en el problema de síntesis de sistemas de separación es seleccionar el método apropiado. Aquí sólo se analizará en principio, el problema de síntesis de sistemas de destilación utilizando columnas convencionales o simples sin integración calórica.

### ***Síntesis de trenes de destilación integrados (TDI).***

En un proceso de destilación, existente o a diseñar, es posible distinguir las tareas de separación que se llevan a cabo en las columnas de destilación, de las tareas de enfriamiento y calefacción que ocurren en los intercambiadores de calor, condensadores y rehervidores, donde se generan las corrientes de reflujo y el vapor de fondo del equipo, respectivamente.

Dado un tren de destilación, cada columna debe cumplir con la tarea de separar la mezcla que ingresa a ella de forma de obtener los productos deseados con las especificaciones de pureza exigidas.

La búsqueda del sistema de destilación más económico, con integración calórica, capaz de separar una mezcla multicomponente de composición dada, implica definir:

- i.- La estrategia de separación
- ii.- La configuración del sistema de intercambio calórico.
- iii.- Las presiones de operación de las columnas.
- iv.- Los flujos calóricos involucrados en cada equipo.

La *estrategia* de separación hace referencia al orden en que la mezcla de alimentación se separa en sus componentes puros. Por ejemplo, en la Figura (II.7) se representan las cinco alternativas posibles para separar por destilación, las especies químicas A, B, C, D, de una mezcla cuaternaria (ABCD), utilizando separadores simples.

Se puede decir entonces que cada estrategia está caracterizada por una secuencia de separadores o simplemente secuencia. Puede notarse que debido a las opciones posibles, pueden hallarse un número significativo de secuencias para una mezcla de muchos componentes, y la forma de hallarlas es similar a la planteada en los ejemplos de la sección I.4. En la próxima sección trataremos este punto.

Por otra parte, la configuración del sistema de intercambio calórico asociado a un tren de destilación hace referencia a la disposición de los equipos recuperativos y auxiliares necesarios, para producir el cambio de fase buscado en cada corriente del proceso. Se denominan *equipos recuperativos*, a aquellos donde se materializa el acoplamiento calórico de una corriente *caliente* proveniente del condensador de una columna con la corriente *fría* proveniente del rehervidor de otra columna del tren.

Las características estructurales del sistema, resumidas en lo que comúnmente se denomina topología de la red, depende de la *política de acoplamiento energético* que se implemente entre las corrientes a condensar y las corrientes a vaporizar. La selección de dicha política está directamente ligada a la presión de operación adoptada en cada columna, ya que estos valores condicionan los acoplamientos inter-columnas que pueden ser implementados. Cuando se enfrenta el problema de síntesis sin considerar el sistema de intercambio, las demandas de los hervidores y condensadores son incorporadas como corrientes adicionales calientes y frías respectivamente, a la grilla de corrientes del problema de la síntesis de redes de intercambiadores, visto en el punto anterior. Esto se hace luego de haber procedido a resolver la estructura del sistema de separación, que definirá las cargas calóricas a satisfacer en cada columna (etapas jerárquicas).

### ***Espacio de Soluciones del Problema***

Aún cuando no se contemple la posibilidad de integración calórica, el problema de síntesis de la secuencia de separadores más económica es altamente combinatorio. El número de secuencias alternativas para la separación completa de una mezcla de NC componentes puede calcularse según la expresión propuesta por Thompson y King (1972):

$$\text{Número de Secuencias} = [2(\text{NC} - 1)]! / \text{NC}!(\text{NC} - 1)! \quad (6)$$

En efecto, la separación de una mezcla de 4 componentes se lleva a cabo en 5 secuencias, para 5 componentes puede llevarse a cabo a través de 14 secuencias distintas, mientras su número se eleva a 1430 cuando  $\text{NC} = 9$ .

Como lo puntualizara A. W. Westerberg (1983), la posibilidad de integración calórica en el sistema de destilación agrava aún más el carácter combinatorio del problema de síntesis. Por ejemplo, para una mezcla de 5 componentes y suponiendo que cada columna puede acoplarse calóricamente con sólo una de las que la acompañan en una dada secuencia, el número de configuraciones posibles se eleva a 350.

El espacio de soluciones posibles es sumamente rico en diseños alternativos, los cuales involucran empalmes calóricos entre diferentes corrientes y distintas formas de interconexión de equipos para realizar en definitiva las mismas tareas, aunque a un costo total diferente. Por lo tanto, el hallazgo del sistema de destilación energéticamente más eficiente requiere de procedimientos de búsqueda que permitan barrer completamente el espectro de posibilidades.

### ***Distintos Enfoques para abordar el Problema***

En la actualidad se dispone de numerosas técnicas de diseño de trenes de destilación tanto convencionales como integrados que difieren sustancialmente en la

estrategia de resolución del problema. De las formas alternativas que registra la literatura para resolver el problema de síntesis se pueden distinguir claramente tres enfoques, que muchas veces aparecen complementados entre sí; el heurístico, el termodinámico y el algorítmico.

Las técnicas heurísticas se caracterizan por la obtención de una estructura óptima para el sistema, apelando a determinadas reglas. Estas reglas son generalmente empíricas o bien provienen del análisis de soluciones obtenidas por otros enfoques.

Se habla de enfoques termodinámicos, cuando se aplican criterios de evaluación que se deducen a partir de conceptos derivados de la primera y segunda ley de la termodinámica. La aplicación de esos criterios permite determinar la performance del sistema real respecto a un valor teórico, límite óptimo, correspondiente al comportamiento de un sistema ideal. Los resultados obtenidos son en muchos casos de carácter cualitativo, por lo que resultan útiles para ahondar en el conocimiento físico del sistema y para restringir el espacio de búsqueda bajo otros enfoques. No obstante, para problemas de síntesis de trenes de separación (y para redes de intercambio calórico, en especial las integradas con sistemas de generación de potencia), existen algoritmos de optimización basados en funciones objetivo que contemplan aspectos de la segunda ley de la termodinámica (sistemas reversibles versus sistemas reales) que resuelven el problema muy elegantemente (ver bibliografía recomendada).

En la resolución del problema de síntesis con enfoque algorítmico, el sistema se describe mediante un modelo matemático que incluye una función objetivo, a minimizar o maximizar, y un conjunto de restricciones que definen el dominio de búsqueda de las soluciones posibles. Generalmente, la función objetivo está vinculada en forma directa con algún tipo del costo del sistema a optimizar. Normalmente, las soluciones no se obtienen en forma analítica sino numérica, mediante la implementación computacional de un algoritmo apropiado. El tiempo de computación consumido suele tomarse como medida de eficiencia del algoritmo empleado.

Una de las mayores ventajas que ofrecen los métodos algorítmicos reside en su capacidad de garantizar el carácter óptimo del diseño de un tren de destilación hallado, siempre y cuando las hipótesis del modelo matemático se satisfagan, al barrer todo el espacio de soluciones del problema y el modelo presente ciertas propiedades matemáticas especiales. Un ejemplo de la aplicación de métodos algorítmicos a la síntesis de TDI's se puede encontrar en (Benz, 1991) y (Benz y Cerdá, 1992), quienes consideraron además, la flexibilidad del sistema ante variaciones en la composición de la alimentación al tren. No obstante, este enfoque puede complicarse para el caso de sistemas que tratan mezclas altamente no ideales.

### ***Síntesis de la secuencia de separación***

Un importante problema de diseño del proceso de separación de una mezcla multicomponente es la secuencia de separación, que está relacionada con la selección

del mejor método y estrategia de separación para cada componente en la mezcla. Este problema se representa frecuentemente colocando en un arreglo (vector) los componentes a ser separados listados en orden de volatilidades relativas. Si se considera las secuencias para separar una mezcla de A, B, C y D, ordenados en orden descendente de volatilidades relativas (A, B, C, D), se deben examinar las diferentes alternativas. Por ejemplo (A/BCD) seguido por (B/CD) o (BC/D) y (C/D) o (B/C) respectivamente. Otra posible secuencia es (AB/CD) seguido por (A/B) y (C/D) (ver Figura (II.7)). Estas separaciones se denominan *sharp* (cada producto a ser separado aparece en una y sólo una de las corrientes de producto).

Así, como en el problema de intercambio calórico, se debe utilizar una metodología práctica para encontrar la secuencia óptima. Técnicas generales desarrolladas para resolver el problema de secuencia de separación han incluido enfoques algorítmicos, basados por ejemplo, en programación dinámica (Hendry y Hughes, 1972), métodos heurísticos (Rudd y col., 1973), estrategias evolucionarias a partir de la creación de una secuencia de separación inicial (Stephanopoulos y Westerberg, 1976), y métodos termodinámicos involucrando aplicaciones de principios termodinámicos (Gomez y Seader, 1985) entre otros.

A continuación, se ejemplificará la búsqueda de la mejor secuencia mediante un método evolucionario. Según la Figura (II.8), todas las posibles secuencias de separadores que podemos plantear para separar la mezcla en los componentes puros (también se pueden especificar separaciones prohibidas o no deseadas, o productos que comprenden mezcla de varios componentes) pueden representarse mediante un árbol. Este árbol es similar a los planteados en la sección (I.4) para el análisis de alternativas ya sea para el problema de ordenamiento de números como para la resolución analítica de una integral recurriendo al particionando del problema. En efecto, en la Figura (II.8) se observa que los nodos (mezclas producidas en los separadores) unidos con arcos representan los diversos caminos factibles (distintas secuencias de separación).

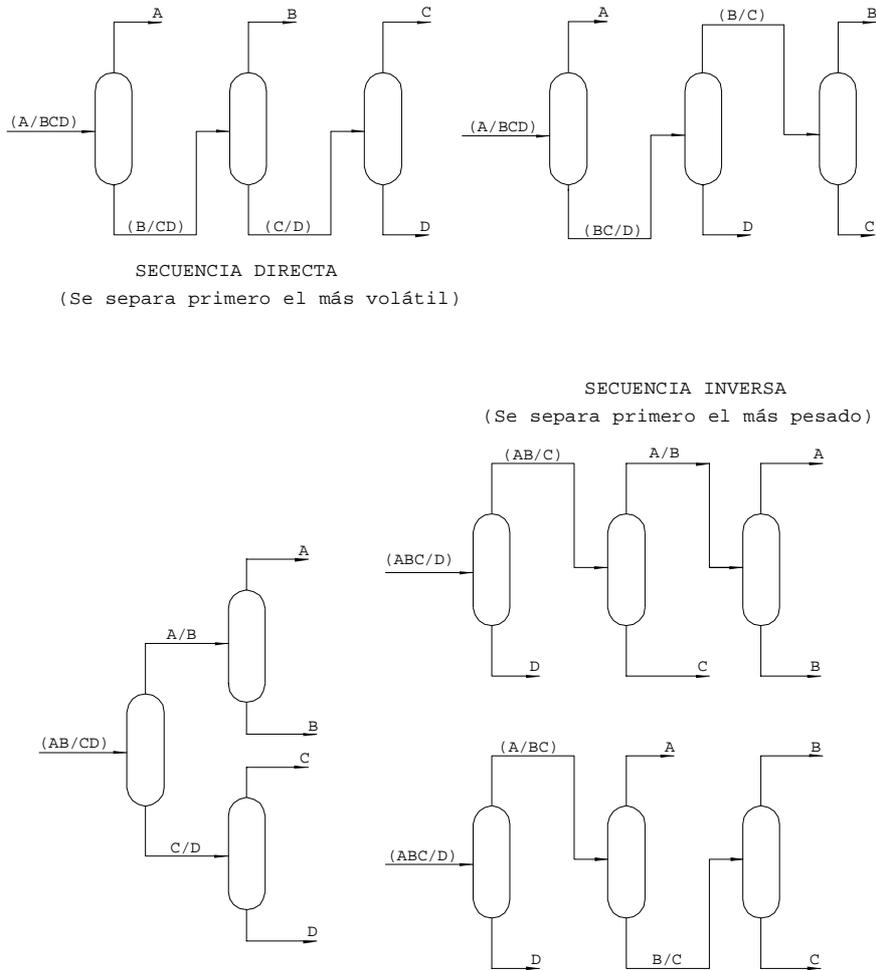


Figura II.7 : Alternativas secuenciales para separar la mezcla (ABCD) utilizando columnas de destilación convencionales. Note que el número de alternativas coinciden con el resultado de la Ecuación (II.6) para  $NC=4$ .

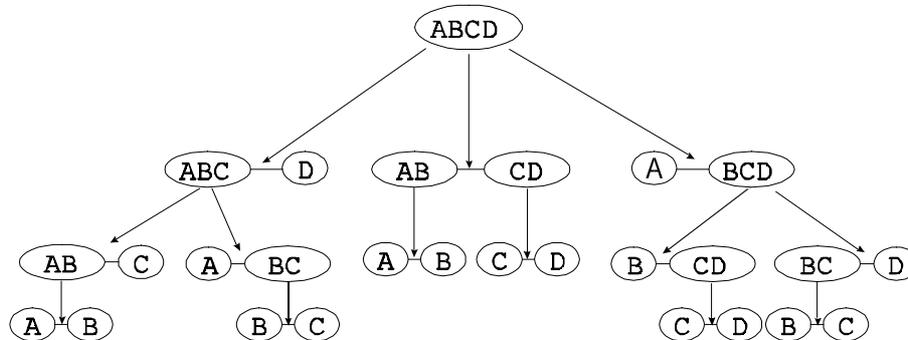


Figura II.8: Árbol de secuencias de separación para una mezcla cuaternaria.

Esto es, los nodos unidos por arcos pertenecen a la misma secuencia de separación, y deben considerarse simultáneamente para lograr la separación de la mezcla. El armado de las secuencias es muy sencillo, ya que basta con decidir en cada caso (operadores para transición entre estados) el componente a separar o el punto de corte a realizar (por ejemplo, A/B, B/C o C/D). Cada corte o separación (arco) origina subproblemas independientes (mezclas multicomponentes de menor orden), que pueden ser considerados como nuevos problemas. Para cada subproblema, una vez producida una separación, debemos continuar con el desarrollo de las mezclas remanentes, hasta lograr la separación completa (base del árbol o fin de la expansión).

Como hemos mencionado, el número de alternativas es explosivo, ya que apenas se incrementa la cantidad de componentes a tratar se generan un gran número de opciones, haciendo intratable el problema (ver Ec. 6). Por lo tanto, al igual que los problemas discutidos en I.4, deberá desarrollarse una técnica para obtener la secuencia (estructura de separación), por ejemplo, de mínimo costo total, sin necesidad de recurrir al costeo y diseño (aunque sea preliminar) de todos los separadores -lo cual es prohibitivo aún con computadores muy potentes-.

Para esto necesitamos varias herramientas. En primer lugar, algún método de costeo rápido y eficiente. Como es conocido, el diseño preliminar de una columna de destilación puede realizarse utilizando algunas aproximaciones. Las variables más importantes (habiéndose fijada la presión de operación) son el diámetro de la columna y el calor entregado al hervidor (que en una primera aproximación puede suponerse igual al extraído en el condensador). Los costos ligados a ambas variables están en contraposición, lo que exige un método de optimización para determinar el número de etapas y el reflujo de operación de la columna para lograr la separación deseada. Es usual utilizar la ecuación de Fenske para determinar el mínimo número de etapas, la de Underwood para calcular el mínimo reflujo, y la relación de Gilliland

para relacionar el reflujo real con el número de etapas de diseño. Generalmente, se recurre a heurísticos que aproximan el cálculo (sin plantear un problema de optimización) del número de etapas y el reflujo adoptando factores de relación adecuados (por ejemplo, multiplicar el reflujo mínimo por el factor 1,1 y adoptar el doble de las etapas mínimas). Respecto al uso de estas ecuaciones, debe aclararse que son aproximadas y pueden presentar un error considerable, aún en mezclas ideales, cuando se trata de separaciones de componentes con alta pureza o bien trazas, cuando hay una gran diferencia de volatilidades relativas o cuando la topología del separador no se encuadra con las hipótesis del desarrollo de las mismas. Además, para mezclas no ideales son decididamente inadecuadas. Para el caso de número mínimo de etapas por ejemplo, si las volatilidades relativas varían mucho a lo largo de la columna puede utilizarse la ecuación de Winn, que contempla factores de corrección de las volatilidades relativas por presión y temperatura dentro del rango de interés. Cuando la mezcla es no ideal, esta solución tampoco es adecuada, y deben utilizarse métodos rigurosos de cálculo.

Dentro de este contexto, aún cuando para mezclas ideales puedan utilizarse las ecuaciones anteriores, suponiendo que en realidad en esta etapa del diseño lo que se hace es una comparación relativa -entre alternativas competidoras- y no cálculos absolutos, se debe todavía solucionar el problema de explorar el enorme número de alternativas posibles. Para esto podemos proceder según dos estrategias. Una es puramente empírica o heurística, mientras la otra es algorítmica, en el sentido que recorre las alternativas evaluando costos según una estrategia sistemática especificada (algoritmo).

En el primer caso se parte de plantear reglas del arte, o heurísticos, que si bien no aseguran el óptimo, garantizarían una secuencia al menos sub-óptima, esto es, en el entorno del óptimo. Los heurísticos propuestos (ver por ejemplo Seader and Westerberg, 1977) en general tienen alguna explicación teórica, pero mayoritariamente están basados en relaciones aproximadas como las ecuaciones anteriormente mencionadas, o hipótesis equivalentes. Otros surgen de la experiencia ante un gran número de casos analizados. Por ejemplo, se pueden plantear los siguientes heurísticos o reglas para generar las secuencias:

- i.- Si la mezcla tiene composiciones y volatilidades relativas similares, entonces favorezca la secuencia directa. Esto implica, dado que están ordenadas por volatilidades relativas decrecientes, que se elimine por tope de cada separador el componente más volátil.
- ii.- Si los componentes de la mezcla se caracterizan por una marcada diferencia entre las volatilidades relativas, entonces separe el más volátil primero.
- iii.- Si las composiciones (fracciones) molares en la mezcla son muy disímiles, pero no las volatilidades relativas, entonces separe los componentes de tal forma de eliminarlos en orden decreciente de fracciones molares.
- iv.- Si para separar un componente debe recurrirse a un solvente auxiliar,

---

### **Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos**

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

remueva este inmediatamente en la secuencia.

Estas reglas se utilizan durante la expansión del árbol ( Figura II.8), ya que ante cada alternativa permiten seguir un camino en detrimento de los otros, limitando la enorme cantidad de opciones existentes. Se propusieron numerosos heurísticos, y muchas veces contradictorios entre sí, en cuanto a las acciones a realizar y en el orden en que se toman. No obstante, en general puede afirmarse que las soluciones halladas, o bien constituyen una solución sub-óptima, a un costo de cómputo muy razonable, o bien constituyen un buen punto de partida para un método algorítmico, a los efectos de ahorrar esfuerzos de cálculo en éstos.

En efecto, como habíamos comentado en el problema de ordenamiento de números en un arreglo matricial (sección I.4), para aplicar un criterio o función de evaluación necesitamos, en general, conocer algo acerca de la solución deseada. Por ejemplo, si la función evaluación involucra la distancia a la solución, necesariamente su cálculo implica conocer ésta última. Aquí es trivial el hecho de que la solución involucra todos los componentes separados, si esa es la especificación de diseño. El problema es que necesitamos hallar la secuencia de costo mínimo, y ésta no la conocemos de antemano, por lo que no podemos comparar ninguna solución actual en relación con la solución deseada, porque sencillamente la desconocemos. Por otra parte, queremos hallarla sin generar todas las alternativas.

Una solución es considerar como una aproximación al costo de la secuencia óptima (esto es calcular mediante las ecuaciones anteriormente vistas los costos de cada separador y sumarlos) el costo de la secuencia generada por medio de la síntesis heurística, ya que se logra fácilmente. A partir de allí, teniendo una cota deseable o punto de referencia, podemos evolucionar (estrategias evolucionarias) hacia una solución de menor costo, perturbando con cierta estrategia las opciones de corte en cada separador de la secuencia y observando cómo se comporta el costo de las alternativas generadas (Stephanopoulos y Westerberg, 1976).

Debido a que ni las estrategias heurísticas ni las evolucionarias pueden asegurar el óptimo, es conveniente, luego de un estudio o etapa preliminar, utilizar un algoritmo que contemple el barrido de las secuencias, aplicando una función de evaluación adecuada para minimizar el número de nodos visitados. Además, deberá contemplarse en el costo la mayor cantidad de variables posibles, como ser por ejemplo la optimización del plato de alimentación, etc. Nuevamente, necesitamos un punto de partida para evaluar cada secuencia en el proceso de expansión. Una estrategia puede ser una secuencia generada por los métodos anteriores, otra puede ser tomar un heurístico que haga que se expanda siempre a través del separador de mínimo costo, al analizar cada nodo. Luego de generada esta primer secuencia, se suman los costos de cada una de sus unidades y esta será la de costo mínimo o de referencia (Thompson and King, 1972). Al tomar como costo cota el valor dado (cota de máxima al mínimo costo) retrocedemos hacia arriba en el árbol para tomar, ante el primer nodo *or*, las nuevas direcciones de expansión. Se evalúa para cada secuencia

generada el costo, y se lo compara con la cota. Si aparece un costo menor, se reemplaza la cota por el valor nuevo, y la secuencia, por la nueva secuencia encontrada. De esta manera, se sube un nivel en el árbol y se sigue con el mismo procedimiento. Cuando no existan más nodos por expandir, la secuencia resultante y el costo de la misma representa la solución. A diferencia de los métodos anteriores, y si bien debe tomarse esto relativo a las hipótesis asumidas, esta forma de proceder garantiza un óptimo. Queda claro también que cuanto mejor sea el heurístico empleado para generar la primer secuencia (o valor base o cota para el costo mínimo), menos tiempo de cómputo se empleará ya que no será muy fácil encontrar valores menores de costo, y nuevas secuencias alternativas. Esto es, en las ramas no óptimas, unos pocos cálculos implicarán un costo mayor al óptimo y por lo tanto se reducirá la exploración de cada rama.

Existen inconvenientes, según comentamos, cuando pretendemos aplicar estas metodologías a mezclas azeotrópicas o destilación extractiva, en las cuales se recurre a diversos agentes o solventes auxiliares que complican la generación o expansión de árbol, así como también la aplicación de las fórmulas aproximadas para el cálculo del costo. Para este tipo de problemas es posible utilizar otros métodos, también algorítmicos, pero basados en propiedades termodinámicas de la mezcla, y el concepto de destilación reversible (ver por ejemplo Petlyuk y col., 1965; Aguirre y col., 1992; Koehler y col., 1992; etc.).

### **Resumen**

En síntesis, en los puntos anteriores se analizaron algunos tópicos del problema de síntesis de procesos. Como fuera mencionado en la sección II.3, la síntesis de un proceso completo es demasiado complicada y hasta el presente sólo se ha podido lograr una solución sub-óptima (estrategia de descomposición). Esta área es materia de varios esfuerzos de investigación para mejorar el conocimiento y obtener mejores procedimientos para el diseño de procesos óptimos.

Bajo este contexto, se lograron resultados en subproblemas específicos como la síntesis de redes de intercambio calórico, sistemas integrados de calor y potencia, síntesis de sistemas de control, sistemas de separación, sistemas de reacción, etc. Además, obviamente el combustible quemado es proporcional al consumo de calefacción en el proceso, por lo que al minimizar los servicios también se minimiza las emisiones gaseosas por combustión (Linnhoff, 1994), minimizando el impacto sobre el ambiente.

En este capítulo solo se mencionaron unos pocos métodos propuestos para la síntesis de subunidades como la red de intercambiadores y las secuencias de columnas de destiladores simples para el problema de la separación de una mezcla de NC componentes bajo ciertas condiciones. No obstante, existen muchos otros algoritmos que el lector puede encontrar en la bibliografía especializada. El objetivo de esta breve introducción en nuestro caso es mostrar que existe una metodología sistemática para

enfrentar la tarea de diseño de un proceso, y además, que dado nuestro estado de conocimientos, el procedimiento es iterativo, exigiendo interacción entre las herramientas informáticas propuestas para realizar cada tarea o etapa.

Finalmente, es importante remarcar que en la última década se desarrollaron numerosas aplicaciones computacionales (muchas de ellas software comercial) que son útiles para la resolución de diferentes problemas de síntesis. Más aún, la tendencia muestra que en un futuro cercano muchos algoritmos de síntesis de subunidades serán reunidos en ambientes de diseño integrados, logrando otra etapa hacia el paradigma final en la disciplina o metodología CAD (*Computer Aided Design* o diseño asistido por computadora).

#### **II.4 EJEMPLO: BREVE NOCIÓN DE TÉCNICAS DE SÍNTESIS APLICADAS A UN PROCESO DE DESALACIÓN DE AGUAS DE MAR.**

Los procesos de desalinización de agua de mar o salobres de otra procedencia tienen como objetivo convertirlas en agua potable para consumo humano y/o animal.

A principios del siglo XX la revolución industrial se consolida y el vertiginoso crecimiento de la población aumenta desde 1600 millones de habitantes a aproximadamente 7000 millones en nuestros días. Dentro de este contexto, decenio a decenio, el margen entre recursos hídricos y demanda se reduce peligrosamente, principalmente en aquellos países en los cuales existe un considerable grado de desarrollo, ya que la expansión demográfica, agrícola e industrial juegan un rol preponderante. Por otra parte, la contaminación de numerosas fuentes de aprovisionamiento de agua dulce y la irracional administración de las reservas naturales contribuyen a acrecentar la problemática. Como consecuencia de varios estudios, puede concluirse que uno de los problemas ambientales más importantes para la humanidad, en el futuro inmediato, es afrontar la dramática carencia de recursos de agua potable. Ante semejante perspectiva, se recurre a la investigación permanente a los efectos de lograr tecnologías eficientes para la elaboración de agua potable, de tal forma de expandir las reservas hídricas disponibles a un costo accesible para poder masificar el consumo.

A tales efectos, la desalación de aguas salobres resulta sumamente importante, ya que, por ejemplo, el agua disponible en el mar resulta un recurso prácticamente ilimitado. Obviamente, el problema básico consiste en separar las sales disueltas en el agua, de tal manera de lograr un nivel de soluto acorde con el mínimo aceptable para el consumo humano y/o necesidades prácticas en la industria.

En general, los principales métodos de desalación pueden agruparse según la siguiente clasificación: por métodos térmicos, electrodiálisis, intercambio iónico, ósmosis inversa, formación de hidratos, etc. Esta descripción no pretende ser exhaustiva, sólo se mencionan las principales áreas o principios en los cuales se basan los procesos que han logrado utilización a escala industrial.

Si bien aquí pretendemos ejemplificar el proceso de generación de las diversas opciones posibles para lograr un producto dado y por lo tanto deberían explorarse todas las alternativas, en adelante, para simplificar el análisis de la síntesis de la estructura óptima, sólo analizaremos brevemente el campo de los procesos de desalación por métodos de evaporación.

En la práctica, se utilizan con éxito diversas tecnologías que se basan en la evaporación. Así también, existen procesos que se basan en la mayoría de los principios antes citados. Su conveniencia depende de muchos factores, entre ellos del costo relativo entre la energía eléctrica, el precio del petróleo o gas, elementos de análisis estratégicos, la tasa de interés, el costo de los materiales, etc. Sin embargo, es posible imaginar también un problema en el cual sólo se poseen estudios de laboratorio, que proveen detalles conceptuales acerca de los diversos principios para la desalación. No obstante, debe plantearse la obtención de un proceso industrial óptimo, sin disponer de plantas industriales en funcionamiento como ejemplos.

Los procesos de desalación basados en operaciones de evaporación son los históricamente más desarrollados y presentan, a la fecha, diversas alternativas. Fundamentalmente se basan en la separación del agua de la salmuera por evaporación, tratando de utilizar el calor de condensación del vapor producido (ya que el producto es líquido) para precalentar la alimentación o para obtener una nueva cantidad de vapor. En la Figura (II.9) se presenta un esquema global del proceso, donde se muestra el bloque genérico de separación por evaporación y el bloque de recuperación de energía (el producto deseado es líquido, por lo cual puede recuperarse el calor latente de condensación). Este calor puede utilizarse para precalentar la alimentación o para producir más vapor (separación). En el esquema se prevé la incorporación de energía al sistema, a través del bloque de calentamiento en el cual se aporta energía externa. Como se verá luego, según los distintos casos, ésta podría ser calórica o mecánica.

Como antes mencionamos, al enfrentar un proceso como el descrito, lo conveniente es dividirlo en subproblemas. También vimos que no existe un único criterio para ello. Por ejemplo, aquí tenemos simultáneamente una operación de transferencia de calor y de separación (bloques), lo cual hace difícil plantear cada problema por separado. Esta necesidad de individualizar cada subsistema y sus articulaciones para lograr un resultado final es una parte muy importante del planteo del problema de síntesis. Como veremos más adelante, para este ejemplo, es posible lograr un planteo del problema que recoge elementos de la síntesis de redes de intercambio calórico como una aproximación al proceso global, bajo ciertas hipótesis.

En lo que sigue, trataremos de analizar muy someramente, utilizando los principios elementales explicados anteriormente sobre la síntesis de redes de intercambio calórico y las nociones sobre sistemas integrados de generación y potencia, algunas de las alternativas que funcionan con éxito en la industria de la desalación de aguas, a los efectos de ejemplificar en un caso real, los elementos

discutidos más arriba.

Además, resultará interesante, durante el ejemplo, remarcar las etapas en las cuales, por cada alternativa propuesta, resultaría conveniente o necesario analizar la performance, contemplando rigurosamente los aspectos de diseño tales como el sistema de control, operabilidad, análisis de fallas, etc., o lo que es lo mismo, la utilización de simuladores tanto estacionarios como dinámicos. Aquí resultará mucho más evidente lo remarcado anteriormente, respecto al grado de flexibilidad que deben poseer los simuladores de uso general, ya que durante la tarea de diseño deberán ser utilizados numerosas veces, y siempre sobre variantes estructurales u operativas que surgen de aplicar criterios de optimización evolutivos durante el ciclo de diseño.

### ***Síntesis de la estructura de los procesos de desalación por vía térmica***

Como hemos mencionado, los procesos de desalación por evaporación separan el destilado de la salmuera a través de un cambio de fase. Debido a que el sistema desalador produce agua a partir de evaporaciones y posteriores condensaciones (el producto es líquido), se pueden identificar numerosas operaciones de intercambio calórico, que además incluyen el pre-calentamiento de la alimentación.

Luego, existirá un sistema de recuperación de energía asociado al complejo desalador (red de intercambio calórico). Es de notar que, por lo general, los problemas clásicos que se presentan en la síntesis de una red de intercambio (por ejemplo en una refinería de petróleo) se caracterizan por la presencia de un gran número de corrientes, y un número importante de equipos tanto de transferencia de materia como de energía.

Como hemos visto en la sección 3.1 el problema resulta bien planteado si se conocen todas las corrientes, las temperaturas de entrada y salida, sus propiedades fisicoquímicas, etc.

En nuestro ejemplo, en cambio, si bien existe una red de intercambio calórico según se muestra en la Figura (II.10), esta no está definida en cuanto al número de corrientes y sus temperaturas, tanto de entradas como de salidas. Por lo tanto, estrictamente hablando, o conceptualmente hablando, el ejemplo analizado no es un problema típico de síntesis de redes de intercambio calórico. Además, el enfriamiento de la corriente caliente ( $T_c$  a  $T_c$ ) se produce por evaporación flash, simultáneamente con la producción de vapor, que se utiliza para intercambiar calor con la corriente fría. No obstante, pueden aplicarse todos los principios conceptuales discutidos anteriormente, a partir de un razonamiento muy sencillo.

A continuación expondremos la relación que nos permitirá asociar el proceso de transferencia de energía y vapor simultáneos con la estrategia de modelado que hemos introducido para la síntesis de la red de intercambiadores, esto es la representación en el diagrama T-H.

Sea por ejemplo una corriente fría (CF) que evoluciona tomando calor de una corriente caliente (CC) en un dispositivo en contracorriente como se indica en la

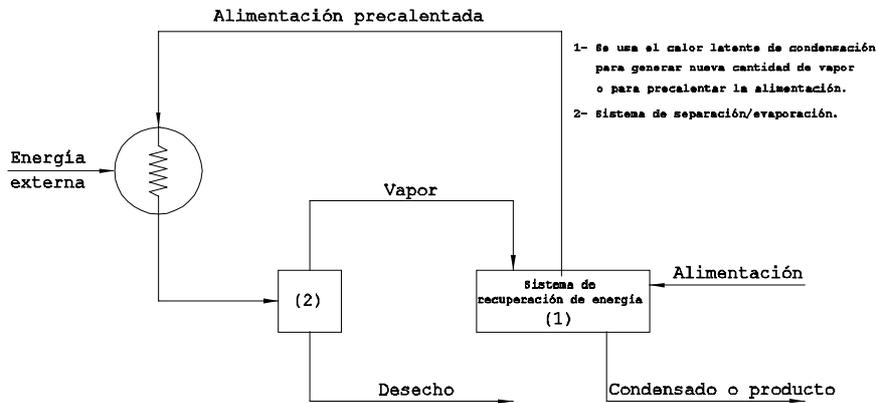


Figura II.9: Esquema estructural de un sistema de desalación por evaporación. Figura (II.11), ambas con el mismo flujo de capacidad calorífica. A diferencia de los sistemas de intercambio convencionales, en este caso, podemos suponer en un principio que el enfriamiento ( $dT$ ) de la SCC se produce como consecuencia de un enfriamiento brusco o auto-evaporación diferencial (o flasheo) en el diferencial de longitud ( $dL$ ). La corriente de vapor generada ( $dV$ ) será la encargada de transferir calor a la CF, al condensar y ceder energía térmica ( $dQ_{int}$ ), provocando en ella un aumento diferencial de temperatura ( $dt$ ), que por un simple balance de energía resulta igual a la caída ( $dT$ ) experimentada por la CC.

El vapor condensado ( $dV$ ), genera una corriente líquida ( $dD$ ), apareciendo por lo tanto una nueva corriente cuya evolución debe ser equivalente a la CC que la origina; dado que el destilado objeto del proceso debe ser obtenido a temperatura ambiente ( $T_0$ ) y debe enfriarse. Por lo tanto, si bien ambas corrientes físicamente resultan diferentes, a los efectos del modelo, destilado y salmuera conforman, por definición, la supercorriente caliente (SCC) con un flujo de capacidad calorífica constante, independientemente que a medida que evoluciona a lo largo de la longitud ( $L$ ) se produce su separación en la corriente de destilado ( $D$ ) y la de deshecho ( $B$ ).

En otras palabras, tenemos la supercorriente fría (salmuera que se precalienta) y la supercorriente caliente, conformada por la salmuera que se enfría (por evaporación súbita), y el destilado que circula por las etapas (que también se enfría por evaporación) hasta convertirse en el producto final.

Se supone además, que existe la fuerza impulsora necesaria para la evaporación flash, esto es, un gradiente de presiones ( $dP$ ) a lo largo del dispositivo de intercambio, de tal forma de permitir el *flasheo* de la SCC y originar la corriente de

vapor (dV). En la Figura (II.10) se muestra un esquema idealizado que cumple con las premisas consideradas en el dispositivo anteriormente analizado, siendo necesaria la presencia del calentador de salmuera para llevar la temperatura de la CF desde  $t_s$  a  $T_e$ , necesariamente mayor a los efectos de permitir la condensación de la corriente dV producida por auto-evaporación de la SCC.

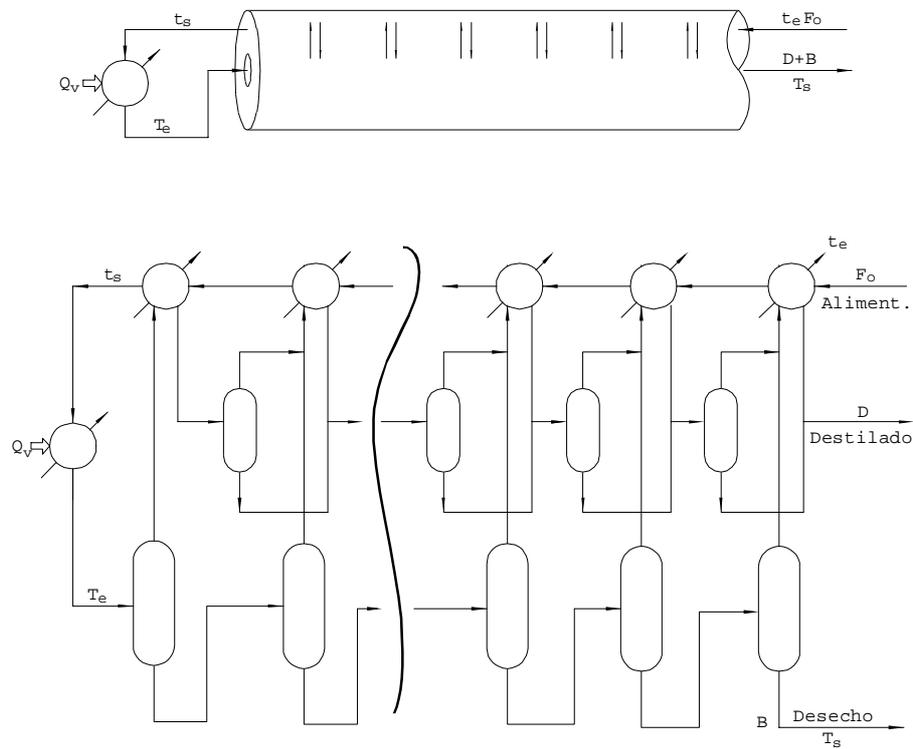


Figura II.10 : Estructura del sistema con infinitas etapas, derivada del modelo adoptado para el intercambio calórico, con evaporaciones diferenciales tanto de la corriente de destilado como de la salmuera de desecho.

Esta evolución analizada para la SCC, coincide con una evolución en la cual

---

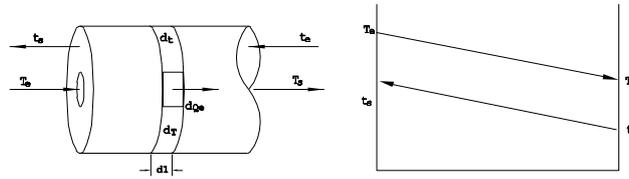
**Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos**

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

se cede energía calórica en forma de calor sensible, de tal forma que su representación en el plano (T-H) será una línea recta, paralela a la que representa la evolución de la CF (ya que son la misma supercorriente antes y después del calentador introducido en el esquema de la Figura (II.10)). Se nota por lo tanto que, en virtud de la estrategia de modelado adoptada, pese a producirse una transferencia simultánea de materia (vapor) y energía entre ambas supercorrientes, el enfoque en el diagrama T-H convencional para representar la evolución del sistema de intercambio se aplica directamente (Figura II.11).

Como analizáramos en la Sección 3.1, aquí tenemos un sistema sencillo desde el punto de vista del diagrama T-H. En efecto, en la Figura (II.12) se observa en la parte (a) la situación de máximo consumo de servicios, disminuyendo éstos a medida que se desplacen las supercorrientes, de tal forma de producir superposición, o lo que es equivalente, la factibilidad de intercambio entre las mismas. Esta superposición está limitada como vimos por el valor de acercamiento mínimo permitido ( $\Delta t$ ), ya que si se adopta  $\Delta t = 0$ , la recuperación de energía térmica será máxima, pero el área de intercambio térmico resulta infinita. Por otra parte, la SCC debe siempre poseer una temperatura mayor a la SCF ( $\Delta t > 0$ ).



Intercambio elemental entre la supercorriente fría y caliente.

Figura II.11

Queda claro según lo expuesto que una evolución como la indicada en la Figura (II.12) puede ahora representar una operación de intercambio calórico convencional, o bien para este caso, una en la cual se realiza un transporte simultáneo de vapor y energía calórica, según el mecanismo analizado recientemente. Resulta sumamente importante además, una consecuencia directa de tal correspondencia. En efecto, existirá una relación que vincula la cantidad de energía recuperada ( $Q_{int}$ ) y el destilado producido ( $D$ ); ya que éste último es proporcional a aquél, según se desprende a partir de la evolución de la SCC, en la cual todo el calor transferido se realiza a partir de la producción de vapor. Esta relación puede obtenerse analizando

la producción elemental (en cada etapa) de las sucesivas evoluciones diferenciales de *flasheo* de la SCC. Sin embargo, no nos abocaremos aquí a esta tarea, dejando al lector con inquietudes consultar a la bibliografía citada (Scenna, 1987).

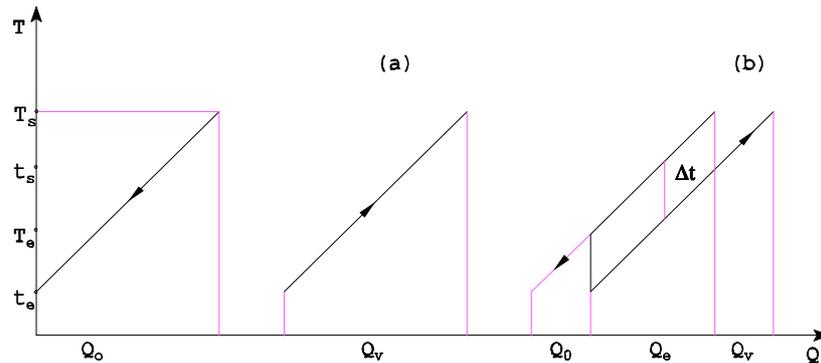


Figura II.12: Evolución de ambas supercorrientes en el diagrama T-H.  
 (a) Solapamiento nulo (máximo consumo)  
 (b) Solapamiento máximo (mínimo consumo)

### Dispositivo real.

Una vez adoptado el parámetro  $\Delta t$ , según lo visto, la evolución anterior determina el mínimo consumo energético ( $Q_v$ ) ya que al asegurarse la máxima superposición (Intercambio calórico entre las supercorrientes) se maximiza la recuperación de calor ( $Q_e$ ) a partir de las corrientes calientes. Por otra parte, debido a que el calor recuperado, en función del mecanismo utilizado, está acompañado de una transferencia de vapor a partir de la salmuera, se incrementa la producción de destilado. No obstante, el sistema definido por esta evolución idealizada contiene infinitas etapas de flasheo, cada una con *un salto diferencial de presiones (o temperaturas)* y una producción diferencial.

Evidentemente, un sistema real, será aquél que contenga un número finito de etapas de flasheo (ver Figura (II.13)). En consecuencia, si se desea analizar la evolución correspondiente a un sistema real, entendiéndose por tal uno con un número de etapas finito, se deberán introducir saltos finitos de temperaturas para el *flasheo* ( $\Delta t_i$ ) en lugar de los saltos diferenciales previamente considerados en el enfriamiento de la SCC. Obviamente, y en correspondencia con éste, queda definido un salto de presiones equivalente ( $\Delta p_i$ ). Por otra parte, es evidente que el valor ( $\Delta t_i$ ) no puede ser arbitrario. En efecto, su cota superior resulta el valor ( $\Delta t$ ) definido para la

operación de intercambio calórico. Por otra parte, para condensar los vapores producidos con área finita será necesario disponer de un acercamiento de temperaturas ( $\Delta t_c$ ). Nuevamente, el valor correspondiente a dicha magnitud resulta acotado. Más aún, según la Figura (II.13), resulta sencillo plantear la relación que vincula los saltos térmicos mencionados. En efecto, la modificación introducida involucra el desdoblamiento de la fuerza impulsora para la transferencia calórica original ( $\Delta t$ ) en dos componentes; el equivalente térmico correspondiente al gradiente de presiones ( $\Delta t_f \sim \Delta P_f$ , fuerza impulsora para la transferencia de materia), y el acercamiento permitido para la condensación de los vapores  $\Delta t_c$ , fuerza impulsora para la transferencia de calor).

En la Figura (II.14) se gráfica en el plano T-H, la evolución que corresponde a un sistema cuyas temperaturas extremas son  $T_m$  y  $T_o$  respectivamente, evolución en la que se basa la alternativa tecnológica conocida como proceso de desalación por flash múltiple etapa (EMF) sin recirculación, en la cual se ha supuesto un valor constante para ( $\Delta t_c$ ) y ( $\Delta t_f$ ) en cada etapa.

A poco de observar el diagrama indicado en la Figura (II.14) nos damos cuenta que existirán diversas políticas de asignación de caídas de presión (temperatura) entre etapas (todas iguales o distintas entre sí), lo cual producirá simultáneamente distintas fuerzas impulsoras (diferencias de temperaturas) en los intercambiadores de pre-calentamiento de la alimentación. Luego, existirá una política óptima de asignación de las mismas que produzca un costo mínimo. Dicha política puede obtenerse, planteando un problema de optimización (con los métodos que se analizarán en el Capítulo XII) o bien obtener una solución aproximada construyendo un diagrama equivalente a la Figura (II.6). En efecto, el costo del sistema no sólo involucra el área de intercambio y el vapor de calefacción, ya que existe un costo asociado a cada *recipiente* de vaporización, siendo este factor proporcional al número de etapas. Además existe un costo asociado al bombeo de fluidos, el pre-tratamiento de la alimentación, etc. No obstante, para un diseño preliminar, puede suponerse con un gran margen de seguridad, que el costo determinante está asociado al sistema de intercambio calórico, por lo cual optimizarlo implica optimizar el proceso.

Aquí sólo nos resta destacar que a partir de un razonamiento elemental, y apoyados en prácticas o principios de la síntesis de redes de intercambiadores, se pudo *generar* una estructura para el sistema, y además, visualizar rápidamente las variables que pueden afectar la *performance* óptima del proceso. En este caso, las más importantes son obviamente el número de etapas y el acercamiento mínimo permitido en los intercambiadores, tanto principal como los de recuperación de calor. Esto implica dos variables, cuando se supone que todos los saltos entre etapas son iguales; mientras que si se considera que los saltos en cada etapa pueden ser diferentes entre sí, el número de variables a optimizar se incrementa notablemente. Si se considera que el coeficiente global de intercambio (U) también varía etapa a etapa, la complejidad del problema se incrementa aún más.

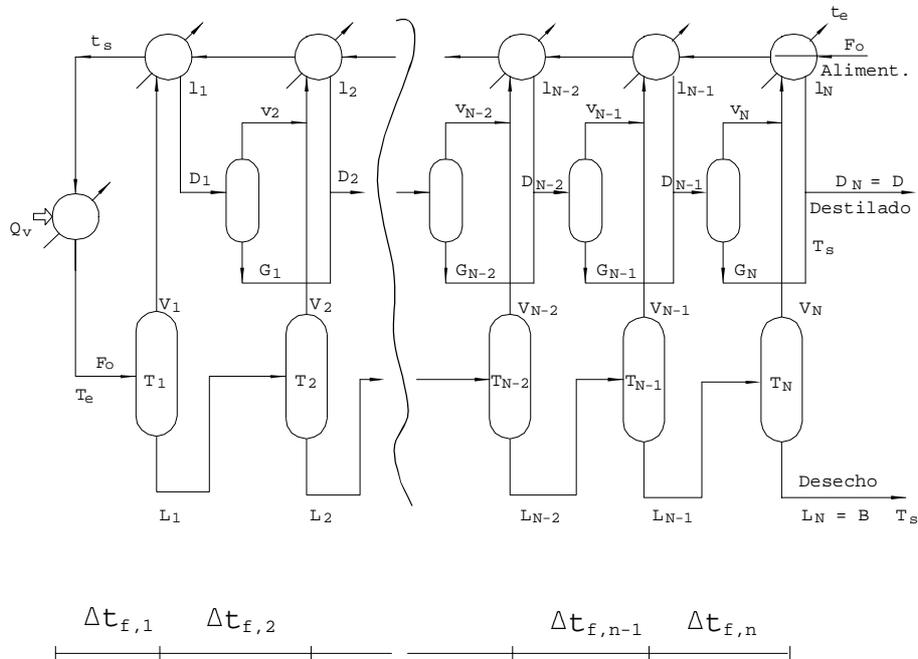


Figura II.13: Esquema de un dispositivo real y principales variables asociadas al sistema Evaporación Múltiple Flash (EMF).

Obviamente, si se requiere analizar la *performance* operativa del proceso, deberán introducirse las propiedades de los fluidos, por lo que será necesario recurrir a un modelo más riguroso, ya sea para la simulación estacionaria o dinámica, o bien para el diseño geométrico de las cámaras de *flasheo*, o del sistema de vacío. En efecto, la elevación del punto de ebullición depende de la temperatura, la cantidad de vapor producida depende de la eficiencia de la operación de *flasheo* (que dependerá de la geometría de la cámara), la potencia del sistema de vacío dependerá de los no-condensables. En general, se recicla parte de la corriente de desecho ya que está tratada y puede entonces ahorrarse el costo de pre-tratamiento de la porción reciclada, etc. Por otra parte, los coeficientes peliculares de intercambio dependerán de las propiedades de los fluidos en cada cámara y su geometría, y no son constantes. En síntesis, luego del análisis genérico de las estructuras, o bien una optimización de

variables operativas, que por lo general para simplificar el problema en una primera etapa involucra un modelo simplificado, cuando queremos analizar la *performance* del proceso, o su operabilidad bajo determinadas condiciones, debemos recurrir a un simulador riguroso ya sea estacionario o bien dinámico (ver Capítulo XVII).

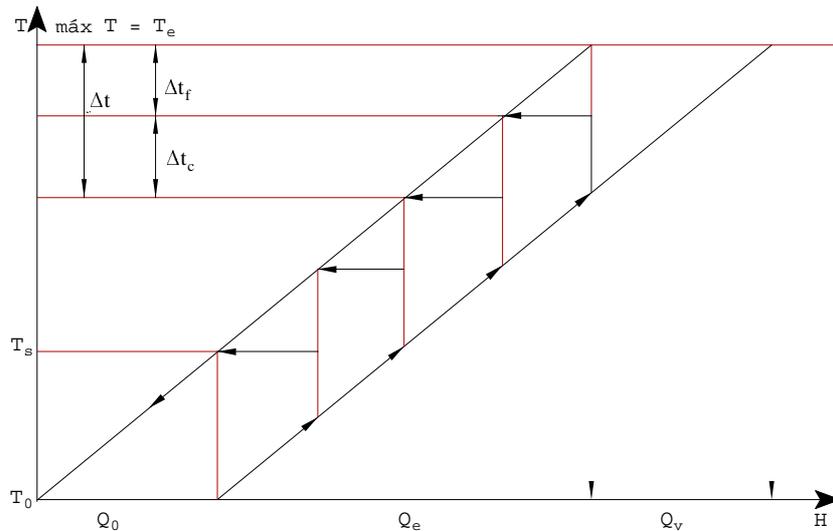


Figura II.14: Evolución de un sistema EMF en el diagrama T-H.

El proceso aquí bosquejado, (solo se han indicado nociones elementales), es muy empleado hoy en día, y se lo conoce como Evaporación Múltiple Flash (EMF).

Un análisis similar puede realizarse para un sistema por evaporación múltiple efecto (Scenna, 1987). Más aún, las estructuras óptimas para un sistema por evaporación múltiple efecto implican un procedimiento bastante complejo, involucrando enfoques similares a los aquí bosquejados o métodos de optimización computacionales (Schenoy, 1995).



el ciclo se convierte íntegramente en trabajo). Esto es, en el sistema integrado se logra *convertir* esa cantidad de calor totalmente en trabajo, lo cual está prohibido por la segunda ley de la termodinámica, si utilizáramos el ciclo funcionando solamente, en forma no integrada.

Aquí pueden plantearse varios esquemas de integración, esto es, turbinas de contrapresión (descargan todo el vapor luego de la expansión al calentador principal del desalador), de extracción (sólo se extrae lo necesario para la demanda en el desalador pero el resto del vapor prosigue la expansión hasta el máximo posible), y por último, la utilización de turbinas de gas, las cuales generan una corriente gaseosa a alta temperatura que puede utilizarse para generar vapor y éste, luego de pasar por una turbina de alguno de los dos tipos mencionados arriba, podrá ser utilizado en el calentador principal del desalador (Aguirre y col., 1997), (Scenna, 1987).

En resumen, es posible, desde el punto de vista estructural, plantear la integración del proceso a un sistema de generación de potencia ya que además las poblaciones demandan simultáneamente ambos productos. En este sentido, la mejora se manifiesta con la cristalización de procesos híbridos que aprovechan características ventajosas de las metodologías básicas ya descritas.

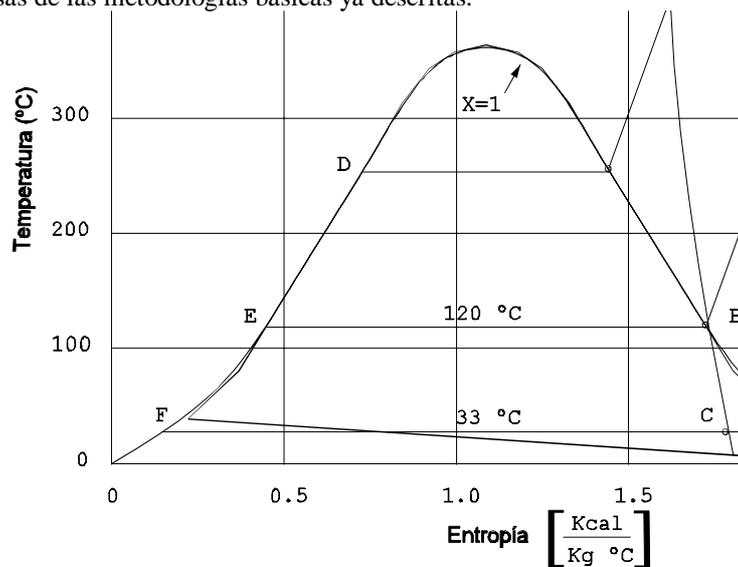


Figura II.16: Evolución característica del vapor en plantas de desalación por doble propósito. El punto B muestra el nivel de expansión cuando se extrae vapor para utilizarlo en el evaporador flash. El punto C muestra la expansión de una turbina de condensación. La diferencia implica potencia eléctrica no producida a cambio de eliminar servicios de calefacción en el calentador.

En la Figura (II.16) se representa en un diagrama T-S, la evolución característica del vapor en plantas de desalación por doble propósito.

No obstante, además de generar las estructuras y alternativas, debemos optar por una de ellas, según un criterio de óptimo. Nuevamente, esto dependerá de muchas variables, tanto del desalador (ya hemos mencionado varias) como de los ciclos de potencia posibles de integrar. Por ejemplo, deberá analizarse la proporción entre agua y energía demandada (lo cual puede favorecer a uno u otro tipo de turbinas en la alternativa de integración), el precio de la electricidad, el del agua, la tasa de interés, el precio del combustible, etc.

Nuevamente, se deberá plantear un modelo de optimización en el cual intervengan todas las variables. Además, para verificar la performance del sistema involucrando aspectos tanto estáticos como dinámicos cada vez más profundos (geometría de las cámaras, nivel de las mismas, etc.) a los efectos de estudiar criterios de control ante fuertes fluctuaciones de la demanda (ciclos diurnos, estacionales, etc., tanto en agua como en electricidad), deberá necesariamente utilizarse un simulador riguroso que involucre todos los equipos mencionados, contemplándose sus características geométricas y operativas.

### ***Consideraciones Finales acerca del Ejemplo***

Existen además otras combinaciones posibles. En efecto, así como se plantean reglas para la integración adecuada de ciclos productores de potencia también existen las correspondientes para la ubicación de los ciclos consumidores de potencia. Para nuestro ejemplo, sólo mencionaremos que éstas justifican a los sistemas de compresión de vapor, en los cuales se reemplaza la fuente de energía externa (vapor de calefacción por energía mecánica), recurriendo a compresores. La utilidad práctica de esta opción nuevamente dependerá de los costos relativos asociados, la operabilidad del sistema, etc., exigiendo un estudio en profundidad, al igual que las anteriores propuestas.

Podría también suponerse, en la alternativa de bombeo de calor por medios mecánicos, la utilización de vapor como elemento de arrastre y proveedor de la energía necesaria, a través de un eyector. Esta alternativa, en la cual se utilizan eyectores para la compresión de vapores en lugar de energía mecánica, se conoce en la actualidad como procesos de desalación por termo-compresión.

Por otra parte, dado que el vapor necesario para que funcione un eyector puede disponerse a partir de extracciones a una turbina, como en el caso de las plantas doble propósito, pueden plantearse de este modo nuevas alternativas. Igualmente, puede considerarse la combinación de elementos estructurales basados en termo-compresión, energía mecánica, y evaporación múltiple flash o múltiple efecto. Es decir, combinaciones híbridas que serán más convenientes o no, de acuerdo a un número de condiciones que deberán analizarse en cada caso particular. Y para ello,

seguramente deberá recurrirse a simuladores del proceso que permitan evaluar las distintas condiciones de operación, la controlabilidad, seguridad, etc; además del aspecto económico propiamente dicho.

## II.5 ETAPAS EN LA INGENIERÍA DE PROCESOS

En el ejemplo anterior solo se pretendió mostrar, en forma muy sintética y elemental, una aproximación a algunas de las etapas comunes y metodologías disponibles para la generación de estructuras convenientes; y a su vez, el gran esfuerzo que ello significa, en particular si imaginamos una idea a nivel de propuesta o de ensayo de laboratorio, y el problema de su implementación en un proceso real.

Como ya mencionamos, es evidente que dada la existencia del enorme número de alternativas para un proceso dado y la necesidad de analizar la viabilidad de las mismas, siempre existirá la necesidad de simular los diversos arreglos para chequear innumerables cuestiones operativas, al principio sólo a nivel de balances de materia y energía. Seguidamente, avanzando ya en el diseño al adoptar una estructura básica, deberán analizarse numerosos ítems, desde el diseño propiamente dicho, los aspectos dinámicos y el control, hasta la política de puesta en marcha y parada, con los consiguientes agregados de equipos y verificaciones de lazos de control y área de intercambio, etc.; y por último (pero no menos importante) los aspectos de confiabilidad del proceso, que deberán estudiarse desde el mismo momento que comienza la síntesis del *flowsheet*, pero que deben verificarse cuantitativamente después de definidas las características operativas y de diseño de los diversos equipos. Por ejemplo, la simulación de diversos estados transitorios ante fallas críticas, para decidir el nivel de protección y redundancia en las distintas alarmas, bombas y compresores en paralelo (redundantes), sistemas de alivio, etc. En la Figura (II.17) se esquematizan someramente los distintos pasos que se llevan a cabo normalmente en la tarea del diseño de procesos químicos. En ellos se indica el uso genérico que puede darse a la herramienta de simulación durante la tarea normal de diseño.

Hasta aquí hemos discutido los aspectos inherentes al diseño de procesos. Sin embargo, existe todo otro capítulo que corresponde a la operatividad u operabilidad de los mismos, esto es, su puesta en marcha, operación normal y en las condiciones óptimas, la optimización en línea para encontrar el nuevo punto óptimo ante cada variación en los parámetros de entrada (materias primas, condiciones ambientales), etc.

En este caso, más que la simulación estacionaria resulta muy útil la simulación dinámica, y en particular, la que se lleve a cabo en tiempo real, debido a que se trata de optimizar las condiciones en *operación* ante modificaciones en las condiciones de contorno del proceso, o bien durante la supervisión del mismo, o el diagnóstico de fallas, etc. Por ejemplo, podemos imaginar un sistema de control inteligente que en vez de tener fijos los set points de cada controlador, o bien depender del operador para sus cambios, éstos sean fijados por el sistema de supervisión en

tiempo real (automáticamente) ante cada cambio, de manera de optimizar la *performance* según una función objetivo previamente especificada.

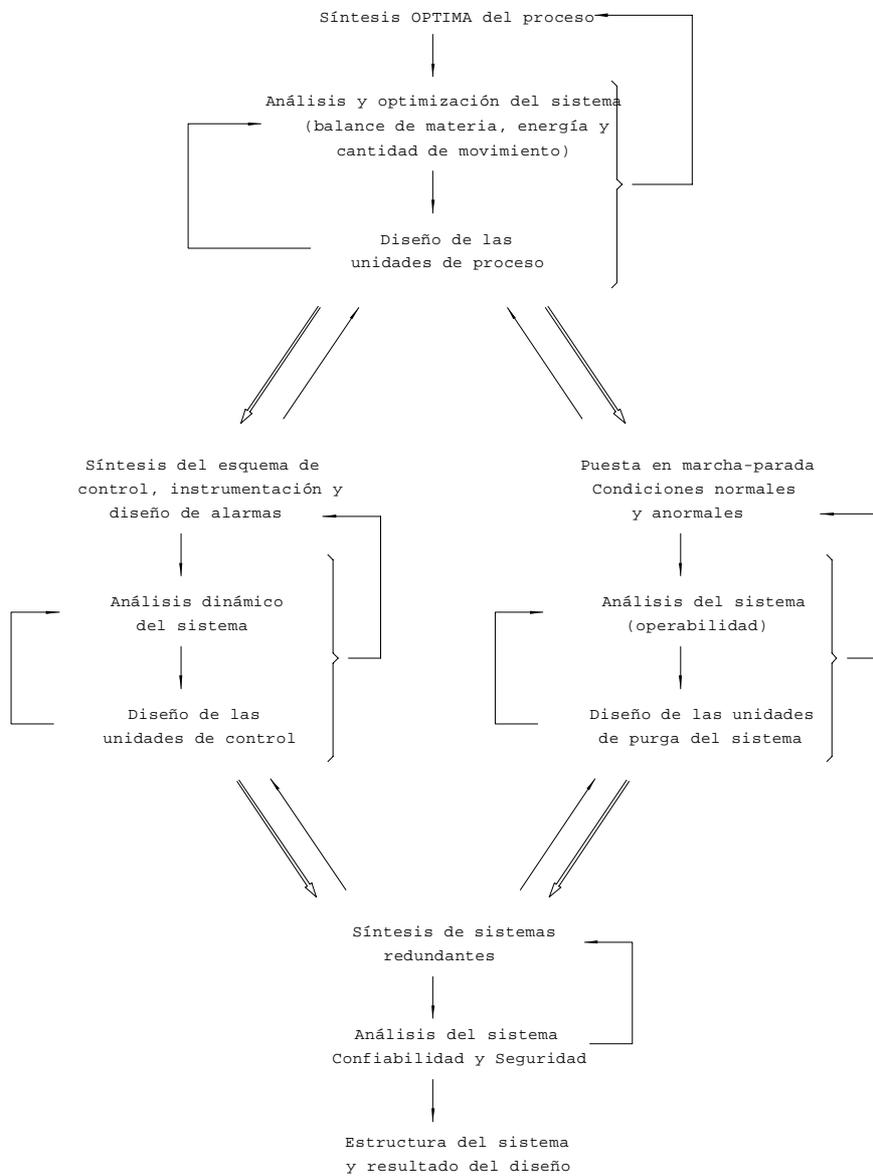
### ***Sistemas de Información Integrados.***

Muchas de las tareas de supervisión de procesos requieren de la disponibilidad de una gran cantidad de datos. Como se mencionó anteriormente (ver Capítulo I.5), no existe una sola herramienta que lleve a cabo adecuadamente todas las tareas que comprende la actividad de diseño o la supervisión de un proceso en operación. Además, la evolución histórica hizo que se generaran distintas implementaciones (software y hardware) para la solución de diversos aspectos parciales (sistemas de control, simulación estacionaria, simulación dinámica, programas de diseño de diversos equipos, etc.), pero cada uno en forma autónoma y poco compatible con el resto.

A partir de la gran diversidad de aplicaciones existentes, por un imperativo de la realidad, se está realizando un gran esfuerzo para lograr un entorno único de aplicación que permita un diálogo eficaz entre las distintas herramientas, no sólo de diseño, sino también de administración (stock, costos, programación de la producción, ventas, compras, evolución del mercado, etc.). El objetivo consiste en integrar toda la información disponible acerca de la empresa en un único ambiente, útil para el soporte en la toma de decisiones, cualquiera sea el punto de vista o gerencia que demande dicha tarea.

Este nuevo campo, el de *los sistemas de información aplicados a las industrias de proceso*, como base para el gerenciamiento de la información y toma de decisiones, evolucionará en forma muy dinámica en las próximas décadas, haciendo que muchas de las herramientas de síntesis y análisis aquí someramente discutidas, como así también las de soporte para la operabilidad y supervisión del proceso en tiempo real, cambien radicalmente su filosofía, haciéndolas más flexibles, más abiertas al usuario, más fácilmente adaptables a casos particulares, y minimizando la distinción entre operación y diseño del proceso, datos para la administración o para la producción, para el sector mantenimiento (preventivo o predictivo) o para el departamento control de calidad o bien para evaluar la confiabilidad del proceso, o para asesoramiento al operador en la tarea de supervisión o diagnóstico de fallas en tiempo real. Estas tareas mencionadas no son un listado exhaustivo, solamente constituyen un conjunto indicativo entre muchas de las que hoy son llevadas a cabo con el auxilio de sistemas computacionales, y que en un futuro no muy lejano serán integradas (intercambiarán información) en un único entorno o ambiente de aplicación.

En efecto, en la sección I.5 mencionamos someramente las características propias de los sistemas auxiliares para el gerenciamiento de la información, y la necesidad de contar con herramientas computacionales compatibles.



Actividades iterativas durante el diseño de procesos químicos.

Figura II.17

---

**Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos**

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Desde este punto de vista, no debe confundirse la dificultad que mencionamos para lograr un algoritmo que englobe a todas las tareas del ciclo síntesis-análisis-optimización, con la disponibilidad de un entorno computacional o ambiente informático integrado en el cual justamente las herramientas parciales intercambian información, a los efectos de facilitar la tarea iterativa propia del diseño. En este sentido, se está evolucionando hacia una síntesis de los diversos algoritmos en un único procedimiento, y la integración de las herramientas informáticas parciales en un único ambiente de interacción. Seguramente, de la convergencia de ambas corrientes se obtendrán próximamente contribuciones importantes en la disciplina del diseño de procesos asistido por computadora.

He aquí la verdadera dimensión del problema! He aquí también una idea acerca de qué se deberá lograr en el campo del modelado de procesos, y su implementación en algoritmos computacionales. En el resto del libro intentaremos dar una breve noción de los aspectos asociados al modelado y su implementación en algoritmos computacionales para la simulación (y optimización) estacionaria o dinámica de procesos químicos, y algunos de sus usos más comunes. Lamentablemente, abarcar la totalidad de los aspectos mencionados es muy difícil de lograr en un solo volumen. No obstante, en todos los casos se trata de incentivar la lectura de otros trabajos que tratan temas complementarios o profundizan lo aquí desarrollado, con la esperanza que resulten de utilidad para aquellos deseosos de profundizar en los temas discutidos en el presente capítulo.

#### **PROBLEMAS PROPUESTOS**

P1) En base a qué enfoques se puede plantear la tarea de síntesis de procesos y cuáles son las características de cada uno de ellos?

P2) Qué ventajas y desventajas implica la descomposición de un proceso en subunidades, como metodología para la generación del flowsheet del mismo? El problema es aún combinatoriamente explosivo?

P3) Qué procedimientos de descomposición de un proceso conoce? Discuta las similitudes y/o diferencias que encuentre entre ellos.

P4) Seleccione un flowsheet de una revista (por ejemplo, Hydrocarbon Process). Identifique las corrientes calientes y frías, discuta como construir las supercorrientes que correspondan y cuál es el procedimiento para determinar el mínimo y el máximo consumo de servicios auxiliares para el sistema.

P5) Que importancia tiene la determinación del punto *pinch* para el diseño del sistema de intercambio energético, considerando simultáneamente la generación de potencia?

P6) Se requiere separar una corriente efluente proveniente de una unidad de hidrogenación en sus componentes puros utilizando destilación convencional. Esquematice las posibles secuencias de separación, sabiendo que las características de la mezcla se describen a continuación:

Componente	Flujo Molar (kgmol/hr)	Volatilidad Relativa
Propano (C <sub>3</sub> )	10.0	8.1
Buteno (B <sub>1</sub> )	100.0	3.7
n-Butano (nB)	341.0	3.1
Buteno-2isómero (B <sub>2</sub> )	187.0	2.7
n-Pentano (C <sub>5</sub> )	40.0	1.0

P7) Aplique los heurísticos dados, además de los que Ud. proponga, para determinar la secuencia más favorable para el problema (P6).

#### BIBLIOGRAFÍA CITADA O RECOMENDADA

- Aguirre P. A., Scenna N. J. y Mussati S., "Thermodynamic Synthesis of Cogeneration Systems in Thermal Desalination Plants, Including Gas Turbines", *IDA World Congress on Desalination and Water Reuse*, Vol IV, 383-394, Madrid (1997).
- Argnihotri R. B. y Motard R. L., "Reaction Path Synthesis in Industrial Chemistry", *ACS Symp. Series, Computer Applications to Chemical Process Design and Simulation*, 124, 193 (1980).
- Benz S. J. "Síntesis Óptima de Trenes de Destilación Flexibles con Integración Calórica", Tesis Doctoral, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, Argentina, 1991.
- Benz S. J. y J. Cerdá, "Optimal Synthesis of Flexible Heat-Integrated Distillation Trains", *Computer Chem. Engn.*, 16, 8, 753-776 (1992).
- Cerdá J., B. Linnhoff y A. W. Westerberg, "Minimum Utility Usage in Heat Exchanger Network Synthesis: A Transportation Problem", *Chem. Eng. Sci.*, 38, 373 (1983).
- Corey, E. J. y W. T. Wipke. "The Computer- Assisted Synthesis of Complex Organic Molecules", *Science*, 116, 179 (1969).
- Douglas J., "Conceptual Design of Chemical Processes", Mc Graw-Hill Co, 1988.
- Galli M. R. "Síntesis Óptima de Redes de Intercambio Flexibles", Tesis Doctoral, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Tecnológica

---

#### Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

- Nacional, Santa Fé, Argentina, 1990.
- Galli M. R. y J. Cerdá, "Synthesis of Flexible Heat Exchange Networks - III: Temperature and Flowrates Variations.", *Computer chem Engng.* 15 (1), 7-24 (1991).
  - Gelernter, H., N. S. Sridharan, A.J. Hart, F. W. Fowler y H. J. Shue, "An Application of Artificial Intelligence of the Problem of Organic Synthesis Discovery", Technical Report. Departaments of Computer Science and Chemistry, SUNY at Stony Brook, Agosto (1971).
  - Gelernter, H., N. S. Sridharan y A.J. Hart. *Topics in Curr. Chem.*, 41, 113 (1973).
  - Govind, R. y G. Powers. "Studies in Reaction path Synthesis", *AIChE J.*, 27, 429 (1981).
  - Govind, R. y G. Powers. "Control Systems Synthesis Strategies", *AIChE J.*, 28, 60 (1982).
  - Grossmann, I. E. "Mixed Integer programming Approach for the Synthesis of Integrated Process Flowsheets", *Comp and Chem. Engng.*, 9, 463-482 (1985).
  - Hendry J. E., D. F. Rudd y J. D. Seader. "Synthesis in the Design of Chemical Processes", *AIChE J.*, 19, 1 (1973).
  - Hendry J. E. y R. R. Hughes. "Generating Separation Process Flowsheets", *Chem.Eng.Prog.*, 68, 69 (1972).
  - Hlavacek V. "Journal Review: Synthesis in the Design of Chemical Processes", *Comput. Chem. Eng.*, 2, 67 (1978).
  - Hohmann E. C., "Optimum Networks for Heat Exchnage", Ph. D. Thesis, Chemical Engineering, University of Southhern California, Los Angeles, CA, 1971.
  - Irazoqui H. A., "Optimal Thermodynamic Synthesis of Thermal Energy Recovery Systems", *Chem. Eng. Sci.* 41, 1243-1255 (1986).
  - Kaibel, G., Blass. E., y Koehler J., "Thermodynamics Guideline for the Development of Distillation Columns Arrangements", *Gas Sep.& Purif.*, 4, 109-114 (1987).
  - Koehler, J., Aguirre, P. y E. Blass, "Evolutionary Thermodynamic Synthesis of Azeotropic Distillation Sequences", *Gas Sep.& Purif.*, 6, 3, 153-167 (1992).
  - Linnhoff, B. "Use Pinch Analysis to Knock Down Capital Cost and Emissions", *Chem. Engn. Prog.*, Agosto (1994).
  - Linnhoff B. y J. R. Flower. "Synthesis of Heat Exchanger Networks". *AIChE J.*, 24, 633 (1978).
  - Linnhoff B. y E. Hindsmarsh. "The Pinch Design Method for Heat Exchanger Networks", *Chem. Eng. Sci.*, 38, 5, 745-763 (1983).
  - Linnhoff B. y S. Paker. "Heat Exchanger Networks with Process

---

**Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos**

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

- Modifications”, *IchemE 11th Annual Res Meeting*, April, bath, U.K., 1984.
- Linnhoff, B. y J.A. Turner. “Simple Concepts in Process Synthesis give Energy Savings and Elegant Designs”, *the Chemical Engineer*. pp 621-624, Octubre, 1980.
- Linnhoff, B. y D.W. Townsend. “Designing Total Energy Systems”, *Chem. Engn. Prog.*, 78, 7, 72-80 (1982).
- Linnhoff, B., Townsend, D. W., Boland, D. Hewitt, G.F., Thomas, B.E.A., Guy, A.R.; Marsland, R.H.; Flower, J.R., Hill, J.C., Turner, J.A. y D. A. Reay. “User Guide on Process Integration for the Efficient use of Energy”, The Institute of Chemical Engineers, London, 1982.
- May D. y D. F. Rudd, “Development of Solvay Clusters of Chemical Reactions”, *Chem. Eng. Sci.*, 31, 59 (1976).
- Morari, M., Y. Arkun, y G. Stephanopoulos. *AIChE J.*, 26, 220 (1980).
- Nishida N., G. Stephanopoulos y A. W. Westerberg, “A Review of Process Synthesis”, *AIChE J.*, 27, 321 (1981).
- Nishimura H. “A Theory for the optimal Synthesis of heat exchange systems”, *J. Optimization Theory Appl.*, 30, 423-450 (1980).
- Petlyuk, F.B., Platonov V.M. y D. M. Slavinskii. “Thermodynamically Optimun Method for Separating Multicomponent Mixtures”, *Int. Chem. Eng.*, 5, 3, 555-561 (1965).
- Rudd D. F. “The Synthesis of System Design: I. Elementary Decomposition Theory”, *AIChE J.* 14, 343 (1968).
- Rudd, D.F., G.J. Powers y J.J. Sirola, “Process Synthesis”, Prentice Hall, NJ (1973).
- Rotstein, E. y G. Stephanopoulos. “Studies on the Synthesis of Reaction Paths. Part I”. *Annual AIChE Meeting*, Chicago, November, 1980.
- Scenna N. J., “Síntesis de procesos de Desalinización Térmica”, Tesis Doctoral, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fé, Argentina, 1987.
- Shenoy U. V. “Heat Exchanger network Synthesis”, Gulf Publishing Co, 1995.
- Stephanopoulos G. “Synthesis of Process Flowsheets: An Adventure in Heuristic Design or a Utopia os Mathematical Programming?”, *en R.S.H. Mah and D. Seider (eds.), Foundations of Computer-Aided Chemical Process Design*, 2, 439, Engineering Foundation, New York (1981).
- Stephanopoulos G. y D. W. Townsend. “Synthesis in Process Development”. *Chem Eng Res Des*, 64, mayo, 1986.
- Stephanopoulos G. y A. W. Westerberg. “Studies in Process Synthesis-II: Evolutionary Synthesis of Optimal Process Flowsheets”, *Chem. Engn. Sci.*, 31, 195-204 (1976).
- Takama N. y T. Umeda “Multi-level, Multi-objective Optimization in Process Engineering”, *Chem. Engng. Sci.*, 36, 129-136 (1980).

---

**Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos**

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

- Thompson R.W. y J.C. King. "Systematic Synthesis of Separation Schemes", *AIChE J.*, 18, 941 (1972).
- Townsend, D.W. y B. Linnhoff. "Heat and Power Networks in Process Integration: I. Criteria for the Placement of Heat Engines and Heat Pumps in Process Networks". *AIChE J.*, 29, 742-748 (1983).
- Umeda, T. "Computer Aided Process Synthesis", *Proceedings of Process Systems Engineering Symposium*, p. 79, Kyoto, Japan, 1982.
- Umeda T. Y T. Kuriyama. "A Logical Structure for Process Control System Synthesis", *Proc. of IFAC Congress, Helsinki, Finland*, 1978.
- Umeda T., T. Kuriyama, S. Kobayashi y A. Ichikawa. *Comput.Chem.Eng.*, 4, 3 (1980).
- Umeda T., Niida K. y K. Shiroko. "A Thermodynamic Approach to Heat Integration in Distillation Systems". *Computers & Chem. Engng.*, 25, 423 (1979a).
- Umeda T., Niida K. y K. Shiroko. "A Thermodynamic Approach to the Synthesis of Heat Integration Systems in Chemical Processes". *Computers & Chem. Engng.*, 3, 273 (1979b).
- Umeda T. y A. Ichikawa. "Synthesis of Optimal Processing Systems by a Method of Decomposition", *AIChE Meeting*, Dallas, TX (1972).
- Westerberg A. W., H.P. Hutchinson, R.L. Motard y P. Winter. "Process Flowsheeting", Cambridge Univ. Press, Cambridge, England (1979).
- Westerberg A. W. "A Review of Process Synthesis", en *Computer Applications to Chemical Engineering*, R.G. Squires and G.V. Reklaitis (eds), *ACS Symposium Series*, (1980).
- Westerberg A. W. "A Review of the Synthesis of Distillation Based Separation Systems" *Conferencia Internacional sobre Nuevos Desarrollos Conducentes a Tecnologías de bajo Consumo Energético*, Santa Fe (1983).
- Wipke W. T. *Computer Representation and Manipulation of Chemical Information*, Wipke y col. (Ed.), Wiley, Ney York (1974).