

SÍNTESIS DE PROCESOS: UNA PROPUESTA HOLÍSTICA

RAFAEL MARTÍN*, GLADYS RINCÓN†, BERENICE BLANCO*

* Universidad Central de Venezuela, Facultad de Ingeniería, Escuela de Ingeniería Química
P.O. Box 50656, Caracas 1040-A, Venezuela

† Universidad Simón Bolívar, Departamento de Procesos y Sistemas.
Apdo. 89000, Caracas 1080-A, Venezuela

Recibido: mayo de 2005

Recibido en forma final revisado: marzo de 2006

RESUMEN

La síntesis de procesos químicos es un proceso holístico que requiere la solución de problemas a través de métodos algorítmicos y heurísticas basadas en los principios fundamentales de la ingeniería química. El objetivo de este trabajo es proponer una metodología que apoye el diseño de la síntesis de un proceso químico, utilizando reglas heurísticas y bajo un enfoque holístico. Esta metodología holística descompone el problema original en 4 problemas más sencillos, denominados etapas: reacción, asignación, separación e integración. Las soluciones de cada ejercicio pueden modificar los resultados de la metodología, impartiendo de esta manera el carácter holístico. Esta metodología se probó exitosamente en el aula de clase durante 3 años en cursos de la Universidad Simón Bolívar. Para ilustrar la metodología propuesta se utilizan ejemplos relacionados con la síntesis del amoníaco.

Palabras claves: procesos químicos, síntesis de procesos, heurísticas, proceso holístico.

PROCESS SYNTHESIS: A HOLISTIC APPROACH

ABSTRACT

Process synthesis is a holistic procedure that requires the integration of substantial volumes of data and the application of basic chemical engineering principles. This paper is aimed at providing such a methodological procedure based on a philosophical approach. The methodology is based mainly on the intelligent and practical application of heuristic rules developed by experience. This holistic methodology decomposes the original problem in four simpler problems, caller phase: reaction, localization, separation and integration; the result of each exercise could modify the former exercises and forward exercises, providing a holistic character to the methodology. This methodology was tested successfully in the classroom during three years at the Simon Bolivar University. The proposed methodology we made examples related to ammoniac synthesis.

Keywords: chemical process, process synthesis, heuristic rules, process holistic.

INTRODUCCIÓN

La síntesis de un proceso químico es un proceso holístico que requiere utilizar estrategias creativas, decisiones asertivas y resolución de problemas a través de métodos algorítmicos y heurísticos. Esto significa que no existe una única forma ni un único camino para diseñar la síntesis de un proceso químico, y no hay garantía que el resultado de esta creación sea el mejor. Para esto se requiere del uso de la imaginación, la libertad de errar, y por lo tanto, de innovar y cambiar lo que sea necesario para alcanzar las metas propuestas. Todos estos elementos deben apoyarse en una sólida formación en termodinámica, cinética química, fenómenos de transporte de masa y energía y, la economía del proceso.

La intención de este trabajo es proveer una metodología que facilita el diseño de la síntesis de procesos químicos. Esta metodología hace hincapié en el uso de heurísticas, las cuales se basan en los principios fundamentales antes mencionados y provienen principalmente, de la experiencia en el diseño y operación de procesos químicos. Para ilustrar la aplicación de algunos conceptos y la mecánica de la metodología, se presentan ejemplos relacionados con la producción de amoníaco.

EL PROCESO HEURÍSTICO DE CREACIÓN

Las heurísticas son guías basadas en el método inductivo que sigue un ingeniero experimentado durante el diseño, operación o mantenimiento de un proceso químico. Las

Tabla 1. Heurísticas para la síntesis de procesos químicos

Conversión
<ul style="list-style-type: none"> • Basándose en analogías estructurales, identifique las especies químicas que pueden servir de punto de partida para la síntesis de los productos deseados o que pueden aparecer como productos intermedios en dicha síntesis. • Elimine todos aquellos caminos que sean impracticables por consideraciones de tipo termodinámico o cinéticas. • Identifique posibles productos intermedios o secundarios, así como sus niveles de conversión.
Separación
<ul style="list-style-type: none"> • Retire primero los componentes más corrosivos o peligrosos. • Evite usar técnicas que impliquen el ingreso de una especie nueva. Si es inevitable, retire la nueva especie cuanto antes. • Separe lo más fácil primero, deje las separaciones más difíciles para el final.
Mecanismos de Separación
<ul style="list-style-type: none"> • Use destilación como primera opción para separar fluidos cuando se requiera alta pureza en ambos productos. En destilación es preferible retirar la especie deseada como un destilado al final de la serie. • Use absorción gaseosa para remover trazas de un componente en una corriente gaseosa. • Use cristalización para separar dos sólidos o para purificar un sólido de una solución líquida.
Manejo de Energía
<ul style="list-style-type: none"> • Evite excursiones en las temperaturas o presiones. Trate de ir de los valores más altos a los más bajos. • Las corrientes de flujo a altas temperaturas deben usarse para generar vapor, trabajo o para calefacción. • Las corrientes a alta presión deben usarse para realizar trabajo directamente. • La calefacción o disipación de calor debe realizarse preferiblemente entre fluidos del proceso.
Manejo de Materiales
<ul style="list-style-type: none"> • El transporte de fluido debe hacerse en cascada de presiones, minimizando los altibajos. • En lo posible, debe evitarse el transporte de materiales en más de una fase y en los casos en que el transporte de materiales requiera la coexistencia de dos o más fases por un tramo del trayecto, la segregación de las fases debe hacerse tan pronto se pueda.

Fuente: Turton *et al.*, 1998; Rudd *et al.*, 1973; Giral *et al.*, 1979

mismas no garantizan una única solución, a veces se contradicen unas con otras, pero tienden a reducir el tiempo de resolución del problema; y su acierto dependerá del contexto inmediato más que de un estándar absoluto [Turton *et al.*, 1998]. La tabla 1 presenta algunas heurísticas usadas en la práctica de ingeniería para el diseño de la síntesis de procesos químicos (SPQ).

Autores como Rudd, Powers y Siirola [1973] y Smith, [1995] coinciden en señalar que lo ideal para el diseño de la SPQ, sería repetir de forma racional el método inductivo que sigue un ingeniero experimentado para llegar a la creación del proceso a partir de las especificaciones de materia prima y producto. Por lo tanto, se consideró adecuado, el uso de heurísticas como soporte para el diseño de un proceso químico, ya que las mismas son fruto de experiencias anteriores para situaciones similares.

Adicionalmente, Rudd y colaboradores [1973] advierten que la SPQ puede llegar a ser un problema complejo. Una manera efectiva de resolverlo es descomponiéndolo en problemas más sencillos, cuyas soluciones deben ensamblarse para resolver el problema original. Estos autores sugieren que el problema original se descomponga en 5 etapas: camino de reacción, asignación, mecanismos de separación, selección

de la separación e integración. Mientras que Smith [1995] plantea que el problema original se descomponga en 4 etapas: camino de reacción, red de separación y reciclo, diseño de la red de intercambio de calor, y diseño de los servicios.

Ahora, nosotros evaluamos el hecho de que en cada etapa se generan soluciones parciales del problema original, pero que a su vez estas soluciones afectan las decisiones que se toman en la propia etapa, en la anterior y en la siguiente, generándose un proceso de retroalimentación constante entre las decisiones tomadas y la información requerida y generada por cada etapa y la de las demás, impartándole el carácter holístico a la SPQ.

Tomando en cuenta lo expuesto y conociendo lo complejo que es resolver adecuadamente la SPQ, se avala lo expuesto por Rudd *et al.* [1973] y Smith [1995] de dividir el problema original en problemas más pequeños y, por lo tanto, más manejables. Se propone que el problema original se divida en 4 etapas: a) reacción, b) asignación, c) separación y, d) integración. Esta propuesta se fundamentará en el uso de heurísticas, para garantizar que los resultados de cada etapa generen soluciones técnicamente viables y se reduzca el número de posibles caminos a evaluar, además, mantendrá

el carácter holístico necesario para el diseño de la SPQ.

La figura 1 presenta de manera gráfica la metodología propuesta en este trabajo, que llamaremos metodología holística para la SPQ. Las soluciones de cada etapa se basan en heurísticas y en los principios fundamentales de termodinámica, cinética, operaciones unitarias y en la economía del proceso.

METODOLOGÍA HOLÍSTICA PARA SPQ

A continuación, se detallan las 4 etapas propuestas en la metodología holística para el diseño de SPQ (figura 1):

Etapas de Reacción

Esta etapa tiene como objetivo identificar el camino de reacción más adecuado en función de la necesidad de un producto, la calidad y cantidad a producir y, las características de la materia prima. Si el proceso a sintetizar involucra una reacción química, se evalúan los potenciales caminos de reacción. Si un mismo producto tiene diferentes fuentes, se identifican los criterios para seleccionar la materia prima más adecuada, entre los que cabe destacar: disponibilidad, facilidad de procesamiento, estado de agregación, costos, toxicidad e impacto ambiental. Si el producto se puede obtener de diferentes materias primas en paridad de condiciones, la decisión se basa en la ganancia bruta potencial, la cual es la diferencia entre los ingresos por la venta de productos y subproductos menos los egresos por la adquisición de la materia prima.

Cuando se va a diseñar la SPQ se recomienda utilizar heurísticas (tabla 1) que orienten la tarea de definir cuál es el mecanismo de conversión adecuado. Se debe identificar la estructura molecular del compuesto químico deseado y se evalúan posibles reactivos o productos intermedios. En el caso del amoníaco, cuando se produce a gran escala se parte de un hidrocarburo, para obtener el gas de síntesis como materia prima del amoníaco, pero, para producirlo a pequeña escala se cuenta con el nitrógeno y el hidrógeno puro como materia prima. Usando analogías estructurales también se identificaría a la urea - $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ - como potencial materia prima.

Se debe conocer el estado de agregación, composición, presión, temperatura y propiedades físico-químicas de la materia prima, así como los datos cinéticos y termodinámicos de la reacción. Con esta información, se establecen los equipos requeridos para manejar y procesar la materia prima.

La información necesaria para esta etapa, se encuentra

disponible en la bibliografía especializada [Kirk *et al*, 1991; Perry *et al*, 2002; McKetta, 1977], experiencias anteriores o ensayos de laboratorio. Si la información no está disponible en estas fuentes, se pueden estimar propiedades por medio de extrapolación de sustancias similares, analogías y estimaciones empíricas.

En esta etapa de la síntesis se diseña el caso base, el cual se representa con un diagrama de bloque preliminar donde se organiza de forma esquemática la información del proceso, sobre la base de las heurísticas. La figura 2 resume los elementos iniciales que conforman el caso base para la etapa de reacción.

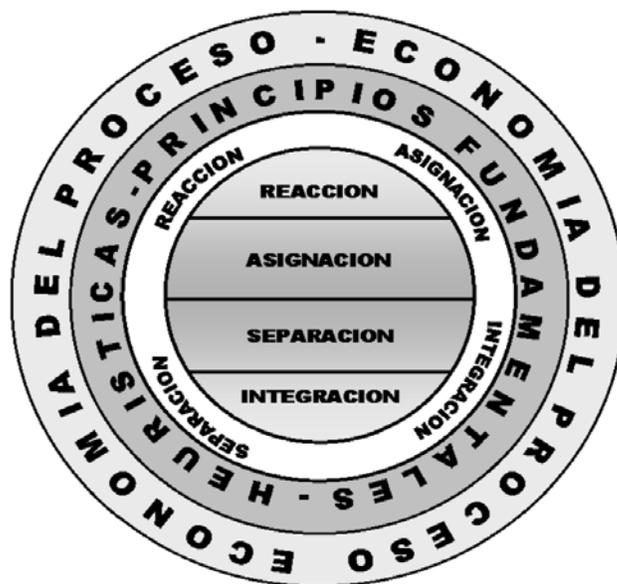


Figura 1. Metodología holística para la SPQ

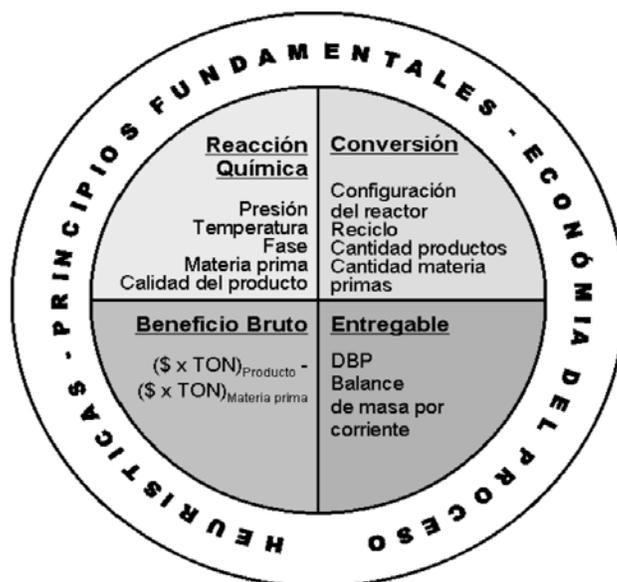


Figura 2. Información requerida en el caso base

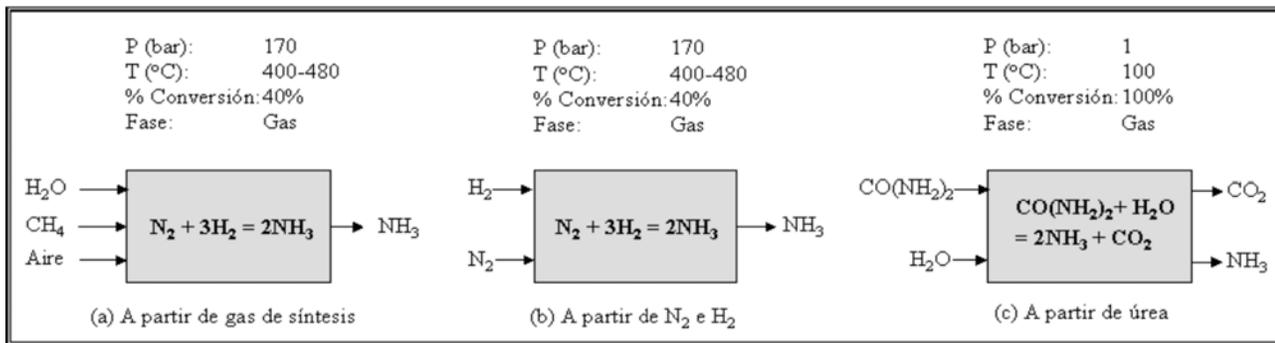


Figura 3. DBP general para la producción de amoníaco

Por otro lado, la figura 3 contiene la información mínima de los tres casos base para la producción de amoníaco - diagramas de bloque general - a partir de las tres materias primas anteriormente mencionadas: a) metano; (b) nitrógeno e hidrógeno puro y (c) úrea. Los diagramas de bloque general, contienen parte de la información requerida para el caso base (indicada en la figura 2).

Las heurísticas advierten la importancia de conocer posibles productos secundarios y, evaluar la termodinámica y la cinética, para escoger entre posibles caminos potenciales. Se puede observar que los casos (a) y (b) exigen condiciones de operación severas, debido al alto calor de disociación del nitrógeno, mientras que el caso (c) a pesar de llevarse a cabo a presiones y temperaturas cercanas a las ambientales, genera un subproducto.

Etapa de Asignación

La asignación de componentes es el flujo de materiales a través del proceso químico, la cual toma en cuenta: materia prima, conversión de reactivos a productos, requerimiento de inertes, disposición de productos y disposición de reactantes no convertidos [Smith, 1995]. Adicionalmente, se propone incorporar las restricciones operacionales de calidad y ambiente para completar la tarea de asignación de componentes.

En esta etapa se re-evalúan las posibles fuentes de materia prima para mejorar la factibilidad técnica del proceso sobre la base de las heurísticas. La materia prima apropiada para producir amoníaco a pequeña escala podría ser el hidrógeno y el nitrógeno puros, sobre la base de la heurística que establece que para esta escala de planta, es conveniente el uso de materias primas puras para eliminar inertes e impurezas y, reducir costos de separación. Sin embargo, la selección final también debería evaluar las medidas de

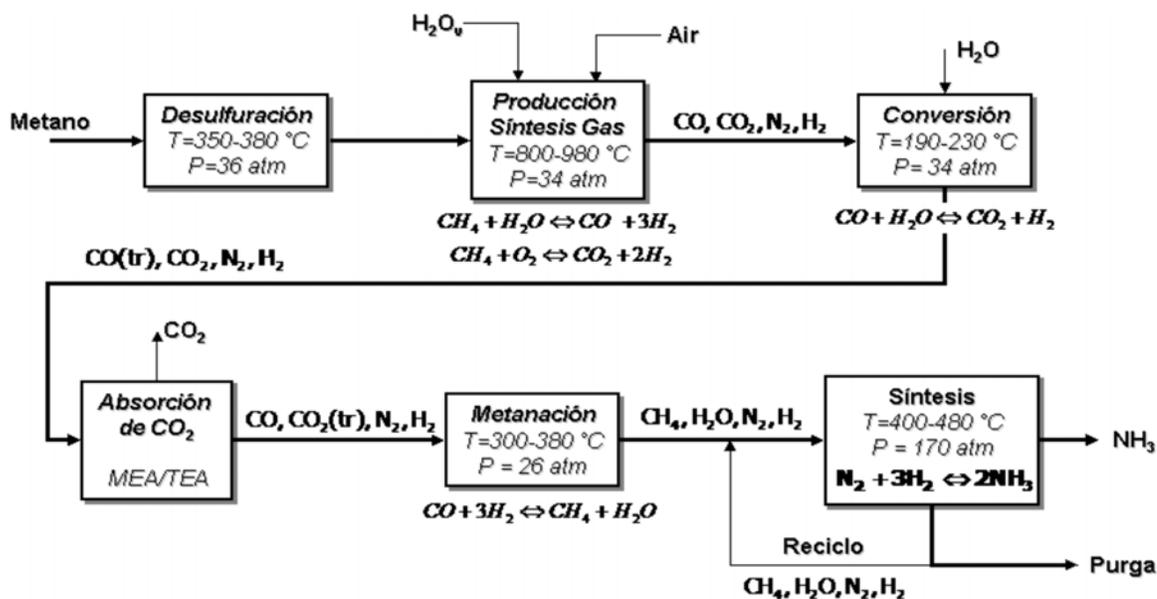
seguridad para el manejo del hidrógeno y el gas de síntesis, en contraste con el manejo de la úrea sólida.

Como los costos de los procesos de separación se reducen de la ganancia bruta potencial, se deben analizar las posibles alternativas de asignación de componentes para seleccionar aquellas que afecten menos este valor. Entre los criterios para evaluar estas alternativas cabe destacar: tolerancia a perturbaciones en el flujo o composición de la alimentación, cumplimiento de restricciones (termodinámicas, cinéticas, ambientales, operacionales) e impacto de las propiedades físico-químicas en la facilidad de separación.

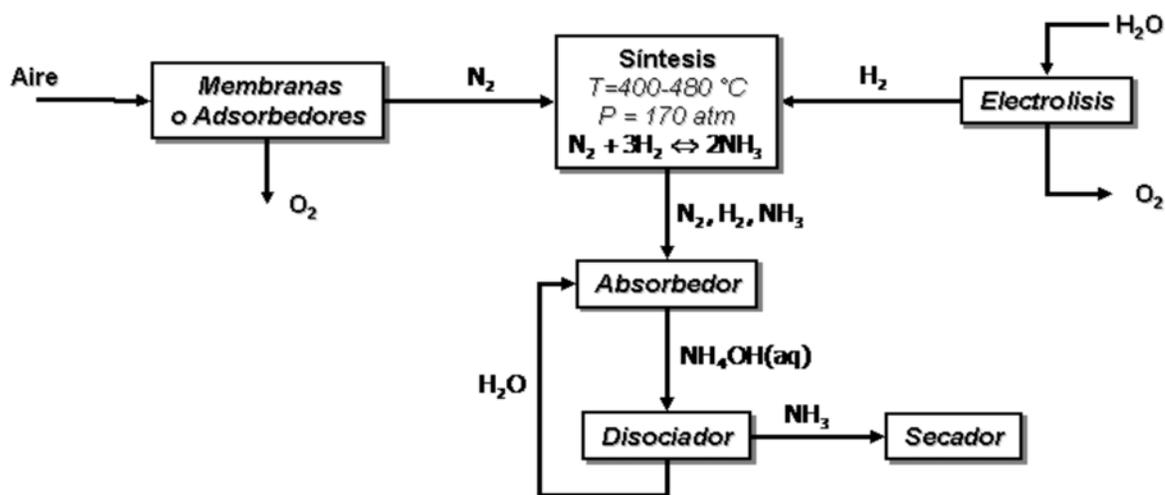
En esta etapa se debe evaluar el desempeño del reactor, como en el caso de una baja conversión que exigiría corrientes de reciclo para recuperar materia prima sin reaccionar. Luego, se detalla el caso base y se recalcula la ganancia bruta potencial.

En la figura 4 se muestran los diagramas de bloque de proceso para la obtención de amoníaco a partir de (a) metano, (b) nitrógeno e hidrogeno puros, (c) úrea.

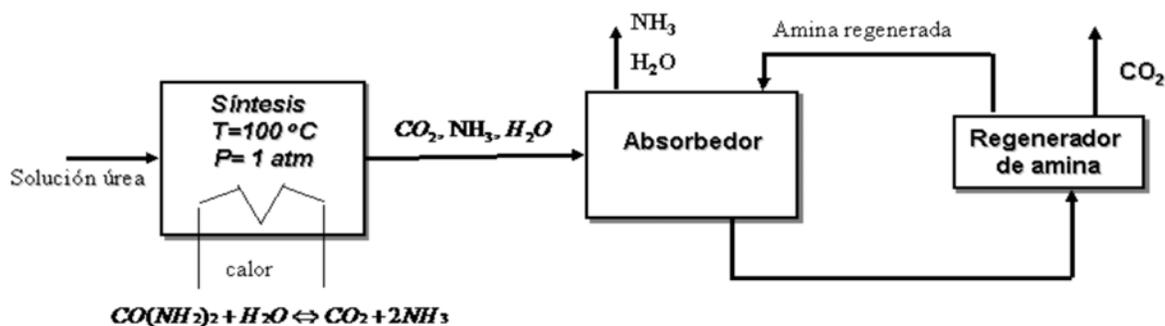
En las figuras 4 (a), (b), y (c) se puede observar que en el caso de la producción de NH_3 a partir del CH_4 , se tiene una mayor tolerancia a cambios en la composición o flujo de las materias primas, ya que se cuenta con etapas de purificación previas a la reacción de amoníaco. Por otra parte, el proceso a partir del N_2 e H_2 puros no requiere purga y, las propiedades de las especies involucradas en la purificación del NH_3 hacen que la separación sea más fácil y menos costosa. El proceso de obtención de amoníaco a partir de úrea es atractivo a muy pequeña escala, si se toma en cuenta la facilidad de manipular úrea sólida y, las ventajas que representan las condiciones de operación requeridas por ese proceso. Pero se debe tomar en cuenta que sería incoherente producir industrialmente úrea a partir de amoníaco, para luego convertir la úrea en amoníaco.



(a) DBP del Proceso industrial de producción de amoníaco (>300 MT/d)



(b) DBP del proceso de producción de amoníaco a pequeña escala a partir de N₂ y H₂ puro (<10 MT/d)



(c) DBP del proceso de producción de amoníaco a pequeña escala a partir de úrea (<10 MT/d)

Figura 4. DBP de posibles proceso de producción de amoníaco

Etapa de Separación

La etapa de separación se encarga de evaluar los posibles mecanismos de separación disponibles y seleccionar el más conveniente para las separaciones señaladas en la etapa de asignación.

Para que ocurra la separación, se requiere que existan diferencias significativas en al menos una propiedad físico-química de los componentes de una mezcla. Cuando esta diferencia no es evidente se deben generar condiciones para propiciar la diferencia entre las propiedades de los componentes [Rudd *et al*, 1973]. Las heurísticas orientan sobre cuál es el mecanismo de separación más adecuado, según las características de los componentes, su composición y, lo que se desea separar. La selección del mecanismo de separación depende de: la propiedad que presenta la mayor diferencia en el ambiente establecido, los costos energéticos requeridos por el mecanismo de separación y el estado del arte de la tecnología. Siempre cabe la posibilidad de no realizar la separación, si los costos de la misma no compensan el beneficio económico que se obtendría por purificar el producto.

Los elementos que intervienen en la selección de una diferencia de propiedad incluyen, a la propiedad física misma, la magnitud de la diferencia de la propiedad, la cantidad de material a manejar y la composición de la mezcla. Adicionalmente, se requiere conocer la pureza requerida, la necesidad de recuperar otros componentes, el comportamiento químico durante la separación, las fases involucradas, lo corrosivo y el conocimiento general disponible.

Para aproximarse a la selección de un esquema de separación, se debe realizar la recolección sistemática, el ordenamiento, la diferenciación y la evaluación de la información relativa a las propiedades físico-químicas de los compuestos involucrados [Rudd *et al*, 1973].

Para ilustrar el uso de las heurísticas de separación, se analiza el proceso de producción de amoníaco a partir de metano (Figura 4a). Las etapas de conversión en este proceso, son catálisis heterogéneas donde los catalizadores se envenenan con compuestos de azufre y las fuentes para el gas de síntesis contienen azufre. Haciendo uso de las heurísticas, la primera etapa de este proceso es la hidrodesulfuración.

Además, el gas de síntesis contiene CO/CO₂ y el convertidor de amoníaco se envenena con pequeñas cantidades de estos compuestos. En la práctica se convierte el CO en CO₂ para remover este último con MEA (mono-etanol-amina), DEA (di-etanol-amina), o TEA (tri-etanol-amina). Aún después

de esta separación los gases contienen una cantidad de CO y CO₂ mayor a la admitida. Después de haber agotado las alternativas para remover el CO y el CO₂ por medio de procesos de separación física, las heurísticas recomiendan convertirlos en otros compuestos fácilmente removibles o inertes. En este proceso industrial, esto se hace con la metanación.

Es posible que en la etapa de separación, se descubra que la asignación de especies propuesta en la etapa anterior es técnicamente imposible porque no se alcanza la pureza deseada. Esto conduce a replantearse la etapa anterior y el caso base.

Después de ejecutar las actividades de retroalimentación exigidas por esta etapa se redefinirá el caso base, se calculará el balance de masa para el diagrama de flujo diseñado y la ganancia bruta potencial tomando en cuenta los costos de separación. Si el valor obtenido en la ganancia bruta potencial es negativo, se regresa a las etapas anteriores: primero a la etapa de asignación, tratando de encontrar un camino de los componentes que resulte en una ganancia bruta potencial positiva, si esto no fuera posible, se debe regresar a la etapa de reacción, y reevaluar las posibles alternativas de conversión. Este proceso de retroalimentación entre las etapas, se realizará hasta garantizar que la ganancia bruta potencial resulte en un valor positivo.

Etapa de Integración

El diseño de la SPQ es parte de un desarrollo industrial sustentable, para lo cual se requerirá usar la menor cantidad de energía externa y cumplir con criterios de seguridad, higiene industrial y normas ambientales. En esta etapa se debe optimizar el caso base para mejorar su estructura y los requerimientos energéticos. El costo de operación del proceso se reduce minimizando los recursos energéticos externos, localizando fuentes de estos recursos dentro del proceso y apareando tareas complementarias para alcanzar las condiciones de operación requeridas [Linnhoff *et al*, 1978; Umeda *et al*, 1978].

Para garantizar el desarrollo de un diseño sustentable, las heurísticas recomiendan que las corrientes de fluido a altas temperaturas se usen para generar vapor, para realizar trabajo directamente o para tareas de calentamiento, mientras que las corrientes a alta presión se usen para realizar trabajo directamente.

La estructura de la SPQ debe incluir la etapa de control al medio ambiente, para definir lineamientos que estén en concordancia con las regulaciones ambientales. Los lineamientos de control de medio ambiente involucran tareas

de conversión, asignación de componentes y de separación adicionales que no se habían contabilizado anteriormente. Los procesos de tratamiento de corrientes de desechos son costosos y estos costos se reducen de la ganancia bruta potencial, la cual debe ser recalculado al final de la etapa de integración.

VALIDANDO LA METODOLOGÍA HOLÍSTICA

La metodología holística fue validada a través de los cursos de Ingeniería de Procesos, dictados a estudiantes del 4º año de la carrera de Ingeniería Química, de la Universidad Simón Bolívar, durante los años 2003, 2004 y 2005. Como parte de la evaluación de los cursos, los estudiantes desarrollaron la SPQ, utilizando la metodología holística. La alta calidad de los diseños elaborados validó la metodología holística.

Además, cada año académico se seleccionó el mejor trabajo para enviarlo a la Conferencia de la Asociación Venezolana para el Avance de la Ciencia - AsoVAC - donde estos trabajos después de ser arbitrados por expertos externos y, compitiendo en la mayoría de las veces con tesis de pregrado, fueron aceptados en las tres ediciones [Guerra *et al.*, (2003); López *et al.*, (2004); Itriago *et al.*; (2005)].

COMENTARIOS SOBRE LA PROPUESTA

La síntesis de procesos químicos requiere descomponer el complejo diseño en problemas más sencillos, cuyas soluciones se deben ensamblar para dar respuesta al problema original de síntesis de procesos químicos.

La metodología holística descompone el problema original en 4 etapas: reacción, asignación, separación e integración. Además, considera el aspecto holístico de la síntesis de procesos químicos, haciendo énfasis en el impacto de cada actividad en cada etapa y al basarse en heurísticas, garantiza la inclusión de lo mejor de la experiencia de los más experimentados.

El alto nivel de los diseños de síntesis de procesos químicos realizados durante los cursos de Ingeniería de Procesos en la Universidad Simón Bolívar utilizando la metodología holística, demostró lo adecuado de esta metodología para el diseño de la síntesis de procesos químicos novedosos.

REFERENCIAS

GIRAL, J., BARNES, F., RAMÍREZ, A. (1979). Ingeniería de Procesos. Editorial Alambra, México.

GUERRA, P. DE LA VIUDA, L. LUQUE, A. RINCÓN G. (2003). Factibilidad técnica para la obtención de suplemento

alimenticio a partir del hígado de res. AsoVAC, Noviembre Maracaibo. Venezuela. pp. 376.

ITRIBAGO, D. RANGEL, M. ÁLVAREZ, N. PÉREZ. N. RINCÓN G. (2005). Proceso de obtención de hidrógeno para combustión limpia en vehículos a partir de etanol. AsoVAC. Noviembre. Caracas, Venezuela. CD.

KIRK, R. E., OTHMER D. F. (1991). Encyclopedia of Chemical Technology, 4th ed., Wiley, New York.

LINNHOF, B., FLOWER, J.R. (1978). Synthesis of Heat / exchanger networks: 1. Systematic generation of energy optimal network, AIChE J., 24, 633.

LÓPEZ A. DE AMORÍN D. RINCÓN, G. REQUENA A. (2004). «Sustitución Parcial del Sebo por Aceite de Semillas de Mango en la Obtención de Jabón». LIV AsoVAC, Noviembre. pp. 55.

McKETTA, J. J. (1977). Encyclopedia of Chemical Processes and Design, Marcel Dekker, New York.

PERRY, R., GREEN, D., MALONEY, J. (2002). Chemical Engineers Handbook. McGraw-Hill.

RUDD, D. POWERS, G. SIROLA, J. (1973). Process Synthesis. Prentice Hall Inc.. New Jersey.

SMITH, ROBIN. (1995). Chemical Process Design. MacGraw Hill, New Jersey.

TURTON R. BAILIE R. WHITING W. SHAEIWITZ A. (1998). Analysis, Synthesis and Design of Chemical Processes. Prentice Hall International Series in the Physical and Chemical Engineering Science. New Jersey.

UMEDA, T. ITON, J. SIROCO, K. (1978). Heat Exchanger System Synthesis, Chem. Eng. Prog., 74 (7), 70.