



UNIVERSITAT  
ROVIRA I VIRGILI

ESCOLA TÈCNICA SUPERIOR D'ENGINYERIA QUÍMICA  
DEPARTAMENT D'ENGINYERIA QUÍMICA

TESIS DOCTORAL

---

METODOLOGÍA PARA EL *RETROFIT* DE  
PROCESOS QUÍMICOS BASADA EN UNA  
REPRESENTACIÓN JERÁRQUICA

---

presentada por

**ANTONIO RODRÍGUEZ MARTÍNEZ**

para optar al grado de Doctor en Ingeniería Química y de Procesos  
por la Universitat Rovira i Virgili

Tesis dirigida por el Dr. René Bañares-Alcántara

Tarragona, Abril de 2005

UNIVERSITAT ROVIRA I VIRGILI  
METODOLOGÍA PARA EL RETROFIT DE PROCESOS QUÍMICOS BASADA EN UNA REPRESENTACIÓN JERÁRQUICA  
Antonio Rodríguez Martínez  
ISBN:978-84-693-4062-2/DL:T-1161-2010

# METODOLOGÍA PARA EL *RETROFIT* DE PROCESOS QUÍMICOS BASADA EN UNA REPRESENTACIÓN JERÁRQUICA

---

---

## Comité de Tesis

**Dr. Alberto Coronas Salcedo**  
Departament D'Enginyeria Mecànica  
Universitat Rovira i Virgili

**Dr. Antonio España Camarasa**  
Departament d'Enginyeria Química  
Universitat Politècnica de Catalunya

**Dr. José Antonio Caballero Suárez**  
Departamento de Ingeniería Química  
Universidad de Alicante

**Dr. Josep Vehi Casellas**  
Departament d'Electrònica, Informàtica i Automàtica  
Universitat de Girona

**Dr. Ignasi Rodriguez-Roda**  
Departament d'Enginyeria Química  
Universitat de Girona

**Dr. Idefonso Cuesta**  
Departament D'Enginyeria Mecànica  
Universitat Rovira i Virgili

**Dr. Allan Mackie**  
Departament d'Enginyeria Química  
Universitat Rovira i Virgili

UNIVERSITAT ROVIRA I VIRGILI  
METODOLOGÍA PARA EL RETROFIT DE PROCESOS QUÍMICOS BASADA EN UNA REPRESENTACIÓN JERÁRQUICA  
Antonio Rodríguez Martínez  
ISBN:978-84-693-4062-2/DL:T-1161-2010



Tarragona, 4 de Abril de 2005

Los firmantes,

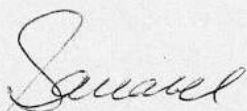
HACEN CONSTAR

Que el trabajo con el título:

**METODOLOGÍA PARA EL RETROFIT DE PROCESOS QUÍMICOS BASADA EN  
UNA REPRESENTACIÓN JERÁRQUICA**

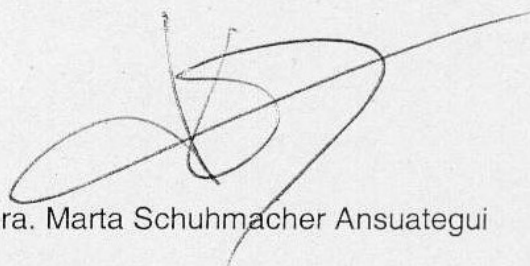
Presentado por el doctorando Antonio Rodríguez Martínez ha sido realizado en el Departamento de Ingeniería Química de la Universidad Rovira i Virgili y cumple con los criterios de calidad necesarios para que pueda optar al grado de Doctor por la Universidad Rovira i Virgili, además de que todos los resultados presentados y el análisis de los mismos son fruto de la investigación realizada por el mencionado doctorando, por tal motivo,

PEDIMOS al Consejo del Departamento que otorgue su conformidad para la presentación de la Tesis a la Comisión de Doctorado.



Dr. René Bañares-Alcántara

Director de Tesis  
Department of Engineering Science  
University of Oxford  
Parks Road  
Oxford OX1 3PJ, UK



Dra. Marta Schuhmacher Ansuategui

Tutora  
Departamento de Ingeniería Química  
Universitat Rovira i Virgili

UNIVERSITAT ROVIRA I VIRGILI  
METODOLOGÍA PARA EL RETROFIT DE PROCESOS QUÍMICOS BASADA EN UNA REPRESENTACIÓN JERÁRQUICA  
Antonio Rodríguez Martínez  
ISBN:978-84-693-4062-2/DL:T-1161-2010

## DEDICATORIA

A todos los seres vivos y muertos que sienten o han sentido algún tipo de cariño por mi.

A mis padres Wulfrano y Enriqueta por haberme dado el Don de la VIDA.

A mis hermanos Alma Delia y Andrés por compartir la misma sangre. A mis sobrinos Diana, Andrés y Eduardo por compartir casi la misma sangre. A mis cuñados Matilde y Gerardo por ser parte de mi familia.

A Gabriela por caminar a mi lado.

A mis dos hijos Alejandro y Fernando por darme fuerzas para continuar día a día.

A toda mi hermosa y gran familia.

A todos ustedes con cariño,

Antonio

UNIVERSITAT ROVIRA I VIRGILI  
METODOLOGÍA PARA EL RETROFIT DE PROCESOS QUÍMICOS BASADA EN UNA REPRESENTACIÓN JERÁRQUICA  
Antonio Rodríguez Martínez  
ISBN:978-84-693-4062-2/DL:T-1161-2010

---

# CONTENIDO

---

<b>AGRADECIMIENTOS</b> .....	<b>V</b>
<b>RESUMEN</b> .....	<b>VII</b>
<b>LISTA DE FIGURAS</b> .....	<b>IX</b>
<b>LISTA DE TABLAS</b> .....	<b>XII</b>
<b>CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN</b> .....	<b>1</b>
1.1. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA. ....	2
1.2. OBJETIVOS .....	3
1.2.1 GENERAL .....	3
1.2.2 PARTICULARES .....	3
1.3. ESTADO DEL ARTE .....	4
1.4. HIPÓTESIS .....	11
<b>CAPÍTULO 2. FUNDAMENTOS</b> .....	<b>15</b>
2.1. METODOLOGÍA DE DOUGLAS .....	16
2.2. SISTEMAS BASADOS EN CONOCIMIENTO .....	18
2.2.1. MODELOS MÚLTIPLES.....	23
2.2.2. RAZONAMIENTO BASADO EN CASOS.....	24

---

2.3. METODOLOGÍAS DE RETROFIT DE PROCESOS .....	26
2.4. RESUMEN .....	30
<b>CAPÍTULO 3. METODOLOGÍA PARA EL RETROFIT DE PROCESOS QUÍMICOS .....</b>	<b>31</b>
3.1. EXTRACCIÓN DE INFORMACIÓN.....	33
3.2. ANÁLISIS Y REPRESENTACIÓN .....	34
3.2.1. GENERACIÓN DE NIVELES DE ABSTRACCIÓN .....	36
3.3. GENERACIÓN DE ALTERNATIVAS.....	39
3.4. EVALUACIÓN DE ALTERNATIVAS.....	40
3.5. RESUMEN .....	41
<b>CAPÍTULO 4. IMPLEMENTACIÓN DE LA METODOLOGÍA DE RETROFIT .....</b>	<b>43</b>
4.1. ONTOLOGÍA PARA EL RETROFIT DE PROCESOS .....	44
4.2. HEAD .....	47
4.2.1. ETSEQ-CODE CREATOR.....	48
4.2.2. EXTRACCIÓN Y ANÁLISIS DE INFORMACIÓN.....	51
4.3. AHA!.....	54
4.3.1. REPRESENTACIÓN DEL CONOCIMIENTO .....	54
4.3.1.1. MODELO FUNCIONAL.....	54
4.3.1.2. MODELO TELEOLÓGICO .....	56
4.3.2. GENERACIÓN DE NIVELES DE ABSTRACCIÓN.....	61
4.4. RETRO .....	65
4.4.1. BÚSQUEDA E IDENTIFICACIÓN DE SECCIONES SUSCEPTIBLES DE RETROFIT .....	65
4.4.2. RAZONAMIENTO BASADO EN CASOS .....	66
4.4.2.1. INDEXADO DE CASOS .....	67
4.4.2.2. RECUPERACIÓN DE CASOS.....	69
4.4.3. EVALUACIÓN DE ALTERNATIVAS DE SOLUCIÓN .....	72
4.5. RESUMEN .....	74

---

<b>CAPÍTULO 5. RESULTADOS Y DISCUSION.....</b>	<b>75</b>
5.1. CASOS DE ESTUDIO .....	76
5.1.1 DESCRIPCIÓN DEL PROCESO DE AMONIACO .....	76
5.1.2 DESCRIPCIÓN DEL PROCESO DE ACETONA.....	80
5.2. HEAD.....	81
5.3. AHA! .....	84
5.3.1. GENERACIÓN DE NIVELES DE ABSTRACCIÓN.....	85
5.3.2. INFORMACIÓN DE UNITS O META-UNITS.....	96
5.3.3. NAVEGACIÓN ENTRE NIVELES DE ABSTRACCIÓN .....	99
5.3.4. IDENTIFICACIÓN DE SECCIONES DE PROCESO .....	101
5.4. RETRO .....	102
5.4.1. CRITERIOS DE RETROFIT .....	102
5.4.2. RECUPERACIÓN DE ALTERNATIVAS DE SOLUCIÓN.....	104
5.4.3. ADAPTACIÓN DE ALTERNATIVAS DE SOLUCIÓN .....	108
5.5. DISCUSIÓN DE RESULTADOS.....	114
5.6. RESUMEN .....	117
<b>CAPÍTULO 6. CONCLUSIONES, CONTRIBUCIONES Y TRABAJO FUTURO</b>	<b>119</b>
6.1. CONCLUSIONES .....	120
6.2. CONTRIBUCIONES .....	123
6.3. TRABAJOS FUTUROS.....	124
<b>REFERENCIAS.....</b>	<b>125</b>
<b>PUBLICACIONES.....</b>	<b>133</b>
<b>CURRICULUM VITAE .....</b>	<b>137</b>
<b>RESUMEN EN INGLÉS .....</b>	<b>139</b>



**ANEXOS ..... 141**

ANEXO 1. ESTRUCTURAS DE DATOS PARA EQUIPOS Y DISPOSITIVOS DE PROCESO. .A1-1

ANEXO 2. CÓDIGO FUENTE DE HEAD. ....A2-1

ANEXO 3. SISTEMA DE REGLAS DE PRODUCCIÓN PARA EL MODELO TELEOLÓGICO. .A3-1

ANEXO 4. REGLAS DE AGRUPAMIENTO DE EQUIPOS DE PROCESO. . . . .A4-1



---

# AGRADECIMIENTOS

---

Quiero agradecer,

Al Dr. René Bañares-Alcántara por su apoyo y guía durante el desarrollo del presente trabajo de investigación, así como a la Dra. Marta Schuhmacher por sus consejos y ayuda en los últimos años de investigación.

A los doctores Alberto Coronas Salcedo, Antonio Espuña Camarasa, José Antonio Caballero Suárez, Josep Vehí Casellas, Ignasi Rodríguez-Roda, Ildefonso Cuesta y Allan Mackie por haber aceptado ser miembros del comité de evaluación de tesis.

Al Ing. Iván López Arévalo y la Dra. Arantza Aldea por su invaluable colaboración.

A todos los integrantes del grupo de Análisis y Gestión Ambiental (AGA) por su amistad y apoyo durante mi estancia en el Departamento de Ingeniería Química; en especial a los doctores Francesc Castells y Laureano Jiménez.

Al Departamento de Ingeniería Química de la Universitat Rovira i Virgili y a la misma universidad por su apoyo administrativo, recursos materiales y económicos para asistir a cursos y congresos dentro y fuera de España. En especial al Sr. Samuel García, a la Sra. Nuria Juanpere y la Sra. Dolors Marlol. Además mi agradecimiento al personal del Servei de Recursos Informàtics por su ayuda en momentos difíciles con el ordenador. En especial al Sr. Antoni Giribet y Alexis Villanueva.

A todos los integrantes del grupo Modal Intervals and Control Engineering (MICE) por su amistad y apoyo durante mi estancia en el Departamento de Electrónica, Informática y Automática de la Universitat de Girona; en especial a los doctores Josep Vehí, Miguel A. Sainz, Joaquim Armengol, Ningsu Luo y Remei Calm. En especial a Raül por su apoyo informático. A los compañeros de café en Girona: Magda, Lucho, Javier, Salvador, Gabriel, Ronald, Silvana, Sonia y Araceli.

A mis amigos, compañeros de despacho y “mini-comedor” del DEQ por hacer mi estancia tan agradable (sobre todo a la hora del café); En especial a Israel, Haydeé, Isabela, Pàmies, Montse, Paula y Justyna.

A mis amigos extramuros de la universidad en Tarragona por brindarme la oportunidad de conocer otras formas de pensar y hacer mas llevadera la vida; en especial a Israel, Edith, Camy, Guillermo, Lulu, Betito, Juan y Mary, Pili, Lourdes y Antonio, Joana y Balta (Esther), Josep y Nuria (Olga), Mary y Rafa (además por su rico pan), Juanito y Marta, Ivan y Yoria.

A la Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería y al Programa de Mejoramiento del Profesorado (PROMEP) de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos (México) por el apoyo económico para la realización de mi doctorado.

A la Fundación Caixa de Sabadell por el premio económico recibido pero sobre todo por el estímulo moral que éste me proporcionó.

---

# RESUMEN

---

Los procesos industriales en operación deben ser evaluados periódicamente para satisfacer las demandas económicas (coste de producción, eficiencia, etc.) y medioambientales (disminución de emisiones atmosféricas, residuos, etc.) a las que se ven sometidos. Una de las formas de hacer esta tarea es mediante el retrofit.

El objetivo de este trabajo fue desarrollar una metodología para el retrofit de procesos químicos basada en representaciones jerárquicas para hacer mas eficiente y menos costosa la evaluación de nuevas condiciones de operación.

La metodología se fundamenta en:

- La aplicación de manera inversa del procedimiento de diseño jerárquico de Douglas [Douglas, 1988].
- La representación de procesos mediante diagramas de bloques genéricos de Turton [Turton et al., 1998].
- La estructura básica de los sistemas basados en conocimientos (base de conocimiento, motor de inferencia e interfaz de usuario) [Han et al., 1996]

La metodología que se planteo para el retrofit de proceso integra conocimientos relacionados con el retrofit, diseño, síntesis y análisis de procesos, de forma que se logró diseñar e implementar herramientas informáticas de apoyo al retrofit de procesos. Además de los conocimientos de ingeniería química antes mencionados, se incorporaron conocimientos del área de ingeniería informática para desarrollar un sistema basado en conocimientos utilizando algoritmos computacionales de comunicación, visualización y técnicas de inteligencia artificial.

La metodología consiste de cuatro etapas generales:

1. Extracción de la información.

2. Análisis y representación de la información.
3. Generación de alternativas de solución.
4. Adaptación y evaluación de alternativas de solución.

La metodología se implementó en un Sistema Basado en Conocimientos (SBC). El SBC está formado por tres prototipos informáticos y una ontología que sirve de base para un lenguaje común entre los prototipos. Los prototipos son:

- HEAD (Hysys Extraction Data), el cual permite la extracción de información de procesos simulados con ayuda del simulador comercial Hysys.Plant™.
- AHA! (Automatic Hierarchical Abstraction tool) el cual realiza el análisis y la representación de la información proporcionada por HEAD mediante el enfoque de modelos múltiples. Uno de los objetivos de AHA! es la generación de niveles de abstracción que permitan al usuario comprender e identificar las secciones de un proceso químico.
- RETRO (Reverse Engineering Tool for Retrofit Options), el cual realiza una búsqueda de secciones susceptibles de mejora con base en información proporcionada por el usuario y unos criterios funcionales, para posteriormente generar y evaluar alternativas de solución mediante un sistema de razonamiento basado en casos.

El SBC ha sido validado con 50 procesos químicos. Ha sido aplicado detalladamente a los procesos de producción de amoníaco y acetona con resultados satisfactorios en cuanto a la reducción del tiempo y complejidad de las tareas de análisis, representación y generación de alternativas de solución durante el retrofit.

Los avances y resultados de la investigación se han publicado en 9 artículos (3 en revistas internacionales, 1 en un libro y 5 en libros de congresos con revisores) y se han presentado en 10 congresos internacionales (7 ponencias y 3 pósters) y 3 nacionales (3 pósters).

# LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1. JERARQUÍA DE DECISIONES DE DOUGLAS .....	16
FIGURA 2. NIVELES DE ABSTRACCIÓN PARA APLICAR RETROFIT A UN PROCESO QUÍMICO.....	18
FIGURA 3. METODOLOGÍA DE RETROFIT DE PROCESOS.....	32
FIGURA 4. GENERACIÓN DE NIVELES DE ABSTRACCIÓN.....	37
FIGURA 5. JERARQUÍA DE META-MODELOS .....	38
FIGURA 6. EXTENSIÓN E INSTANCIACIÓN DE CONCEPTOS EN SUMO .....	45
FIGURA 7. ESTRUCTURA JERÁRQUICA EN UNA ONTOLOGÍA.....	46
FIGURA 8. OBJETOS CONTENIDOS DENTRO DE “OPERATIONS” .....	49
FIGURA 9. GENERACIÓN DE CÓDIGO PARA DECLARACIÓN DE VARIABLES .....	50
FIGURA 10. MODIFICACIÓN/ADICIÓN DE OBJETOS EN LA BASE DE DATOS .....	50
FIGURA 11. INTERFAZ DE USUARIO DE HEAD.....	52
FIGURA 12. JERARQUÍA DE FUNCIONES: ICONOS DE EQUIPOS Y DISPOSITIVOS DE PROCESO .....	56
FIGURA 13. ALTERNATIVAS PARA GENERAR EL MODELO TELEOLÓGICO DE UNIT/META-UNITS.....	58
FIGURA 14. DIAGRAMA GENERAL DEL SISTEMA DE REGLAS DE PRODUCCIÓN PARA GENERAR EL MODELO TELEOLÓGICO DE UNA <i>UNIT</i> O <i>META-UNIT</i> .....	60
FIGURA 15. GENERACIÓN DE BLOQUESFUNCIONALES A PARTIR DE UNA JERARQUÍA DE FUNCIONES .....	61
FIGURA 16. JERARQUÍA DE PRECEDENCIA .....	62
FIGURA 17. GENERACIÓN DE <i>META-UNITS</i> .....	63
FIGURA 18. AGRUPACIÓN CON DIFERENTES JERARQUÍAS DE PRECEDENCIA.....	64
FIGURA 19. RELACIONES PADRE-HIJO EN UN PROCEDIMIENTO DE ABSTRACCIÓN .....	68

FIGURA 20. REPRESENTACIÓN DE ÁRBOLES JERÁRQUICOS PARA <i>META-UNITS</i> DE REACCIÓN .....	72
FIGURA 21. IDENTIFICACIÓN DE <i>META-UNITS</i> “CAUSA” Y “CONSECUENCIA” .....	73
FIGURA 22. PROCESO DE PRODUCCIÓN DE AMONIACO SIMULADO EN HYSYS.PLANT™.....	79
FIGURA 23. PROCESO DE PRODUCCIÓN DE ACETONA SIMULADO EN HYSYS.PLANT™ .	81
FIGURA 24. EXTRACCIÓN DE INFORMACIÓN DEL PROCESO DE AMONIACO .....	82
FIGURA 25. EXTRACCIÓN DE INFORMACIÓN DEL PROCESO DE ACETONA.....	83
FIGURA 26. REPRESENTACIÓN INICIAL DEL PROCESO DE AMONIACO EN AHA! .....	84
FIGURA 27. ASIGNACIÓN DE “ROLES” EN EL PROCESO DE AMONIACO .....	86
FIGURA 28. ASIGNACIÓN DE “ROLES” DE LAS CORRIENTES EN EL PROCESO DE AMONIACO .....	86
FIGURA 29. NIVEL 1 DE ABSTRACCIÓN DEL PROCESO DE AMONIACO .....	87
FIGURA 30. NIVEL 2 DE ABSTRACCIÓN DEL PROCESO DE AMONIACO .....	89
FIGURA 31. NIVEL 3 DE ABSTRACCIÓN DEL PROCESO DE AMONIACO .....	90
FIGURA 32. NIVEL 4 DE ABSTRACCIÓN DEL PROCESO DE AMONIACO .....	91
FIGURA 33. NIVEL 5 DE ABSTRACCIÓN DEL PROCESO DE AMONIACO .....	92
FIGURA 34. NIVEL 6 DE ABSTRACCIÓN DEL PROCESO DE AMONIACO .....	92
FIGURA 35. NIVEL 0 DE ABSTRACCIÓN DEL PROCESO DE ACETONA .....	93
FIGURA 36. NIVEL 1 DE ABSTRACCIÓN DEL PROCESO DE ACETONA .....	93
FIGURA 37. NIVEL 2 DE ABSTRACCIÓN DEL PROCESO DE ACETONA .....	94
FIGURA 38. NIVEL 3 DE ABSTRACCIÓN DEL PROCESO DE ACETONA .....	94
FIGURA 39. NIVEL 4 DE ABSTRACCIÓN DEL PROCESO DE ACETONA .....	95
FIGURA 40. NIVEL 5 DE ABSTRACCIÓN DEL PROCESO DE ACETONA .....	95
FIGURA 41. INFORMACIÓN DEL MODELO ESTRUCTURAL DE UNA <i>UNIT/META-UNIT</i> .....	97
FIGURA 42. INFORMACIÓN DETALLADA DE UNA <i>META-UNIT</i> .....	98
FIGURA 43. MODELO TELEOLÓGICO DE UNA <i>META-UNIT</i> .....	99
FIGURA 44. NAVEGACIÓN ENTRE NIVELES DE ABSTRACCIÓN .....	100
FIGURA 45. IDENTIFICACIÓN DE SECCIONES DE PROCESO .....	101
FIGURA 46. SELECCIÓN DE CRITERIOS DE BÚSQUEDA.....	103
FIGURA 47. SELECCIÓN DE UNA SUSTANCIA CON EL CRITERIO DE CONCENTRACIÓN EN EL PROCESO DE AMONIACO.....	103

---

FIGURA 48. LISTA DE <i>UNITS/META-UNITS</i> QUE SATISFACEN EL CRITERIO DE CONCENTRACIÓN .....	104
FIGURA 49. INFORMACIÓN DE LA <i>META-UNIT</i> MU6-2-REACTION DEL PROCESO DE AMONIACO .....	105
FIGURA 50. ESPECIFICACIÓN DEL CASO PROBLEMA EN EL SISTEMA CBR.....	106
FIGURA 51. <i>UNITS/META-UNITS</i> RECUPERADAS DE LA LIBRERÍA DE CASOS .....	107
FIGURA 52. EFECTO DE LA TEMPERATURA Y PRESIÓN SOBRE LA PRODUCCIÓN DE AMONIACO EN LA SÍNTESIS DE HABER-BOSCH .....	108
FIGURA 53. EFECTO DE LA TEMPERATURA SOBRE LA CONVERSIÓN EN EL REACTOR PFR-101 .....	109
FIGURA 54. SIMULACIÓN DEL NIVEL 5 DE ABSTRACCIÓN DEL PROCESO DE AMONIACO .....	110

---

# LISTA DE TABLAS

---

TABLA 1. ESPECIFICACIÓN DE CAMPOS DE INFORMACIÓN PARA EL MODELO ESTRUCTURAL DE EQUIPOS Y DISPOSITIVOS DE PROCESO PROBLEMA.....	53
TABLA 2. JERARQUÍA DE FUNCIONES DE EQUIPOS Y DISPOSITIVOS DE PROCESO .....	55
TABLA 3. PARÁMETROS PARA GENERAR EL MODELO TELEOLÓGICO DE EQUIPOS Y DISPOSITIVOS DE PROCESO .....	57
TABLA 4. COMBINACIONES POSIBLES PARA UNA <i>UNIT</i> (U) CON UNA ENTRADA Y DE 2 A 6 SALIDAS .....	59
TABLA 5. RANGOS DE OPERACIÓN PARA TEMPERATURA Y PRESIÓN .....	70
TABLA 6. PROCESOS QUÍMICOS UTILIZADOS COMO CASOS DE ESTUDIO .....	77
TABLA 7. <i>META-UNITS</i> GENERADAS EN EL NIVEL 1 DE ABSTRACCIÓN DEL PROCESO DE AMONIACO .....	88
TABLA 8. <i>META-UNITS</i> GENERADAS EN EL NIVEL 2 DE ABSTRACCIÓN DEL PROCESO DE AMONIACO .....	89
TABLA 9. <i>META-UNITS</i> GENERADAS EN EL NIVEL 3 DE ABSTRACCIÓN DEL PROCESO DE AMONIACO .....	90
TABLA 10. <i>META-UNITS</i> GENERADAS EN LOS 5 NIVELES DE ABSTRACCIÓN DEL PROCESO DE ACETONA.....	96
TABLA 11. <i>META-UNITS</i> SUGERIDAS POR EL SISTEMA DE DIAGNÓSTICO .....	105
TABLA 12. INFORMACIÓN GENERAL DE LAS TRES ALTERNATIVAS MAS SIMILARES A LA <i>META-UNIT</i> MU6-2-REACTION DEL PROCESO DE AMONIACO.....	107
TABLA 13. FACTORES PARA ESTIMAR EL COSTO DE OPERACIÓN DE EQUIPOS DE PROCESO.....	111



---

# Capítulo 1.

# **INTRODUCCIÓN**

---

El presente capítulo está dividido en cuatro secciones. En la primera se presenta el planteamiento del problema, el cual justifica el desarrollo de la presente investigación. En la segunda se hace la descripción de los objetivos (general y particulares) que se desean alcanzar con base en el planteamiento del problema de la sección anterior. En la tercera se presenta el estado del arte sobre las metodologías de retrofit de procesos y en la última sección se presenta la hipótesis que sustenta el presente trabajo.

## 1.1. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

---

Todos los procesos industriales en operación deben ser evaluados periódicamente para satisfacer las demandas económicas (coste de producción, eficiencia, rentabilidad, etc.) y medioambientales (disminución de emisiones atmosféricas, residuos o efluentes, etc.) a las que se ven sometidos. Un ejemplo sobre las presiones medioambientales es el de la refinería de “La Pobla de Mafumet” en Tarragona, en la cual el grupo Repsol YPF ha invertido en los últimos años cerca de 95 millones de euros y prevé una inversión de 24 millones de euros adicionales a los 18 millones que anualmente dedica en éste rubro [Pérez, 2004]. Es claro que la evaluación y control de la operación es un factor determinante en la vida y rentabilidad de un proceso industrial.

Como resultado de la evaluación de un proceso podemos obtener que el proceso en cuestión cumple con los requerimientos técnicos/económicos ó que necesita modificaciones para continuar operando adecuadamente. Una de las formas de implementar posibles modificaciones en un proceso es mediante la aplicación del *retrofit*.

El *retrofit* es una metodología de análisis y evaluación de posibles cambios en un proceso existente para mejorar en una o más métricas determinadas (económica, medioambiental, seguridad, controlabilidad, etc.). Dentro del retrofit existen varios enfoques, según la problemática del proceso que se plantee y el esfuerzo que se quiera invertir [Nelson y Douglas, 1990]. Cuatro son los enfoques principales:

1. Estudios para mejorar en una unidad particular del proceso.
2. Integración de una nueva tecnología.
3. Estudios para eliminar los “cuellos de botella”.
4. Estudios sistemáticos que analizan el proceso completo y sus interacciones para reducir costos y/o incrementar rendimientos.

Es claro que a medida que se analicen y evalúen un mayor número de alternativas del proceso original de forma global, los costos de investigación y

desarrollo aumentarán. Por ello es deseable contar con herramientas computacionales que permitan realizar las etapas del retrofit de forma semi-automática para disminuir éstos costos. Las etapas en las que se divide el retrofit de procesos son:

- a) Obtención y análisis de información.
- b) Identificación de la o las secciones del proceso susceptibles de cambios/mejoras.
- c) Generación de alternativas de solución.
- d) Evaluación y selección de las alternativas generadas.

Como parte de estos esfuerzos y de la investigación que se realizó en el Departamento de Ingeniería Química de la Universitat Rovira i Virgili, se justifica el desarrollo de la presente investigación con base en los objetivos presentados en la sección 1.2. y la hipótesis descrita en la sección 1.4.

## 1.2. OBJETIVOS

---

### 1.2.1. GENERAL

---

Desarrollar una metodología para el *retrofit* de procesos químicos basada en una representación jerárquica.

### 1.2.2. PARTICULARES

---

Con base en la metodología propuesta implementar una herramienta computacional. La herramienta deberá contar con la capacidad de:

- Extraer la información necesaria de un diagrama de flujo de proceso (DFP) de un proceso existente para su posterior análisis y representación. El fichero que contenga al DFP podrá estar generado con ayuda de algún programa de simulación comercial (Hysys, Aspen Plus, etc.). Con la información obtenida se podrán clasificar y representar visualmente las unidades de proceso presentes en el DFP, dependiendo de la topología del proceso y de la funcionalidad de cada una de ellas.
- Identificar la o las secciones de proceso susceptibles de mejoras con base en el análisis del proceso y criterios aplicados por el usuario durante el retrofit. En esta tarea la herramienta deberá generar varias representaciones del proceso a diferentes niveles de abstracción con base en la información del DFP, la proporcionada por el usuario, las reglas de agrupamiento y la jerarquía de precedencia.
- Generar una serie de alternativas de solución a partir de un determinado nivel de abstracción aplicando la técnica de razonamiento basado en casos (Case-Based Reasoning, CBR) y los criterios del usuario. Como resultado de la aplicación del retrofit, el usuario en colaboración con la herramienta podrán encontrar una solución que reúna las especificaciones planteadas.

### **1.3. ESTADO DEL ARTE**

---

Muchas industrias químicas tienen la necesidad de adecuar sus procesos a las nuevas demandas económicas y medioambientales. En este sentido, las investigaciones se han enfocado principalmente en la resolución de las siguientes problemáticas:

1. Incremento de la capacidad de producción.
2. Incremento de la eficiencia de producción y calidad del producto.
3. Implementación de nuevas tecnologías.

4. Reducción en el consumo de energía.
5. Reducción del impacto ambiental.
6. Implementación de mejoras para la flexibilidad, operabilidad, controlabilidad y seguridad del proceso.

Durante las últimas décadas se han realizado avances significativos en el tema de ahorro de energía y síntesis de secuencias de separación mediante la utilización de la metodología Pinch [Linnhoff y Hindmarsh, 1983], el uso de programación matemática [Kocis y Grossmann, 1988] y métodos de Inteligencia Artificial [Barnicki y Fair, 1990, 1992]. Gundersen [Gundersen, 1990] realizó una revisión de la aplicación de los métodos sistemáticos en el retrofit de procesos. Como resultado de ésta revisión destacan dos observaciones:

1. La mayoría de los proyectos en la industria de proceso (cerca del 70%) eran proyectos de retrofit.
2. Los métodos sistemáticos para el retrofit de proceso se basan en los mismos métodos que en el diseño de procesos.

La diferencia entre el diseño y el retrofit de procesos es que en el primero se trata de crear un proceso y en el segundo el punto de inicio es un proceso al cual se le quieren hacer mejoras.

Las conclusiones de Gundersen han sido confirmadas recientemente por Westerberg [Westerberg, 2004] al comentar por un lado que en las últimas dos décadas los proyectos en la industria han sido mayoritariamente proyectos de retrofit y por otro que los métodos de diseño son aplicables a problemas de retrofit. Westerberg hace especial mención de que las soluciones de los problemas de retrofit son mas complejos que en los problemas de diseño. Esta consideración es por el hecho de que en los problemas de retrofit además de tener las soluciones proporcionadas por las metodologías de diseño se debe considerar cuales de los equipos existentes se deben sustituir o reutilizar.

Para el manejo y reducción de la complejidad en el manejo de los problemas de *retrofit* se han implementado en sistemas computacionales metodologías basadas en representaciones jerárquicas y métodos heurísticos. En la aplicación de jerarquías para el desarrollo de herramientas de apoyo al retrofit se han realizado varios esfuerzos. Kirkwood et al. [Kirkwood, et al., 1988] implementaron un procedimiento de retrofit en un programa de cómputo llamado PIP (Process Invention Procedure). Combinaron reglas heurísticas con algoritmos para generar un sistema experto que emplea un arreglo jerárquico. Fisher et al. [Fisher, et al., 1987] desarrollaron un procedimiento sistemático para hacer búsquedas de oportunidades al aplicar retrofit. El procedimiento considera modificaciones en la estructura y la dimensión de los equipos para un diagrama de flujo determinado. Asimismo, proponen un procedimiento para identificar los equipos que representan un “cuello de botella” dentro del proceso (enfoque 3 dentro del retrofit, ver sección 1.1.). El procedimiento presentado para aplicar retrofit está basado en un procedimiento jerárquico de 5 niveles. El nivel jerárquico corresponde a una serie de metas, las cuales hacen posible terminar rápidamente el estudio de retrofit si no hay suficiente incentivo económico que justifique algún esfuerzo adicional. Como ellos mencionan, los primeros cuatro pasos son los mismos que se aplican en el diseño de procesos.

Por otro lado Nelson y Douglas [Nelson y Douglas, 1990] desarrollaron un procedimiento sistemático y un programa de cómputo para estudiar problemas de retrofit en plantas petroquímicas enfocado a la consideración de rutas de reacción alternativas. El procedimiento es jerárquico y provee guías para reducir el esfuerzo durante la identificación de procesos poco viables. El procedimiento plantea el estudio del problema de evaluación del diagrama de flujo en dos partes:

- 1) generar y examinar alternativas de proceso sin considerar los sistemas de energía presentes en el proceso original.
- 2) una vez encontrada la mejor alternativa, incorporar los sistemas de energía que se requieran.

Nelson y Douglas iniciaron el uso de ordenadores para hacer algunas tareas semiautomáticas dentro del retrofit de procesos.

Uno de los enfoques no considerados en la aplicación del retrofit de procesos por Nelson y Douglas es el de la búsqueda de mejoras del proceso para disminuir el impacto ambiental. Fonyo et al. [Fonyo, et al., 1994] evaluaron y extendieron el procedimiento de decisión jerárquico descrito por Douglas para problemas de retrofit de procesos en los que el objetivo era minimizar residuos. La evaluación se basa en la experiencia obtenida de numerosos casos industriales en los cuales se habían realizado mejoras ambientales substanciales. Los casos de estudio fueron analizados con base en una lista jerárquica de contaminantes para la identificación de la fuente de contaminación. Como resultado, Fonyo et al. lograron refinar, corregir y extender el procedimiento de síntesis jerárquico en el proceso de retrofit para la minimización de residuos.

Recientemente se han desarrollado sistemas que resuelven simultáneamente las restricciones de tipo económico, medioambiental y de seguridad. Ben-Guang et al. [Beng-Guang, et al., 2000] desarrollaron una metodología que se centra en la identificación y eliminación de “*cuellos de botella*” en las secciones de reacción y separación. Argumentan que gran parte de la generación de contaminantes proviene de éstas dos secciones. Sylvester et al. [Sylvester, et al., 2000] describen el concepto de desarrollo sostenible desde el punto de vista industrial y hacen una revisión de las reglas heurísticas para la estimación del costo de tratamiento de residuos y selección de solventes. Con esta información y el desarrollo de modelos realizan la optimización de procesos bajo el enfoque de *Greener Process*. En este enfoque se tiene presente en todo momento minimizar el posible daño medioambiental. Por otro lado, Hertwig et al. [Hertwig, et al., 2001] implementaron un prototipo para el análisis de sistema químicos complejos. Este prototipo permite la evaluación simultánea de restricciones económicas y medioambientales mediante la aplicación de Programación Mixta Entera No-Lineal (*Mixed-Integer Non-Linear Programming*, MINLP) para la obtención de la mejor configuración de la planta. Halim et al. [Halim, et al., 2001] desarrollaron una metodología sistemática que integra el análisis para la minimización de

residuos y seguridad. Hacen uso del enfoque *material-centric*, el cual utiliza las similitudes entre estrategias de prevención y objetivos relacionados con seguridad y manejo de residuos. Smith et al. [Smith, et al., 2001] hicieron un estudio basado en las corrientes de proceso para determinar fugas de compuestos con valor comercial y/o con alto potencial de impacto ambiental. La idea de este trabajo era examinar las posibles emisiones fugitivas de un reformador de catalizador en una refinería empleando criterios económicos y de reducción del potencial de impacto ambiental. En este mismo sentido, Uerdingen et al. [Uerdingen, et al., 2001; Uerdingen, et al., 2003] desarrollaron un método basado en el análisis de las trayectorias de flujo de los componentes presentes en el diagrama de flujo. Además del análisis de las trayectorias de flujo utilizan indicadores de funcionamiento para clasificar el impacto económico de cada componente. Estos indicadores son:

- 1) El factor de acumulación en el reciclo.
- 2) El flujo másico del reciclo por componente y función. En teoría un proceso ideal no debería necesitar reciclo, es decir, un flujo másico de reciclo alto significa que el proceso no opera de forma óptima.
- 3) El coste que implica el reciclo.
- 4) El cociente del costo de reciclar y el valor económico de un componente en un reciclo. El valor específico es dado por la multiplicación de su precio de mercado con el caudal total en la corriente de reciclo.

Kheawhom y Hirao [Kheawhom y Hirao, 2001, 2002, 2004] proponen el empleo de indicadores económicos, medioambientales y de robustez para el diseño y selección de procesos. El indicador económico se basa en el cálculo del valor presente neto, el medioambiental utiliza el índice de proceso sostenible (*Sustainable Process Index*, SPI) y el de robustez emplea el de probabilidad de falla y el cociente de desviación (*Deviation Ratio*, DR). Con estos tres indicadores se construye un diagrama de Pareto y una superficie óptima multicriterio (*Multi-criteria Optimal Surface*, MOS). De esta forma y considerando el diagrama de Pareto y la MOS se realiza el diseño de procesos y la selección de condiciones de



operación con un mínimo impacto ambiental, una máxima robustez y desempeño económico.

Las metodologías propuestas anteriormente consisten básicamente en generar un nuevo diseño del proceso de acuerdo a las especificaciones para luego compararlo con el ya existente. Las diferencias entre los dos procesos es la propuesta de retrofit. En este sentido Rapoport et al. [Rapoport, et al., 1994] plantean un algoritmo para realizar diseño de unidades aplicando retrofit a unidades de proceso existentes. El algoritmo es una aproximación de síntesis de procesos con reglas heurísticas basadas en experiencias de ingenieros, cálculos detallados de procesos y evaluación económica para obtener un diseño óptimo. El algoritmo consta de niveles jerárquicos y reglas heurísticas que son utilizadas en cada nivel. La secuencia de estos niveles jerárquicos para el retrofit son:

- a) identificar posibles mejoras de un diagrama de flujo.
- b) selección de unidades de operación adicionales.
- c) determinación de los flujos de alimentación a las unidades.
- d) especificación de los equipos.
- e) diseño de los equipos sin considerar la integración de calor.
- f) diseño con integración de calor.
- g) análisis de los resultados del proceso resultante por el diseñador.

Estos siete pasos se deben repetir hasta encontrar un diseño satisfactorio. Al final de cada iteración el diseñador puede modificar algunas especificaciones y cambiar los pesos de algunas de las reglas heurísticas.

Por otro lado, de las actividades a considerar dentro del desarrollo de herramientas computacionales de apoyo al retrofit de procesos están el análisis y representación de la información que un diagrama de flujo de proceso (DFP) proporciona. Para la representación de la información Teck [Teck Chong, 1995] propone el uso de Knowledge-Based Design System (KBDS), el cual es un sistema de soporte al diseño basado en el conocimiento. En KBDS se toma en cuenta el conocimiento funcional durante el rediseño de procesos. Estas

funciones son identificadas a partir de una clasificación basada en aspectos tales como estructura (número de corrientes de entrada/salida) y función (función o uso previsto).

Con éstas funciones e información del usuario se construye una representación del proceso y se generan niveles de abstracción. Los niveles de abstracción son generados mediante un sistema de reglas de producción y un algoritmo de reglas de inducción utilizando jerarquías de precedencia. Las jerarquías de precedencia se definen por 4 funciones: reacción, separación, cambio de fase o temperatura o presión y cambio de flujo. Como resultado de ésta investigación, Teck logró desarrollar un programa computacional capaz de representar un diagrama de flujo de proceso utilizando la descripción de funciones de cada una de las unidades que lo forman y la generación de niveles de abstracción combinando las funciones y las jerarquías de precedencia antes mencionadas.

La representación de la información también se puede realizar a través de modelos. En este sentido en las últimas décadas los esfuerzos de modelado de sistemas se han centrado en el modelado del comportamiento ya que el fin principal ha sido la simulación del sistema. El inconveniente que se presenta al emplear esta clase de modelado “monolítico” es que esta forma únicamente se basa en fundamentos físicos y matemáticos del sistema, dejando de lado el conocimiento interpretativo que el usuario puede darle a dicho proceso. Para solventar este problema Chittaro et al. [Chittaro, et al., 1993] proponen el modelado múltiple (estructural, de comportamiento, funcional y teleológico) de las unidades de un sistema clasificándolos en conocimiento fundamental (estructural y de comportamiento) e interpretativo (funcional y teleológico). La adopción de diferentes clases de modelos agiliza el proceso de razonamiento enfocándose en los aspectos mas importantes del sistema [Bonarini and Sassaroli, 1997]. Beltrame and Toppano [Beltrame and Toppano, 1995] han aplicado de manera exitosa el modelado múltiple en el diagnóstico de fallas en plantas industriales.

Los trabajos mencionados anteriormente sugieren la utilización de reglas heurísticas en combinación con niveles jerárquicos de decisión para el retrofit de procesos, además del desarrollo de programas computacionales para hacer ésta tarea de forma semiautomática.

## 1.4. HIPOTESIS

---

Con base en el estado del arte se pone de manifiesto que una herramienta de apoyo al retrofit de procesos podría hacer mas eficiente y menos costosa la evaluación de mejoras de un proceso químico determinado considerando las siguientes suposiciones y hechos:

- Las oportunidades de comercialización de un nuevo proceso industrial en la etapa de investigación es del 1 al 3%, para la etapa de desarrollo es del 10 al 25% y en la etapa de planta piloto del 40 al 60% [Douglas, 1988]. Por otro lado, debido a los cambios en los escenarios económicos y a las nuevas normativas medioambientales, en las últimas dos décadas en los procesos industriales cerca del 70% de los cambios realizados han sido proyectos de retrofit [Gundersen, 1990]. Estos datos sugieren dos cosas:
  - 1) hay una baja posibilidad de éxito de los procesos nuevos en las primeras etapas de investigación y desarrollo,
  - 2) la adecuación de los procesos industriales existentes mediante proyectos de retrofit es usual en la industria.
- Los procesos químicos deben ser evaluados periódicamente para verificar su correcta operación y garantizar su rentabilidad.
- La aplicación de metodologías de retrofit presupone un estudio exhaustivo del proceso actual para proponer mejores alternativas técnica y económicamente viables reutilizando al máximo posible los equipos

presentes. Con estas alternativas obtenidas a través del retrofit se logran minimizar los costos de investigación, desarrollo e inversión que dichas soluciones sugieren.

- En los proyectos de retrofit para la ampliación y transformación de sistemas de proceso (*Enlargement and Transformation of Process Systems*, ETPS) [Beng-Guang, et al., 2000] se cuenta generalmente con tres grupos de trabajo:
  - 1) ingenieros de planta (encargados y expertos).
  - 2) ingenieros para el retrofit/diseño
  - 3) ingenieros de proyectos.

Cada uno de estos grupos tiene tareas específicas para un ETPS. Dentro de las tareas para los ingenieros de planta se encuentran: identificación de cuellos de botella, problemas de operación y control, protección ambiental, ahorro de energía, etc. Para los de retrofit/diseño están: la simulación de la planta, análisis del proceso (por ejemplo utilizando análisis pinch), desarrollo de técnicas que permitan identificar y resolver los cuellos de botella, optimización, minimización de residuos, aplicación de metodologías de retrofit y diseño, etc. Para los ingenieros de proyecto: el *layout* de la planta, ingeniería de detalle, diagramas de tubería e instrumentación, etc. Muchas de estas actividades se pueden realizar con ayuda de un ordenador para reducir el tiempo y coste de investigación y desarrollo. En este sentido y si consideramos que un grupo de investigación para un ETPS puede estar formado de 5 a 10 personas (1-2 ingenieros de planta, 3-5 ingenieros especialistas en retrofit/diseño y 1-3 ingenieros de proyecto) y que el coste promedio de una hora de trabajo de un ingeniero/investigador es de 40 Euros, el coste diario del grupo sería de 1600 a 3200 Euros (32000-64000 Euros/mes). Esto significa que el uso de herramientas computacionales en los proyectos de ETPS pueden lograr ahorros significativos en la etapas de investigación y desarrollo.

- Históricamente el desarrollo de herramientas computacionales para el retrofit de procesos se ha centrado básicamente en el ahorro de energía y síntesis de sistemas de separación. Solo en algunos casos se ha considerado el retrofit global de procesos.

Con base en lo anterior se plantea la siguiente hipótesis:

“Una metodología para el retrofit de procesos químicos basada en una representación jerárquica y su posterior implementación en un sistema computacional podría ayudar a realizar las tareas del retrofit de procesos de manera:

- Mas eficiente:
  - organizando, clasificando y representando en modelos de conocimiento la información.
  - identificando secciones de proceso susceptibles de mejoras y generando alternativas de solución de forma semiautomática.
- Menos costosa:
  - En la etapa de I+D, disminuyendo el tiempo de investigación-desarrollo y el número de personas a participar en este tipo de proyectos.
  - En la etapa de implementación, reutilizando al máximo los equipos y dispositivos existentes, seleccionando la mejor alternativa generada,

De esta manera se pretende encontrar procesos que sean mas eficientes técnica y económicamente, así como con el menor daño posible al medio ambiente”.

Se debe tener presente que el tipo de procesos químicos a los que se pretende aplicar ésta metodología son continuos y operan en estado estacionario. No están considerados los procesos en donde haya manejo de sólidos (por ejemplo,

cristalizadores, secadores, etc.) o electrolitos. Por otro lado, debe estar disponible información de:

- Las especies químicas presentes y sus propiedades.
- Las reacciones que ocurren (si es el caso).
- Los equipos y dispositivos que forman el proceso.
- Las propiedades de las corrientes de materia y energía.

---

# Capítulo 2.

# FUNDAMENTOS

---

En el presente capítulo se presentan los fundamentos teóricos que sirven de base para la metodología de retrofit de procesos químicos propuesta en el capítulo tres. La metodología de retrofit propuesta se fundamenta principalmente en:

- la representación y generación de niveles de abstracción de un proceso químico existente (aplicando de manera inversa la metodología de diseño de Douglas [Douglas, 1988]).
- la generación y evaluación de alternativas de solución mediante el desarrollo de un sistema basado en conocimiento, aplicando el enfoque de modelos múltiples y razonamiento basado casos.
- un conjunto de ideas aplicadas tradicionalmente en el retrofit de procesos.

Debido a los puntos mencionados anteriormente este capítulo está dividido en tres secciones principales. En la primera sección se presenta la metodología de diseño de procesos de Douglas [Douglas, 1988]. En la segunda se describen las características principales de los sistemas basados en conocimiento (*Knowledge-Based Systems*, KBS), haciendo especial énfasis en el enfoque de modelos múltiples y la metodología de razonamiento basado en casos (*Case-Based Reasoning*, CBR). En la tercera sección se analizan diferentes enfoques de las metodologías de retrofit y su aplicación a la metodología propuesta.

## 2.1. METODOLOGÍA DE DOUGLAS

La metodología de Douglas es un procedimiento jerárquico “*top-down*” para el diseño conceptual de procesos químicos. Ha sido utilizada ampliamente para el diseño y síntesis de procesos [Kirkwood et al., 1988; Nelson y Douglas, 1990; Douglas, 1992, 1995; Fonyo et al., 1994; Han et al., 1995; Zheng et al., 1999]. Sus objetivos son: encontrar un buen diagrama de flujo de proceso y estimar las condiciones de diseño óptimas. El análisis y síntesis del proceso se realizan con base en el planteamiento jerárquico de decisiones de diseño. La idea de plantear jerarquías de diseño es debido a que se desea dividir un problema en partes más simples y de fácil manejo. La metodología está dividida en 5 niveles de decisión como se muestra en la figura 1.

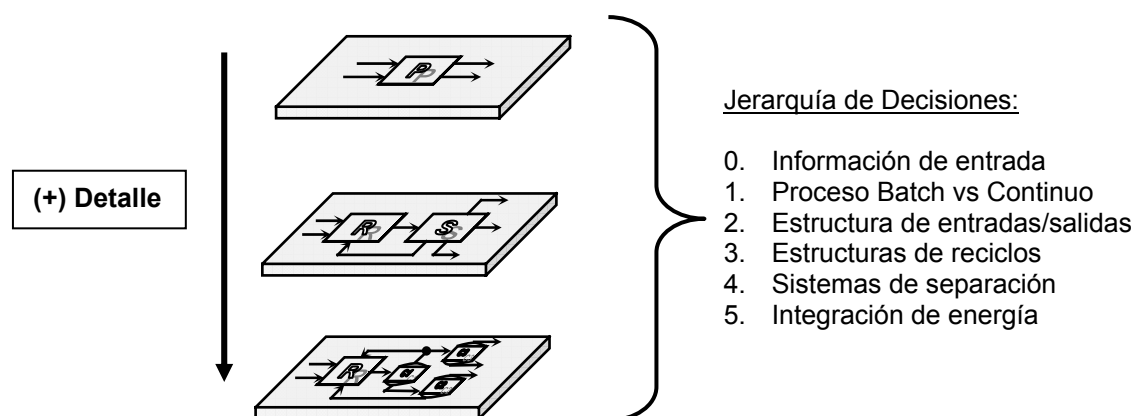


Figura 1. Jerarquías de decisión de Douglas.

El punto de inicio de la metodología de Douglas es una “caja negra” que contiene información de las entradas y los requerimientos de las salidas (nivel 0). En este nivel es deseable contar con la mayor información posible relacionada con la(s) reacción(es) que se llevarán a cabo para transformar las materias primas en productos. En el nivel 1 se toma la decisión sobre el modo de operación en función de la cantidad de producto(s) a producir entre otros criterios, es decir, modo de operación batch o continuo. En el nivel 2 se determina el número y condiciones de las corrientes de entrada (materia(s) prima(s)) y salida (producto principal, sub-productos, residuos, solventes, etc.). En el nivel 3 se fija la



estructura de los ciclos que contendrá el proceso. La estructura de los ciclos depende en gran medida de los sistemas de reacción presentes en el proceso. En el nivel 4 se hace la selección del tipo de sistema de separación a utilizar para separar el producto principal del resto. La selección del sistema de separación depende básicamente de la fase en que se encuentre la corriente de salida del sistema de reacción. Para corrientes líquido-vapor existen tres posibilidades:

- Si es líquido: se asume que solo es necesario un sistema de separación de líquidos, utilizando por ejemplo, destilación, extracción líquido-líquido, etc.
- Si es una mezcla líquido-vapor: se puede utilizar el mismo reactor como un sistema de separación o se coloca un flash para separar ambas fases. Después de esta separación se requiere un sistema de separación de líquidos y un sistema de recuperación de vapor.
- Si es vapor: se requiere enfriar la corriente hasta producir una condensación parcial o total. En el primer caso se requerirá de un sistema de separación de líquidos y un sistema de recuperación de vapor. En el segundo caso solo se requerirá de un sistema de separación de líquidos.

En el último nivel se hace el diseño de la red de cambiadores de calor teniendo en mente el objetivo de lograr una red que cumpla con los requerimientos mínimos de calentamiento y de enfriamiento.

Al generar estos 5 niveles se logra el diseño conceptual de un proceso químico. La intención es aplicar de manera inversa la metodología de Douglas a un proceso ya existente y generar niveles de abstracción del mismo (ver figura 2). El objetivo de generar niveles de abstracción es obtener un posible “razonamiento” de cómo un proceso pudo ser concebido, además de identificar las diferentes secciones que lo forman, de cara a que sean éstas secciones los puntos de inicio para explorar mejoras. Esta hipótesis permite aplicar el retrofit de procesos con un enfoque global.

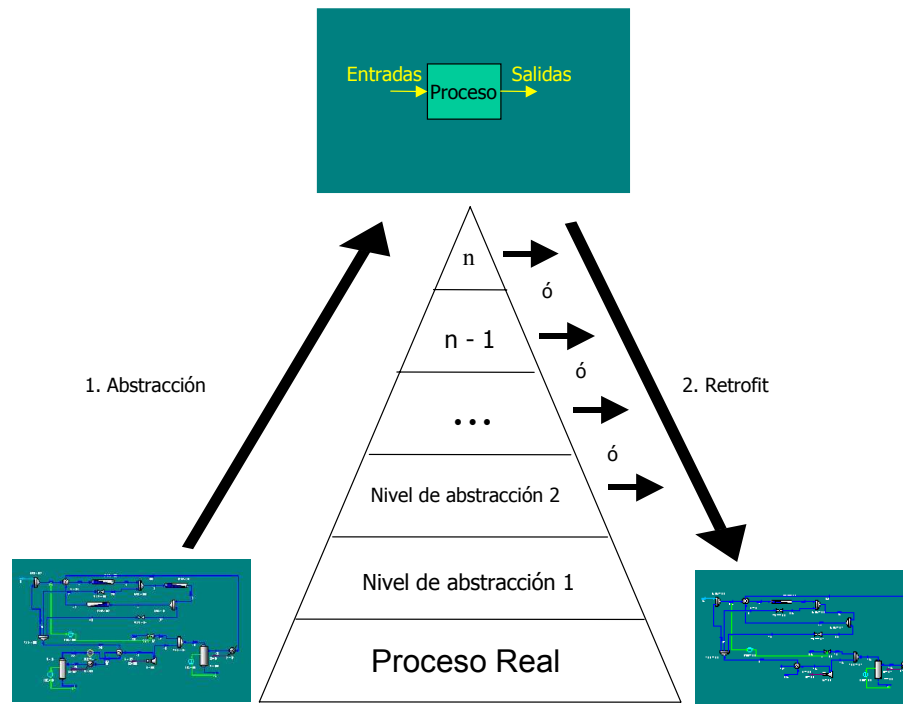


Figura 2. Generación de niveles de abstracción durante el retrofit de un proceso químico.

## 2.2. SISTEMAS BASADOS EN CONOCIMIENTO

Un sistema basado en conocimientos (*Knowledge-Based System, KBS*) [Han, et al., 1996] es un programa computacional que tiene conocimiento especializado sobre un área y resuelve una clase específica de problemas utilizando dicho conocimiento. Las ventajas de utilizar un KBS son:

- representar y almacenar conocimiento.
- reproducir el conocimiento una vez que se haya representado.
- refinar el conocimiento identificando inconsistencias y conflictos durante la construcción y prueba de la representación del conocimiento.
- centralizar el conocimiento mediante la incorporación de varias formas de conocimiento en un solo KBS.
- transferir el conocimiento de un KBS a otros sistemas.

La estructura básica de un KBS consiste de:

1. **Base de conocimiento.** Contiene información específica y en profundidad del problema a manejar. El conocimiento puede representarse mediante hechos, reglas y/o heurísticas.
2. **Motor de inferencia.** El motor utiliza mecanismos de inferencia para procesar el conocimiento y presentar conclusiones.
3. **Interfaz de usuario.** Proporciona la comunicación entre el programa de cómputo y el usuario.

De los principales problemas en los KBS es la representación del conocimiento. Una representación es un sistema de convenciones para describir un concepto o un objeto. Winston [Winston, 1992] sugiere que una buena representación debería a) hacer de forma explícita la importancia de los objetos y sus relaciones, b) exponer las restricciones naturales, c) unir los objetos y sus relaciones, d) suprimir detalles irrelevantes, e) ser transparente, f) ser completa, g) ser concisa, h) ser rápida, e i) ser computable. Winston enumera adicionalmente varias representaciones de gran alcance: a) redes semánticas, b) espacio de estados, c) árbol de metas/objetivos, d) reglas, e) *frames*, clases, instancias, *slots*, y herencia y f) lógica y pruebas de resolución.

En ingeniería química se han aplicado muchos esquemas de representación que destacan la importancia de los objetos y sus relaciones, suprimiendo detalles irrelevantes. El diagrama de flujo de proceso es un ejemplo de la utilización de esquemas de representación.

Una vez seleccionado el esquema de representación del conocimiento se debe seleccionar/diseñar el o los métodos de solución para el motor de inferencia. Para problemas sencillos un esquema puramente algorítmico puede ser utilizado. Sin embargo, para problemas complejos es inevitable el uso de alguna combinación entre métodos heurísticos, evolucionarios y algorítmicos. Algunas veces se requiere de la intervención activa del usuario. Algunos ejemplos de métodos de solución son [Quantrille y Liu, 1991; Winston, 1992]:

- Generación y prueba. Similar a los métodos de prueba y error. Este método ha sido ampliamente utilizado en KBS, por ejemplo en sistemas de manejo de alternativas de diseño generadas mediante decisiones jerárquicas [Han et al., 1995; Bañares-Alcántara, 1995; Bañares-Alcántara y Lababidi, 1995; Bañares-Alcántara y King, 1996].
- Análisis de medios y fines. Se intenta encontrar y reducir la diferencia entre el estado inicial y el estado final aplicando un operador apropiado. Para las diferencias generadas se aplica la misma estrategia hasta lograr que sean resueltas. Este método ha sido aplicado en un programa de síntesis de procesos (AIDES [Sirola et al., 1971]) y en un programa de aprendizaje (CDP-Soar [Modi et al., 1995a; Modi et al., 1995b]).
- Descomposición. En algunas ocasiones es posible convertir metas/objetivos complejos en dos o más fáciles de lograr. Cada sub-meta/objetivo a su vez puede ser dividido en uno o más sub-meta/objetivo de mas bajo nivel. Esta descomposición es también llamada reducción de objetivos. Por ejemplo, el procedimiento de decisión jerárquico de Douglas [Douglas, 1988] emplea esta estrategia para reducir el alcance del diseño de la planta total a una estructura de entradas/salidas con reciclos.
- Métodos de búsqueda. Algunos ejemplos de estos métodos son: búsqueda en profundidad, búsqueda en horizontal o anchura, *branch-and-bound* y programación dinámica discreta. Una de las claves de éxito en un KBS para la síntesis de proceso es emplear un método de búsqueda eficiente debido a la naturaleza combinatoria de la síntesis [Quantrille y Liu, 1991].
- Satisfacción de restricciones y resolución de conflictos. Es una técnica de filtrado que elimina ciertas soluciones potenciales dentro del espacio de estado cuando no satisfacen un sistema específico de restricciones. Esta técnica es particularmente útil en el manejo de restricciones durante el diseño [Han et al., 1995; Sheppard et al., 1991].

Por último y debido a la naturaleza compleja de los problemas a resolver con los KBS's se debe poner especial interés en la interfaz del usuario. Una interfaz

debería permitirle al usuario que supervise el progreso del diseño, proporcionarle capacidad de toma de decisiones y de dirección del diseño de manera productiva. Existen varios criterios para el diseño de una interfaz de usuario. Britt et al. [Britt et al., 1989] comentan que un buen diseño de una interfaz:

- Necesita una comprensión cuidadosa de los problemas que serán tratados y de las maneras mediante las cuales los usuarios podrán resolverlos.
- Debe proporcionar una navegación flexible. Esto quiere decir que deberá proporcionar información sobre cómo y desde qué punto los usuarios pueden tener acceso a las diversas funciones del sistema.
- Se puede modificar según los requisitos y necesidades particulares de los usuarios para diversos estilos de trabajo.
- Proporciona avisos y ayuda para guiar al usuario.
- Anticipa y previene errores.
- Utiliza el color, forma, tamaño, y textura para proporcionar información útil al usuario.
- Debe ser la misma para todo el sistema.

Para el desarrollo de KBS's, Han et al. [Han et al., 1996] proponen 5 pasos basados en ingeniería de software:

1. **Análisis de requisitos/restricciones.** Se debe tener claro cuales son los problemas que se desean resolver, así como las simplificaciones y/o suposiciones que se desean añadir.
2. **Adquisición de conocimiento.** Es recomendable que el desarrollador adquiera conocimiento de expertos en el manejo de problemas similares a los que se desea resolver. Otra forma de adquirir conocimiento pueden ser: el uso de gráficas y tablas, el conocimiento basado en modelos o el conocimiento basado en casos. En la sección 2.2.1. se da mas detalle del enfoque de modelos múltiples y en la sección 2.2.2. del razonamiento basado en casos (*Case-Based Reasoning*, CBR).

3. **Modelado de objetos** (*Object Modelling Technique*, OMT). Un modelo es una abstracción de un proceso o un objeto con el fin de entenderlo. El modelado nos ayuda a entender sistemas que son demasiado complejos. En OMT [Rumbaugh et al., 1991] un sistema es modelado desde tres puntos de vista diferentes pero relacionados, cada uno de ellos cubriendo aspectos importantes del sistema. El primero de ellos es un modelo estático, que cubre aspectos tales como estructura y datos. El segundo es un modelo dinámico, que se encarga del comportamiento temporal y de control, y el tercero es un modelo funcional que cubre aspectos de transformación y función del sistema. Un procedimiento de software típico incorpora estos tres aspectos: utiliza estructuras de datos (modelo estático), secuencias de operación en el tiempo (modelo dinámico) y valores de transformación (modelo funcional).
  
4. **Modelado de la lógica de inferencia**. Las reglas son condiciones que deben ser satisfechas y permiten que el usuario especifique las condiciones en unidades pequeñas e independientes usando declaraciones explícitas. Cuando se activa más de una regla, generalmente se realiza una de las acciones posibles, de tal forma que se requiere de una estrategia para resolver el conflicto y decidir que regla se acciona. El encadenamiento hacia adelante o hacia atrás son dos posibles mecanismos a utilizar.
  
5. **Verificación**. Una vez desarrollado el KBS no debería ser utilizado sin una evaluación previa. Algunas pruebas que deberían realizarse son: a) factibilidad termodinámica del diagrama de flujo obtenido, b) consistencia lógica y completez de las decisiones de diseño/retrofit realizadas, c) evaluación con condiciones de operación óptima de las diferentes alternativas generadas.

El desarrollo de KBS's es un proceso iterativo y no secuencial. Durante el proceso de verificación la interacción con expertos o ingenieros de planta es muy importante.

## 2.2.1. MODELOS MÚLTIPLES

---

Mediante el empleo y desarrollo de modelos podemos representar y obtener conocimiento de un determinado sistema (el sistema puede estar formado por objetos, procesos o artefactos). Los modelos pueden ser físicos o abstractos. En este caso los modelos abstractos y el enfoque de modelos múltiples es de especial interés para la representación de procesos químicos. El enfoque de modelos múltiples [Chittaro et al., 1993] consiste en el uso de diversos modelos (estructural, de comportamiento, funcional y teleológico) de un sistema para facilitar tareas complejas, tales como la representación, interpretación, análisis, diseño, simulación, etc. Mediante el modelos múltiples podemos representar el conocimiento de la siguiente manera:

Conocimiento fundamental.

- Estructural, es el conocimiento acerca de la topología de un sistema (describe sus partes e interconexiones). Comprende objetos físicos, nodos e interconexiones.
- De comportamiento, es el conocimiento acerca de cómo operan e interactúan los objetos con otros dentro del mismo sistema.

Conocimiento interpretativo.

- Funcional, es el conocimiento acerca del “rol” del objeto dentro del sistema (por ejemplo, la función de una columna de destilación en un proceso químico es de separación de mezclas líquido/vapor).
- Teleológico, es el conocimiento acerca de los objetivos asignados al objeto por el diseñador y de las condiciones operacionales (por ejemplo, una columna de destilación que separa una mezcla ternaria A, B y C, podría tener como modelo teleológico dadas unas condiciones de operación “separación de A de B y C”. Dadas otras condiciones de operación, la misma columna podría tener como modelo teleológico “la separación de A y B de C”).

Ambos tipos de conocimiento (fundamental e interpretativo) requieren de una terminología común acerca de los objetos, procesos y/o artefactos que forman un sistema. Una forma de estandarizar los conceptos y términos es mediante una ontología. El concepto de ontología es ampliamente utilizado en el área de Inteligencia Artificial. Una ontología puede verse como un “diccionario” acerca de un dominio con una taxonomía bien definida de los conceptos que lo forman. Una de las características de las ontologías es que los conceptos que contienen son entendibles tanto por humanos como por computadoras mediante una semántica común. Una de las definiciones mas aceptadas en inteligencia artificial es la de Gruber: *“Una ontología es la especificación formal y explícita de una conceptualización compartida”* [Gruber, 1993], en donde *conceptualización* se refiere a un modelo abstracto que identifica los conceptos relevantes de algún fenómeno.

Adicional a la ontología debe definirse en los modelos:

- La granularidad de la representación, es decir, la información que realmente interesa representar en el modelo. Esto involucra dos aspectos: alcance (los aspectos que se consideran relevantes para representarlos en el modelo) y precisión (el grado de especificación de la representación).
- el nivel de agregación, el cual se refiere al nivel de abstracción del conocimiento representado.

De los factores que se deben considerar al momento de organizar los modelos son: 1) la unicidad del modelo (cada modelo individual debe contar con la especificación de una ontología, granularidad de la representación y nivel de agregación) y 2) la interconexión entre modelos (cada modelo debe estar explícita y apropiadamente interconectado a otros modelos).

### **2.2.2. RAZONAMIENTO BASADO EN CASOS**

---



El razonamiento basado en casos (CBR) es un paradigma computacional basado en la idea de resolver problemas mediante experiencias pasadas. Un sistema CBR requiere de una base de casos lo suficientemente poblada y que cada caso describa una situación y una solución a un problema en particular. El funcionamiento de un sistema CBR consiste de 4 etapas:

1. **Recuperación.** En esta etapa se recuperan (de la base de casos) los casos mas similares al problema a resolver.
2. **Reutilización.** Los casos recuperados se analizan y modifican para intentar satisfacer las especificaciones del problema a resolver.
3. **Revisión.** Los casos modificados se verifican para determinar si son una solución viable al problema a resolver.
4. **Retención.** Si alguno de los casos verificados cumple satisfactoriamente la etapa de revisión, entonces se guarda en la base de casos.

Las aplicaciones de CBR pueden clasificarse en 1) tareas de clasificación y 2) en tareas de síntesis [Watson, 1997]. Los problemas que se pretende resolver con el diseño y retrofit de procesos se pueden enmarcar dentro de las tareas de síntesis. El uso (directo o analógico) del conocimiento generado en diseños previos o en la aplicación del retrofit puede disminuir el tiempo y los costos de desarrollo e investigación de nuevos problemas.

El CBR se ha aplicado en ingeniería química en diferentes áreas. Las aplicaciones mas comunes han sido en optimización/supervisión/control de procesos [Krovvidy y Wee, 1993; Sánchez-Marrè et al., 1997; Rodríguez-Roda et al., 1999, 2000a] y diseño/síntesis de procesos [Avramenko et al., 2002; Avramenko et al., 2004; Ceccaroni et al., 2002; Kolodner, 1993; Kraslawski et al., 1995; Krovvidy y Wee, 1993; Núñez et al., 2004; Núñez et al., 2002; Pajula et al., 1999; Pajula et al., 2001a, 2001b; Rodríguez-Roda et al., 2000b; Seuranen et al., 2002]. Hasta el momento no hay reportadas aplicaciones de CBR en el retrofit de procesos, pero debido a la complejidad e incompletez del conocimiento involucrado en el retrofit de procesos químicos considero que el CBR puede ayudar a:

- 1) obtener soluciones sin invertir demasiado tiempo.
- 2) proveer soluciones cuando los métodos tradicionales no pueden hacerlo.
- 3) proporcionar experiencias pasadas de soluciones satisfactorias e insatisfactorias.

Obviamente se deben considerar las desventajas de la aplicación de CBR. Las desventajas que el CBR presenta son:

- 1) la necesidad de que la base de casos sea lo suficientemente grande para poder proveer casos similares al problema planteado.
- 2) el usuario no puede utilizar directamente los casos recuperados sin antes verificarlos en la nueva situación.
- 3) puede inducir al usuario hacia soluciones erróneas debido a que se considera que los casos almacenados son solo soluciones aproximadas a los problemas planteados.

## **2.3. METODOLOGÍAS DE RETROFIT DE PROCESOS**

En la sección 1.1. se describieron los enfoques principales del retrofit de procesos dependiendo de la problemática planteada y el esfuerzo que se les quiera invertir. En este apartado se presentan de manera general los aspectos que son deseables en una metodología de retrofit, sin considerar una metodología en particular.

En contraste con un problema de diseño, en el cual se inicia con el objetivo de obtener un proceso que transforme las materias primas en determinados productos, en el problema de retrofit se inicia con la descripción de un diseño existente para satisfacer nuevos requerimientos. En el retrofit de procesos debe considerarse la modificación y adaptación del diseño existente teniendo como objetivo la satisfacción de los nuevos requerimientos, minimizando los cambios en el diseño original y maximizando la utilización de los equipos y dispositivos existentes. Es claro que el diseño y el retrofit son problemas de satisfacción de

restricciones. La solución de este tipo de problemas es limitada ya que su manejo computacional se hace imposible si el espacio de búsqueda es grande [Chandrasekaran, 1990]. Con la ecuación de Thompson y King (Ecuación 1) [Thompson y King, 1972] se puede estimar el número de posibles secuencias para separar  $N$  componentes en  $N$  productos utilizando  $S$  métodos de separación con separadores simples (una entrada y dos salidas) y *sharp* (separación directa de los componentes claves). En la Tabla 1 se muestra el número de secuencias de separación para un máximo de 10 componentes y 5 métodos de separación calculados con la ecuación 1.

$$\text{No. de Secuencias} = \frac{(2(N-1)!) S^{N-1}}{N!(N-1)!} \quad (\text{Ec.1})$$

Tabla 1. Secuencias de separación según Thompson y King.

No. de Componentes (N)	No. de métodos de separación (S)				
	1	2	3	4	5
2	1	2	3	4	5
3	2	8	18	32	50
4	5	40	135	320	625
5	14	224	1,134	540672	8,750
10	4,862	2,489,344	95,698,746	1,274,544,128	9,496,093,750

Como puede verse en la Tabla 1, con una mezcla de 10 componentes (lo cual es muy común en la industria petroquímica) y 2 métodos de separación se pueden tener del orden de  $2.5 \cdot 10^6$  secuencias de separación. El número de secuencias de separación explota combinatoriamente si se consideran 5 métodos de separación ( $9.5 \cdot 10^9$ ). Computacionalmente hablando Knuth [Knuth, 2001] comenta que el número  $10^9$  es igual a infinito. En esta situación se hace necesario la reducción del espacio de búsqueda de soluciones, así como de su posterior

análisis. Biegler et al. [Biegler et al., 1997, pp. 33-35] enumeran los siguientes enfoques para reducir el espacio de búsqueda de soluciones:

- Enumeración total. En los casos en los que es factible se generan y evalúan todas las soluciones del problema con base en criterios (e.g. técnicos y/o económicos). Como resultado de la evaluación se obtiene la solución que mejor satisface los criterios establecidos. La desventaja de este enfoque es que si el número de soluciones a evaluar es muy grande los recursos técnicos y humanos son excesivos. Una alternativa para reducir el número de soluciones a evaluar es utilizar métodos de enumeración parcial empleando por ejemplo heurísticas como las descritas Seader y Westerberg [Seader y Westerberg, 1977] o por Turton et al. pags. 232-258 [Turton et al., 1997].
- Métodos evolutivos. El estado inicial de estos métodos es un diagrama de flujo de proceso existente para el mismo producto o de alguno similar. A continuación se hacen las modificaciones con base en los nuevos objetivos [Stephanopoulos y Westerberg, 1976; Nath y Motard, 1981; Bamopoulos et al., 1988].
- Optimización de una superestructura. Estos métodos inician con una superestructura que contenga muchas alternativas e interconexiones redundantes para eliminarlas después, mientras se optimizan otros parámetros de diseño. Recientemente Biegler y Grossmann presentaron una retrospectiva sobre esta metodología [Biegler y Grossmann, 2004], así como una perspectiva a futuro [Grossmann y Biegler, 2004].
- *Targeting*. En este enfoque los límites de funcionamiento del sistema se analizan para reducir el espacio de búsqueda de soluciones. Generalmente las metas a lograr proporcionan información útil sobre la solución global. Linnhoff [Linnhoff, 1994] presenta una revisión de la aplicación de esta metodología en la integración de procesos y Morgan [Morgan, 1992] describe la importancia de su empleo en el diseño de procesos.
- Abstracción del problema. En este método lo que se pretende es tomar decisiones jerárquicas para reducir el espacio de búsqueda de soluciones

con base en una representación abstracta del proceso. Este tipo de decisiones jerárquicas ha sido utilizado en AIDES [Sirola et al., 1971] y es parte fundamental de la metodología jerárquica de Douglas [Douglas, 1985, 1988].

Cada uno de los enfoques mencionados anteriormente tienen una forma muy específica de resolver el problema de diseño/retrofit dependiendo de las situaciones a las que se enfrentan. En este trabajo se propone que un enfoque genérico de retrofit debería componerse de las siguientes etapas:

1. Adquisición de la información. Se debe adquirir y/o inferir la descripción del diseño original o la del proceso en operación.
2. Representación de la información. La información del proceso se debe procesar para tener una representación que sea entendible por el usuario y por algún sistema computacional.
3. Análisis. Con las etapas anteriores y las nuevas especificaciones definidas por el usuario se identifican las partes o secciones del proceso susceptibles de modificación o sustitución.
4. Generación de alternativas. Con las partes o secciones de la etapa anterior se generan alternativas que satisfagan la nuevas especificaciones.
5. Modificación. Cada una de las alternativas de la etapa anterior se adaptan en la representación de la etapa 2.
6. Evaluación. Cada modificación hecha se evalúa para determinar si su desempeño es el adecuado. Esta etapa es iterativa a partir de la etapa 4 y se repite hasta encontrar la opción mas adecuada. En esta etapa es necesario la ayuda de un simulador de procesos para facilitar y disminuir el tiempo de evaluación.
7. Implementación. Una vez evaluadas las alternativas y definida la mejor, se implementa con ayuda de expertos en el proceso real.

---

## 2.4. RESUMEN

---

En el presente capítulo se presentaron los fundamentos teóricos que sirven de base para la metodología de retrofit de procesos químicos propuesta en el siguiente capítulo.

En la sección 2.1. se presentó la metodología de diseño de procesos de Douglas [Douglas, 1988], la cual se pretende utilizar para representar y generar niveles de abstracción de un proceso existente aplicándola de forma inversa. En la sección 2.2. se describen las características principales de los sistemas basados en conocimiento (Knowledge-Based Systems, KBS). La estructura básica de los KBS's es una base de conocimiento, un motor de inferencia y una interfaz de usuario. En esta sección se hace especial énfasis en el enfoque de modelos múltiples y la metodología de razonamiento basado en casos (Case-Based Reasoning, CBR). El enfoque de modelos múltiples se utilizará para la representación del conocimiento (fundamental e interpretativo) de los equipos y dispositivos de proceso y el CBR para la generación y evaluación de alternativas de solución. Finalmente, en la sección 2.3. se analizaron los diferentes enfoques de retrofit y se proponen 7 etapas genéricas que debería contener una metodología de retrofit.

## Capítulo 3.

# METODOLOGÍA PARA EL RETROFIT DE PROCESOS QUÍMICOS

La metodología que se plantea integra conocimientos relacionados con el retrofit, diseño, síntesis y análisis de procesos, de forma que se logre diseñar e implementar una herramienta informática de apoyo al retrofit de procesos. Además de los conocimientos de ingeniería química antes mencionados, se plantea la incorporación de conocimiento en el área de ingeniería informática para desarrollar un sistema basado en conocimientos utilizando algoritmos computacionales de comunicación, visualización y técnicas de inteligencia artificial.

La metodología consiste de cuatro etapas generales:

- Extracción de la información.
- Análisis y representación de la información.
- Generación de alternativas de solución.
- Evaluación de alternativas.

Siguiendo éstas etapas, el presente capítulo esta dividido en cuatro secciones principales. En la primera sección se describe la etapa de extracción de la información del proceso a investigar, en la segunda se presenta la de análisis y representación de la información, en la tercera la de generación de alternativas y en cuarta la evaluación de las mismas.

Como se mencionó en la sección 2.3., una metodología genérica de retrofit debería tener las siguientes etapas:

- Adquisición de la información.
- Representación de la información.
- Análisis
- Generación de alternativas.
- Modificación.
- Evaluación.
- Implementación.

La metodología propuesta consiste de 4 etapas (ver Figura 3), las cuales engloban a las seis primeras etapas genéricas, dejando la última fuera puesto que ésta es la acción de modificar/evaluar el proceso real. Las 4 etapas están apoyadas por una ontología que les permite tener un semántica común.

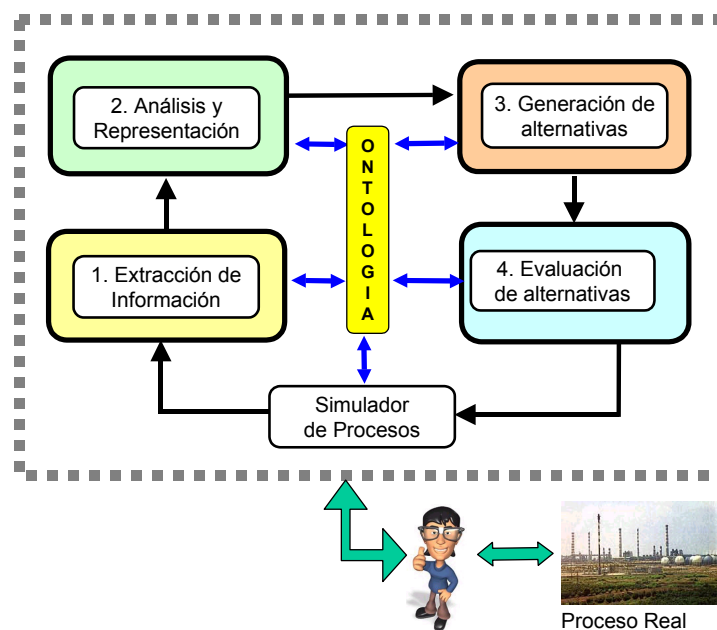


Figura 3. Metodología de retrofit de procesos.

La metodología propuesta está limitada a procesos continuos y en estado estacionario. No están incluidos los procesos en los que haya manejo de sólidos y



electrolitos, así como tampoco lo están los sistemas de control con que cuenten los equipos/dispositivos presentes.

Con el planteamiento de las etapas de la metodología de retrofit, su aplicación y limitaciones, se cubre el primer punto (análisis de requisitos/restricciones) que proponen Han et al. [Han et al., 1996] para el desarrollo de KBS's (sección 2.2).

### **3.1. EXTRACCIÓN DE INFORMACIÓN**

Esta etapa es considerada debido a que se parte del supuesto de que se conoce el diagrama de flujo de proceso (DFP), así como información de la cinética de la reacción (si existe alguna reacción química en el proceso), las características de los equipos y de las corrientes de proceso.

Como puede verse en la Figura 3, el usuario tiene que pasar los datos del proceso real a un simulador de procesos en caso de que no cuente con un fichero informatizado del mismo. A partir de este punto se inicia la etapa de extracción de información.

Las actividades a realizar en esta etapa son:

1. Extraer información predeterminada del fichero informatizado o del simulador de procesos que contenga el DFP. Básicamente la información a extraer se divide en tres:
  - a) Cinética de reacción. Sustancias (reactivo(s) y producto(s)) que intervienen en la reacción, mecanismos de reacción, expresiones de las velocidades de reacción (constantes de equilibrio, energías de activación, etc.), temperatura, presión, conversión y limitaciones termodinámicas.
  - b) Equipos/dispositivos. El número de equipos/dispositivos, su interconexión mediante corrientes de proceso de entrada/salida y sus características (altura, diámetro, longitud, presión, temperatura, etc.).

- c) Corrientes de proceso. Su número/nombre de identificación, temperatura, presión, fracción de vapor, flujo másico/molar, concentración de las especies químicas presentes.

Con ésta actividad se pretende extraer conocimiento acerca de la topología del DFP.

2. Análisis mediante balances de materia y energía de cada uno de los equipos/dispositivos presentes.

Con esta actividad se pretende extraer conocimiento acerca del comportamiento (cómo operan e interactúan) y funcionalidad de los equipos/dispositivos presentes.

3. Generar con base en los dos puntos anteriores un fichero de datos que contenga la estructura del DFP y la funcionalidad de cada unos de sus componentes.

Con la extracción de información se satisface el segundo punto (adquisición de conocimiento) que proponen Han et al. [Han et al., 1996] para el desarrollo de KBS's (sección 2.2).

## **3.2. ANÁLISIS Y REPRESENTACIÓN**

Un proceso puede ser representado a nivel de subsistemas o a nivel de sus componentes elementales. De esta manera, la información puede ser manejada eficientemente de forma separada.

El conocimiento que es extraído del DFP es representado con base en el enfoque de modelado múltiple (ver sección 2.2.1) de la siguiente manera:

## Conocimiento fundamental,

- Estructural, es el conocimiento acerca de la topología del proceso.
- De comportamiento, es el conocimiento de los valores de las variables y parámetros que caracterizan un estado.

## Conocimiento interpretativo.

- Funcional, es el conocimiento acerca del “rol” del equipo/dispositivo dentro del proceso y se puede obtener analizando sus entradas (precondiciones), sus salidas (poscondiciones) y los equipos/dispositivos de su entorno.
- Teleológico, es el conocimiento acerca de las objetivos asignados al equipo/dispositivo por el diseñador y las condiciones de operación.

Con base en el conocimiento funcional de cada uno de los equipos/dispositivos del DFP se pueden identificar secciones funcionales del proceso. Cabe mencionar que una función puede obtenerse mediante la interacción de más de un equipo y un equipo puede realizar más de una función. Esto lleva a clasificar las funciones de la siguiente manera:

- Función general. Es una función genérica que puede obtenerse por varios equipos.
- Función específica. Es la función para la que fue diseñado explícitamente un equipo.

Una vez identificadas las funciones de los equipos/dispositivos (llamados también *Units*) es posible formar grupos (llamados también *Meta-units*) de equipos/dispositivos que denoten secciones o bloques de proceso. Estos grupos cumplen meta-funciones que pueden involucrar varias funciones específicas.

### 3.2.1. GENERACIÓN DE NIVELES DE ABSTRACCIÓN

---

Una vez que se cuente con el conocimiento mediante el modelado del proceso, se procederá a generar los niveles de abstracción con base en:

- Información del usuario. Esta información consta de dos partes: 1) definición de “roles” de las especies químicas presentes y 2) los objetivos por los cuales quiere aplicar retrofit. En el punto 1) el usuario deberá de proporcionar información del “rol” que desempeña una especie química determinada (reactivo, producto principal, subproducto, residuo, solvente, catalizador o inerte). En el punto 2), se podrá seleccionar cual es el objetivo de aplicar el retrofit, siendo posible seleccionar entre:
  - ✓ Incremento en la capacidad de producción.
  - ✓ Incremento de la calidad de los productos.
  - ✓ Reducción del consumo de energía
  - ✓ Reducción de la contaminación.
- Reglas de agrupamiento. Se debe definir cuales serán las posibles formas en que los equipos/dispositivos de proceso generarán nuevas estructuras como resultado de la agrupación de dos o más de ellas. En el Anexo 4 se presentan las reglas de agrupamiento para los equipos y dispositivos de proceso.
- Jerarquía de precedencia. Esta jerarquía de precedencia define el grado de importancia de un equipo/dispositivo dentro de un proceso. Estará fundamentada en la metodología jerárquica propuesta por Douglas [Douglas, 1988] y la precedencia funcional propuesta por Teck Chong [Teck Chong, 1995]. En la sección 4.3.2. se presenta con detalle la jerarquía de precedencia para los equipos y dispositivos de proceso.
- Generación de diagramas de flujo de bloques (DFB). El DFB es un diagrama que contiene una serie de bloques interconectados con

corrientes de entrada y salida e incluye información de las condiciones de operación (temperatura, presión, conversión, etc.). El DFB se construirá con base en la descripción propuesta por Tourton et al. [Tourton et al. 1998, pag. 179-189]. El DFB podrá contener los siguientes bloques genéricos: 1) preparación de las corrientes de entrada a la sección de reacción, 2) sección de reacción, 3) preparación de las corriente de entrada a la sección de separación, 4) sección de separación, 5) reciclaje y 6) control ambiental.

En la figura 4 se presentan los niveles de abstracción que se generarán a partir de un DFP de inicio.

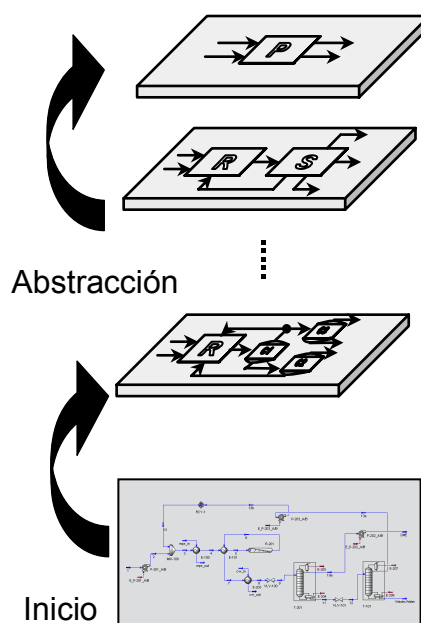


Figura 4. Generación de niveles de abstracción.

Como se mencionó en la sección anterior, los equipos/dispositivos (*Units*) se pueden agrupar en secciones o bloques de proceso denominados *Meta-units*. Las *Meta-units* pueden contener tanto a *Units* como a otras *Meta-units*. Para la generación de las *Meta-units* se consideran principalmente el modelo funcional y teleológico de cada *Unit* y *Meta-unit* involucrada. Como resultado se obtiene una jerarquía de meta-modelos conectados tanto en un mismo nivel (internivel) como en diferentes niveles (intranivel). Un meta-modelo es una colección de modelos

individuales interconectados (estructura, comportamiento, función y teleología) que representa a una *Unit* o *Meta-unit* como se muestra en la figura 5.

El nivel más bajo denotará a los *Units* de proceso que componen el DFP, en los intermedios a las *Units/Meta-units* de cambio de flujo, presión o temperatura y en los niveles más altos a las *Meta-units* de reacción/separación. Este enfoque le permite al ingeniero el manejo de la información y reduce la complejidad del problema para que pueda centrarse en la o las secciones de proceso de interés.

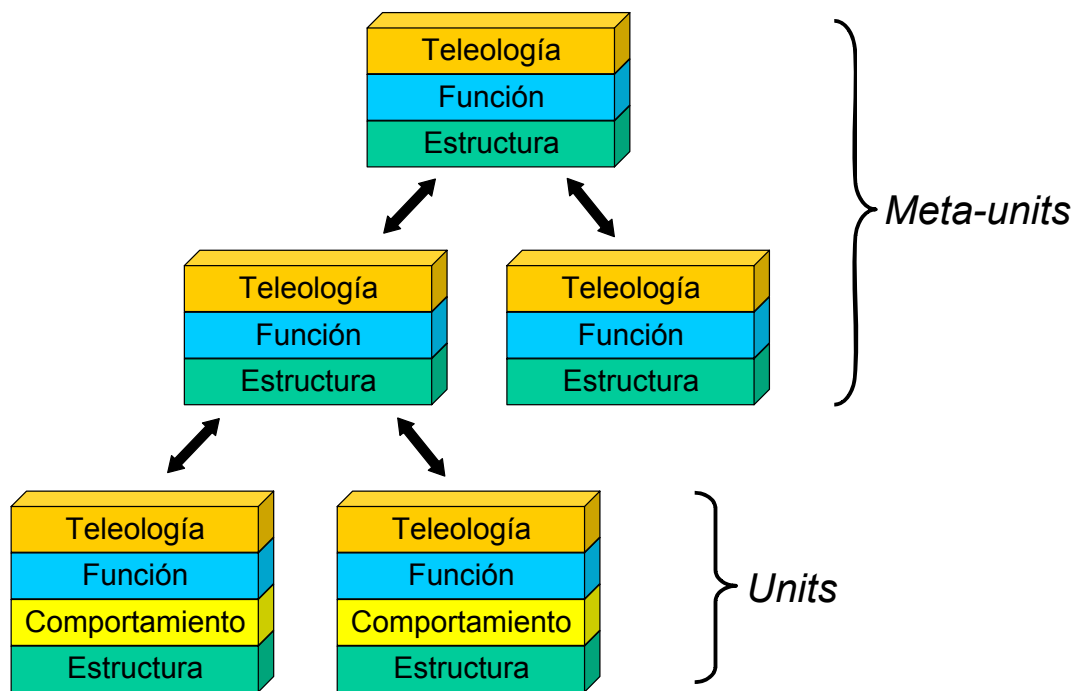


Figura 5. Jerarquía de meta-modelos.

Cabe mencionar que en el proceso de abstracción no se generan modelos abstractos de comportamiento puesto que no se desea simular el proceso en cada nivel de abstracción. La simulación del proceso en diferentes niveles de abstracción es un tema que queda fuera del alcance de la metodología por su dificultad. La idea es contar con una representación del conocimiento cualitativa y lo suficientemente completa para poder aplicar retrofit.

Con esta etapa se satisfacen el tercer (modelado de objetos) y cuarto (modelado de la lógica de inferencia) puntos que proponen Han y col. [Han et al., 1996] para el desarrollo de KBS's (sección 2.2).

### 3.3. GENERACIÓN DE ALTERNATIVAS

---

Una vez realizada las etapas anteriores y para generar alternativas de solución, primero se deben identificar la o las secciones que son susceptibles de cambios o mejoras. Para poder realizar esta actividad se cuenta con los objetivos por los cuales el usuario quiere aplicar retrofit y la descripción del proceso. Con base en los objetivos se pueden especificar criterios de retrofit que permitan de manera más fácil identificar secciones de proceso. Estos criterios deben reunir las siguientes propiedades:

1. Completez. La información de los requerimientos debe expresar de manera específica lo que se desea con base en, al menos, un nivel de abstracción.
2. Consistencia. Los requerimientos deben ser coherentes entre sí.
3. Operatividad. Los requerimientos deben expresar información acorde con las funciones existentes en el nivel de abstracción seleccionado.

El representar adecuadamente los criterios de retrofit asegurará cumplir con los objetivos y acotar el espacio de búsqueda para substituir la sección candidata a modificación o sustitución. La identificación de la o las secciones involucra la justificación de su selección, las restricciones que deben satisfacer, sus modelos (intranivel e internivel) y la información de su entorno (relaciones, pre y postcondiciones).

El espacio de búsqueda se acota mediante la verificación de consistencia entre las características actuales y las características esperadas de la sección. Esta actividad empleará el modelo funcional y teleológico para obtener los propósitos no alcanzados. Además de los modelos es necesario verificar las precondiciones y postcondiciones. La identificación de la o las secciones candidatas será un proceso iterativo hasta encontrar la *Unit* o *Meta-unit* que produzca el efecto deseado.

Una vez identificada la o las secciones susceptibles de cambio o mejora, se considera la búsqueda y adaptación de secciones similares (casos) en otros diagramas de proceso. Se seleccionarán las secciones de proceso que más se aproximen a la sección o secciones deseadas, es decir, que cumplan en lo máximo posible con los nuevos requerimientos de retrofit. Este enfoque basado en casos reduce el tamaño del espacio de búsqueda ya que se realiza sobre información que ya ha sido utilizada previamente [Chandrasekaran, 1990]. Este enfoque inicia con la especificación y planteamiento del problema (caso problema) y se divide en:

- Recuperación de casos. Con base en la sección seleccionada y los requerimientos de retrofit (caso problema) se hace una búsqueda y recuperación de casos (secciones) que más se aproximen a la solución deseada. Las secciones recuperadas se clasifican en un rango cualitativo considerando las diferencias respecto a la sección deseada.
- Adaptación de casos. Las diferencias entre la sección deseada y recuperada(s) deben minimizarse utilizando criterios técnicos/económicos.

El empleo del enfoque basado en casos requiere de una memoria (base) de casos. Esta base de casos estará formada por información de procesos industriales y académicos. Los casos (secciones) serán indexados de acuerdo a sus características funcionales y estarán organizados con base en una jerarquía generalización-especialización.

### **3.4. EVALUACIÓN DE ALTERNATIVAS**

---

La recuperación de un caso (sección) de proceso no garantiza que éste cumpla totalmente con los nuevos requerimientos de proceso. El diagrama de proceso alternativo debe evaluarse para comprobar en qué medida satisface los requerimientos.



La nueva alternativa puede aceptarse aunque sea necesario modificar alguna de sus propiedades. Si por el contrario no cumple adecuadamente con lo esperado, será necesario obtener otra alternativa. Este proceso será iterativo (entre la obtención de alternativas y la evaluación de la misma) hasta que se obtenga un DFP lo mas cercano posible a la solución deseada.

En la evaluación de alternativas es necesaria la ayuda de expertos en el diseño/retrofit de procesos. De momento no está considerada la automatización de esta etapa debido a que la complejidad de los procesos químicos obliga a que los criterios de evaluación y las decisiones de diseño/retrofit queden supeditados al conocimiento y experiencia del ingeniero. Cabe mencionar que la viabilidad de un proceso responde a factores técnicos, de medio ambiente y de seguridad, pero en primera instancia a económicos.

Otro aspecto a considerar es que la información contenida en la alternativa no cubra toda la información en detalle de la estructura y comportamiento del proceso. Cabe recordar que el nivel con mayor grado de granularidad (nivel de abstracción 0) abstrae la información del proceso real proveniente del simulador de procesos. Esta “eliminación” de información es justificable en la medida de que la información relevante para la simulación puede ser irrelevante para su rediseño. En la metodología que se presenta es responsabilidad del ingeniero el interpretar el diagrama de flujo propuesto por el sistema, introducirlo y hacer que converja (resolver los balances de materia y energía) en un simulador para comprobar su comportamiento antes de implementar los cambios en el proceso real.

### **3.5. RESUMEN**

---

En este capítulo se presenta la metodología de retrofit de procesos la cual se basa en las siguientes cuatro etapas generales:

1. Extracción de la información.
2. Análisis y representación.
3. Generación de alternativas de solución.
4. Evaluación de alternativas.

La metodología esta limitada a procesos en estado estacionario y continuos. No se consideran los procesos donde haya manejo de sólidos y electrolitos, así como los sistemas de control con que cuenten los equipos/dispositivos de proceso.

La primer etapa de la metodología comprende la extracción de información específica de cada uno de los equipos/dispositivos que forman el proceso. Esta etapa permite obtener conocimiento estructural (topología) y de comportamiento del proceso. En la segunda etapa se analiza la información y se obtiene el conocimiento interpretativo (funcional y teleológico) del proceso, además se realiza una representación jerárquica con base en el enfoque de modelos múltiples, reglas de agrupamiento y jerarquías de precedencia. En esta etapa se generan niveles de abstracción que junto con los objetivos de retrofit (especificados por el usuario) permiten identificar la o las secciones susceptibles de modificación/cambio. En la tercer etapa se generan alternativas de solución una vez que el usuario haya identificado la o las secciones a explorar. Las alternativas son generadas a partir de la aplicación de un sistema basado en casos. Este sistema considera la búsqueda y adaptación de secciones (casos) similares de otros procesos. Finalmente, en la cuarta etapa se plantea la evaluación de las alternativas generadas. Esta etapa se apoya fuertemente en el conocimiento y la experiencia de que tenga el ingeniero del proceso en cuestión.

En el siguiente capítulo se presenta la semi-automatización de las primeras tres etapas de la metodología mediante el diseño y desarrollo de herramientas informáticas. La última etapa no se tiene considerado automatizarla, sin embargo el ingeniero contará con la información necesaria para poder realizar esta tarea con ayuda de simuladores comerciales o académicos.

## Capítulo 4.

# IMPLEMENTACIÓN DE LA METODOLOGÍA DE RETROFIT

En el presente capítulo se describe el diseño y desarrollo de un sistema basado en conocimiento (SBC) que implementa la metodología de retrofit descrita en el capítulo anterior. El SBC está formado por 4 prototipos informáticos y una ontología que permiten aplicar de forma semiautomática la metodología de retrofit.

El capítulo está dividido en cuatro secciones principales. En la primera se describe la ontología que sirve de base para un lenguaje común entre los prototipos informáticos y el usuario. En la segunda se presenta el prototipo informático llamado HEAD (*Hysys Extraction Data*), el cual permite la extracción de información de procesos simulados con ayuda del simulador comercial Hysys.Plant™. En esta misma sección también se presenta el prototipo denominado ETSEQ-Code Creator, el cual permite generar código informático para programar funciones específicas de extracción de información. En la tercera se presenta AHA! (*Automatic Hierarchical Abstraction tool*) el cual realiza el análisis y la representación de la información proporcionada por HEAD. Uno de los objetivos de AHA! es la generación de niveles de abstracción que permitan al usuario comprender e identificar las secciones de proceso. En la última sección se presenta RETRO (*Reverse Engineering Tool for Retrofit Options*), el cual realiza una búsqueda de secciones susceptibles de mejora con base en información proporcionada por el usuario y en unos criterios funcionales, para posteriormente generar y evaluar alternativas de solución mediante un sistema de razonamiento basado en casos.

## 4.1. ONTOLOGÍA PARA EL RETROFIT DE PROCESOS

---

Como se mencionó en la sección 2.2.1., una ontología puede servir de base para la interoperabilidad entre sistemas informáticos y el usuario. En otras palabras, una ontología es un vocabulario de conceptos, relaciones y axiomas que definen un marco de entendimiento común en un área específica.

Los objetivos por los cuales es deseable contar con una ontología son:

- Contar con un vocabulario común.
- Facilitar el intercambio de información y conocimiento.
- Ayudar a desarrollar e integrar herramientas informáticas.
- Crear prototipos informáticos consistentes.

En la última década se ha incrementado el desarrollo de ontologías para la representación del conocimiento, sin embargo, en Ingeniería Química es un concepto relativamente nuevo. No se ha encontrado en la literatura alguna ontología en el área de diseño/retrofit de procesos, por lo que se tomó la decisión de no iniciar su desarrollo de cero y hacer una extensión (mediante la adición de conceptos) de una ontología llamada SUMO (*Suggested Upper Merged Ontology*). SUMO fue propuesta por *The Standard Upper Ontology Working Group* [SUO-WG, 2005], el cual está avalado por el *Institute of Electrical and Electronics Engineers* y está formado por investigadores que pertenecen a distintas áreas de conocimiento, tales como, Ingeniería, Filosofía y Ciencias Computacionales. SUMO fue seleccionado debido a que proporciona una terminología de propósito general y puede emplearse como base para áreas específicas.

La ontología propuesta se denomina OnREP (*Ontology for Retrofit of Processes*). OnREP extiende conceptos genéricos de SUMO tales como procesos, objetos y conceptos topológicos. Sobre éstos conceptos se han definido conceptos más específicos tales como, procesos fisicoquímicos, procesos termodinámicos, sustancias, “roles” de sustancias, dispositivos (equipos, accesorios y conexiones), unidades de medida, operaciones y relaciones.

El nivel jerárquico mas alto o raíz en SUMO se denomina “Entidad” (*Entity*), la cual se divide en entidades Físicas (*Physical*) y Abstractas (*Abstract*). Las entidades físicas son aquellas que ocupan un lugar espacio-tiempo y las abstractas no. La mayoría de los conceptos que se han adicionado a SUMO son entidades físicas. En la figura 6 se muestra un ejemplo de cómo se han instanciado conceptos en SUMO. Estas instancias corresponden a las instancias Mixer y Mixing.

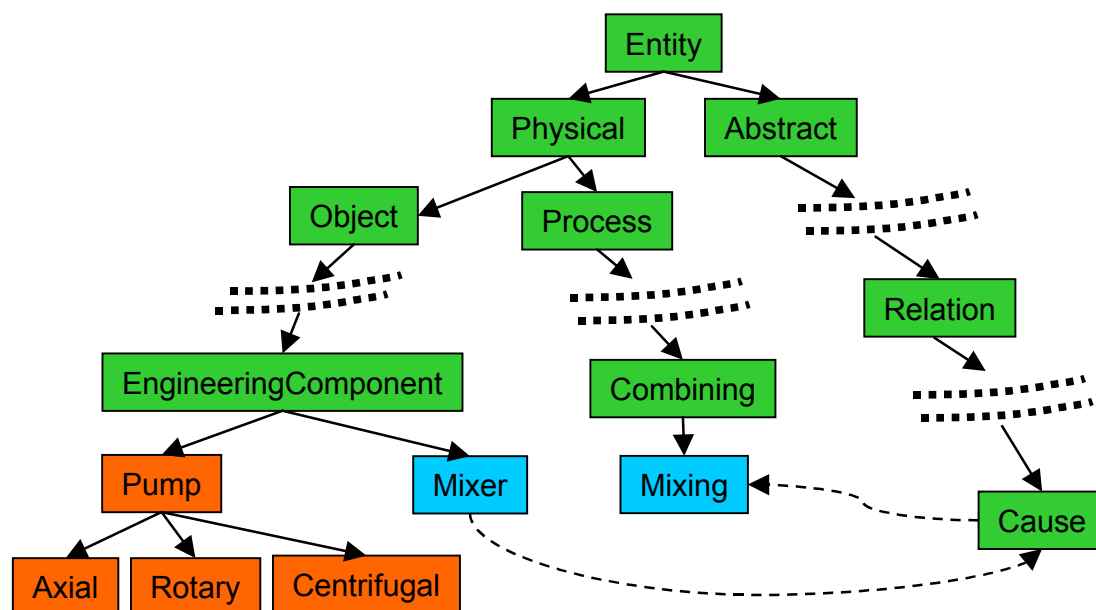


Figura 6. Extensión e instanciación de conceptos en SUMO.

El empleo de una ontología permite clasificar de la misma manera en que se haría utilizando una representación orientada a objetos. En este caso cada concepto pertenece a una clase (e.g., tipo de concepto) y tiene atributos (e.g., sus características) que lo diferencian de los demás. Este enfoque permite generar una jerarquía de conceptos. Por ejemplo, una clase *Dispositivo* puede tener los siguientes campos:

Nombre:

Tipo\_dispositivo:

No\_corrientes\_de\_entrada:

Nombres\_corrientes\_de\_entrada:

Nombres\_de\_equipos\_de\_entrada:

No\_corrientes\_de\_salida:

Nombres\_de\_equipos\_de\_salida:

Nombres\_corrientes\_de\_salida:

Con esta clase es posible representar a todos los equipos y accesorios de una planta química. Por otro lado, a partir de la clase *Dispositivo* es posible definir las clases *Compresor* (para representar a los equipos que se utilizan para incrementar la presión de las corrientes de proceso) y *Calentador* (*idem* que la anterior pero para temperatura) con los siguientes campos adicionales:

*Compresor:*

Fase\_corriente\_de\_entrada  
Presión\_de\_entrada  
Presión\_de\_salida  
Fase\_corriente\_de\_salida  
Delta\_de\_presión  
Potencia

*Calentador:*

Fase\_corriente\_de\_entrada  
Temperatura\_de\_entrada  
Temperatura\_de\_salida  
Fase\_corriente\_de\_salida  
Delta\_de\_temperatura  
Flujo\_de\_energía

Posteriormente a estas clases pueden definirse clases más específicas que permitan representar determinados tipos de compresores o calentadores. De esta manera se forma una jerarquía de conceptos mediante relaciones “padre-hijo” como se muestra en la figura 7.

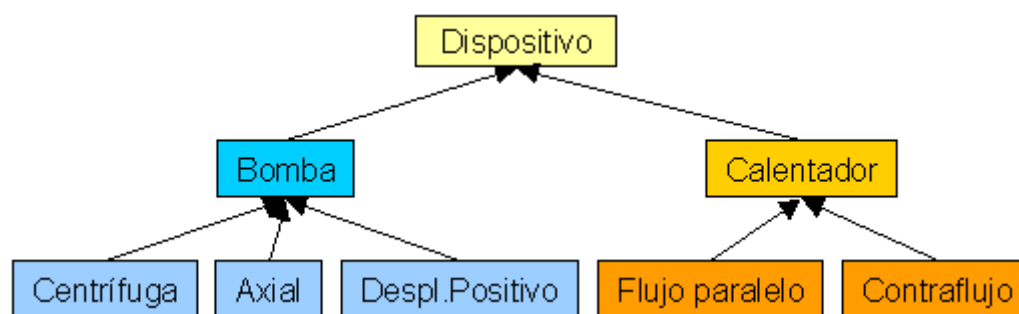


Figura 7. Estructura jerárquica en una ontología.

Los conceptos formalizados en OnREP son cerca de 200, los cuales cubren las áreas de diseño y retrofit de procesos. Cabe mencionar que OnREP es una ontología abierta que permite la adición de nuevos conceptos mediante la codificación de las siguientes propiedades:

**Conceptos.** Se definen de lo general a lo específico, e.g. “*Dispositivo, Compresor y Calentador*”

**Relaciones.** Cómo un concepto se relaciona con otro, e.g. “*Dispositivo-A conectado\_a Dispositivo-B*”

**Funciones.** Cómo puede calcularse el valor de algún campo, e.g. “*Delta\_de\_temperatura = Flujo\_calor /Flujo\_masa \* Cp*”.

**Axiomas.** Algo que es siempre cierto en el dominio, e.g. “*Columna\_destilación: separa una corriente de alimentación en estado líquido y/o vapor por diferencia de volatilidad entre las sustancias presentes*”.

**Instancias.** Es la concepción específica de los elementos físicos o abstractos, e.g. “*Compresor(nombre: K-100; Delta\_de\_presión: 35 kPa; Potencia: 10 hp)*”.

OnREP es una ontología que no puede ni debe compararse aún con otra ontología similar (si es que existe) ya que se ha desarrollado únicamente para emplearla en la metodología de retrofit propuesta. Con la formalización de OnREP se pretende dar pauta para establecer un punto de partida para la estandarización de una terminología común en el diseño/retrofit de procesos. Una de las limitaciones de OnREP es que no incluye conceptos dependientes del tiempo. Esta limitación es debido a que la metodología propuesta solo se aplica a procesos continuos y en estado estacionario.

## 4.2. HEAD

Tal y como se menciona en la sección 3.1, la primer etapa de la metodología de retrofit es la extracción de información específica del proceso. La información es extraída después de que el usuario ha generado un diagrama de flujo de proceso (DFP) del proceso real con ayuda de algún simulador comercial. En la presente investigación el simulador empleado para tal efecto es Hysys.Plant™ versión 2.4.1. [Hyprotech, 2001]. Para realizar la extracción de información de Hysys.Plant™ primero se determinaron las estructuras de datos necesarias para

cada uno de los equipos, dispositivos y corrientes de proceso, así como de las sustancias presentes y las reacciones entre ellas (si es que existen). En el Anexo 1 se presentan las estructuras de datos para los diferentes componentes.

Hysys.Plant™ proporciona una interfaz para la generación de DFP mediante iconos de equipos/accesorios de proceso y su interconexión mediante corrientes de proceso. Previo a la construcción del DFP es necesario definir el modelo termodinámico a utilizar, las especies químicas presentes y si es el caso las reacciones químicas entre ellas. Hysys.Plant™ permite la simulación de procesos en estado estacionario y dinámico, pero no permite exportar directamente la información del DFP generado. La solución para extraer información de ficheros de Hysys.Plant™ es mediante el uso de la capacidad denominada *Programmability* con que cuenta. Para hacer uso de esta capacidad es necesario diseñar y desarrollar *software* en el lenguaje de programación Visual.Basic™. Con base en las estructuras de datos presentadas en el Anexo 1, se diseñó y desarrolló un prototipo llamado HEAD (*Hysys Extraction Data*), el cual se describe en la sección 4.2.2.

#### 4.2.1. ETSEQ-Code Creator

Como se mencionó anteriormente, Hysys.Plant™ no permite extraer información directamente de los componentes de un DFP (llamados objetos). Para resolver éste problema se desarrollo el prototipo llamado ETSEQ-Code Creator, el cual permite buscar y seleccionar información específica de todos los objetos (e.g. equipos, corrientes, modelos termodinámicos, etc.) definidos en Hysys.Plant™ para posteriormente generar el código necesario para programar funciones en Visual.Basic™. ETSEQ-Code Creator permite:

1. Iniciar a trabajar con un fichero nuevo o abrir uno existente. Esta capacidad le permite al usuario recuperar ficheros anteriores en los cuales haya generado código para programar.



2. Visualizar y trabajar con todos los objetos definidos en Hysys.Plant™. Esta propiedad le permite al usuario seleccionar los diferentes tipos de objetos definidos en Hysys.Plant™ de manera que pueda encontrar la información requerida de manera fácil y rápida. Por ejemplo, en la Figura 8 se muestran los objetos definidos como “Operations”.

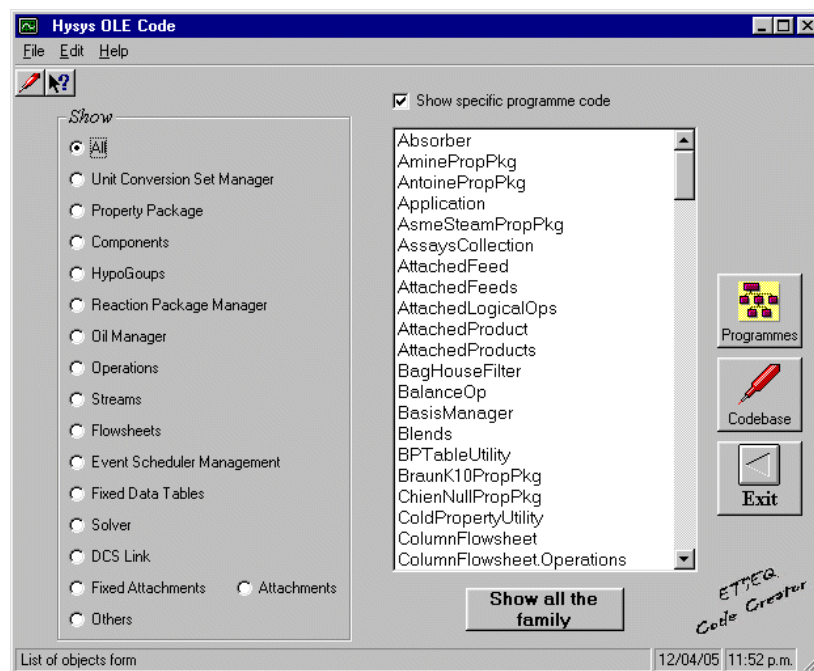


Figura 8. Objetos contenidos dentro de “Operations”.

3. Generar código en Visual.Basic para leer información específica de los objetos de Hysys.Plant™. Por ejemplo, si se desea saber cual es la corriente de proceso conectada al lado coraza de un cambiador de calor, el código que debe adicionarse es:

“Application.SimulationCases.SimulationCase.Flowsheet.Operations.HeatExchanger.ShellSide.Feed”

4. Declarar las variables a utilizar para la lectura de información de Hysys.Plant™. Esta opción permite generar de forma automática el código para declarar las variables requeridas durante la programación en Visual.Basic. Por ejemplo, si se define como nombre de variable “hyReflux” para describir a la corriente de reflujo, el código que se genera es “Dim hyReflux As ProcessStream”, como se muestra en la Figura 9.

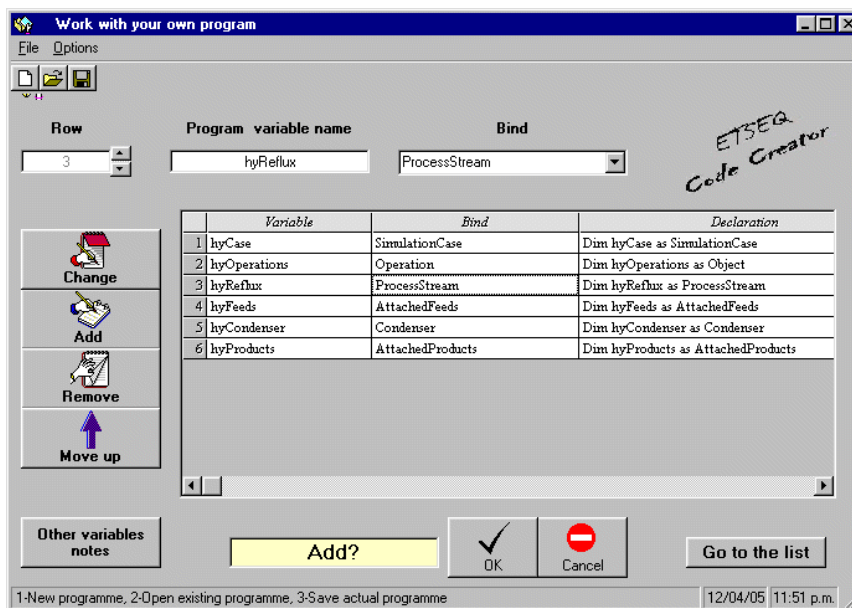


Figura 9. Generación de código para declaración de variables.

5. Modificar o adicionar objetos a la base de datos. Esta arquitectura abierta le permite al prototipo crecer mediante la modificación o adición de nuevos objetos (ver Figura 10).

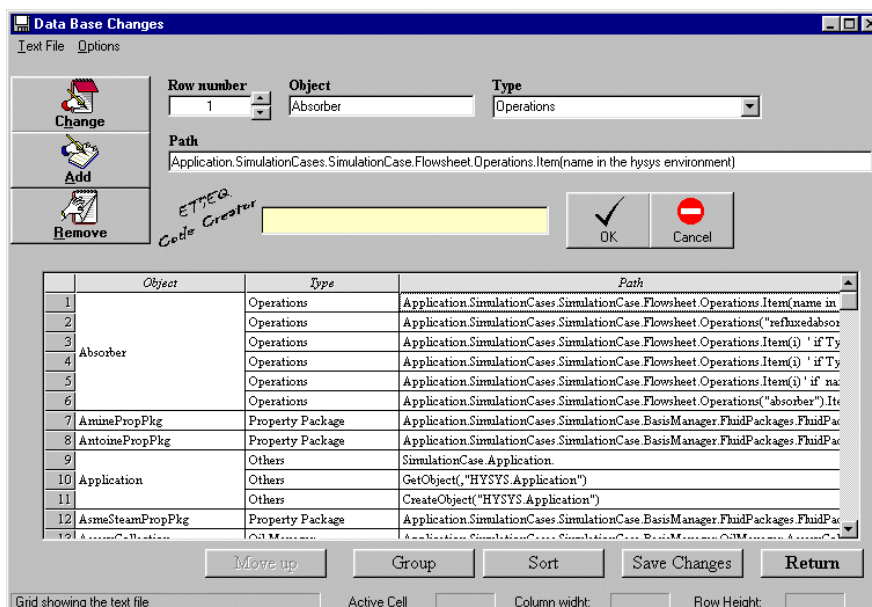


Figura 10. Modificación/adición de objetos en la base de datos de ETSEQ-Code Creator.

Cabe mencionar que los resultados de ETSEQ-Code Creator se presentaron en el primer congreso universitario sobre simulación y aplicación Hyprotech [Fernández

et al., 2001], además de que se publicó un artículo en la revista CACHE News [Fernández et al., 2002].

#### **4.2.2. EXTRACCIÓN Y ANÁLISIS DE INFORMACIÓN**

La extracción de información se enfoca principalmente en los equipos y dispositivos de proceso así como en las corrientes de materia y energía, sin considerar los sistemas e instrumentos de control con que cuenten. La información que se extrae sirve de base para generar los modelos estructurales (topología) y de comportamiento de cada uno de los equipos y dispositivos.

El empleo de un simulador comercial (en este caso Hysys.Plant™) asegura que no existan ambigüedades e inconsistencias de datos (considerando que el usuario converge correctamente la información proporcionada del proceso en el simulador). Al hacer la extracción selectiva de datos se elimina información no necesaria para el retrofit y se reduce la complejidad del proceso al manejar menor cantidad de información. Esta reducción permite un fácil manejo y comprensión del proceso por parte del ingeniero o diseñador.

Para realizar esta actividad, y como se mencionó en las secciones anteriores, se desarrolló el prototipo llamado HEAD (*Hysys Extraction Data*). HEAD es un conjunto de funciones (macros) programadas en Visual.Basic™ que extraen y analizan información de DFP's contenidos en Hysys.Plant™. Los macros están programados para extraer información con base en las estructuras de datos definidas en el Anexo 1. Con esta información se forman los modelos estructurales de los equipos y dispositivos del proceso. El análisis de la información se lleva a cabo mediante balances de materia y energía para generar los modelos de comportamiento. Los macros están insertados en MS-Excel™ gracias al uso de la propiedad de comunicación OLE. Esto proporciona al usuario un ambiente generalmente conocido para analizar, interpretar y exportar datos. En la Figura 11 se presenta la interfaz de usuario de HEAD y en el Anexo 2 se presenta el código fuente.

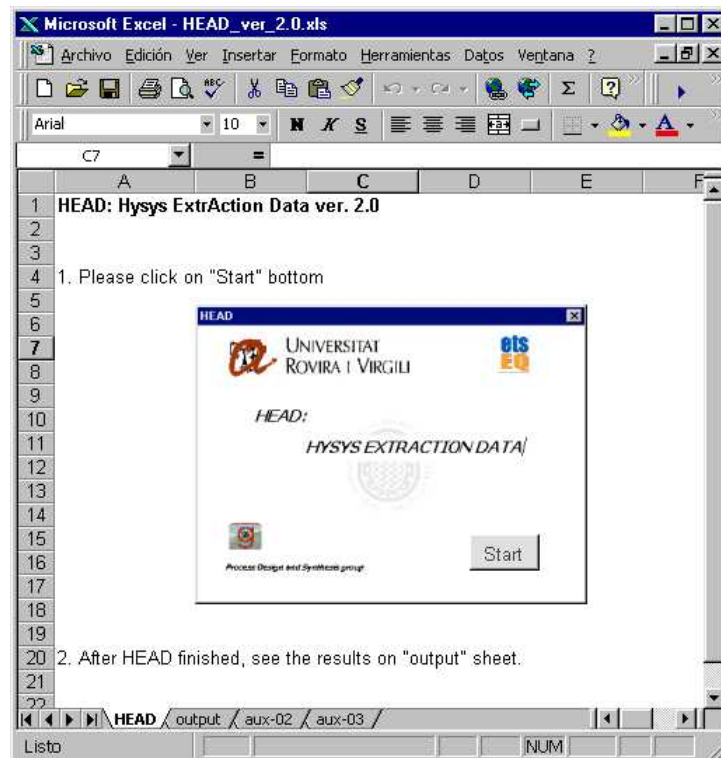


Figura 11. Interfaz de usuario de HEAD.

Para poder ejecutar HEAD es requisito que en el ordenador se encuentre instalado Hysys.Plant™. Una vez que se pulsa el botón “Start”, HEAD permite la selección del fichero de Hysys.Plant™ (ficheros con extensión \*.hsc) que contiene el DFP. Hecha la selección se debe esperar un tiempo hasta que aparezca una ventana con el título “*End of HEAD program*” (e.g. 20 segundos para un proceso con 19 equipos, 27 corrientes de materia, 3 de energía y 10 especies químicas utilizando un ordenador con un procesador Pentium III a 533 MHz).

Finalizada la lectura y análisis de los datos del DFP, se hace un vaciado de datos en la hoja de trabajo de Excel™ llamada “output”. En esta hoja se organiza la información en 5 clases de equipos/dispositivos, además de las corrientes de materia y energía con base en la estructura especificada en la Tabla 2. El usuario debe seleccionar esta hoja y exportar los datos a un archivo con extensión \*.dat mediante la opción “Guardar como” y con el tipo “Texto (delimitado por tabulaciones)”. Este fichero contendrá la información del modelo estructural y de comportamiento del DFP y será utilizado para iniciar la segunda etapa de la metodología.

Tabla 2. Especificación de campos de información para el modelo estructural de equipos, dispositivos y corrientes de proceso.

Clase	Equipo/ Dispositivo	Campos de información
Reacción	Reactor tipo tanque	cstr_reactor, name, no_stream_in, name_stream_in, no_stream_out, name_stream_out, vessel_volume, reaction_type, pressure_drop, liquid_level
	Reactor tubular	tubular_reactor, name, no_stream_in, name_stream_in, no_stream_out, name_stream_out, no_tubes, diameter_tubes, tube_wall_thickness, diameter_particle, solid_density, reaction_type, pressure_drop
Separación	Extractor Líquido-Líquido	liq_liq_extractor, name, no_stream_in, name_stream_in, no_stream_out, name_stream_out, no_stages
	Flash	flash_tank, name, no_stream_in, name_stream_in, no_stream_out, name_stream_out, name_stream_vapour, name_stream_liquid
	Separador de 3 fases	3_phase_separator, name, no_stream_in, name_stream_in, no_stream_out, name_stream_out, name_stream_vapour, name_stream_heavy_liquid
	Columna de Destilación	trayed, name, no_stream_in, name_stream_in, no_stream_out, name_stream_out, no_stages, reflux_ratio
	Absorbedor	absorber, name, no_stream_in, name_stream_in, no_stream_out, name_stream_out, no_stages
Temperatura	Cambiador de calor	heat_exchanger, name, name_tube_side_in, name_tube_side_out, name_shell_side_in, name_shell_side_out, heat_transfer_area, length_tubes, heat_loss
	Calentador	heater, name, name_stream_in, name_stream_out, name_heat_load, pressure_drop, temperature_change
	Enfriador	cooler, name, name_stream_in, name_stream_out, name_heat_load, pressure_drop, temperature_change
	Enfriador de aire	air_cooler, name, name_stream_in, name_stream_out, temperature_air_in, temperature_air_out
Presión	Compresor	compressor, name, name_stream_in, name_stream_out, name_stream_energy, pressure_change
	Bomba	pump, name, name_stream_in, name_stream_out, name_stream_energy, pressure_change
	Expansor	expander, name, name_stream_in, name_stream_out, name_stream_energy, pressure_drop
	Válvula	valve, name, name_stream_in, name_stream_out, pressure_drop
Flujo	Mezcladores	mixer, name, no_stream_in, name_stream_in, name_stream_out
	Divisores	split, name, name_stream_in, no_stream_out, name_stream_out
Corrientes de proceso	Materia	material_stream, name, no_comp, name_comp, vapour_fraction, temperature, pressure, mass_flow, molar_flow, molar_enthalpy, molar_entropy, heat_flow, mass_fraction, molar_fraction
	Energía	energy_stream, name, heat_flow

## 4.3. AHA!

La segunda etapa de la metodología es la de análisis y representación (sección 3.2.). Para realizar esta etapa de forma semi-automática se desarrolló un prototipo denominado AHA! (*Automatic Hierarchical Abstraction tool*). AHA! genera niveles de abstracción de un proceso con base en:

- La información proporcionada por HEAD.
- Una jerarquía de precedencia de equipos y dispositivos.
- Las reglas de agrupamiento.

Los niveles de abstracción le permiten al usuario identificar secciones susceptibles de cambios o mejoras. En las siguientes subsecciones se describen en detalle cada uno de los puntos mencionados anteriormente.

### 4.3.1. REPRESENTACIÓN DEL CONOCIMIENTO

La información proporcionada por HEAD (el modelo estructural y de comportamiento) es analizada en AHA! para generar el modelo funcional y teleológico de los equipos y dispositivos de proceso. Con el modelo estructural se identifica la clase a que pertenece un equipo/dispositivo y con la interpretación de su modelo de comportamiento se genera el modelo funcional. Con ayuda de los modelos estructural y funcional se genera el modelo teleológico, proporcionando una posible explicación del “por qué” está un determinado equipo/dispositivo en el DFP.

#### 4.3.1.1. MODELO FUNCIONAL

Dependiendo del comportamiento y la clase a que pertenece un equipo en particular, se le puede asignar una función general y una específica, tal y como se mencionó en la sección 3.2. La función específica de un equipo/dispositivo es aquella que el diseñador concibe que un determinado equipo/dispositivo

desempeñará dentro de un proceso. De esta manera se pueden agrupar clases de equipos dependiendo de la función específica asociada. A su vez estas funciones específicas pueden agruparse en funciones generales que permitan formar bloques genéricos como los descritos por Turton [Turton et al., 1998].

Con base en las funciones generales y específicas se forma una jerarquía *generalización-especialización* de funciones. Esta jerarquía funcional comprende todos los equipos/dispositivos de cualquier DFP. Cabe mencionar que esta jerarquía se basa y extiende el trabajo realizado por Teck Chong [Teck Chong, 1995]. En la Tabla 3 se presenta esta jerarquía de funciones y en la Figura 12 se presentan algunos iconos de equipos/dispositivos de proceso que representan a las 5 funciones generales.

Tabla 3. Jerarquía de funciones de equipos y dispositivos de proceso.

<b>Función General</b>	<b>Función Específica</b>	<b>Clasificación genérica de equipos</b>
Reacción	Reacción en tanque	Reactores tipo tanque con o sin agitación
	Reacción en tubos	Reactores tubulares
Separación	Filtración	Filtros
	Extracción	Extractor Líquido-Líquido
	Separación en tres fases	Separador de tres fases
	Destilación con una etapa	Flash
	Destilación con múltiples etapas	Columna de destilación
	Absorción	Absorbedor
	Adsorción	Adsorbedor
	Lixiviación	Lixiviador
Cambio de Temperatura	Calentar	Cambiador de calor
		Calentador
	Enfriar	Cambiador de calor
		Enfriador
Cambio de Presión	Aumentar presión	Compresor
		Bomba
	Disminuir presión	Expansor
		Válvula
Cambio de Flujo	Mezclar	Mezcladores
	Dividir	Divisores



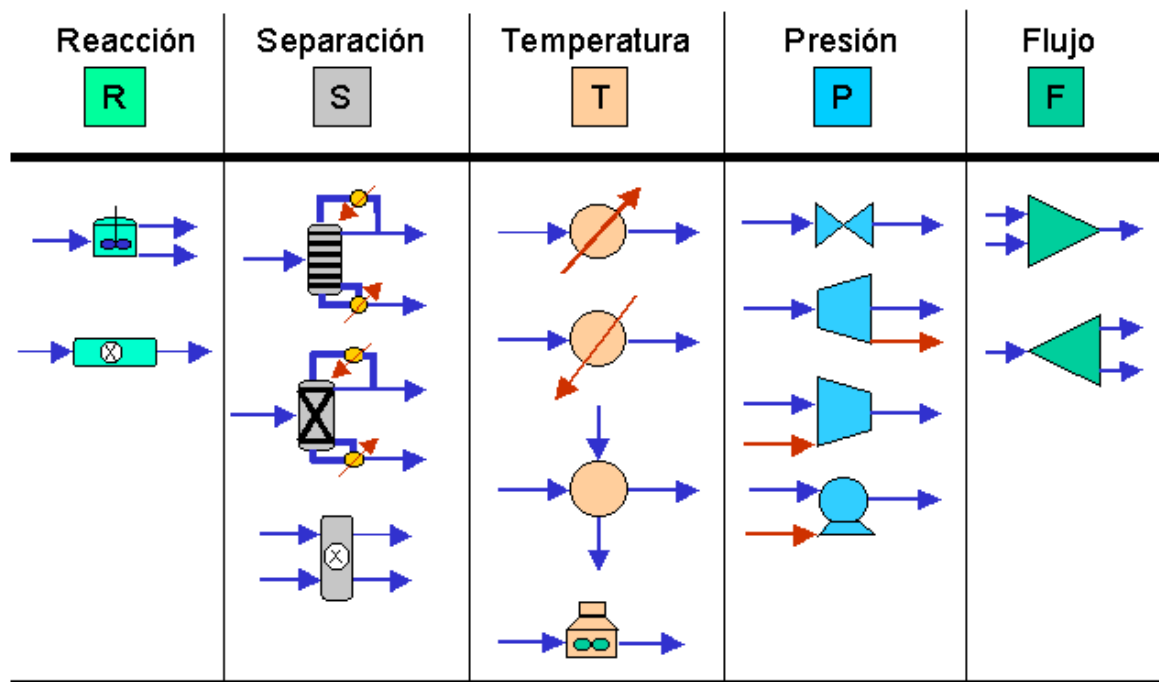


Figura 12. Jerarquía de funciones: iconos de equipos/dispositivos de proceso.

#### 4.3.1.2. MODELO TELEOLÓGICO

El modelo teleológico proporciona una explicación del “por qué” de un equipo/dispositivo dentro de un DFP. Este modelo se construye con base en los modelos estructural, de comportamiento y funcional. Esta dependencia hace que cada equipo y dispositivo requiera de un análisis detallado de los equipos/dispositivos que lo rodean y de las corrientes de procesos que los unen, las condiciones y propiedades de entrada y salida, así como de su función general y específica.

Para facilitar esta tarea se ha definido un conjunto de parámetros que se deben conocer para generar el modelo teleológico de un equipo/dispositivo de proceso. En la Tabla 4 se presentan los parámetros necesarios de los equipos y dispositivos con base en la función jerárquica a la que pertenecen.



Tabla 4. Parámetros para generar el modelo teleológico de equipos y dispositivos de proceso.

Función Jerárquica	Parámetros
Reacción	1. Tipo de reactor. 2. Especies químicas presentes y sus roles. 3. Conversión y/o selectividad. 4. Temperatura, presión, concentración y fracción vaporizada de las corrientes de entrada y salida.
Separación	1. Tipo de sistema de separación. 2. Especies químicas presentes y sus roles. 3. Temperatura, presión, concentración y fracción vaporizada de las corrientes de entrada y salida.
Cambio de Temperatura	1. Tipo de equipo para cambio de temperatura. 2. Especies químicas presentes y sus roles. 3. Temperatura, presión y fracción vaporizada de las corrientes de entrada y salida.
Cambio de Presión	1. Tipo de equipo para cambio de presión. 2. Especies químicas presentes y sus roles. 3. Temperatura, presión y fracción vaporizada de las corrientes de entrada y salida.
Cambio de Flujo	1. Tipo de equipo de flujo. 2. Especies químicas presentes y sus roles. 3. Temperatura, presión y fracción másica/molar de las corrientes de entrada y salida.

Con base en los parámetros de la Tabla 4 y con ayuda de la Tabla 2, se pueden determinar las clases a que pertenecen los equipos/dispositivos de entrada y salida a un determinado equipo o dispositivo (llamados en adelante *Unit* en el caso de los equipos/dispositivos sin abstraer y *Meta-unit* para los que han sido abstraídos, tal y como se describe en la sección 3.2.1.). Cabe mencionar que a las corrientes de entrada o de salida del proceso se les asigna la clase “*Input- I*” y “*Output- O*” respectivamente.

Para generar el modelo teleológico de una *Unit/Meta-unit* se debe determinar el número de clases diferentes que entran y salen. Por ejemplo, si un mezclador tiene conectados dos reactores y una válvula a su entrada y un enfriador a su salida, se considerará que tiene dos clases de entrada (reacción y presión) y una de salida (temperatura). En los casos en que se encuentre una *Unit/Meta-unit* con mas de una corriente de entrada de proceso a su entrada o con mas de una

corriente de salida de proceso a su salida, se considerará como una clase de entrada *Input* o una de salida *Output* respectivamente. Esta simplificación permite que el número de posibles alternativas para generar el modelo teleológico de una *Unit/Meta-unit* se reduzca al considerar sólo 6 tipos de clases conectadas a la entrada (I,R,S,T,P,F) o la salida (O,R,S,T,P,F). En la Figura 13 se presenta el número de alternativas posibles (19845) considerando esta simplificación. Estas alternativas incluyen todas las posibles combinaciones de *Units/Meta-units* dentro de un proceso.

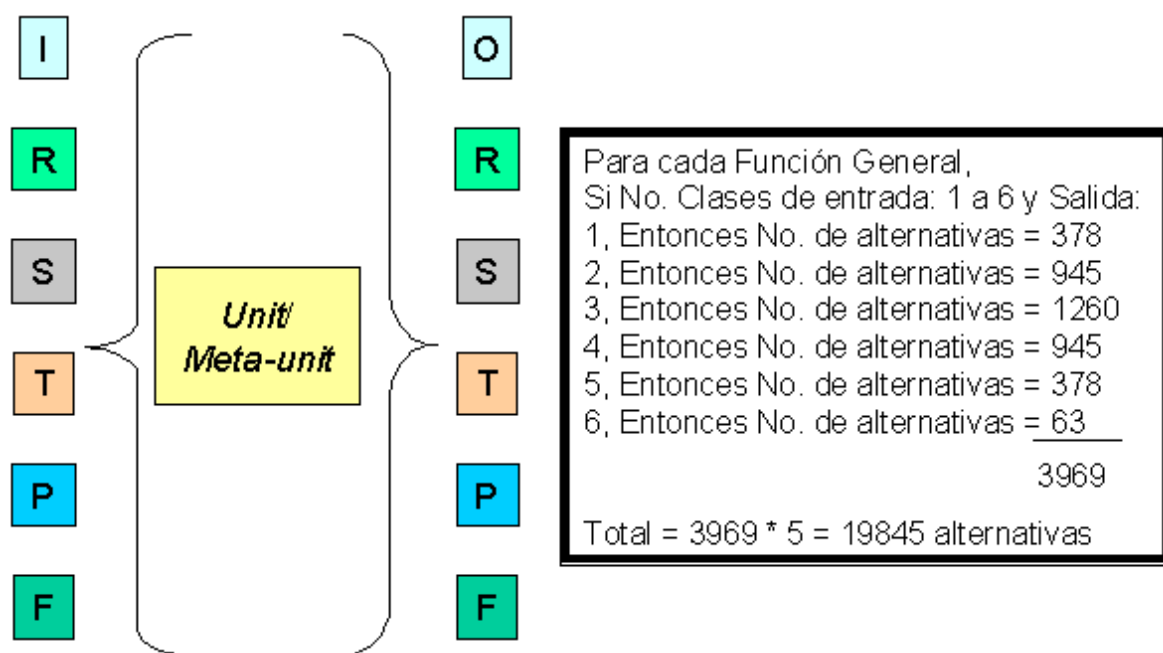


Figura 13. Alternativas para generar el modelo teleológico de *Units/Meta-units*.

Como ejemplo para generar las alternativas de la Figura 13, considere que una determinada *Unit* (U) tiene la clase "I" de entrada y 1 cualquiera de las 6 posibles de salida. Las 6 posibles combinaciones serían:

- I → U → O
- I → U → R
- I → U → S
- I → U → T
- I → U → P
- I → U → F

En la Tabla 5 se muestran las 57 posibles alternativas restantes para cuando la misma *Unit* tiene 2, 3, 4, 5 y 6 tipos de clases diferentes a la salida.

Tabla 5. Combinaciones posibles para una *Unit* (U) con una entrada y de 2 a 6 salidas.

1 entrada y 2 salidas	1 entrada y 3 salidas	1 entrada y 4 salidas	1 entrada y 5 salidas	1 entrada y 6 salidas
I → U → O,R	I → U → O,R,S	I → U → O,R,S,T	I → U → O,R,S,T,P	I → U → O,R,S,T,P,F
I → U → O,S	I → U → O,R,T	I → U → O,R,S,P	I → U → O,R,S,T,F	
I → U → O,T	I → U → O,R,P	I → U → O,R,S,F	I → U → O,R,S,P,F	
I → U → O,P	I → U → O,R,F	I → U → O,R,T,P	I → U → O,R,T,P,F	
I → U → O,F	I → U → O,S,T	I → U → O,R,T,F	I → U → O,S,T,P,F	
I → U → R,S	I → U → O,S,P	I → U → O,R,P,F	I → U → R,S,T,P,F	
I → U → R,T	I → U → O,S,F	I → U → O,S,T,P		
I → U → R,P	I → U → O,T,P	I → U → O,S,T,F		
I → U → R,F	I → U → O,T,F	I → U → O,S,P,F		
I → U → S,T	I → U → O,P,F	I → U → O,T,P,F		
I → U → S,P	I → U → R,S,T	I → U → R,S,T,P		
I → U → S,F	I → U → R,S,P	I → U → R,S,T,F		
I → U → T,P	I → U → R,S,F	I → U → R,S,P,F		
I → U → T,F	I → U → R,T,P	I → U → R,T,P,F		
I → U → P,F	I → U → R,T,F	I → U → S,T,P,F		
	I → U → R,P,F			
	I → U → S,T,P			
	I → U → S,T,F			
	I → U → S,P,F			
	I → U → T,P,F			
NUMERO DE COMBINACIONES				
15	20	15	6	1

De esta forma se obtienen las 63 posibles combinaciones para un tipo de clase de entrada. El número de combinaciones para los 6 diferentes tipos de clase para cuando solo hay una de entrada sería:  $63 * 6 = 378$ , el cual corresponde con el

que se muestra en la Figura 13. De esta forma se obtienen las 3969 posibles combinaciones para cuando son 2, 3, 4, 5 y 6 tipos diferentes de clases de entrada para una determinada *Unit*. Puesto que hemos considerado 5 tipos diferentes de *Units/Meta-units*, obtenemos las 19845 (al multiplicar 3969 por 5) posibles combinaciones para un proceso químico.

Ahora bien, el problema para generar el modelo teleológico se complica puesto que además de depender de las clases de entrada y salida, depende de las condiciones de operación de la *Unit/Meta-unit*. Para resolver este problema se ha generado un sistema de reglas de producción que permite con base en estructuras semánticas (*frames*) y un conjunto de palabras claves (*keywords*) generar el modelo teleológico de cualquier *Unit* o *Meta-unit*. Las palabras claves son calculadas o inferidas mediante la información contenida en el modelo estructural. La palabras claves están contenidas dentro de las estructuras semánticas y una vez evaluadas permiten individualizar el modelo teleológico. En la Figura 14 se presenta el esquema general del sistema de reglas de producción y en el Anexo 3 se presenta con detalle el desarrollado del mismo para cada una de las 5 clases de la Tabla 3.

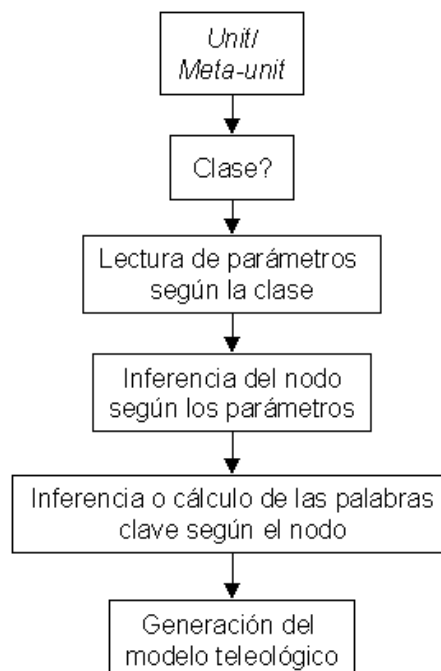


Figura 14. Diagrama general del sistema de reglas de producción para generar el modelo teleológico de una *Unit* o *Meta-unit*.

### 4.3.2. GENERACIÓN DE NIVELES DE ABSTRACCIÓN

Como se mencionó en la sección 2.1, el objetivo de la metodología de Douglas [Douglas, 1988] es encontrar una alternativa de proceso a partir de información inicial y de la aplicación de 5 decisiones jerárquicas. La idea de la metodología propuesta en el Capítulo 3 es aplicar de forma inversa la metodología de Douglas, es decir, partir de una alternativa de proceso (proceso existente) para obtener el conocimiento de cómo pudo ser concebido mediante la abstracción del mismo. Para la generación de niveles de abstracción se definieron las reglas de agrupamiento (ver anexo 4) y la jerarquía de precedencia.

Como se mencionó en la sección 3.2.1. las reglas de agrupamiento definen las posibles formas en que las *Units* generarán nuevas estructuras (*Meta-units*) como resultado de la agrupación de dos o más de ellas. En la Figura 15 se muestran las 31 posibles agrupaciones (bloques) funcionales que se pueden formar a partir de las 5 funciones jerárquicas de la Tabla 3.

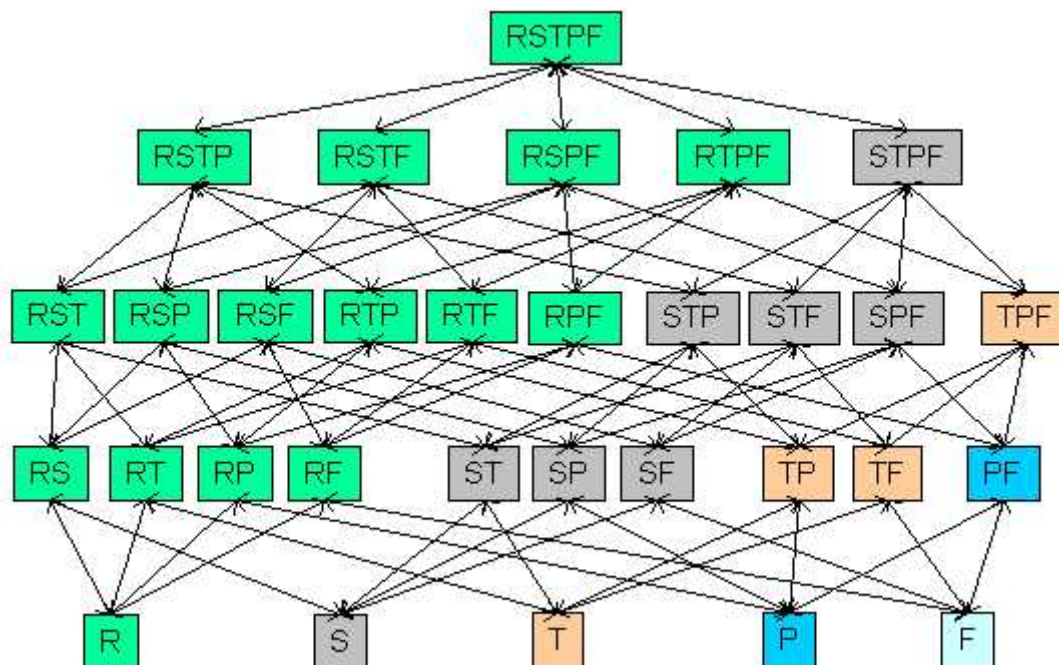


Figura 15. Generación de bloques funcionales a partir de una jerarquía de funciones.

La jerarquía de precedencia es el grado de importancia de la *Unit* o *Meta-unit* en el proceso y define el orden en el cual las *Units/Meta-units* deben ser abstraídas. La jerarquía de precedencia esta definida con base en la función general (ver Tabla 3) y se muestra en la Figura 16.

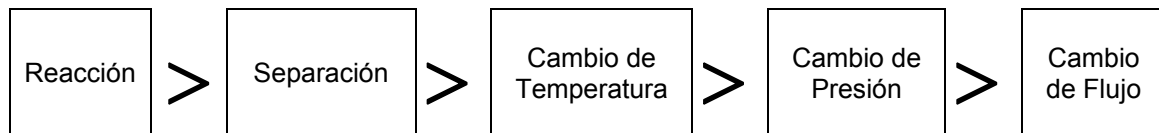


Figura 16. Jerarquía de precedencia.

Las *Units* del proceso a analizar que estén dentro de “Reacción” tendrán la mayor jerarquía posible, continuando con las que estén dentro de “Separación” y así sucesivamente. Esto significa que para la generación de niveles de abstracción las *Units* que estén dentro de “Cambio de Flujo” serán las primeras en abstraerse y las de “Reacción” las últimas.

Las abstracciones se realizan mediante la utilización de un sistema basado en reglas combinando las reglas de agrupamiento y la jerarquía de precedencia. De esta forma se abstraen una a una las *Units* que pertenecen a una jerarquía menor. En las abstracciones se van eliminando detalles de las *Units* abstraídas. Durante estas abstracciones se generan las *Meta-units*. En esencia una *Meta-unit* es una *Unit* con información básica que no contiene información detallada de las *Units* involucradas. Puesto que las *Meta-units* heredan conocimiento (información) de la *Unit*, éstas también pueden originar otras *Meta-units* en un siguiente nivel de abstracción.

Las *Meta-units* combinan la información de una *Unit* con otra, manteniendo la independencia de sus modelos. El conocimiento funcional de las *Meta-units* predomina sobre los otros conocimientos, ya que con base en éste, se identifica la sección del proceso que representa dicha *Meta-unit*. Aunque los conocimientos estructural, funcional y teleológico de una *Meta-unit* son diferentes de las *Units* que abstraen, ésta *Meta-unit* conserva la misma funcionalidad de dichas *Units*, es decir, representa la misma sección del proceso en el nivel más detallado.

Para ejemplificar el caso más sencillo de la generación de una *Meta-unit* consideremos las *Units Unit A* y *Unit B*, siendo *Unit A* de mayor jerarquía de precedencia que *Unit B*. Están conectadas por la corriente 3, además de que la *Unit A* tiene como corrientes de entrada la número 1 y 2, y la *Unit B* tiene de

salida a la 4 y 5. La abstracción de ambas generará una *Meta-unit C*. Esta *Meta-unit* se origina a partir de *Unit A*, es decir, contiene, además de la información de *Unit A*, información de la *Unit B*. Ambas funcionalidades coexisten, pero predomina la función de la *Unit A*. En el nivel más detallado se pasaría de un nivel de abstracción a otro como se muestra en la Figura 17.

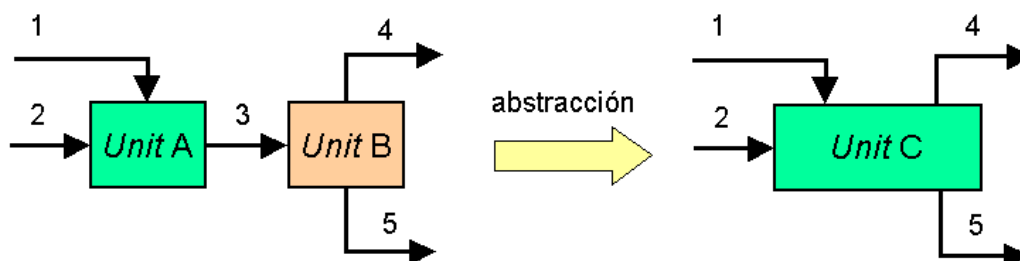


Figura 17. Generación de Meta-units.

En el caso de las *Units* de separación y reacción, que son los dispositivos que se agrupan al final por tener mayor jerarquía de precedencia, se distinguen básicamente dos casos:

- Si no hay reactores, las *Units* de separación se agrupan entre ellas y se obtiene la *Meta-unit\_Separación* final.
- Si hay reactores, las *Units* de separación se agrupan del modo anterior antes de agruparse a los sistemas de reacción.

Si una *Unit* debe agruparse a la *Unit* que está a su salida y tiene más de una *Unit/Meta-Unit* de salida, se identifica a la *Unit* de salida que tenga mayor jerarquía respecto a la *Unit* en cuestión. Lo mismo sucede si la *Unit* ha de agruparse con la *Unit* que esté a su entrada y haya más de una *Unit* de entrada. Por ejemplo, en la Figura 18 al obtener la *Meta-unit E*, visualmente no se distingue si *Unit C* y *Unit D* estaban conectados a *Unit A* o *Unit B*, pero internamente (en el modelo estructural) se lleva un registro de todo lo sucedido. Dentro de la información que se almacena en cada agrupación está:

- 1) Las *Units* que estaban conectadas a la entrada y salida.
- 2) Las *Units* que forman una *Meta-unit* en los nivel de abstracción mayor y menor.
- 3) Las *Units* que han sido abstraídas por una *Meta-unit*.
- 4) Las nuevas corrientes y equipos de entrada y salida.

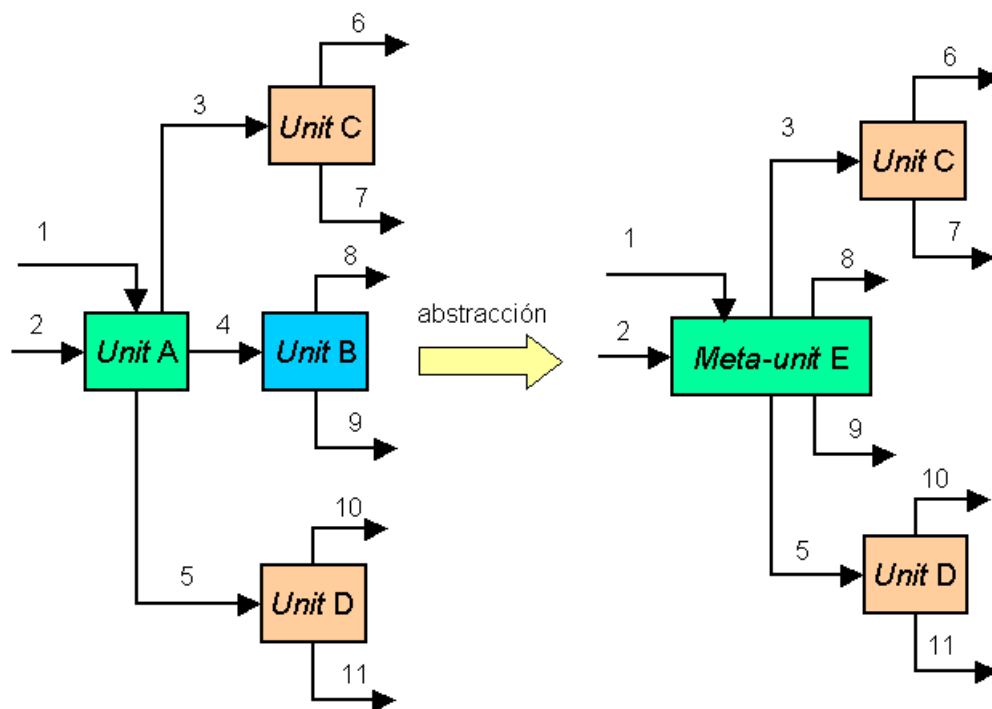


Figura 18. Agrupación con diferentes jerarquías de precedencia.

Otra situación que puede presentarse es cuando dos *Units* tienen la misma jerarquía de separación o reacción y tienen que abstraerse. En este caso pueden agruparse entre sí y generar una *Meta-unit*. Por ejemplo, dadas dos *Units*, *Unit A* y *Unit B* de alguna de las funciones anteriores, pueden agruparse de dos formas: *Unit A* se agrupa con *Unit B* que está a su entrada ó *Unit B* se agrupa con *Unit A* que está a su salida. En principio resultaría una *Meta-unit* con la misma información, a excepción de la *Unit* que origina a dicha *Meta-unit*. En cuanto a funcionalidad no habría ningún problema, puesto que ambas tienen la misma función.

En todos los casos finalmente se obtiene un bloque con entradas y salidas como el que se tenía al iniciar el diseño del proceso y que Douglas representa como una caja “negra” con entradas y salidas (ver Figura 1). Este bloque contiene de manera abstracta todas las funciones, *Units* y corrientes que componen al proceso, además del historial de cómo se fueron agrupando las *Unit*, las corrientes y la posible explicación del proceso.



## 4.4. RETRO

---

La tercer etapa de la metodología es la generación de alternativas (sección 3.3). Para realizar esta etapa de forma semi-automática se desarrolló un prototipo denominado RETRO (*Reverse Engineering Tool for Retrofit Options*). RETRO genera alternativas mediante :

- La identificación de secciones susceptibles de cambio.
- La recuperación de secciones de procesos.
- La adaptación de las secciones recuperadas.

Para el primer punto se ha desarrollado un algoritmo que permite la identificación de secciones de proceso con base en información proporcionada por el usuario y unos criterios funcionales. Los últimos dos puntos han sido cubiertos mediante el diseño y desarrollo de un sistema de razonamiento basado en casos. En las siguientes subsecciones se describen en detalle cada uno de los puntos mencionados anteriormente.

### 4.4.1. IDENTIFICACIÓN DE SECCIONES SUSCEPTIBLES DE RETROFIT

---

Para la identificación de secciones (bloques) de proceso susceptibles de mejoras o cambios se realiza un búsqueda de las *Units/Meta-units* con base en los objetivos de retrofit proporcionados por el usuario (ver sección 3.2.1.) y los siguientes criterios funcionales (CF):

- CF-1. Reacción. *Units/Meta-units* donde ocurre transformación de la materia debido a una reacción química (por ejemplo, reactores tipo tanque agitado, tubulares, etc.).
- CF-2. Separación. *Units/Meta-units* donde se separa y concentra la materia sin reacción química (por ejemplo, columnas de destilación, absorción, etc.).

- CF-3. Temperatura. *Units/Meta-units* donde ocurren principalmente cambios de temperatura en la materia (por ejemplo, cambiadores de calor, enfriadores, etc.).
- CF-4. Presión. *Units/Meta-units* donde ocurren principalmente cambios de presión en la materia (por ejemplo, compresores, bombas, etc.).
- CF-5. Flujo. *Units/Meta-units* donde se mezcla o divide la materia (por ejemplo, mezcladores y divisores).

La identificación se realiza mediante una verificación de consistencia. De esta manera se buscan e identifican las *Units/Meta-units* que satisfacen un determinado criterio funcional con base en sus modelos funcional y teleológico, además de los valores de las variables de proceso (presión, temperatura, concentración, flujo, etc.). Como resultado se obtiene una lista de *Units/Meta-units* que pueden ser consideradas por el usuario como punto de inicio para generar una alternativa. Una vez seleccionada la *Unit/Meta-unit* se identifican sus correspondientes *Units/Meta-units* “causa” y “consecuencia”. La *Unit/Meta-unit* “causa” es aquella que provee las condiciones de operación de las variables de proceso de la *Unit/Meta-unit* de interés, mientras que la *Unit/Meta-unit* “consecuencia” es aquella que se ve afectada por la *Unit/Meta-unit* de interés. Ambas *Units/Meta-units* (causa y consecuencia) son importantes al momento de realizar la adaptación y evaluación de una alternativa.

#### 4.4.2. RAZONAMIENTO BASADO EN CASOS

---

Con la *Unit/Meta-unit* seleccionada se da paso a la aplicación del sistema de razonamiento basado en casos (CBR, *Case-Based Reasoning*) para la generación de alternativas de solución. Como se mencionó en la sección 3.3, el sistema CBR se divide en recuperación y adaptación de casos. Cabe mencionar que sólo son de interés las dos primeras etapas de las cuatro que comúnmente forman un sistema CBR. La tercer etapa de un sistema CBR es la de “revisión”, la cual esta ligada con la etapa 4 (evaluación de alternativas) de la metodología de retrofit propuesta (ver Figura 3). La última etapa de un sistema CBR es la de

retención o almacenamiento del conocimiento generado. Esta etapa almacena un caso después de que ha sido adaptado y probado como una solución válida al problema inicialmente planteado. Esta etapa se realizará posteriormente a la evaluación de la alternativa por parte del usuario.

#### 4.4.2.1. INDEXADO DE CASOS

Previo a las actividades de recuperación y adaptación, el sistema CBR requiere de una memoria (base) de casos. La base de casos debe poblarse con información de procesos que han sido diseñados y validados previamente. Para poblar la base de casos, los casos se indexan de acuerdo a sus características funcionales formando una jerarquía generalización-especialización.

Cada proceso químico puede proveer información de los equipos y dispositivos que lo forman, así como de sus propiedades. Estos a su vez pueden ser representados como casos para poblar la base de casos. Se logró conseguir información de 50 procesos químicos, los cuales han sido simulados con ayuda de Hysys.Plant™ y se han generado sus representaciones en niveles de abstracción con ayuda de HEAD y AHA!. Cada *Unit* o *Meta-unit* identificada o generada constituye un caso base o abstracto respectivamente.

Desde un punto de vista general los casos tienen características comunes, tales como variables de proceso, corrientes de entrada y salida, nivel de abstracción, etc. Desde un punto de vista específico las características de un caso dependen del tipo de *Unit/Meta-unit* que represente. Por ejemplo, las *Units* de cambio de presión (compresores, bombas, etc.) tienen como característica común el aumento/disminución de la presión, la presión y la fase de entrada y de salida, etc. Estas características son las que permiten indexar los casos con base en sus funciones y formar una jerarquía generalización-especialización. Esta jerarquía consta de 5 grupos principales: 1) reacción, 2) separación, 3) cambio de temperatura, 4) cambio de presión y 5) cambio de flujo.

Los casos son representados como “objetos”, es decir, se consideran como una entidad la cual esta definida por un conjunto de atributos. La estructura básica de un caso es:

- Identificación del proceso.
- Función general.
- Función específica.
- Nivel de abstracción.
- Padres.
- Hijos.
- Corrientes de entrada.
- Corrientes de salida.
- Sustancias químicas.
- Rol de las sustancias químicas.
- Objetivos.

El atributo “padre” e “hijo” de un determinado caso se refiere a la *Unit/Meta-unit* que ha generado o la *Unit/Meta-unit* que lo generó. Dadas las *Units/Meta-units* A, B, C, D y E (ver Figura 19), se puede decir que A y B son “padres” de C, y C y D a su vez son “padres” de E. Esto implica que C es “hijo” de A y B y que E es “hijo” de C y D. Para el caso de A, B y D el atributo “padres” quedaría vacío, mientras que para E el atributo que quedaría vacío sería el de “hijos”. Sólo en el caso de C quedarían llenos los atributos “padres” (A y B) e “hijos” (E).

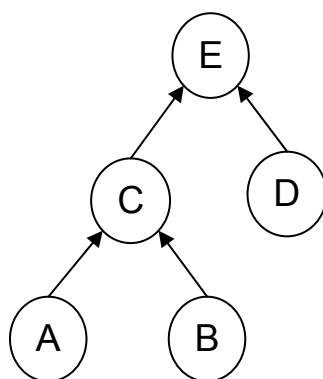


Figura 19. Relaciones padre-hijo en un procedimiento de abstracción.

#### 4.4.2.2. RECUPERACIÓN DE CASOS

Como se mencionó en la sección 4.4.1, el usuario debe seleccionar una *Unit/ Meta-unit* y el nivel de abstracción (caso problema) para iniciar la recuperación de casos. La recuperación consiste en obtener el máximo grado de similitud del caso “problema” con los casos de la base de casos.

El problema que se presenta para obtener el grado de similitud es qué y cómo comparar para determinar si un caso es similar a otro. Existen varias formulas que calculan la similitud con base en la distancia cuantitativa con respecto a una escala, la posición en una estructura jerárquica o por la comparación cualitativa de definiciones (determinación de la similitud de valores tales como alto, medio, bajo, etc.) [Avramenko y Kraslawski, 2003]. Para calcular la similitud se implementó un “motor” de similitudes que evalúa una similitud global en función de similitudes locales.

Para la similitud global se utiliza un método Euclidiano. Sean  $a$  y  $b$  casos, la similitud global entre  $a$  y  $b$  está definida por la Ecuación 1.

$$\text{Similitud Global } (a, b) = \sqrt{\frac{1}{p} \sum_{i=1}^p [\text{sim}_i(a_i, b_i)]^2} \quad \text{Ec. (1)}$$

Donde  $a$  y  $b$  son similitudes locales y  $p$  el número de similitudes locales empleadas.

Las similitudes locales se calculan con base en cada una de los atributos de los casos. En general, se emplean tres tipos de similitudes locales:

1.- Numérica (similitud cuantitativa). Esto es debido a que la mayoría de los parámetros en ingeniería química son por naturaleza cuantitativos (por ejemplo, temperatura, presión, composición, etc.). Sean  $a$  y  $b$  números, la similitud local entre  $a$  y  $b$  esta dada por la Ecuación 2.

$$\text{Similitud numérica } (a, b) = 1 - \frac{|a - b|}{\text{range}} \quad \text{Ec. (2)}$$

Donde *range* es el valor absoluto de la diferencia entre el límite superior e inferior de posibles valores de *a* y *b*.

En el caso de la temperatura y la presión es difícil establecer un rango de posibles valores, de modo que se han definido unos rangos en función de las condiciones de operación sugeridas por Douglas [Douglas, 1988, pag. 120] y Turton [Turton et al., 1998, pag. 207-231]. En la Tabla 6 se muestran estos rangos.

Tabla 6. Rangos de operación para temperatura y presión.

Rango	Temperatura (°C)	Presión (kPa)
Muy bajo	Menor de -48	0 a 100
Bajo	-48 a 25	100 a 400
Medio	25 a 150	400 a 800
Alto	150 a 250	800 a 1000
Muy alto	Mayor de 250	Mayor de 1000

2. Simbólica. En general, una oración puede estar formada por un conjunto de palabras o símbolos. El orden de los elementos es importante y pueden ser considerados como una secuencia de símbolos (por ejemplo, objetivos, nivel funcional, “rol” de la especie química, etc.). Sea *a* y *b* conjuntos de oraciones con una semántica definida, la similitud local entre *a* y *b* esta dada por la Ecuación 3.

$$\text{Similitud simbólica } (a, b) = \frac{\text{card}(a \cup b) - \text{card}(a \cap b)}{\text{max}(a \cup b)} \quad \text{Ec. (3)}$$

Donde “*card*” es la cardinalidad (tamaño), “ $\cup$ ” es la unión y “ $\cap$ ” la intersección de los conjuntos *a* y *b*.

3. Jerárquica (taxonómica). Cuando se abstraen (agrupan) las *Units* para formar *Meta-units* se forma estructuras jerárquicas. Cada *Meta-unit* formada corresponde a un nodo en la estructura jerárquica. La medida de similitud entre dos nodos se

basa en la distancia respecto a un nodo común dentro del árbol jerárquico. Mientras más cerca estén del nodo común dos nodos, mas similares serán entre sí. Sean  $a$  y  $b$  árboles jerárquicos, la similitud entre  $a$  y  $b$  esta dada por la Ecuación 4.

$$\text{Similitud Jerárquica (a, b)} = \frac{h(\text{nodocomun}(a, b))}{\min(h(a), h(b))} \quad \text{Ec. (4)}$$

Donde  $h$  es la altura (número de niveles) del árbol, *nodocomun* es el nodo común (si es que existe) y *min* es el valor mínimo.

Las similitudes locales se calculan en dos pasos. En el primero se obtienen las similitudes numéricas y simbólicas del caso “problema” respecto de los casos de la base de casos. En este primer paso destaca el uso del modelo funcional (función de la *Unit/ Meta-unit*, función de entrada, función de salida, etc.) y teleológico (objetivo, variables de proceso involucradas, *Units/ Meta-units* vecinas, sus atributos, etc.). En este primer paso lo que se pretende es hacer una búsqueda y recuperación de casos que tengan al menos la función del caso “problema”, además de una intención u objetivos lo mas similar posible.

En el segundo paso, se calcula la similitud jerárquica. Esto es posible debido a que cuando se crean *Meta-units* se generan niveles de abstracción y esto permite formar árboles jerárquicos. Idealmente se debería recuperar una *Meta-unit* que contuviera *Units/ Meta-units* similares y con los mismos niveles de abstracción. Por ejemplo, en la Figura 20 se representan 3 árboles jerárquicos que describen en el último nivel de abstracción secciones de reacción. Cada nodo “hijo” tiene una letra (R para reacción, S para separación, T para temperatura y P para presión) que representa cual es la mayor jerarquía funcional al momento de abstraer a los dos nodos “padres”. Si la opción (a) fuera el caso “problema” y (b) y (c) los casos recuperados de la base de casos, la similitud entra (a) y (b) sería mayor que entre (a) y (c). Esto es debido a que dos *Meta-units* son mas similares si tienen estructuras (nodos y niveles) similares, además de si los nodos “hijos” tienen nodos “padres” similares (nodos con la misma función).

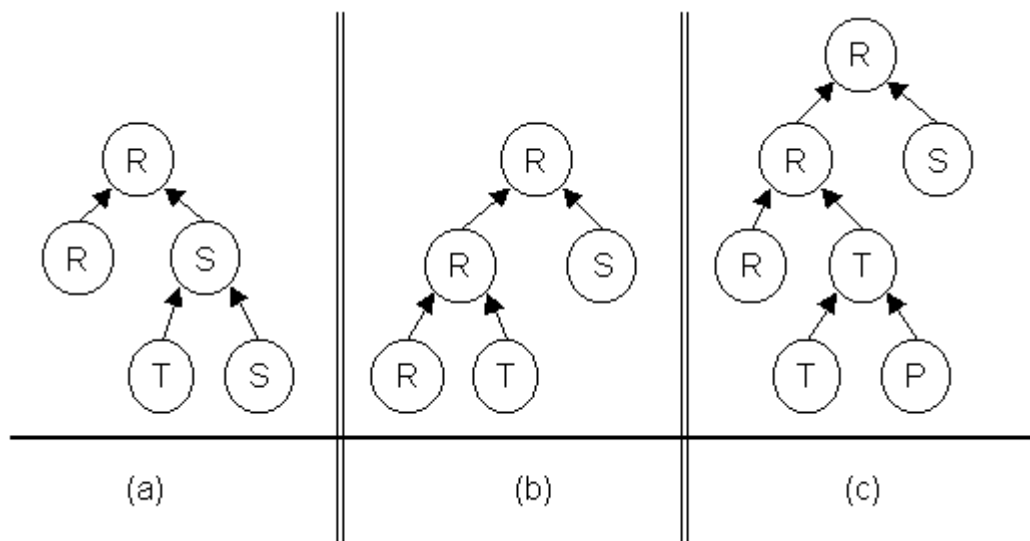


Figura 20. Representación de árboles jerárquicos para *Meta-units* de reacción.

De esta manera se calculan las similitudes locales entre el caso “problema” y los de la base de casos para posteriormente calcular la similitud global. El motor de similitudes recupera un grupo de casos similares al caso “problema” y los lista en función de la mayor similitud global.

#### 4.4.3. EVALUACIÓN DE ALTERNATIVAS DE SOLUCIÓN

La última etapa de la metodología es la evaluación de las alternativas generadas (sección 3.4). Para realizar esta etapa el usuario debe seleccionar *Units/Meta-units* de la etapa anterior para adaptarlas y evaluarlas al proceso en cuestión con ayuda de un simulador. Como se mencionó en la sección 3.4, esta etapa requiere de la ayuda de expertos en el diseño y retrofit de procesos debido que,

1. la evaluación y las decisiones de diseño/retrofit quedan supeditadas a sus conocimientos y experiencia.
2. las alternativas generadas cuentan sólo con información en detalle del modelo estructural, funcional y teleológico sin considerar el de comportamiento.



Para ayudar al usuario a resolver el problema de la falta del modelo de comportamiento en las alternativas generadas y en adición al concepto de similitud, se ha implementado un algoritmo que calcula el grado de adaptabilidad de las alternativas al proceso. Este grado de adaptabilidad se obtiene comparando los valores deseados contra los valores de las variables de proceso de las *Unit/Meta-unit* “causa” y “consecuencia” de la alternativa. Cabe mencionar que no siempre el vecino inmediato es considerado “causa” o “consecuencia”. Por ejemplo, en la Figura 21 se puede decir que la *Meta-unit* MU-reacción es la “causa” de la *Meta-unit* MU-separación puesto que es en MU-reacción donde se generan las especies químicas a separar y no en la *Meta-unit* MU-temperatura, la cual es considerada como un bloque de preparación para la separación (tal y como lo sugiere Turton y col. [Turton et al., 1998] en la generación de diagramas de bloques). En este mismo sentido, se puede decir que MU-separación es “consecuencia” de MU-reacción, debido a que generalmente las especies químicas generadas durante la reacción son separadas y purificadas antes de abandonar el proceso.

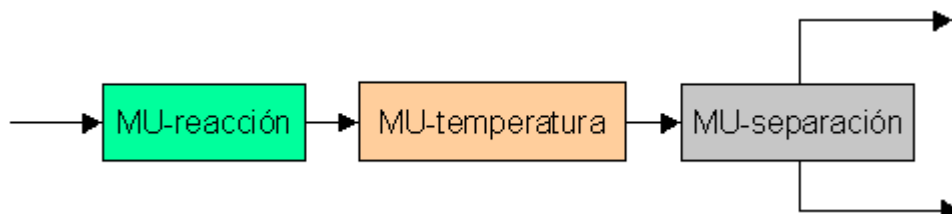


Figura 21. Identificación de *Meta-units* “causa” y “consecuencia”

Finalmente solo queda comentar que esta etapa de evaluación no ha podido ser implementada de forma semiautomática debido principalmente a la dificultad de exportar la información generada a algún simulador comercial o académico. Sin embargo, cabe mencionar que uno de los objetivos de la presente investigación es el desarrollo de herramientas que ayuden al ingeniero a entender un proceso y a facilitarle algunas tareas del retrofit.

## 4.5. RESUMEN

---

En este capítulo se presentó el diseño y desarrollo de un sistema basado en el conocimiento (SBC) que implementa la metodología de retrofit descrita en el Capítulo 3. El SBC esta apoyado en una ontología que permite el uso de un lenguaje común y está formado por los siguientes prototipos informáticos:

1. ETSEQ-Code creator, el cual permite generar código informático para programar funciones específicas de extracción de información de ficheros de Hysys.Plant™.
2. HEAD, el cual realiza la extracción de información de diagramas de flujo de proceso simulados en Hysys.Plant™. Posterior a la extracción de información se realiza un análisis que permite la generación de los modelos estructural (topología) y de comportamiento de los equipos y dispositivos.
3. AHA!, el cual analiza y representa la información proporcionada por HEAD para generar el modelo funcional y teleológico de los equipos y dispositivos. Uno de los objetivos de AHA! es la generación de niveles de abstracción con base a unas reglas de agrupamiento y una jerarquía funcional. Los niveles de abstracción permiten al usuario comprender e identificar las secciones de proceso susceptibles de cambios o mejoras.
4. RETRO, el cual realiza una búsqueda de secciones susceptibles de mejora con base en información proporcionada por el usuario y unos criterios funcionales. Posteriormente genera y evalúa alternativas de solución mediante un sistema de razonamiento basado en casos.

Cabe mencionar la colaboración del Ing. Iván López Arévalo y la Dra. Arantaza Aldea, miembros del grupo de Investigación en Inteligencia Artificial *Banzai* del Departamento de Ingeniería Informática y Matemáticas de la Universitat Rovira i Virgili para la programación de los prototipos AHA! y RETRO.

## Capítulo 5.

# RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En este capítulo se presentan los resultados de la aplicación a procesos químicos de los prototipos desarrollados y descritos en el capítulo anterior. El capítulo está dividido en cuatro secciones. En la primera sección se describen los casos de estudio, haciendo especial énfasis en el proceso de producción de amoniaco y en el de producción de acetona. En la segunda se presenta la aplicación de HEAD para la extracción de la información de los procesos mencionados anteriormente. En la tercera se presenta la aplicación de AHA! para generar niveles de abstracción e identificación de secciones de proceso. Finalmente, en la cuarta sección se presentan los resultados de RETRO para la generación de alternativas de solución.

## 5.1. CASOS DE ESTUDIO

Como se mencionó en la sección 4.4.2.1., se logró reunir información de 50 procesos químicos para poblar la base de casos del sistema CBR. En la Tabla 7 se presenta un resumen de las propiedades de los 50 procesos y en las secciones 5.1.1 y 5.1.2 se da más detalle de los dos procesos utilizados como casos de estudio. La mayoría de los procesos son para la producción de compuestos orgánicos y algunos otros sólo para su separación. El total de equipos o dispositivos que forman estos 50 procesos es de 795. Con la aplicación de HEAD y AHA! a todos los procesos se lograron generar 1590 casos para la base de casos.

### 5.1.1. PROCESO DE PRODUCCIÓN DE AMONIACO

El amoniaco a temperatura y presión estándares es un gas incoloro con un olor característico. Sus principales usos son en la producción de fertilizantes, explosivos y polímeros. El amoniaco se puede utilizar directamente como fertilizante formando una solución con el agua de riego. Es también utilizado como refrigerante puesto que se puede licuar fácilmente a bajas presiones y no genera daños de efecto invernadero [ATSDR, 2004]. Debido su gran uso, el amoniaco es uno de los compuesto inorgánicos mas producidos. Antes de la primera guerra mundial se producía por destilación de productos vegetales y animales. Hoy en día el método mas importante de producción es el proceso Haber [Clark, 2002]. En este proceso, el nitrógeno e hidrógeno gaseosos se combinan directamente sobre un catalizador de hierro a altas presiones y temperaturas para producir el amoniaco.



Tabla 7. Procesos químicos utilizados como casos de estudio.

Proceso de producción de:	Obtenido a partir de:	No. de equipos/ dispositivos	No. de Reciclos	Corrientes de materia	Corrientes de energía	Especies Químicas
Acetaldehído	Etanol	15	1	25	16	7
Acetaldehído	Etileno y Oxígeno	27	2	39	10	7
Acetato de etilo	Etanol y Acido Acético	39	5	59	14	5
Acetato de vinilo	Acido acético y Acetaldehído	25	0	32	11	3
Acetona	Alcohol isopropílico	13	2	20	6	4
Acido Acético	Acetaldehído y Oxígeno	35	0	29	7	4
Acido acrílico	Propileno y oxígeno	17	4	26	7	8
Acido cianhídrico	Amoniaco y Metano	16	1	25	10	6
Acido nítrico	Amoniaco y aire	18	2	30	11	7
Acroleína	Propileno, aire y agua	10	0	21	13	7
Amoniaco vía Gas natural y N2 puro	Gas natural y Nitrógeno	35	1	46	24	8
Amoniaco vía N2 y H2 puros	Nitrógeno e Hidrógeno	19	4	27	3	10
Anhídrido Ftálico	Naftaleno y oxígeno	19	0	18	13	9
Anhídrido Ftálico	o-Xileno y Oxígeno	9	0	16	6	7
Anhídrido Maléico	Butano y Oxígeno	7	0	12	6	10
Benceno y Metano	Tolueno e Hidrógeno	17	3	19	11	4
Benceno y o-Xileno	Tolueno	5	0	7	4	3
Benceno, Tolueno y Estireno	Etil-Benceno	33	0	44	15	10
Separación de Cloro-Benceno y Benceno	Cloro-Benceno y Benceno	12	1	27	5	3
Etil-Benceno	Etileno y Benceno	19	1	26	12	6
Isopropil-Benceno (Cumeno)	Propileno y Benceno	12	1	18	12	6
1,3 Butadieno	n-Butano	6	0	8	5	4
Ciclohexano	Benceno e Hidrógeno	18	1	30	8	4
Cloruro de Alilo	Propileno y cloro	17	1	20	15	6
Separación de Ciclohexano	Mezcla de Ciclohexano, n-Heptano y Tolueno	17	0	24	6	3

Tabla 7. Procesos químicos utilizados como casos de estudio (continuación)

Proceso de producción de:	Obtenido a partir de:	No. de equipos/ dispositivos	No. de reciclos	Corrientes de materia	Corrientes de energía	Especies Químicas
Cloroformo	Metano y Cloro	10	0	20	7	8
Etanol	Etileno y agua	24	2	35	13	5
Purificación de Etanol	Etanol y agua	8	1	19	5	2
Dimetil Eter	Metanol	9	2	17	11	3
Eter Etil Tert-Butílico (ETBE)	Etanol e i-Buteno	11	0	13	6	5
Eter Metil Tert-Butílico (MTBE)	Metanol e i-Buteno	12	0	17	9	4
Eter Metil Tert-Arnilico (TAME)	Metanol y 2-Metil-2-Buteno	19	1	25	11	5
Estireno	Etil-benceno	23	1	33	19	8
Separación de Etano, n-Heptano y n-Octano	Mezcla de Etano, n-Heptano y n-Octano	4	0	6	3	3
Etileno	Etano	27	1	35	17	5
Oxido de Etileno	Etileno y Oxígeno	25	1	34	14	7
Formaldehido	Metanol y Oxígeno	14	0	23	12	7
Formalin	Metanol y Oxígeno	10	1	20	8	5
Metil Formato	Metanol y Bióxido de Carbono	21	2	37	8	4
HP Gas	Gas natural	11	2	17	4	10
Heptano	Propileno y Butenos	14	0	14	11	10
Hidrógeno	Metano y vapor de agua	5	0	15	3	7
Separación de Metano	Gas natural	5	1	12	2	10
Separación de Metano y Etano	Gas natural	3	0	8	5	10
Metanol	Gas natural y vapor de agua	10	1	20	8	6
Metanol	Monóxido de Carbono e	27	1	35	11	6
Oxígeno y Nitrógeno	Aire	19	3	33	15	5
Purificación de Parafinas	Propano, isobutano, n-butano, i-pentano y n-pentano	4	0	9	8	5
Propilenglicol y Dipropilenglicol	Oxido de Etileno y vapor de	10	1	15	9	4
Cloruro de Vinilo	1,2 dicloro Etano	10	1	23	10	6

En la Figura 22 se presenta el diagrama de flujo de proceso (obtenido de la base de casos de Hysys™) para la producción de 600,000 toneladas al año de amoníaco. En éste proceso, una corriente de Hidrógeno/Nitrógeno (corriente de materia 5) se alimenta a tres reactores catalíticos (PFR-100,101,102) en serie. En los reactores se lleva a cabo una reacción de síntesis entre el  $H_2$  y  $N_2$  para producir amoníaco ( $NH_3$ ) @ 393.2 °C y 1.5e+4 kPa. El producto ( $NH_3$ ) de la reacción se alimenta a la sección de separación (V-100,101) para obtener una corriente de producto con un 95%mol de amoníaco. En el proceso se utilizan dos cambiadores de calor (E-102,104) para intercambio de energía entre corrientes de proceso, dos enfriadores (E-101,103) para lograr condiciones de flash y un compresor (K-100) entre los separadores V-100 y V-101. Los gases que no reaccionan son reciclados (corriente de materia 22).

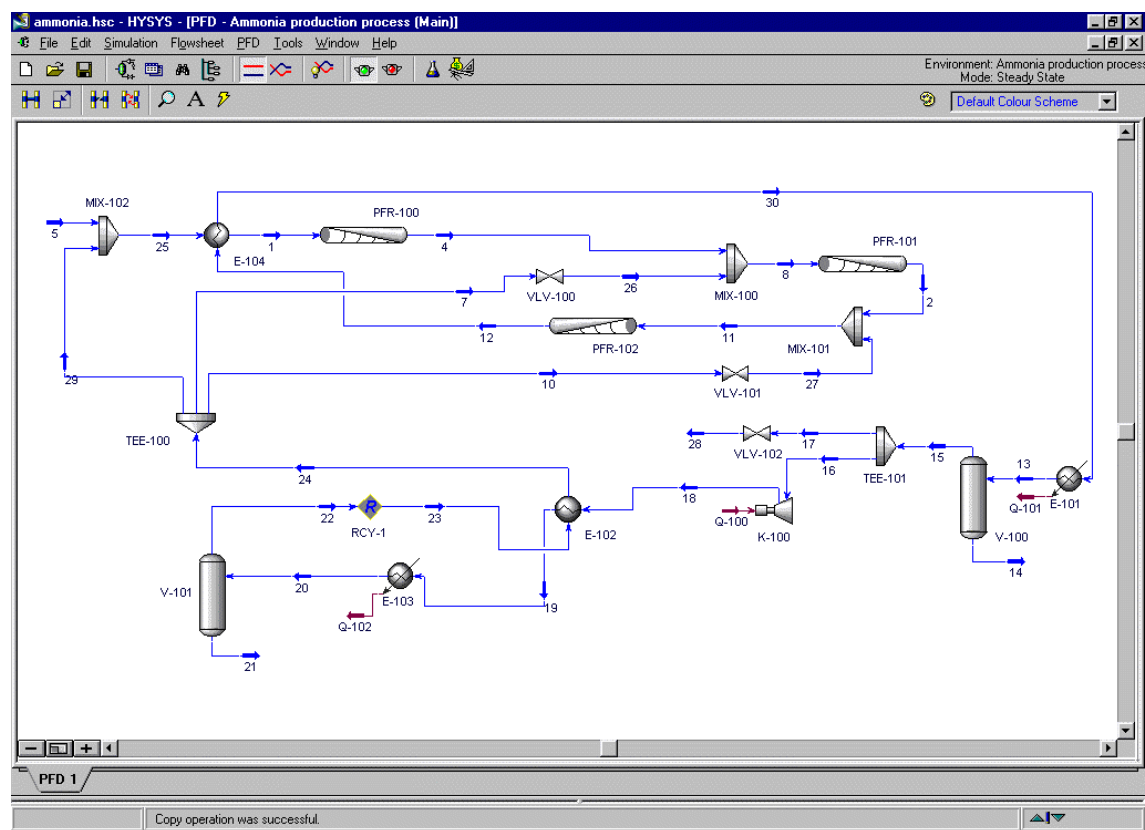
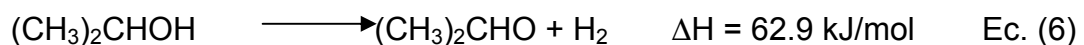


Figura 22. Proceso de producción de amoníaco simulado en Hysys.Plant™.

### 5.1.2. PROCESO DE PRODUCCIÓN DE ACETONA

La acetona es un líquido incoloro, de sabor picante y de olor dulce y penetrante. Se evapora fácilmente, es inflamable y es soluble en agua, etanol, éter, etc. También se le conoce como dimetil-cetona, 2-propanona y beta-cetopropano. La acetona se usa en la fabricación de plásticos, fibras, medicamentos y otros productos químicos tales como metacrilato de metilo, isopropanol, diacetona alcohol, etc. Es un excelente solvente para los aceites, tanto naturales como sintéticos, resinas, gomas, ceras, pinturas y barnices; por esta propiedad, es recomendada para la producción de agentes de recubrimiento, tintas de imprenta y adhesivos. La acetona es un sub-producto en la producción de fenoles a partir de la alquilación de benceno. Otra forma de producir acetona es utilizando como materia prima el alcohol isopropílico (*Isoproyl alcohol*, IPA) [Turton et. al., 1998]. La acetona producida de esta manera es la que se emplea generalmente en la industria farmacéutica debido a que no contiene trazas de compuestos aromáticos. La reacción es la siguiente:



En la Figura 23 se presenta el DFP para la producción de acetona a partir del IPA. En éste proceso, una corriente de IPA/agua (corriente de materia IPA) se alimenta a un reactor catalítico (PFR-100). En el reactor se lleva a cabo la deshidrogenación del IPA para producir acetona (( $\text{CH}_3$ )<sub>2</sub>CHO) @ 234 °C y 216 kPa. El producto de la reacción (acetona e hidrógeno) se alimentan a la sección de separación para obtener una corriente de acetona con un 99% de pureza. La sección de separación esta compuesta de un flash (V-101) que separa la fase gaseosa compuesta principalmente de hidrógeno (subproducto). La fase gaseosa del flash se alimenta a un absorbedor (T-100) donde se separa la acetona del hidrógeno con ayuda de agua (solvente). La fase gaseosa del absorbedor se elimina del proceso y la fase líquida se une con la corriente líquida del flash para alimentar a la primer columna de destilación (T-101). En esta columna es donde se separa la acetona del agua con una pureza del 99%. Los fondos de esta



primera columna se envían a la segunda columna (T-102) para separar el agua del IPA. El agua sale del proceso como residuo y el IPA recuperado se recicla.

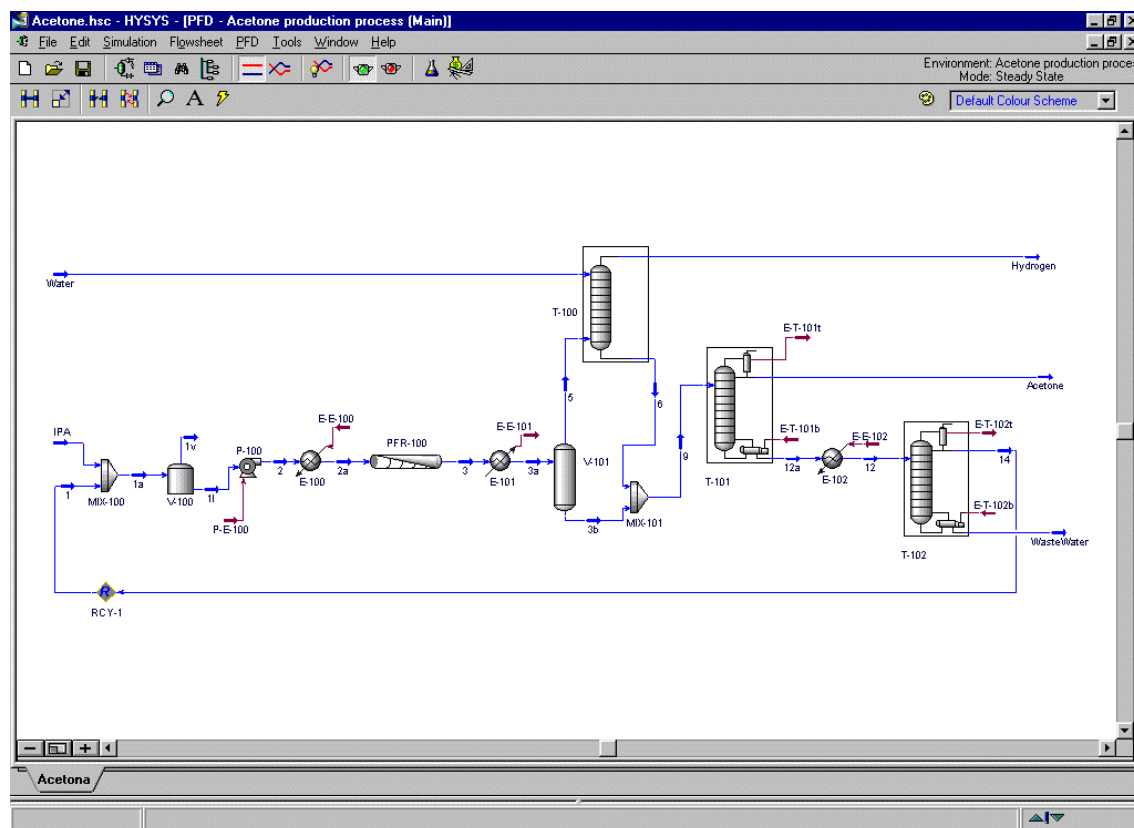


Figura 23. Proceso de producción de acetona simulado en Hysys.Plant™.

## 5.2. HEAD

Tal y como se describe en el Capítulo 3, la primer etapa de la metodología de retrofit es la extracción de información del proceso. En la Figura 24 y 25 se muestra la interfaz de HEAD y los datos obtenidos para el proceso de amoniaco y el de acetona respectivamente. En las Figuras 24(a) y 25(a) se muestran los datos extraídos que sirven de base para la generación de los modelos estructurales. Esta información es congruente con la especificada en la Tabla 2 para los equipos y dispositivos de proceso. En las Figuras 24(b) y 25(b) se encuentra la información del modelo funcional de los equipos y dispositivos, la cual se infiere con ayuda de balances de materia y energía (modelo de

comportamiento) y la jerarquía de funciones descrita en la Tabla 3. En las Figuras 24(b) y 25(b), la primer columna de datos corresponde al nombre del equipo o dispositivo, la segunda a la función general, la tercera a la función específica, la cuarta al tipo de equipo y la quinta al nombre del objeto en Hysys.Plant™. Toda esta información se guarda en un fichero para su posterior tratamiento en AHA!

name_flowsheet	Ammonia production process @										
components	9 Methane	H2O	CO	CO2	Hydrogen	Nitrogen	Oxygen	Ammonia	Argon	@	
pid_controller	LIC-100	14	@								
pid_controller	LIC-101	21	@								
pid_controller	PIC-100	VLV-102	@								
recycle	RCY-1	22	23	@							
material_stream	5	9 Methane	H2O	CO	CO2	Hydrogen	Nitrogen	Oxygen	Ammonia	Argon	1 199.999
material_stream	1	9 Methane	H2O	CO	CO2	Hydrogen	Nitrogen	Oxygen	Ammonia	Argon	1 269.999
material_stream	4	9 Methane	H2O	CO	CO2	Hydrogen	Nitrogen	Oxygen	Ammonia	Argon	1 383.167
material_stream	7	9 Methane	H2O	CO	CO2	Hydrogen	Nitrogen	Oxygen	Ammonia	Argon	1
material_stream	8	9 Methane	H2O	CO	CO2	Hydrogen	Nitrogen	Oxygen	Ammonia	Argon	1 393.027
material_stream	10	9 Methane	H2O	CO	CO2	Hydrogen	Nitrogen	Oxygen	Ammonia	Argon	1
material_stream	11	9 Methane	H2O	CO	CO2	Hydrogen	Nitrogen	Oxygen	Ammonia	Argon	1 392.986
material_stream	12	9 Methane	H2O	CO	CO2	Hydrogen	Nitrogen	Oxygen	Ammonia	Argon	1 393.076
material_stream	13	9 Methane	H2O	CO	CO2	Hydrogen	Nitrogen	Oxygen	Ammonia	Argon	1 34.9761
material_stream	14	9 Methane	H2O	CO	CO2	Hydrogen	Nitrogen	Oxygen	Ammonia	Argon	0 34.9731
material_stream	15	9 Methane	H2O	CO	CO2	Hydrogen	Nitrogen	Oxygen	Ammonia	Argon	1 34.9731
material_stream	17	9 Methane	H2O	CO	CO2	Hydrogen	Nitrogen	Oxygen	Ammonia	Argon	1 34.9731
material_stream	18	9 Methane	H2O	CO	CO2	Hydrogen	Nitrogen	Oxygen	Ammonia	Argon	1 35.7316
material_stream	19	9 Methane	H2O	CO	CO2	Hydrogen	Nitrogen	Oxygen	Ammonia	Argon	0.962078 0.91786
material_stream	20	9 Methane	H2O	CO	CO2	Hydrogen	Nitrogen	Oxygen	Ammonia	Argon	0.9071653 -39.950
material_stream	21	9 Methane	H2O	CO	CO2	Hydrogen	Nitrogen	Oxygen	Ammonia	Argon	0 -39.950
material_stream	22	9 Methane	H2O	CO	CO2	Hydrogen	Nitrogen	Oxygen	Ammonia	Argon	1 -39.950
material_stream	23	9 Methane	H2O	CO	CO2	Hydrogen	Nitrogen	Oxygen	Ammonia	Argon	0.9986505 -39.950
material_stream	24	9 Methane	H2O	CO	CO2	Hydrogen	Nitrogen	Oxygen	Ammonia	Argon	1
material_stream	25	9 Methane	H2O	CO	CO2	Hydrogen	Nitrogen	Oxygen	Ammonia	Argon	1 68.7038
material_stream	26	9 Methane	H2O	CO	CO2	Hydrogen	Nitrogen	Oxygen	Ammonia	Argon	1 24.9862
material_stream	27	9 Methane	H2O	CO	CO2	Hydrogen	Nitrogen	Oxygen	Ammonia	Argon	1 24.9724
material_stream	28	9 Methane	H2O	CO	CO2	Hydrogen	Nitrogen	Oxygen	Ammonia	Argon	1 34.4268
material_stream	16	9 Methane	H2O	CO	CO2	Hydrogen	Nitrogen	Oxygen	Ammonia	Argon	1 34.9731
material_stream	29	9 Methane	H2O	CO	CO2	Hydrogen	Nitrogen	Oxygen	Ammonia	Argon	1
material_stream	2	9 Methane	H2O	CO	CO2	Hydrogen	Nitrogen	Oxygen	Ammonia	Argon	1 383.187
material_stream	30	9 Methane	H2O	CO	CO2	Hydrogen	Nitrogen	Oxygen	Ammonia	Argon	1 194.079
energy_stream	Q-100	1049276	@								
energy_stream	Q-101	261010495	@								
energy_stream	Q-102	113854206	@								
mixer	MIX-100	2	4	26	8	@					
mixer	MIX-101	2	27	2	11	@					
mixer	MIX-102	2	5	29	25	@					
split	TEE-101	15	2	16	17	@					
split	TEE-100	24	3	10	7	@					
valve	VLV-100	7	26	15	@						
valve	VLV-101	10	27	30	@						
valve	VLV-102	17	28	460.5129	@						

(a)

Name_equipment	General Function	Specific Function	Equipment	Hysys Function
PFR-100	Reaction	Reactor	tubular_reactor	pfreactorop
MIX-100	Flow_change	Mixing	mixer	mixerop
PFR-101	Reaction	Reactor	tubular_reactor	pfreactorop
MIX-101	Flow_change	Mixing	mixer	mixerop
PFR-102	Reaction	Reactor	tubular_reactor	pfreactorop
E-101	Temperature_change	Cooling	cooler	coolerop
V-100	Separation	Extraction	flash	flashtank
K-100	Pressure_change	Pressure_increase	compressor	compressor
E-102	Separation	Extraction	heat_exchanger	heatexop
E-103	Temperature_change	Cooling	cooler	coolerop
V-101	Separation	Extraction	flash	flashtank
MIX-102	Flow_change	Mixing	mixer	mixerop
VLV-100	Pressure_change	Pressure_decrease	valve	valveop
VLV-101	Pressure_change	Pressure_decrease	valve	valveop
LIC-100	Logic	Logic	Logic	fbcontrolop
LIC-101	Logic	Logic	Logic	fbcontrolop
PIC-100	Logic	Logic	Logic	fbcontrolop
VLV-102	Pressure_change	Pressure_decrease	valve	valveop
TEE-101	Flow_change	Splitting	split	teeop
RCY-1	Logic	Logic	Logic	recycle
TEE-100	Flow_change	Splitting	split	teeop
E-104	Separation	Extraction	heat_exchanger	heatexop

(b)

Figura 24. Extracción de información del proceso de amoniaco.

name_flowsheet	Acetone production process @														
components		4 Hydrogen	1-Propanol	Acetone	H2O										
recycle	RCY-1	14	1	@											
material_stream	IPA	4 Hydrogen	1-Propanol	Acetone	H2O	0	25	101	2401.3216	51.96	-298495.6	9.10246			
material_stream	1v	4 Hydrogen	1-Propanol	Acetone	H2O	1	25.48538	101	0	0	-247102.8	166.602			
material_stream	11	4 Hydrogen	1-Propanol	Acetone	H2O	0	25.48538	101	2674.4098	57.84	-296291.9	9.82633			
material_stream	1	4 Hydrogen	1-Propanol	Acetone	H2O	0	29.791309	120	273.08821	5.88	-296393.5	16.6260			
material_stream	1a	4 Hydrogen	1-Propanol	Acetone	H2O	0	25.48538	101	2674.4098	57.84	-296281.9	9.82633			
material_stream	2	4 Hydrogen	1-Propanol	Acetone	H2O	0	25.54995	230	2674.4098	57.84	-286272	14.4709			
material_stream	2a	4 Hydrogen	1-Propanol	Acetone	H2O	1	234	216	2674.4098	57.84	-233733.7	198.489			
material_stream	3	4 Hydrogen	1-Propanol	Acetone	H2O	0.85213179	67.504936	191	2674.4149	92.620478	-145957.9	153.351			
material_stream	3a	4 Hydrogen	1-Propanol	Acetone	H2O	0.42947844	20	163	2674.4149	92.620478	-163638.5	95.2744			
material_stream	5	4 Hydrogen	1-Propanol	Acetone	H2O	1	20	163	343.17608	39.779498	-27322.08	183.981			
material_stream	3b	4 Hydrogen	1-Propanol	Acetone	H2O	0	20	163	2331.2388	52.84198	-265805.2	45.9040			
material_stream	Water	4 Hydrogen	1-Propanol	Acetone	H2O	0	25	200	360.30201	20	-284901.3	6.55816			
material_stream	Hydrogen	4 Hydrogen	1-Propanol	Acetone	H2O	1	34.020995	150	251.49085	38.812635	-23251.12	162.495			
material_stream	8	4 Hydrogen	1-Propanol	Acetone	H2O	0	25.446339	163	451.98723	20.988663	-281706.6	14.5407			
material_stream	9	4 Hydrogen	1-Propanol	Acetone	H2O	0	21.220169	163	2783.228	73.807643	-270322.7	38.3106			
material_stream	Acetone	4 Hydrogen	1-Propanol	Acetone	H2O	0.00063003	-252.7322	120	1881.6191	33.132298	-277023.2	-2147.1			
material_stream	12a	4 Hydrogen	1-Propanol	Acetone	H2O	2.58236-06	98.95014	140	901.63695	40.675344	-260441.4	31.1147			
material_stream	12	4 Hydrogen	1-Propanol	Acetone	H2O	0	90	139.99	901.63695	40.675344	-281049.1	23.2450			
material_stream	14	4 Hydrogen	1-Propanol	Acetone	H2O	4.3078E-06	91.0523	120	343.19781	9.6788175	-284372.4	48.3315			
material_stream	WasteWater	4 Hydrogen	1-Propanol	Acetone	H2O	0	110.36153	145	558.40914	30.996726	-278430.3	25.6437			
energy_stream	P-E-100	573.57395 @													
energy_stream	E-E-100	3732895.3 @													
energy_stream	E-E-101	1637682.2 @													
energy_stream	E-T-101a	6620286.1 @													
energy_stream	E-T-101b	5989100.9 @													
energy_stream	E-E-102	-24718.15 @													
energy_stream	E-T-102a	12445683 @													
energy_stream	E-T-102b	12488253 @													
meat	MIX-100	2 IPA	1	1a	@										
mixer	MIX-101	2 6	3b	9	@										
pump	P-100	11	2	P-E-100	129 @										
heater	E-100	2	2a	E-E-100	14 208 45005 @										
heater	E-102	12a	12	E-E-102	0.01 -6.95014 @										
cooler	E-101	3	3a	E-E-101	28 -47.50494 @										
flash	V-101	1 3a	2 3b	5	5 3b @										
trayed	T-101	2	9 E-T-101b	3 12a	Acetone E-T-101a @										
trayed	T-102	2	12 E-T-102b	3 WasteWater	14 E-T-102a @										
tubular_reactor	PFR-100	1 2a	1	3	448 3.01 0.005 @										
tank	V-100	1 1a	2 11	1v	1v 11 @										
vapour_absorption_tower	T-100	2 Water	5	2	6 Hydrogen 10 @										

(a)

Name_equipment	General Function	Specific Function	Equipment	Hysys Function
MIX-100	Flow_change	Mixing	mixer	mixerop
P-100	Pressure_change	Pressure_increase	pump	pumpopp
V-100	Separation	Tank	tank	tankopp
PFR-100	Reaction	Reactor	tubular_reactor	pfreactorop
E-101	Temperature_change	Cooling	cooler	coolerop
V-101	Separation	Flash	flash	flashtank
T-100	Separation	Absortion	vapour_absorption_tower	absorber
MIX-101	Flow_change	Mixing	mixer	mixerop
T-101	Separation	Distillation	distillation column	distillation
E-100	Temperature_change	Heater	heater	heaterop
E-102	Temperature_change	Heater	heater	heaterop
RCY-1	Logic	Logic	Logic	recycle
T-102	Separation	Distillation	distillation column	distillation

(b)

Figura 25. Extracción de información del proceso de acetona.

## 5.3. AHA!

Con la información extraída por HEAD, AHA! realiza un análisis y representación de los equipos y dispositivos de procesos para generar niveles de abstracción. En la Figura 26 se muestra la interfaz de AHA! y la representación inicial (nivel de abstracción 0) del diagrama de flujo del proceso de amoniaco. Esta representación contiene los mismos equipos y dispositivos de proceso que se muestran en la Figura 22. La interfaz de AHA! consta de 3 ventanas:

1. Ventana superior derecha. En esta zona se representa el DFP para su manipulación.
2. Ventana superior izquierda. En esta zona se representa el árbol de los niveles de abstracción.
3. Ventana inferior. En esta zona se presentan descripciones e información sobre el DFP.

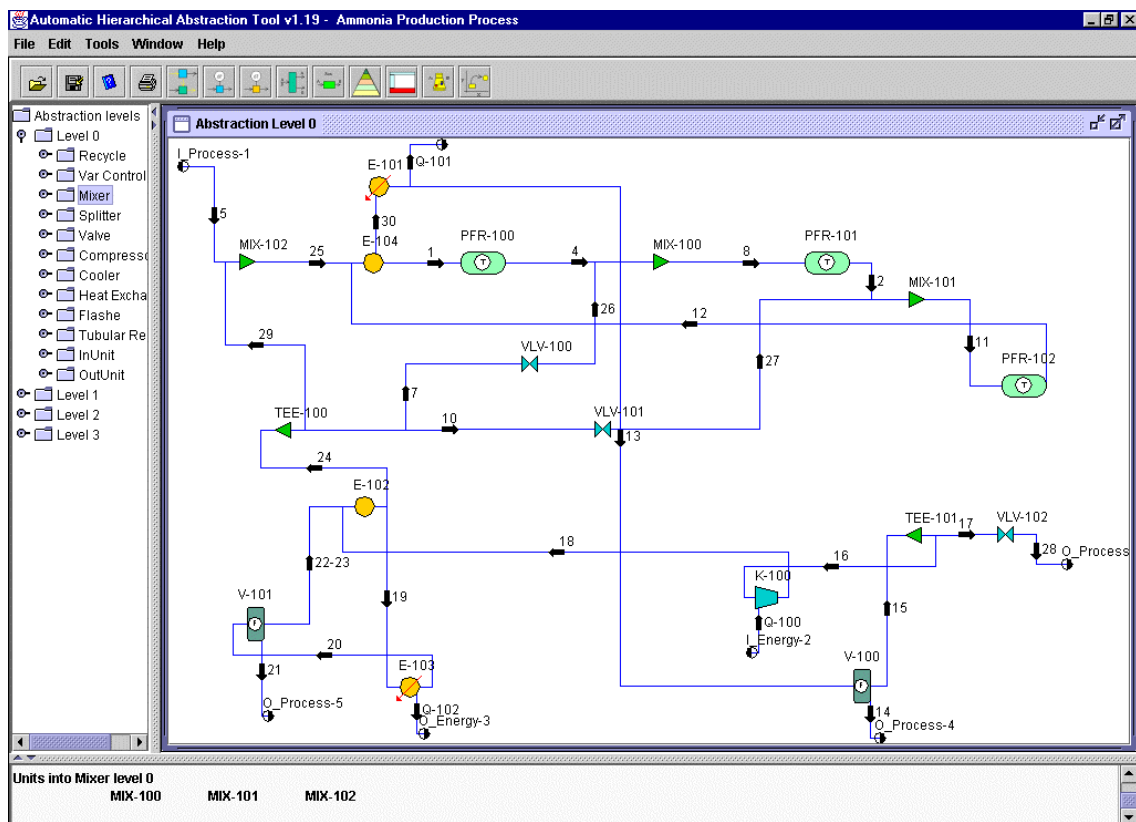


Figura 26. Representación inicial del proceso de amoniaco en AHA!.

Las funciones mas relevantes de AHA! se muestran a continuación:

### 5.3.1. GENERACIÓN DE NIVELES DE ABSTRACCIÓN

Como se mencionó en la sección 3.2.1, el usuario debe especificar los “roles” de las sustancias dentro del proceso. Los roles pueden ser:

- Reactivo (*Reactant*). Sustancia(s) que se transforma(n) mediante una reacción química en otra(s) en el proceso.
- Materia Prima (*RawMaterial*). Sustancias que entran a un proceso en donde no hay reacción química.
- Producto Principal (*MainProduct*). Es la sustancia que se desea producir mediante una reacción química o mediante la separación o purificación del resto en caso de que no haya reacción química.
- Subproducto (*ByProduct*). Son las sustancias que se producen además del producto principal en una reacción química o son aquellas de las cuales se desea separar el producto principal.
- Residuo (*Waste*). Sustancias no deseadas y/o con bajo valor comercial que deben ser tratadas antes de depositarlas/descargarlas al medio ambiente.
- Solvente (*Solvent*). Sustancia capaz de disolver a otra sustancia utilizando la propiedad de solubilidad.
- Catalizador (*Catalyst*). Sustancia que activa o desactiva una reacción química.
- Inerte (*Inert*). Sustancia que a lo largo del proceso no sufre ningún cambio físico-químico.
- Impureza (*Impurity*). Sustancia no deseada (mezclada con los reactivos, materia prima o producto principal).

En la Figura 27 se presenta la asignación de roles para las sustancias presentes en el proceso de amoniaco.

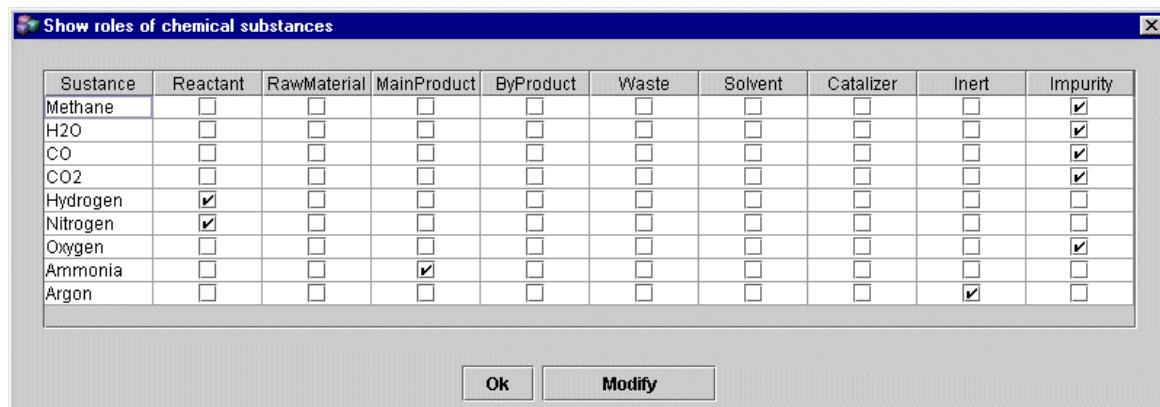


Figura 27. Asignación de “roles” en el proceso de amoniaco.

Una vez que el usuario asigna los roles a las sustancias, AHA! infiere con base en balances de materia y el modelo estructural un “rol” para las corrientes de proceso. Este “rol” permite al usuario identificar el camino o ruta por donde pasan las sustancias en el proceso. En la Figura 28 se muestra la asignación de roles de las corrientes de proceso que realiza AHA! en el proceso de amoniaco.

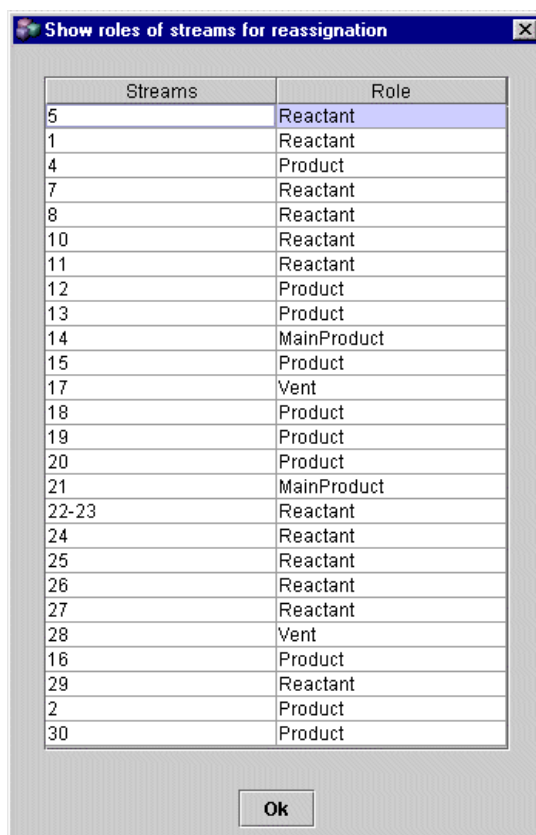


Figura 28. Asignación de roles de las corrientes en el proceso de amoniaco.

A medida que se generan los niveles de abstracción el usuario puede navegar en ellos y manipularlos. En cada nivel de abstracción se registra un historial; de esta manera el usuario puede saber la relación existente entre cada una de las *Units/Meta-units* del nivel actual con las *Units/Meta-units* del nivel inferior o superior. De esta manera el usuario puede conocer los posibles pasos que se siguieron durante el diseño del proceso. En cada nivel de abstracción es posible obtener la información de cualquiera de las *Units/Meta-units* o corrientes del DFP representado. El usuario puede guardar su trabajo en cualquier momento y cerrar la aplicación para posteriormente recuperarlo en el estado en que lo había dejado sin necesidad de iniciar desde el nivel de abstracción más bajo.

La nomenclatura para nombrar a las Meta-units es *MUX-Y-función*, donde MU es la abreviación de Meta-unit, X es el número de la Meta-unit, Y es el nivel de abstracción en donde se ha generado y *función* es la función general con mayor jerarquía de la Unit/Meta-unit.

En la Figura 29 se muestra el nivel de abstracción 1 para el proceso de amoniaco. En este nivel han sido incorporadas las *Units* de “Cambio de Flujo” (mezcladores y divisores) por parte de las de mayor jerarquía (Reacción, Separación y Cambio de Temperatura). Las *Meta-units* resultantes se muestran en la Tabla 8.

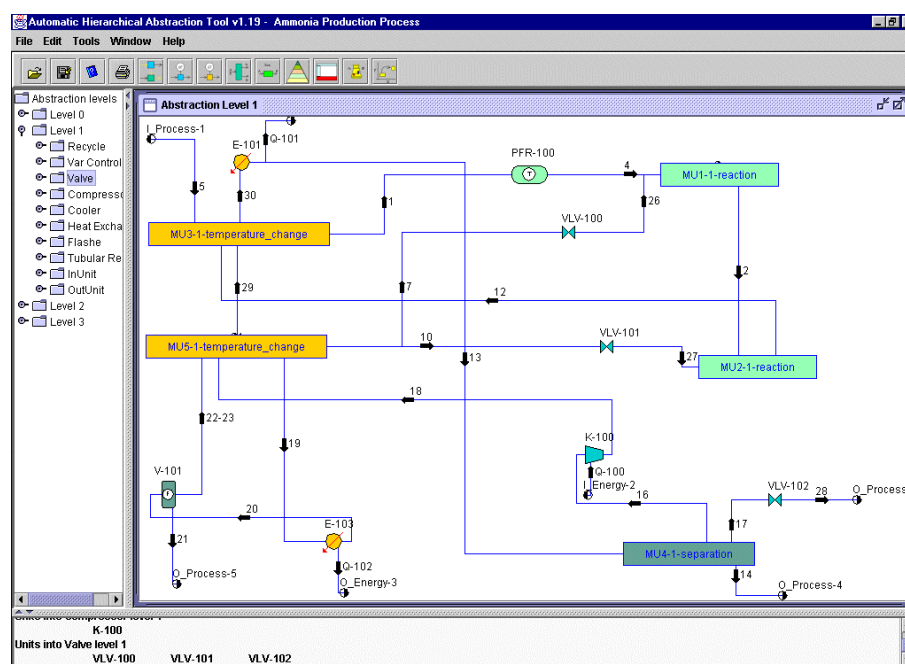


Figura 29. Nivel 1 de abstracción para el proceso de amoniaco.

Tabla 8. *Meta-units* generadas en el nivel 1 de abstracción del proceso de amoniaco.

<i>Meta-unit</i>	<i>Units/Meta-units que se agrupan:</i>	
	<i>Jerarquía mayor</i>	<i>Jerarquía menor</i>
MU1-1-reaction	PFR-101	MIX-100
MU2-1-reaction	PFR-102	MIX-101
MU3-1-temperature_change	E-104	MIX-102
MU4-1-separation	V-100	TEE-101
MU5-1-temperature_change	E-102	TEE-100

Aunque la *Meta-unit* MU1-1-reaction contiene información del reactor PFR-101 y del mezclador MIX-100, ésta *Meta-unit* representa de forma conceptual (en el nivel de abstracción 1) una sección de reacción que tiene 2 entradas y 1 salida. Para realizar esta abstracción, AHA! analiza la información del MIX-100 y determina o infiere que:

1. El MIX-100 es una *Unit* que pertenece a la clase Flujo (ver Tabla 3).
2. El MIX-100 tiene como función general “cambio de flujo” (modelo funcional).
3. El MIX-100 pertenece a las *Units/Meta-units* con menor jerarquía funcional en este nivel (ver Tabla 3) y por ende es candidato a ser incorporado a otra *Unit*.
4. El MIX-100 tiene dos *Units* de entrada (PFR-100 y VLV-100) conectados mediante las corrientes de proceso 4 y 26 y una *Unit* de salida (PFR-101) conectada mediante la corriente de proceso 8 (modelo estructural).
5. El MIX-100 debe agruparse al equipo que esté conectado a la salida (Anexo 4, sección 5) y heredar a la *Meta-unit* el número y nombres de las corrientes de proceso.
6. Puesto que MIX-100 se agrupa al reactor PFR-101, la *Meta-unit* generada hereda la función general “Reacción”.

Este análisis se realiza para cada una de las *Units* o *Meta-units* presentes en cada nivel de abstracción hasta llegar al último nivel o “caja negra”.



En la Figura 30 se muestra el nivel de abstracción 2 del proceso de producción de amoníaco. En este nivel ya se han agrupado las *Units* correspondientes a Cambio de Presión (válvulas y compresores). Las *Meta-units* resultantes se muestran en la Tabla 9.

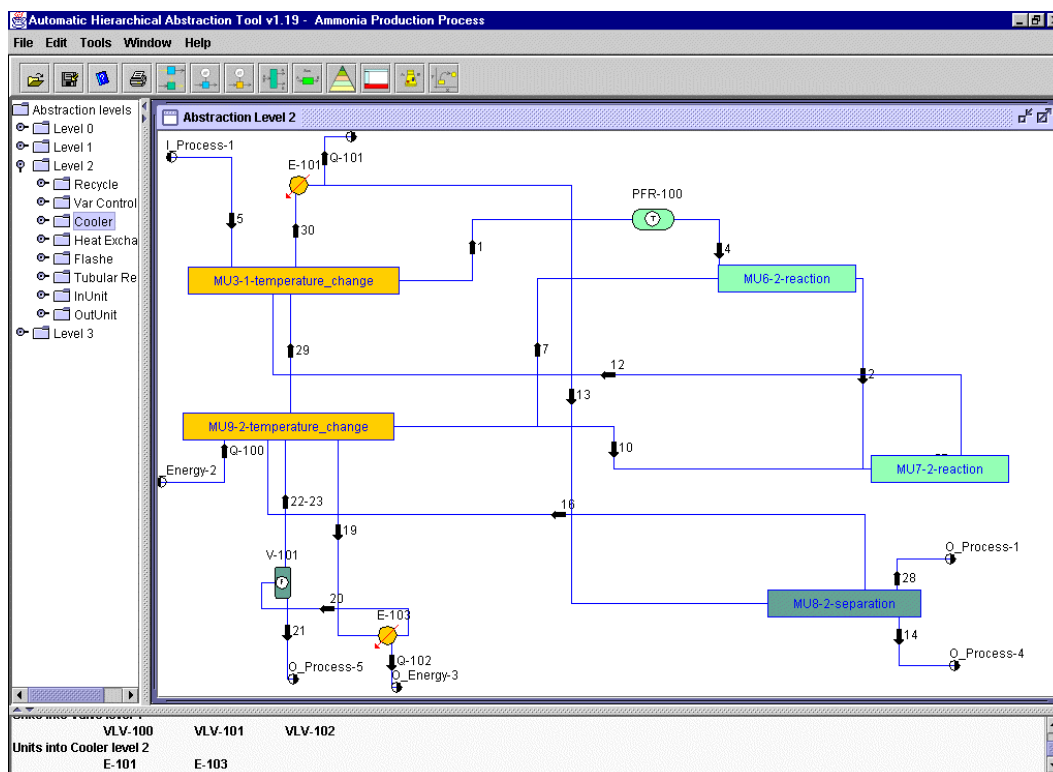


Figura 30. Nivel 2 de abstracción para el proceso de amoníaco.

Tabla 9. *Meta-units* en el nivel 2 de abstracción del proceso de amoníaco.

<i>Meta-unit</i>	<i>Units/Meta-units</i> que se agrupan:	
	Jerarquía mayor	Jerarquía menor
MU6-2-reaction	MU1-1-reaction	VLV-100
MU7-2-reaction	MU2-1-reaction	VLV-101
MU8-2-separation	MU4-1-separation	VLV-102
MU9-2-temperature_change	MU5-1-temperature_change	K-100

En la Figura 31 se muestra el nivel de abstracción 3. En este nivel ya se han agrupado las *Units* correspondientes a Cambio de Temperatura (enfriadores y cambiador de calor). Las *Meta-units* resultantes se muestran en la Tabla 10.

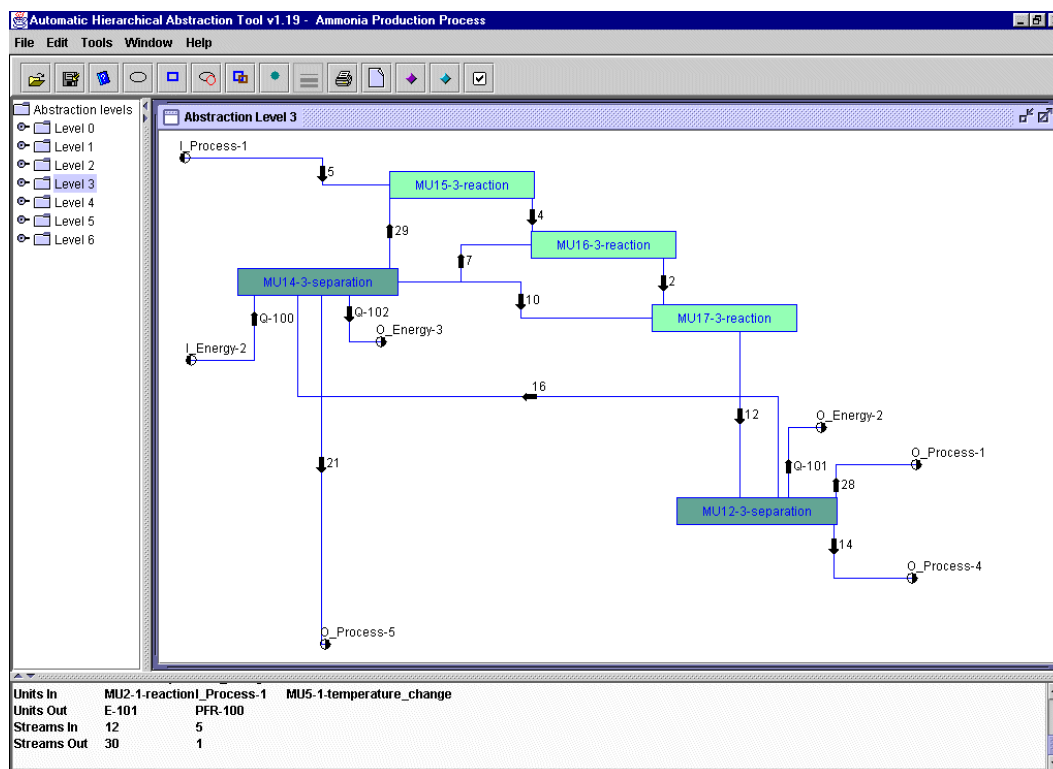


Figura 31. Nivel 3 de abstracción para el proceso de amoniaco.

Tabla 10. *Meta-units* en el nivel 3 de abstracción del proceso de amoniaco.

<i>Meta-unit</i>	<i>Units/Meta-units que se agrupan:</i>	
	<b>Jerarquía mayor</b>	<b>Jerarquía menor</b>
MU12-3-separation	MU8-2-separation	E-101
MU14-3-separation	V-101	E-103
MU15-3-reaction	PFR-100	MU3-1-temperature_change
MU16-3-reaction	MU6-2-reaction	MU9-2-temperature_change
MU17-3-reaction	MU6-2-reaction	MU10-2-temperature_change

En el nivel de abstracción 4 (ver Figura 32) se agrupan entre sí las *Meta-units* de separación (MU12-3-separation, MU14-3-separation) para formar una sola *Meta-unit* de separación (MU18-4-separation). En el nivel de abstracción 5 (ver Figura 33) se agrupan entre sí las *Meta-units* de reacción (MU15-3-reaction, MU16-3-reaction, MU17-3-reaction) para formar una sola *Meta-unit* de reacción (MU20-5-reaction). Finalmente, en el nivel de abstracción 6 (ver Figura 34) la *Meta-unit* de reacción (MU20-5-reaction) agrupa a la *Meta-unit* de separación (MU18-4-separation) para generar la “caja negra” con entradas y salidas. Este es el nivel de abstracción más alto que se puede alcanzar en el proceso de amoniaco aplicando en orden inverso de la metodología de Douglas. Este nivel contiene de entrada una corriente de materia (5) y una corriente de energía (Q-100) y de salida tres corrientes de materia (14, 21, 28) y dos corrientes de energía (Q-101, Q-102).

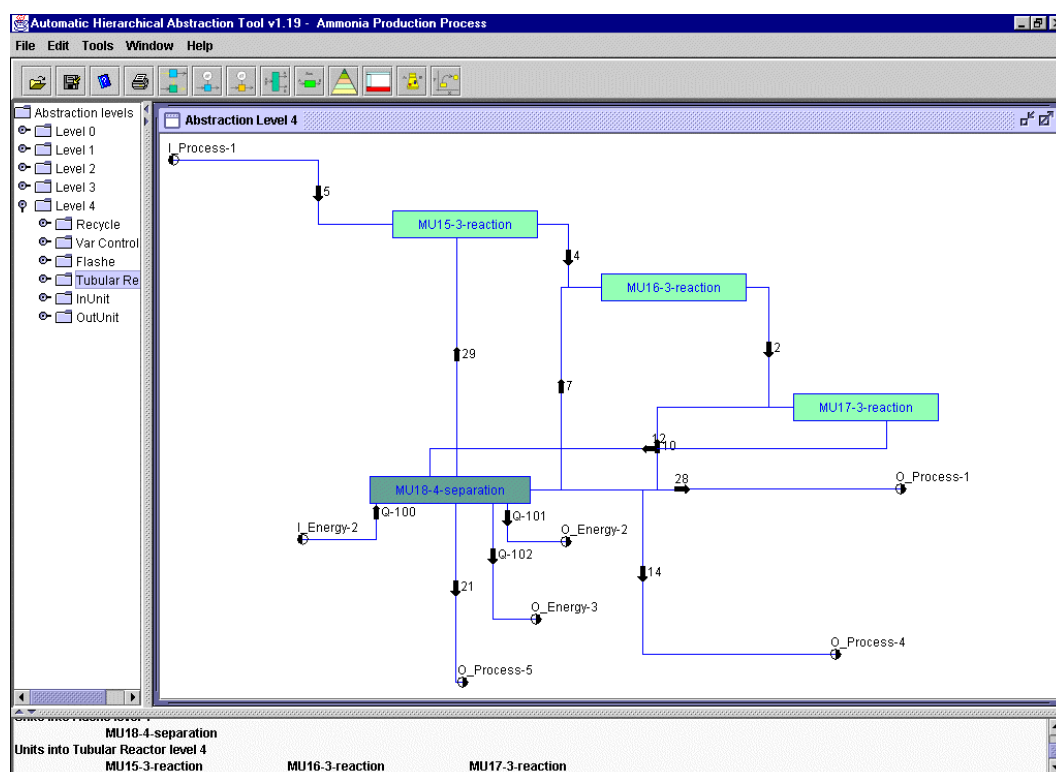


Figura 32. Nivel 4 de abstracción para el proceso de amoniaco.

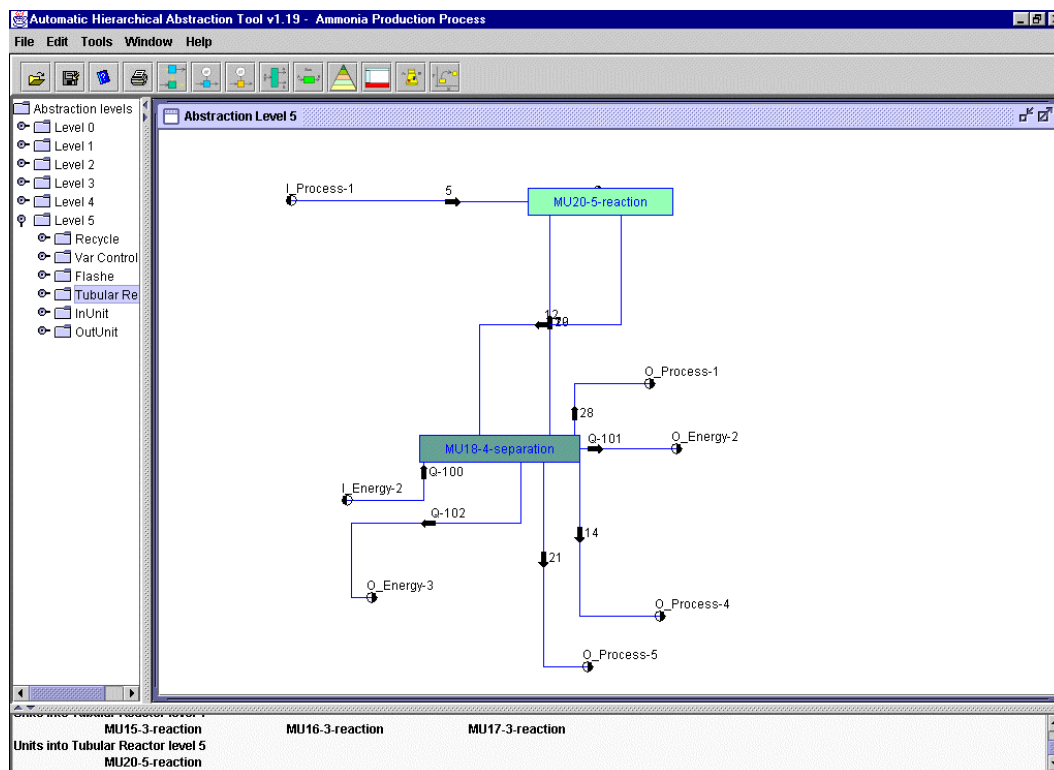


Figura 33. Nivel 5 de abstracción para el proceso de amoniaco.

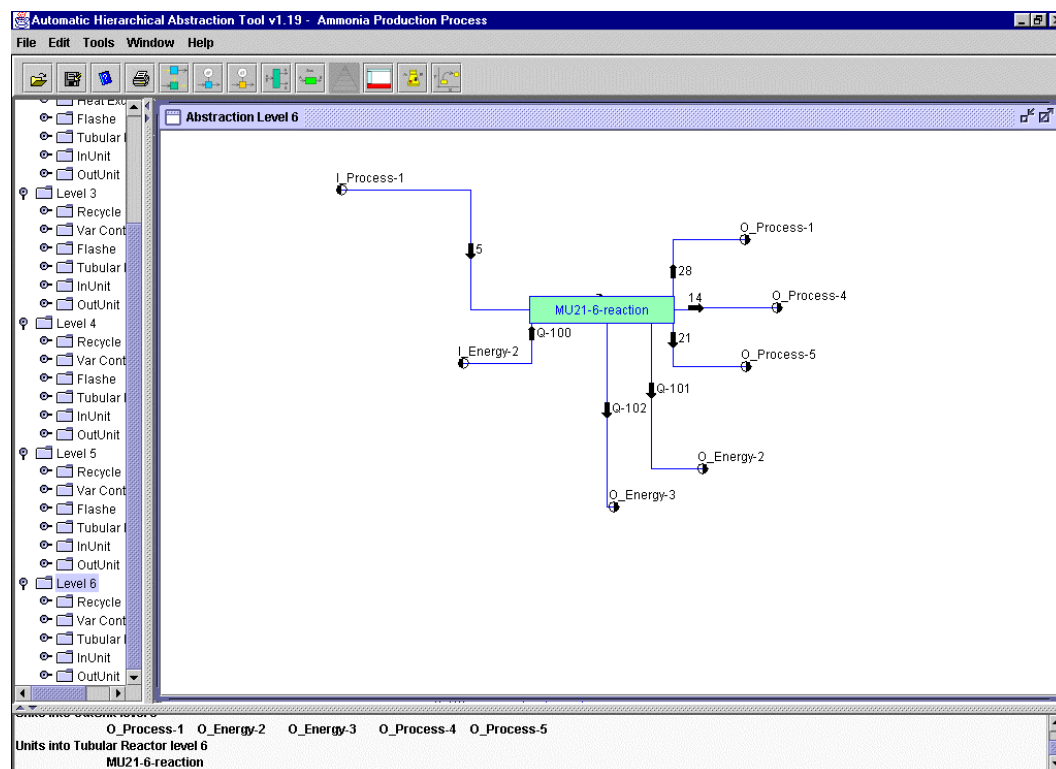


Figura 34. Nivel 6 de abstracción para el proceso de amoniaco.

En las Figuras 35 a 40 se muestran los 5 niveles de abstracción que se generan para el proceso de producción de acetona y en la Tabla 11 se presentan las *Meta-units* resultantes.

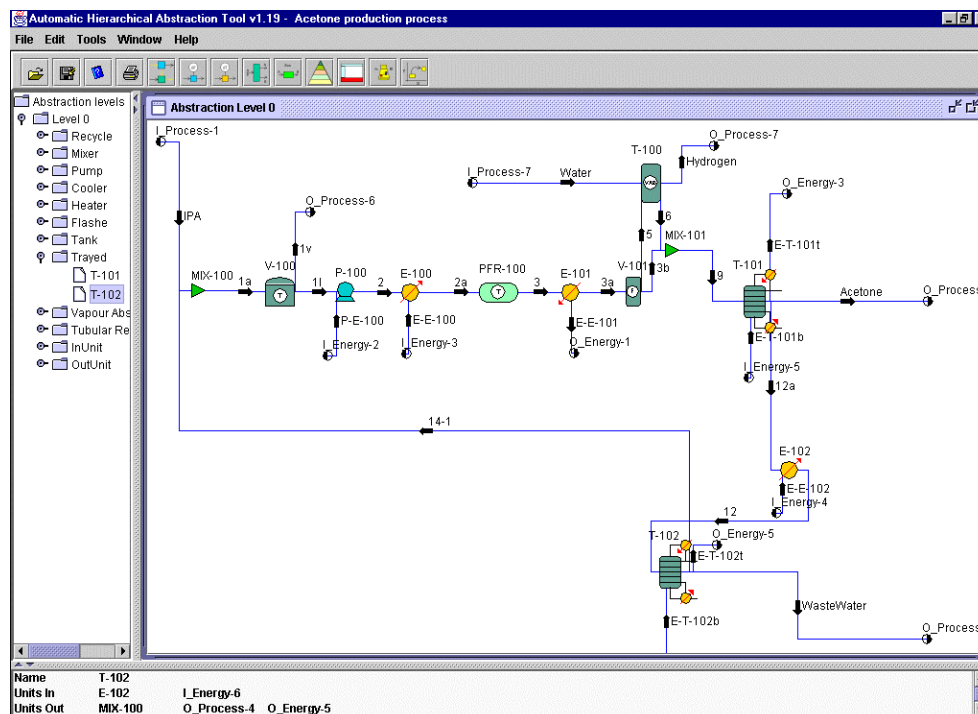


Figura 35 Nivel 0 de abstracción del proceso de producción de acetona.

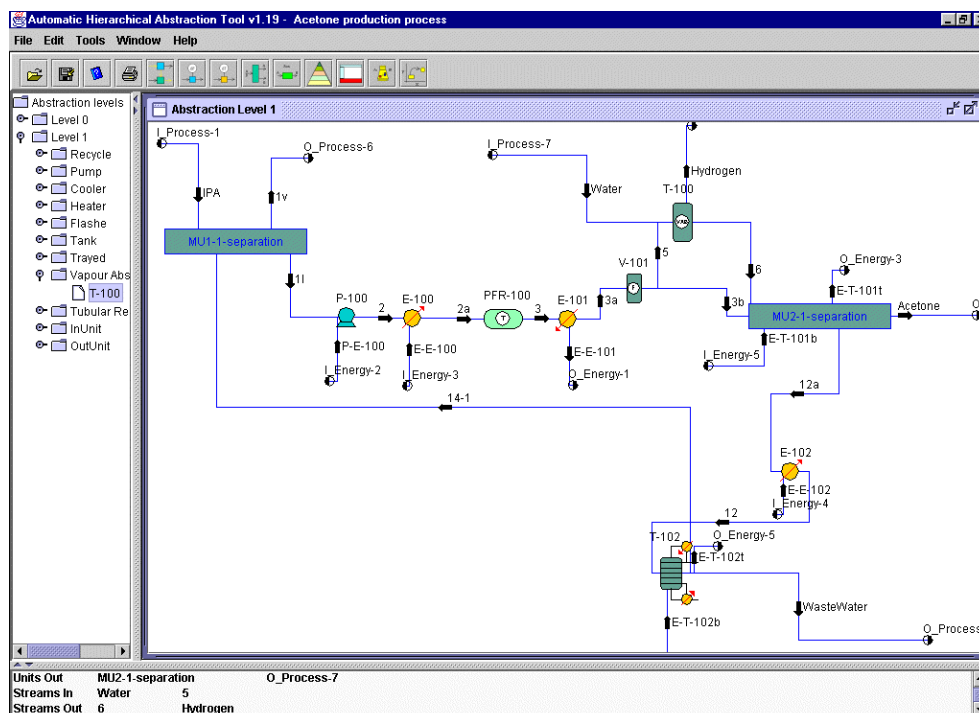


Figura 36 Nivel 1 de abstracción del proceso de producción de acetona.

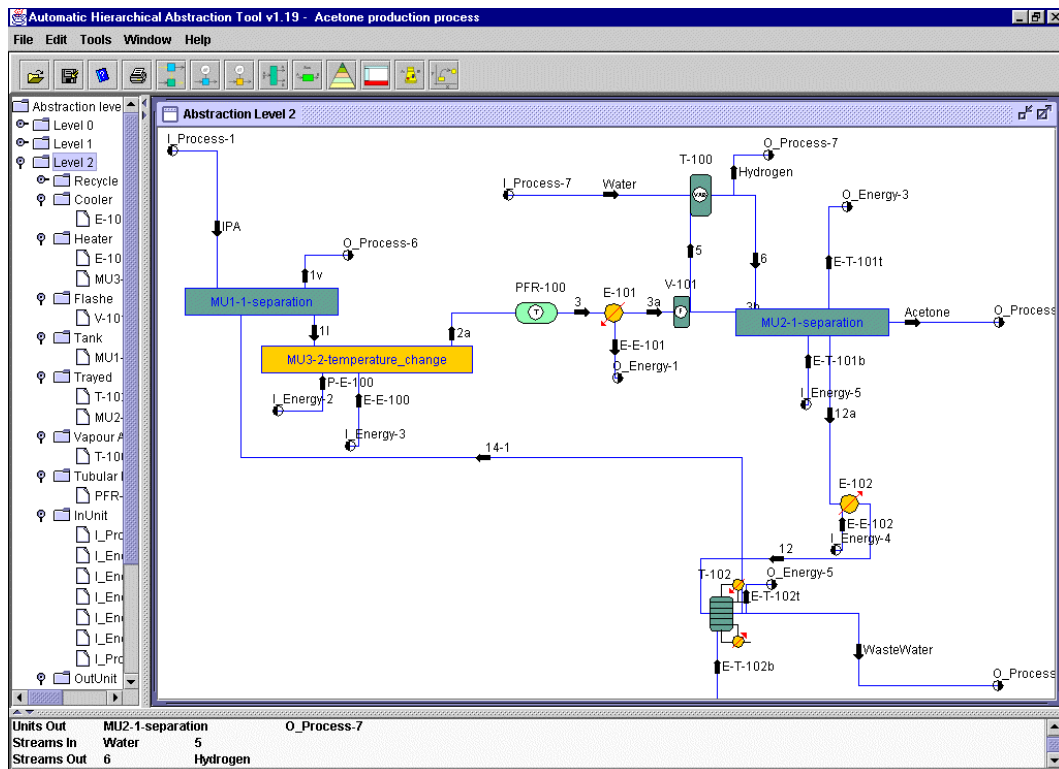


Figura 37 Nivel 2 de abstracción del proceso de producción de acetona.

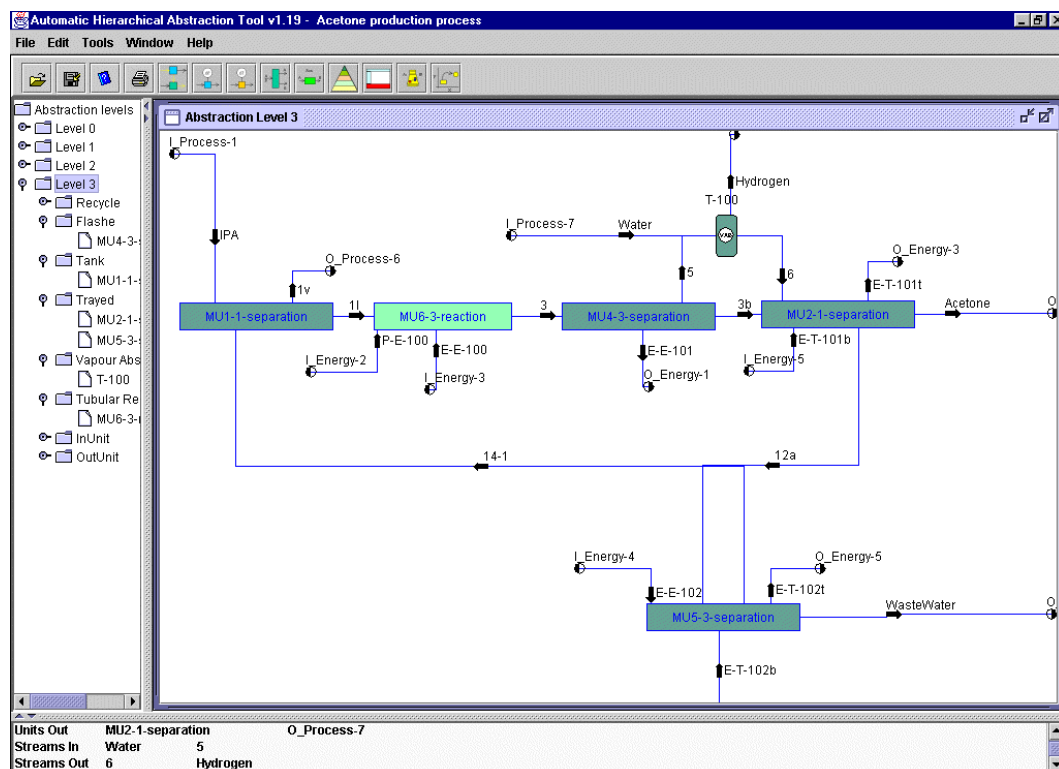


Figura 38. Nivel 3 de abstracción del proceso de producción de acetona.

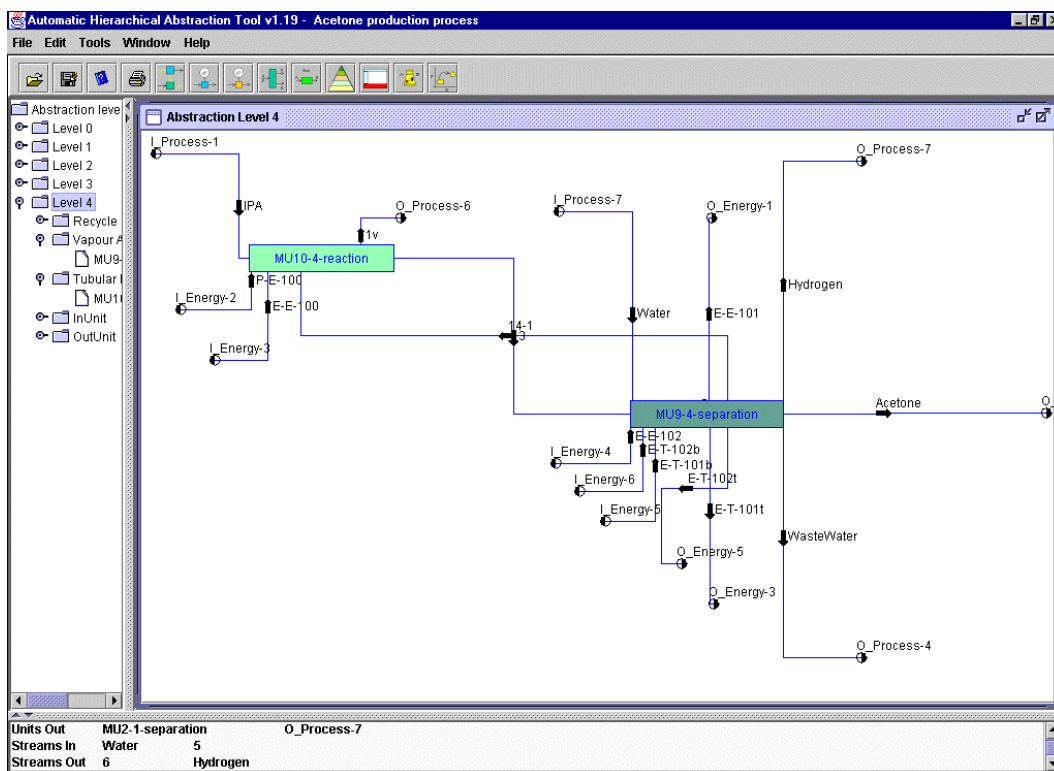


Figura 39. Nivel 4 de abstracción del proceso de producción de acetona.

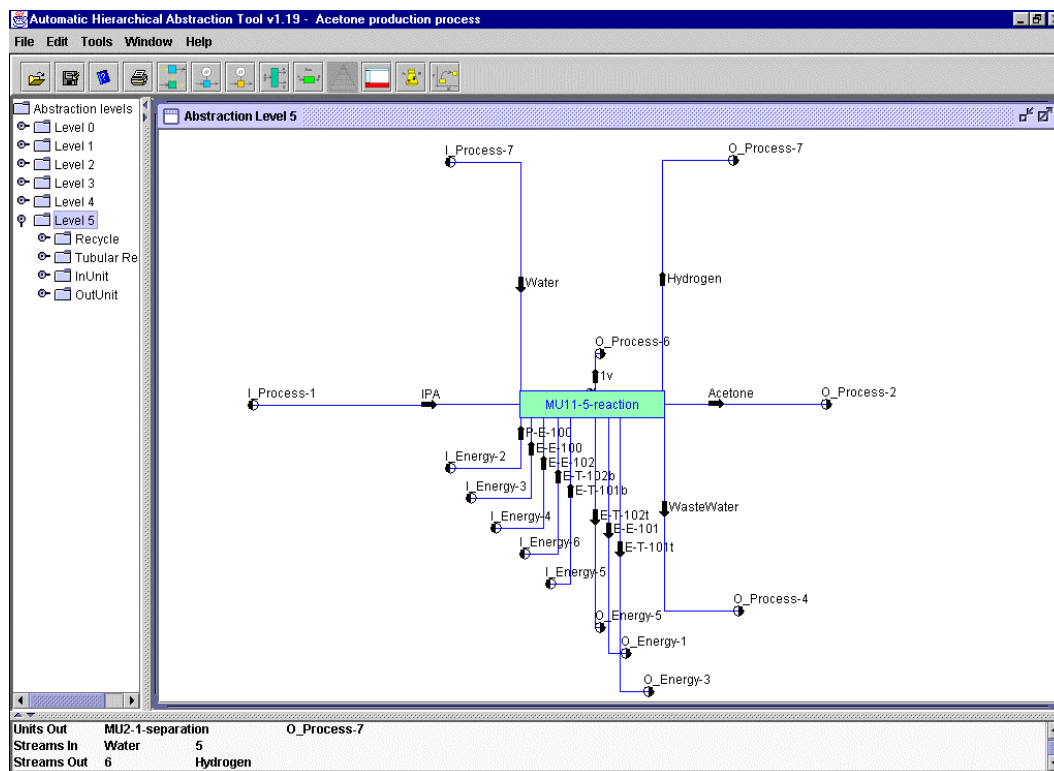


Figura 40. Nivel 5 de abstracción del proceso de producción de acetona.

Tabla 11. *Meta-units* generadas en los 5 niveles de abstracción del proceso de acetona.

<i>Meta-unit</i>	<i>Units/Meta-units</i> que se agrupan:	
	Jerarquía mayor	Jerarquía menor
MU1-1-separation	V-100	MIX-100
MU2-1-separation	T-101	MIX-101
MU3-2-temperature_change	P-100	E-100
MU4-3-separation	V-101	E-101
MU5-3-separation	T-102	E-102
MU6-3-reaction	PFR-100	MU3-2-temperature_change
MU7-4-separation	MU4-3-separation	T-100
MU8-4-separation	MU7-4-separation	MU2-1-separation
MU9-4-separation	MU5-3-separation	MU8-4-separation
MU10-4-reaction	MU6-3-reaction	MU1-1-separation
MU11-5-reaction	MU10-4-reaction	MU9-4-separation

### 5.3.2. INFORMACIÓN DE *UNITS* O *META-UNITS*

En cualquier momento es posible obtener información de las *Units* o *Meta-units* del proceso. Se cuenta con las siguientes formas de acceso:

1. Botón derecho del ratón. Se debe colocar el ratón sobre la *Unit/Meta-unit* de la cual se desee conocer información y oprimir el botón derecho. La información que se despliega es información resumida del modelo estructural: nombre de la *Unit/Meta-unit*, *Units/Meta-units* y sus correspondientes corrientes de proceso de entrada y de salida. En la Figura 41 se muestran varias ventanas generadas mediante esta funcionalidad.

2. Selección en el árbol de abstracción. En la ventana superior izquierda se encuentra el árbol de los niveles de abstracción. En este árbol se despliegan las *Units/Meta-units* presentes según el nivel de abstracción con base en su función específica definida en la Tabla 3. Si se desea saber que *Units/Meta-units* de una



determinada función específica se encuentran presentes en un nivel, basta con colocar el ratón sobre la función en particular y presionar el botón izquierdo del ratón. De la misma manera, si se desea saber mas detalle de una *Units/Meta-units* en particular, basta con seleccionarla y presionar el botón izquierdo del ratón para obtener la misma información que en el punto 1. En la Figura 41 se muestra como se puede generar la información con esta funcionalidad. En ambos casos, la información generada se despliega en la ventana inferior. Si se desea guardar la información que se despliega en esta ventana, se debe seleccionar “*Save displayed message to file*” del menú “*Tools*” y posteriormente dar el nombre al fichero con extensión “*\*.txt*” o “*\*.dat*”. En ambos casos el fichero que se genera puede ser editado con cualquier procesador de texto.

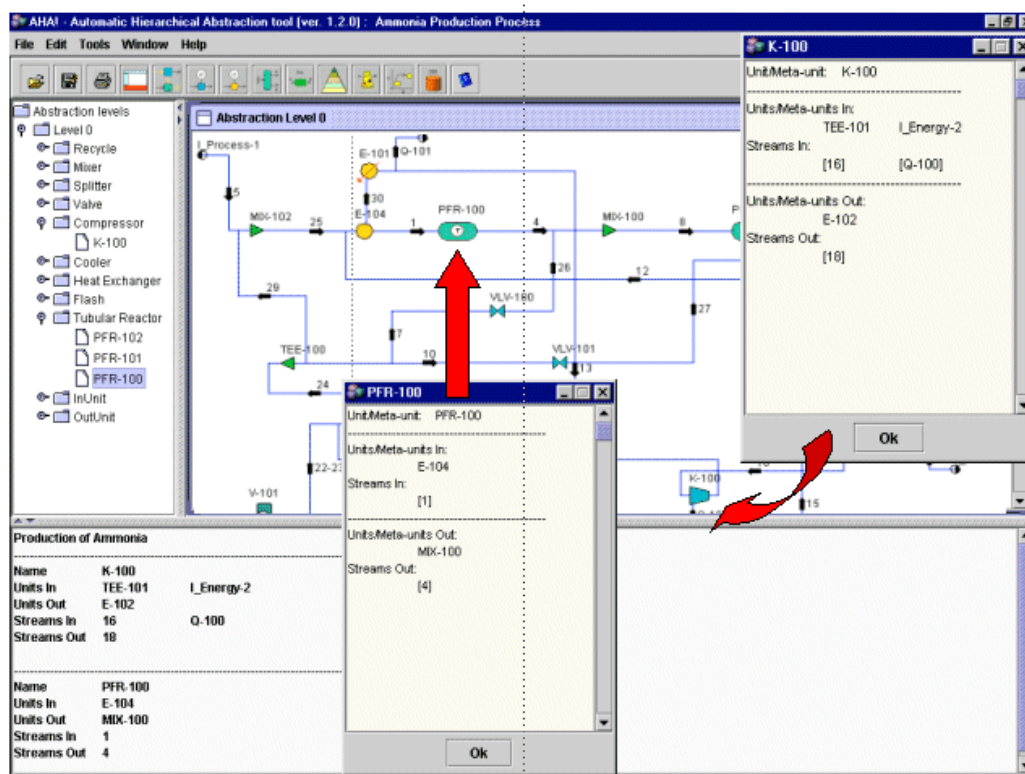


Figura 41. Información del modelo estructural de una *Unit/Meta-unit*.

3. Desde el Menú “*Tools* → *Information of Unit/Meta-unit*”. Con esta opción desde el menú de “*Tools*” se puede acceder a información detallada de las *Units* o *Meta-units*. En la Figura 42(a) se muestra la primer ventana que aparece después de haber seleccionado “*Information of Unit/Meta-Unit*” en donde se le pide al usuario seleccione que tipo de *Unit/Meta-unit* quiere recuperar con base en su función

general (*Flow, Pressure, Temperature, Separation, Reaction*). Una vez seleccionada la función general y pulsando el botón "Ok", aparece una segunda ventana con una lista de todas las *Unit/Meta-unit* presentes (ver Figura 42(b)). Después de seleccionar la *Unit-Meta-unit* y pulsar sobre el botón de "Ok" aparece la ventana que se muestra en la Figura 42(c), en la que se despliega la información disponible para el flash V-101.

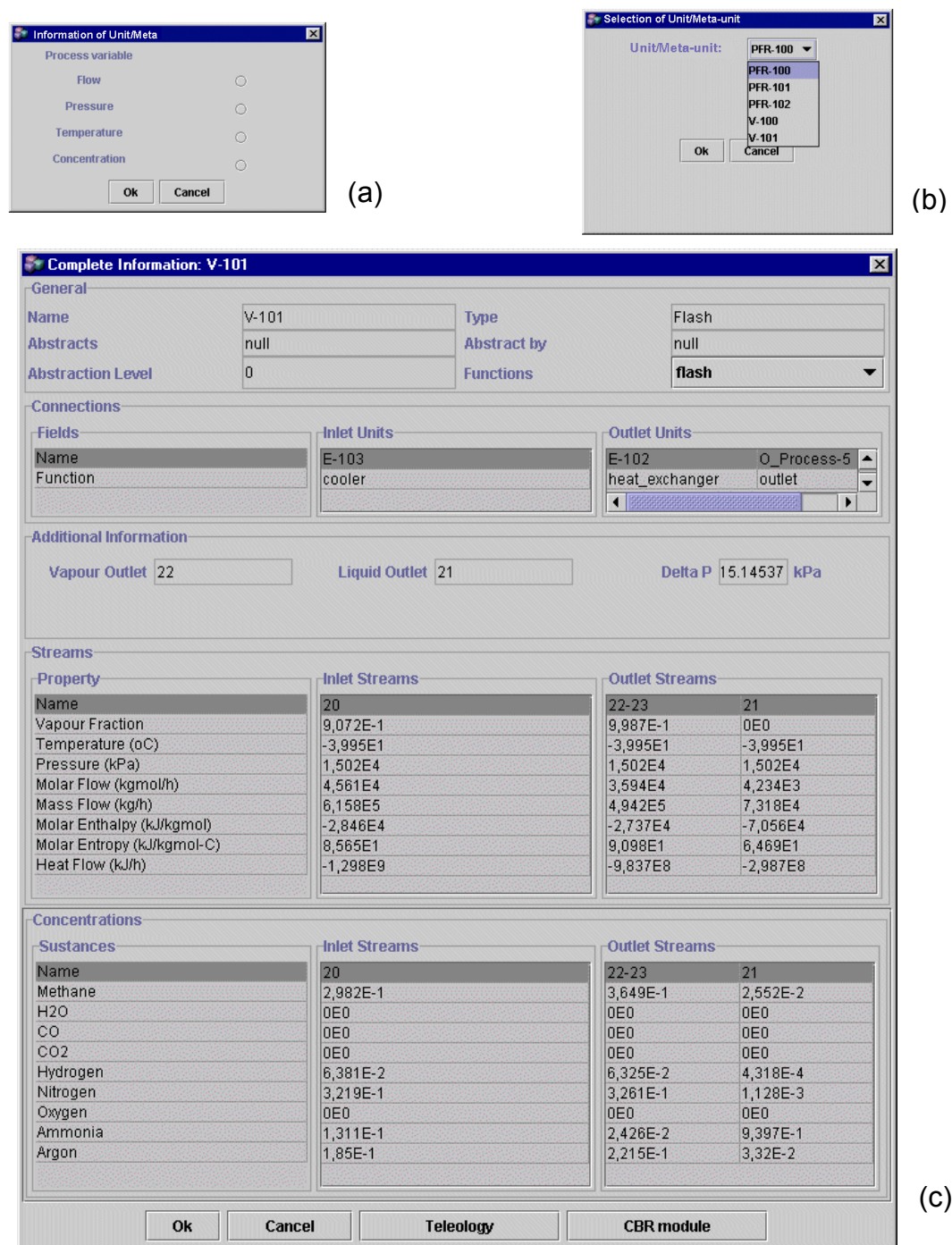


Figura 42. Información detallada de una *Unit/Meta-unit*.

Esta ventana (Figura 42(c)) esta dividida en 5 secciones principales. En la primera se muestra información general de la Unit/Meta-unit (Name, Type, etc.). En la segunda, las *Unit/Meta-unit* que están conectadas a la entrada (*Inlet Unit*) y salida (*Outlet Unit*). En la tercera se presenta información adicional (si es que aplica). En la cuarta se muestran algunas de las propiedades de las corrientes de proceso involucradas (*Name, Vapour Fraction, Temperature, etc.*) y finalmente en la quinta las concentraciones de las sustancias presentes en las corrientes de proceso. En esta misma ventana se cuenta con dos botones adicionales. El primero de ellos, denominado “*Teleology*”, permite al usuario obtener una descripción a diferentes niveles detallados del modelo teleológico de la Unit/Meta-unit (ver ejemplo para el flash V-101 en la Figura 43). El segundo botón denominado “*CBR module*” inicia el sistema CBR (la funcionalidad de este botón se explica con detalle en la sección 5.4.).

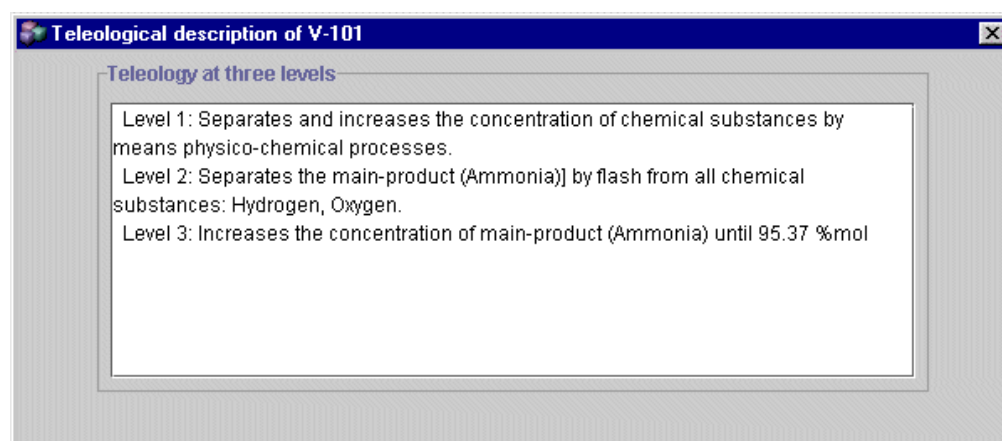


Figura 43. Modelo teleológico del flash V-101 del proceso de amoniaco.

Cabe mencionar que el modelo teleológico de la Figura 43 se obtiene con ayuda del sistema de reglas de producción descrito en el Anexo 3. Como se puede ver en esta figura, el modelo teleológico esta dividido en tres niveles: el primer nivel depende únicamente de la función general de la *Unit/Meta-unit* en cuestión, el segundo además de la función general depende de los vecinos y sus funciones generales y el tercero de sus propiedades y condiciones.

### 5.3.3. NAVEGACIÓN ENTRE NIVELES DE ABSTRACCIÓN

Cuando ya se han generado varios o todos los niveles de abstracción, es posible navegar a través de ellos para compararlos, hacer el seguimiento de la generación de las *Meta-units*, conocer el historial de la abstracción, identificar secciones del proceso, etc. Este historial se mantiene en la memoria del ordenador hasta que es guardado en un fichero. Los ficheros donde se guarda la información de AHA! deben tener la extensión "\*.rto". Una vez que los niveles de abstracción son recuperados del fichero correspondiente, proporcionan al usuario la misma funcionalidad que cuando fueron generados.

En la figura 44 se muestra el nivel 4 de abstracción del proceso de producción de amoníaco. Como se puede ver, podemos navegar entre los niveles de abstracción mediante: 1) la selección del nivel de abstracción que se desea (*Abstraction Level n*) del menú *Window*, 2) la selección con el ratón de la ventana que contenga el nivel deseado o 3) a selección con el ratón sobre el árbol de abstracción (*Abstraction levels*) de la ventana superior izquierda. Esta funcionalidad le permite al usuario visualizar el historial mediante el cual el proceso pudo ser diseñado utilizando la metodología jerárquica de Douglas.

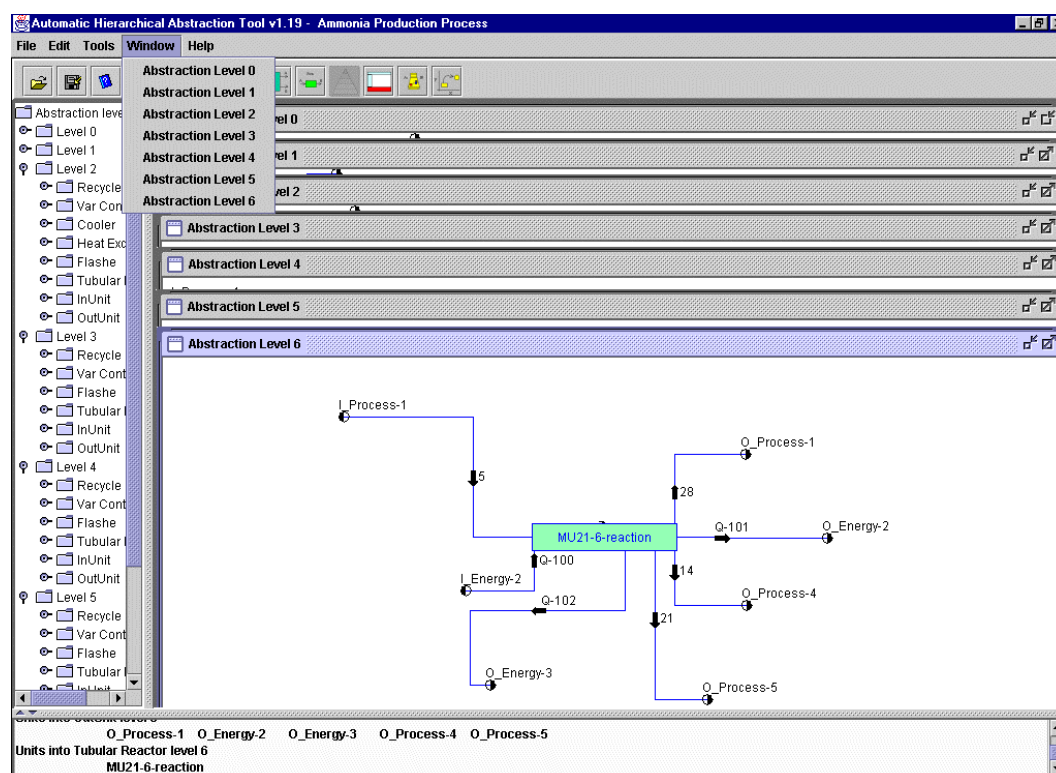


Figura 44. Navegación entre niveles de abstracción.

### 5.3.4. IDENTIFICACIÓN DE SECCIONES DE PROCESO

Esta funcionalidad le permite al usuario identificar *Meta-units* dependiendo de su función general: reacción, separación, cambio de temperatura, cambio de presión o cambio de flujo. De esta manera se pueden clasificar las diferentes secciones del proceso. En la Figura 45 se presenta el nivel 2 de abstracción con 3 tipos de *Meta-units* claramente identificadas: reacción, separación y cambio de temperatura.

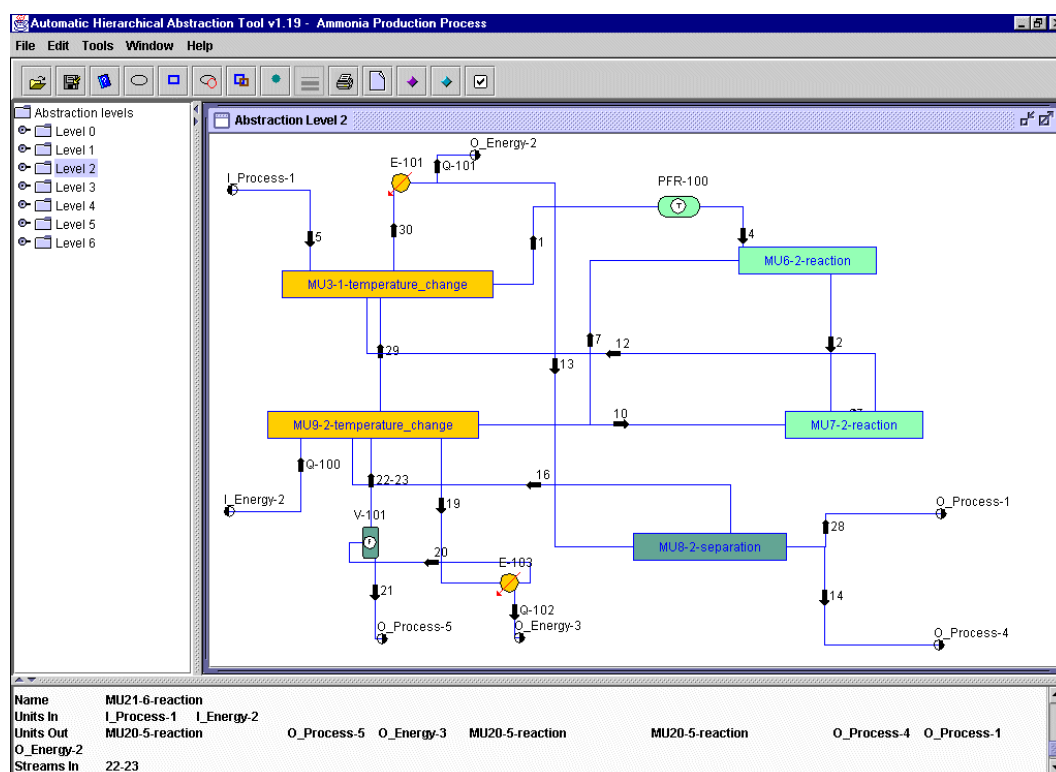


Figura 45. Identificación de secciones de proceso.

Como se puede observar en la figura anterior, la sección de reacción en este nivel de abstracción está formada por una *Unit* que no ha sido aún abstraída (PFR-100) y dos *Meta-units* (MU6-2-reaction, MU7-2-reaction). Esto concuerda con la descripción inicial del proceso, en el que se menciona que hay tres reactores en serie. La sección de separación está formada por una *Unit* (V-100) y una *Meta-unit* (MU8-2-separation). La MU8-2-separation hace un venteo de los productos de la reacción para posteriormente enviarlos a la sección de acondicionamiento




de temperatura-presión (MU9-2-temperature-change). En ésta sección de acondicionamiento intercambian energía térmica las corrientes provenientes de V-101 y MU8-2-separation. Por último, la sección de cambio de temperatura está formada por dos *Units* (E-101, E-103) y dos *Meta-units* (MU3-1-temperature-change, MU9-2-temperature-change). Ambas *Meta-units* tienen como función general el cambio de temperatura para lograr el acondicionamiento de las corrientes alimentación a las secciones de reacción y separación. La diferencia principal es que en la primera *Meta-unit* sólo hay un intercambio de energía entre las corrientes de proceso 5 y 29 con 12, mientras que en la segunda además del cambio de temperatura se debe tener en cuenta un incremento de la presión y una división de flujo debido a que ha abstraído una *Unit* de presión (K-100) y una de flujo (TEE-100).

## 5.4. RETRO

Una vez que se han analizado e identificado las secciones de proceso, así como generado los niveles de abstracción con ayuda de AHA!, el usuario puede generar alternativas de solución utilizando RETRO. Tal y como se mencionó en la sección 4.4., RETRO genera alternativas mediante la búsqueda de secciones susceptibles de cambio y la recuperación de secciones de procesos. Para realizar la búsqueda se apoya en información proporcionada por el usuario y los criterios funcionales descritos en la sección 4.4.1. y para realizar la recuperación se apoya en un sistema CBR. En las siguientes subsecciones se presenta la manera en que el usuario puede buscar secciones susceptibles de cambio y generar alternativas de solución.

### 5.4.1. CRITERIOS DE RETROFIT

El usuario tiene que seleccionar a partir de que nivel de abstracción le interesa aplicar el retrofit. Una vez seleccionado el nivel de abstracción se tiene que pulsar el icono de nuevos requerimientos (  *New requirements*) de AHA! para

iniciar la búsqueda. En la ventana (Figura 46) que aparece después de pulsar el icono se debe seleccionar alguna de las 4 variables de proceso que se presentan: Flujo (*Flow*), Presión (*Pressure*), Temperatura (*Temperature*) ó Concentración (*Concentration*). Estas variables de proceso tienen relación con los 5 criterios funcionales (ver sección 4.4.1.) con los que el sistema de diagnóstico busca las *Units/Meta-units* que los cumplen en el nivel de abstracción seleccionado.

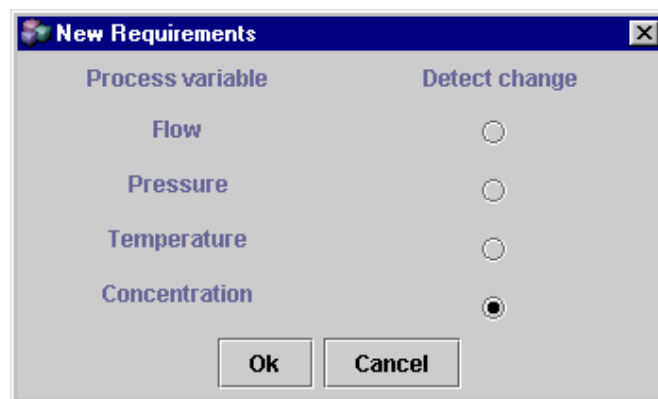


Figura 46. Selección de criterios de búsqueda.

Cabe mencionar que si el usuario selecciona como variable de estudio “Concentración”, el sistema adicionalmente pide al usuario que seleccione en una nueva ventana (Figura 47) una sustancia de entre las presentes en el proceso. Esta selección permite conocer en donde reacciona o se separa la sustancia en los sistemas de reacción y/o separación respectivamente.

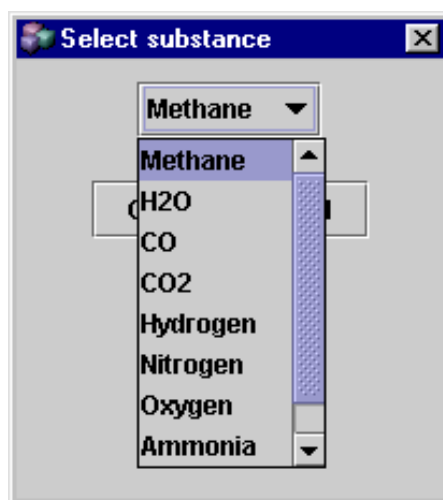


Figura 47. Selección de una sustancia con el criterio de “concentración” en el proceso de Amoniaco.

Como resultado del sistema de diagnóstico, se obtiene:

- Una lista de las *Units/Meta-units* las cuales pueden ser utilizadas como punto de inicio para generar alternativas.
- Información en la ventana inferior de AHA! que muestra el detalle de las *Units/Meta-units* encontradas que satisfacen el criterio seleccionado.

En la Figura 48 se muestra la lista de *Units/Meta-units* a partir del segundo nivel de abstracción del proceso amoniaco cuando se selecciona como criterio de búsqueda concentración y como sustancia de interés el amoniaco.

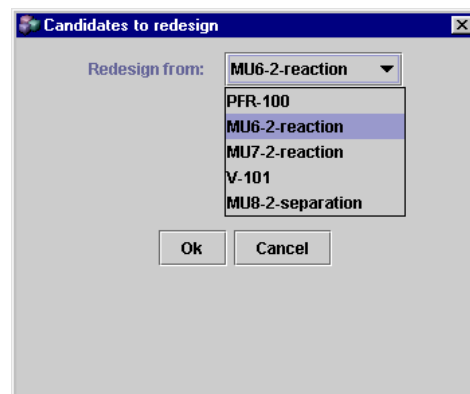


Figura 48. Lista de *Units/Meta-units* que satisfacen el criterio de concentración.

Como se puede ver en la Figura 48 el sistema recupera 2 *Units* (una de reacción y una de separación) y 3 *Meta-units* (2 de reacción y 1 de separación) que satisfacen el criterio de cambio de concentración por reacción o separación.

#### 5.4.2. RECUPERACIÓN DE ALTERNATIVAS DE SOLUCIÓN

Con la lista de *Units/Meta-units* el usuario debe seleccionar una de ellas. En la Tabla 12 se presenta un resumen de las propiedades de *Units/Meta-units* de reacción que se recuperan: PFR-100, MU6-2-reaction y MU7-2-reaction. Como se puede ver en ésta tabla, las condiciones de operación de las tres *Unit/Meta-units* son muy similares, pero la conversión es muy diferente: 22.19%, 3.70E-02% y 2.07E-02% respectivamente. Bajo estas circunstancias, el usuario podría explorar



mejoras en las conversiones de las 2 *Meta-units*. Si se selecciona la *Meta-unit* MU6-2-reaction de la lista de la Figura 48, se despliega la ventana que se muestra en la Figura 49 (esta ventana contiene la misma información que se comentó en la Figura 42). En esta ventana hay un botón que dice “*CBR module*”, el cual se debe pulsar para iniciar el sistema CBR. Una vez iniciado el sistema CBR aparece la ventana que se muestra en la Figura 50, en la cual el usuario puede especificar algunas propiedades del “caso problema” antes de que el sistema recupere los casos mas similares al planteado.

Tabla 12. *Meta-units* sugeridas por el sistema de diagnóstico.

Concepto	Units/Meta-units		
	PFR-100	MU6-2-reaction	MU7-2-reaction
Temperatura ( °C )	393.2	393.2	393.1
Presión (kPa)	1.50E+04	1.49E+04	1.49E+04
Conversión (%)	22.19	3.70E-02	2.07E-02

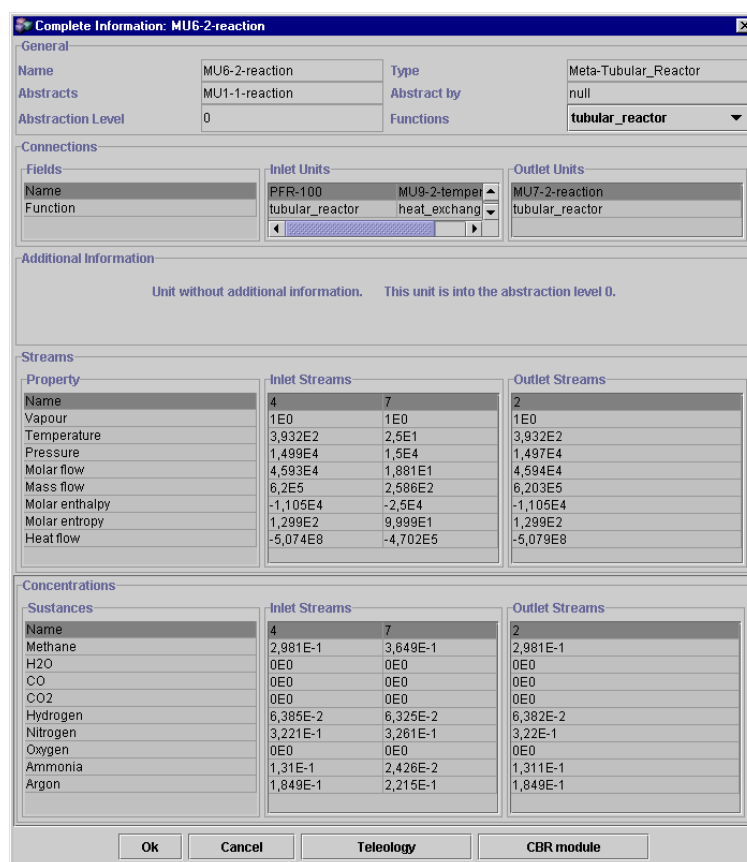
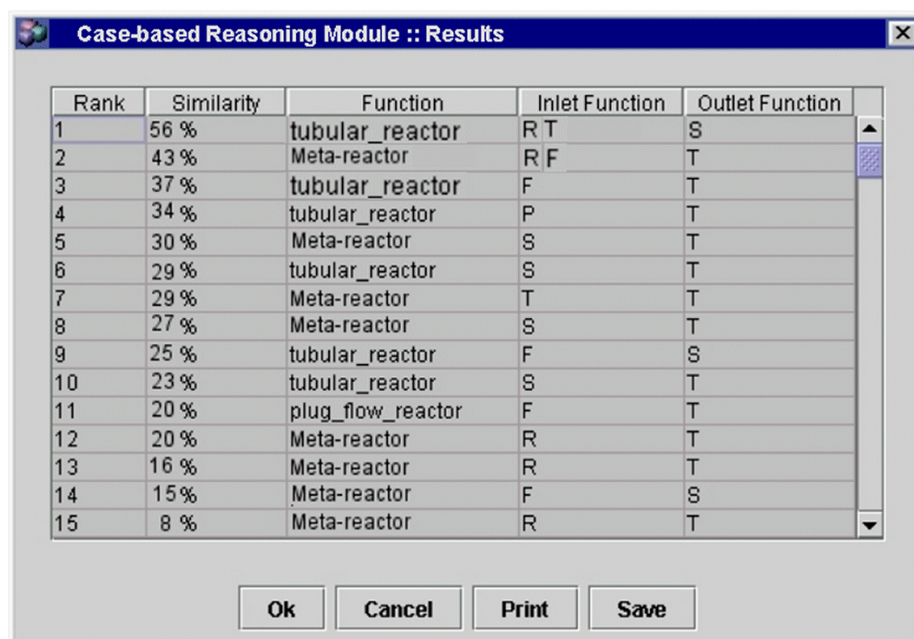


Figura 49. Información de la Meta-unit MU6-2-reaction del proceso de amoniaco.



ordenados de mayor a menor similitud. Cabe mencionar que si se tiene una similitud local grande, no necesariamente significa que se vaya a tener una similitud global alta. Como se puede ver en la Figura 51, los primeros tres casos tienen una similitud con el “caso problema” de 56, 43 y 37 % respectivamente. Estas similitudes resultan de la similitud de los modelos estructural (2 entradas y 1 salida), funcional (“reacción” como función general) y teleológico (transformación de la materia). Un resumen de las propiedades de las tres primeras alternativas se muestra en la Tabla 13.



Rank	Similarity	Function	Inlet Function	Outlet Function
1	56 %	tubular_reactor	R T	S
2	43 %	Meta-reactor	R F	T
3	37 %	tubular_reactor	F	T
4	34 %	tubular_reactor	P	T
5	30 %	Meta-reactor	S	T
6	29 %	tubular_reactor	S	T
7	29 %	Meta-reactor	T	T
8	27 %	Meta-reactor	S	T
9	25 %	tubular_reactor	F	S
10	23 %	tubular_reactor	S	T
11	20 %	plug_flow_reactor	F	T
12	20 %	Meta-reactor	R	T
13	16 %	Meta-reactor	R	T
14	15 %	Meta-reactor	F	S
15	8 %	Meta-reactor	R	T

Figura 51. *Units/Meta-units* recuperadas de la biblioteca de casos.

Tabla 13. Información general de las tres alternativas mas similares a la *Meta-unit* MU-6-2-reaction del procesos de Amoniaco.

<b>Concepto</b>	<b>Units/Meta-units</b>		
	<b>1</b>	<b>2</b>	<b>3</b>
Temperatura ( °C )	190	700	516
Presión (kPa)	9.97E+03	3.54E+03	2.65E+03
Reactivos (familia)	CO, H <sub>2</sub> (inorgánico)	Tolueno (alqueno), H <sub>2</sub> (inorgánico)	Etileno (alquino), O <sub>2</sub> (inorgánico)
Producto(s)	Metanol	Benceno, Metano	Oxido de etileno
Conversión (%)	49.19	53.45	19.82
Tipo de reactor	PFR	PFR	PFR

### 5.4.3. ADAPTACIÓN DE ALTERNATIVAS DE SOLUCIÓN

---

Como se puede ver en la Tabla 13, la mayor similitud de las alternativa que se recuperan de la base de casos es del 56%. Este resultado no parece muy prometedor para la búsqueda de mejores conversiones para las Meta-units (*MU6-2-reaction* y *MU7-2-reaction*). Para explorar nuevas alternativas y resolver este problema se propone analizar los siguientes cuatro factores que afectan el funcionamiento de un reactor químico [Turton et al., 1998]:

- 1) Cinética de la reacción y termodinámica. La influencia de las variables intensivas (temperatura, presión y concentración) sobre el funcionamiento de un reactor está definido en la cinética y equilibrio de la reacción. Estas variables afectan la velocidad de reacción y determinan el grado en el cual un reactivo se convierte en producto en un reactor ó el tamaño del reactor para lograr una conversión determinada. La termodinámica fija un límite teórico del grado de conversión de los reactivos a productos; éste grado de conversión no puede ser modificado por el uso de catalizadores.
- 2) Parámetros del reactor. Aquí están incluidos el volumen del reactor, el tiempo de residencia (volumen del reactor/flujo volumétrico de entrada) y la configuración del reactor. Se pueden tener dos problemas,
  - Problema de diseño, en el cual se calcula el volumen del reactor para lograr una conversión determinada a partir de una cinética de reacción, su termodinámica, el tiempo de residencia y una configuración para el reactor y la transferencia de energía.
  - Problema de funcionamiento, en el cual se tiene el volumen del reactor fijo y se desea evaluar los cambios que provocan en la conversión la temperatura, presión, tiempo de residencia, catalizador y la configuración del reactor y de la transferencia de energía.

- 3) Producción deseada. La conversión, selectividad y producción deseada son términos que cuantifican la cantidad de reactivo que reacciona para formar un producto. Generalmente, el funcionamiento de un reactor se expresa en términos de éstos parámetros.
  
- 4) Transferencia de energía en el reactor. En una reacción química se puede generar (reacción exotérmica) o consumir energía (reacción endotérmica). La velocidad de reacción depende fuertemente de la temperatura. Un punto importante a considerar es la interacción entre la cinética de la reacción y la transferencia de energía. En las reacciones exotérmicas, la energía generada por la reacción se debe remover eficientemente para evitar incrementos de la temperatura que puedan dañar a los productos deseados o al catalizador. En las endotérmicas, se debe adicionar energía de forma tal que se lleve a cabo la reacción. La velocidad de la transferencia de energía depende de la configuración del reactor (incluyendo la configuración para la transferencia de energía), las propiedades de las corrientes de proceso que portan a los reactivos, las propiedades del medio de transferencia de energía y la temperatura a la que se lleva a cabo la reacción.

Por lo que respecta a la cinética de la reacción y termodinámica se cuenta con la siguiente información que se apoya en el principio de Le Chatelier [AUS-e-TUTE, 2005]:

- Un aumento de la presión a volumen constante provoca que el equilibrio de la reacción se desplace al lado derecho de la ecuación 5, resultando un incremento en la producción de amoníaco. Este desplazamiento es debido a que en la ecuación 5 hay mas moléculas del lado izquierdo (1 de  $N_2$  y 3 de  $H_2$ ) que de lado derecho (2 de  $NH_3$ ) y eso provoca que el sistema tienda a eliminar el efecto del incremento de la presión reduciendo el número de moléculas presentes.

- Una disminución de la temperatura a volumen constante provoca que el equilibrio se desplace al lado derecho de la ecuación 5 puesto que la reacción es exotérmica, resultando un incremento en la producción de amoníaco. La reducción de la temperatura hace que el sistema se ajuste para minimizar el efecto del cambio, es decir, producirá mas calor puesto que la energía es un producto de la reacción. Sin embargo, la velocidad de reacción a temperaturas bajas es muy lento; se recomienda utilizar temperaturas altas que permitan una adecuada velocidad de producción con una buena producción de amoníaco.

Del análisis de los factores que afectan el funcionamiento de un reactor y la información adicional con que se cuenta sugieren como primer paso proponer alternativas de proceso modificando la temperatura y/o presión de los sistemas de reacción para aumentar la conversión. Cabe mencionar que respecto al segundo factor (parámetros del reactor) es claro que se tiene el problema de funcionamiento, debido a que en los problemas de retrofit se desea utilizar al máximo posible los equipos y dispositivos existentes. Con relación al tercer factor (producción deseada) es justamente el que se desea explorar ya que las conversiones en las *Meta-units* son muy bajas. Finalmente, el factor de transferencia de calor tiene especial interés si se desea explorar cambios en la temperatura y/o presión.

Para proponer nuevas alternativas en función de cambios en la temperatura se puede utilizar el rango de 190 a 700 °C de las alternativas recuperadas (ver Tabla 13). En la Figura 52 se muestra el efecto de la temperatura y la presión sobre el porcentaje de amoníaco producido mediante la síntesis de Haber-Bosch [CIEC, 2005].

Como se puede ver en la Figura 52, a temperaturas por encima de 400 °C y 100 atmósferas de presión, el porcentaje de producción de amoníaco es menor del 20 %. Esto implica que el rango búsqueda de 400 a 700 °C se elimine y sólo se haga una búsqueda en el rango de 190 a 400 °C.

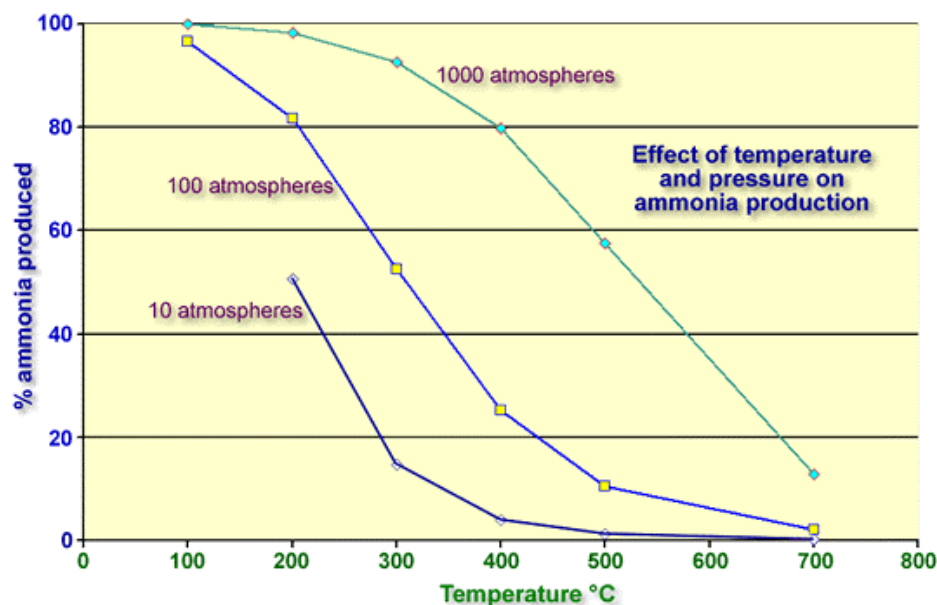


Figura 52. Efecto de la temperatura y presión sobre la producción de Amoniaco en la síntesis de Haber-Bosch [CIEC, 2005].

Con ayuda de las Tablas 8 y 9, se obtienen los equipos y dispositivos que constituyen la Meta-unit MU6-2-reaction. En este caso, es el reactor PFR-101, la válvula VLV-100 y el mezclador MIX-100. Puesto que la reacción es exotérmica se debe adicionar una corriente de energía que sea capaz de retirar el calor generado por la reacción para poder tener las condiciones requeridas de temperatura a la salida del reactor. Considerando que la temperatura de entrada del reactor es constante (393 °C) se modifica la temperatura de salida para generar una gráfica de conversión vs. temperatura del reactor PFR-101, así como de la energía de enfriamiento requerida. En la Figura 53 se muestran la curva de conversión y consumo de energía contra temperatura de salida del reactor obtenida con ayuda del simulador Hysys.Plant™.

Como se puede ver en la Figura 53, la conversión máxima que se puede obtener es del 15% con una temperatura de salida del reactor de 300 °C y un consumo energético de  $2.77e+08$  kJ/h. El costo del uso adicional de energía de enfriamiento sería del orden de 60 USD/h, calculado a partir de los datos proporcionados en la Tabla 3.4, pag. 87 de Turton y col., [Turton y col., 1998]. El incremento de la conversión y por ende en la producción de amoniaco sería del



orden de 38 T/h. Este incremento en la producción de amoniaco podría representar unos 5700 USD/h utilizando el dato del costo por tonelada de amoniaco de 150 USD reportado por la Confederación de Cooperativas Agrarias de España en su reporte de septiembre de 2004 [CCAIE, 2004]

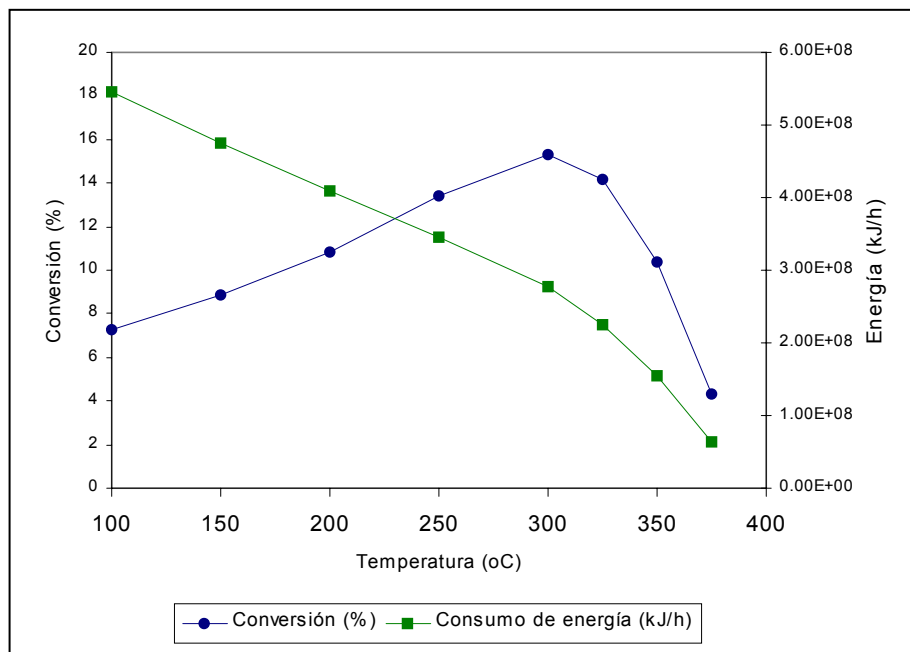


Figura 53. Efecto de la temperatura sobre la conversión en el reactor PRF-101.

Un segundo camino para proponer nuevas alternativas sería el “eliminar” del proceso las dos *Meta-units* de la Tabla 12 debido a la baja conversión que alcanzan. Esta nueva alternativa sería equivalente al nivel 5 de abstracción, en el cual hay un sistema de reacción y un sistema de separación. En esta nueva alternativa se propone que el sistema de reacción este formado únicamente por el reactor PFR-100. Respecto a los dos sistemas de separación con que se cuenta (V-100 y V-101), se puede ver que el flujo másico de la fase líquida del separador V-100 es cero. Esta situación permite “eliminar” el separador V-100 y proponer que el sistema de separación este formado sólo por el separador V-101. Estos cambios se ven reflejados en la Figura 54, en donde se ha simulado el proceso de producción de amoniaco con ayuda del simulador Hysys.Plant™ eliminando los reactores PFR-101, PFR-102 y el separador V-100.



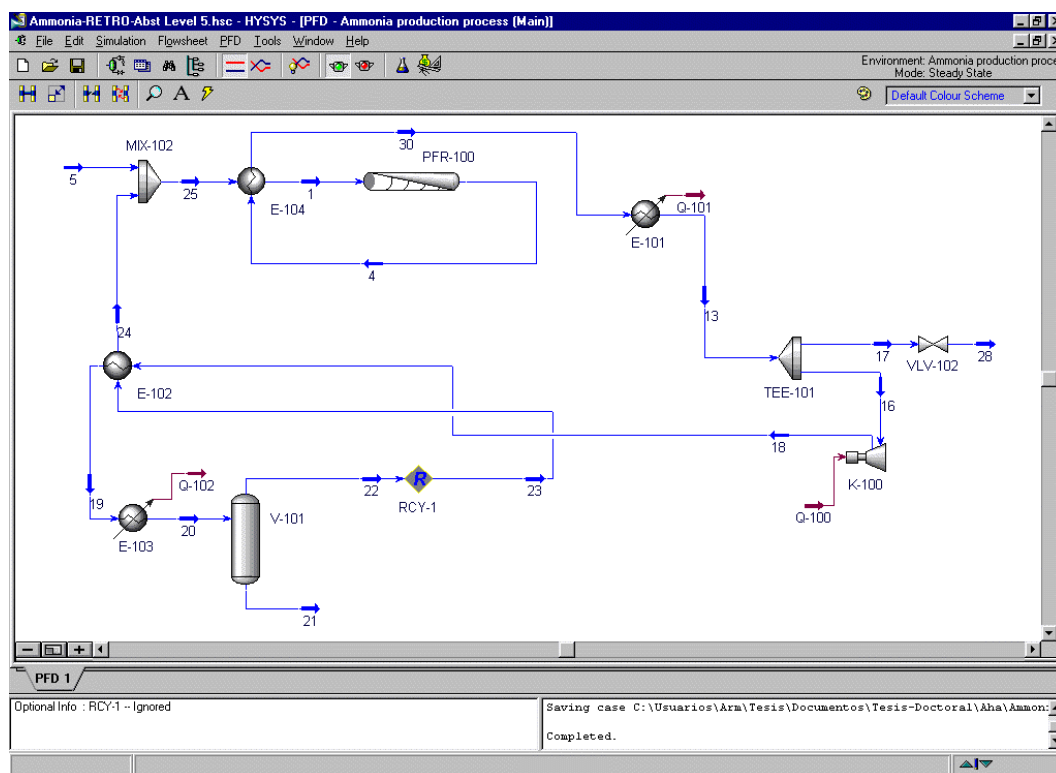


Figura 54. Simulación del nivel 5 de abstracción del proceso de Amoniaco.

El costo de operación de los equipos eliminados se puede calcular utilizando los datos proporcionados en la Tabla 3.3, pag. 83 de Turton et al., [Turton et al., 1998]. En la Tabla 14 se presentan los factores a utilizar para el cálculo del costo de operación.

Tabla 14. Factores para estimar el costo de operación de equipos de proceso.

Tipo de Equipo	Número de Equipos	Operadores por equipo <sup>(1)</sup>	Total operadores por equipo <sup>(1)</sup>
Reactores	2	0.5	1
Separadores	1	0.35	0.35
TOTAL			1.35

(1) Factores tomados de la Tabla 3.3, pag. 83 de Turton y col., [Turton y col., 1998]

Trabajadores para operación anual = (factor de disponibilidad)(Total operadores)

Factor de disponibilidad = 4.5 (pag. 84 de Turton et al. [Turton et al., 1998])

Trabajadores para operación anual = (4.5)(1.35) = 6.075 ≈ 6 trabajadores

Costo de operación = (Trab. para operación anual)(Salario anual de operador)

Salario anual de operador = 46,800 USD/año (pag. 84 de Turton et al. [Turton et al., 1998]. Este salario fue calculado con la media de los salarios de los operadores de plantas químicas en EEUU a mediados de 1996).

Costo de operación = (6)(46,800) = 280,800 USD/año

Esto implica un ahorro de 280,000 dólares americanos al año si se realizan los cambios sugeridos de eliminación de equipos del procesos.

Con estos dos ejemplos de adaptación y evaluación de alternativas de solución queda de manifiesto que esta etapa de la metodología del retrofit de procesos depende fuertemente de la experiencia y conocimientos de diseñador, tal y como se mencionó en la sección 3.4. El diseñador es el responsable y quien debe tomar las decisiones sobre los cambios que se necesiten hacer en el proceso para satisfacer los nuevos requerimientos.

## 5.5. DISCUSION DE RESULTADOS

En este apartado se presenta un análisis y discusión de los resultados obtenidos. Para facilitar esta tarea se hace una división en dos partes: desarrollo y aplicación.

En términos de la fase desarrollo como se puede ver en el Capítulo 3, las cuatro etapas planteadas han sido cubiertas en su totalidad. Es claro que hace falta complementar algunos apartados de HEAD, AHA! y RETRO. En lo que respecta a HEAD es deseable mejorar la interfaz de usuario así como su capacidad de extraer información de otras plataformas de simuladores comerciales. En relación a AHA! es necesario implementar el modelo de comportamiento en todos los niveles de abstracción, el motor de inferencia y la interfaz de usuario y mejorar la parte gráfica de la interfaz. Por lo que respecta a RETRO se debería incrementar el número de casos del sistema CBR, así como implementar un sistema de ayuda a la toma de decisiones para diseñadores con poca experiencia.

Por lo que respecta a la aplicación de HEAD es claro que su desempeño en la extracción de información es adecuado debido a que cumple todas y cada una de las especificaciones descritas en la sección 3.1. Esto permite que HEAD exporte la información de manera completa y en el formato adecuado para su posterior uso en AHA!

En lo que corresponde a la aplicación de AHA! y con base en lo especificado en la sección 3.2 para su funcionamiento y lo que se puede ver de la sección 5.3. su desempeño es satisfactorio debido a las siguientes razones:

- Importa los ficheros generados con HEAD sin ningún problema.
- Hace el análisis de la información proporcionada por HEAD para su posterior representación en los modelos de conocimiento (estructural, de comportamiento, funcional y teleológico) con los que cuenta.
- Hace la representación del proceso real (nivel 0 de abstracción).
- Genera los diferentes niveles de abstracción de un proceso con base en información proporcionada por el usuario, unas reglas de agrupación (Anexo 4) y una jerarquía de precedencia.
- Genera con ayuda del modelo teleológico una posible explicación de la razón por la cual se ha puesto una determinada *Unit* o *Meta-unit* en el proceso.
- Le proporciona la capacidad al usuario de,
  - obtener información en cualquier nivel de abstracción de las *Units* o *Meta-units* presentes.
  - navegar entre los diferentes niveles de abstracción.
  - identificar secciones de proceso con base a su función general.
  - guardar toda la información generada para su análisis posterior.

Cabe destacar que dos de las razones expuestas anteriormente, específicamente la generación de niveles de abstracción y la identificación de secciones de proceso son dos herramientas básicas e importantes para la aplicación del retrofit de procesos.

Finalmente, por lo que respecta a la aplicación de RETRO se puede decir que cumple con las especificaciones descritas en la sección 3.3., tal y como queda demostrado en la sección 5.4. El sistema CBR que lo forma permite realizar una búsqueda y recuperación de casos con base en la similitud global descrita en la sección 4.4.2.2. Los casos recuperados y la información que proporciona ayuda al diseñador en la búsqueda de alternativas para su posterior evaluación.

Es evidente la necesidad de mejorar el sistema CBR para que éste pueda proporcionar alternativas que requieran menor esfuerzo por parte del diseñador en la etapa de adaptación. Para cumplir este objetivo se requiere:

- Aumentar el número de casos de la base de casos de tal manera que el sistema CBR cuente con el mayor conocimiento posible.
- Implementar el modelo de comportamiento de las *Units* y *Meta-units* en todos los niveles de abstracción para que el usuario pueda realizar pruebas en línea y no tener que depender de herramientas de simulación.
- Diseñar e implementar un sistema de ayuda a la toma de decisiones en la etapa de adaptación.

El primer punto es una actividad que requiere de una ayuda y colaboración muy importante por parte de la industria para proporcionar información de sus procesos. En este caso se podrían establecer convenios de colaboración con las industrias para que faciliten información y reciban a cambio asesoría en la investigación de mejoras de sus procesos. El segundo y el tercer punto podrían ser un trabajo de investigación futuro que de continuidad a la investigación realizada.

Con estas herramientas informáticas se facilitará al usuario la aplicación del retrofit de procesos disminuyendo el tiempo de representación, análisis y búsqueda de las alternativas de proceso que sean potencialmente atractivas técnica y económicamente.

## 5.6. RESUMEN

---

En este capítulo se presentó la aplicación de los prototipos informáticos que forman parte de un sistema basado en conocimientos y que implementan la metodología de retrofit propuesta en el capítulo 3.

En la sección 5.1. se describen los casos de estudio, haciendo especial énfasis en el proceso de producción de amoniaco y el de acetona. En la sección 5.2. se muestra como HEAD realiza la extracción de información de los dos procesos mencionados anteriormente, los cuales han sido simulados en Hysys.Plant™. La información extraída por HEAD es guardada y enviada para su posterior análisis en AHA! (sección 5.3.).

AHA! analiza la información para representar los equipos y dispositivos (*Units*) de procesos usando modelos múltiples. Como se puede ver en esta sección, AHA! genera niveles de abstracción que permiten identificar secciones de proceso. Cabe mencionar que AHA! permite al usuario ver información específica y detallada de todas las *Units* y *Meta-units* en cualquier nivel de abstracción.

En la sección 5.4 se muestra como RETRO ayuda a la búsqueda y recuperación de alternativas de solución con base en información del usuario, criterios funcionales y un sistema de razonamiento basado en casos. En esta sección se pueden ver dos alternativas que mejoran económicamente al proceso de producción de amoniaco inicialmente descrito en la sección 5.1. Cabe mencionar que la etapa de adaptación y evaluación depende fuertemente de la experiencia y conocimientos del diseñador, debido a que él debe tomar las decisiones de cuales son las modificaciones que se deben realizar al proceso real para satisfacer los nuevos requerimientos.

Finalmente en la sección 5.5 se presenta una discusión de los resultados obtenidos. Como se menciona en esta sección, los prototipos funcionan adecuadamente según se diseñaron y especificaron, pero es evidente que se

requiere invertir mas tiempo en el desarrollo y mejora de los mismos. Destacan las mejoras al sistema de razonamiento basado en casos y la implementación de un sistema de toma de decisiones para la etapa de adaptación de alternativas de solución.

En el siguiente y último capítulo se presentan las conclusiones, contribuciones y trabajos futuros de la presente investigación.

## Capítulo 6.

# CONCLUSIONES, CONTRIBUCIONES Y TRABAJO FUTURO

Como resultado del planteamiento, desarrollo e implementación de la metodología de retrofit de procesos químicos, así como de su aplicación, el presente capítulo está dividido en tres secciones. En la primera se presentan las conclusiones derivadas del trabajo realizado, en la segunda se hace mención de las contribuciones generadas en el área de ingeniería química y en la última se dan algunas posibles líneas de investigación futuras.

En la investigación que realizó Gundersen [Gundersen, 1990] sobre la aplicación de los métodos sistemáticos en el retrofit de procesos químicos resalta la necesidad e importancia del retrofit. Las conclusiones principales de Gundersen fueron:

- 1) la mayoría de los proyectos en la industria de procesos eran proyectos de retrofit (cerca del 70%)
- 2) algunos métodos sistemáticos para el retrofit de procesos se basaban en los mismos métodos que los que se emplean en el diseño.

Ambas conclusiones fueron recientemente confirmadas por Westerberg [Westerberg, 2004] al comentar por un lado que en las últimas dos décadas los proyectos en la industria han sido mayoritariamente proyectos de retrofit y por otro que los métodos de diseño son aplicables a problemas de retrofit. Westerberg hace especial mención de que la solución de los problemas de retrofit es mas compleja que en los problemas de diseño. Esta consideración es por el hecho de que en los problemas de retrofit además de tener las soluciones proporcionadas por las metodologías de diseño se debe considerar cuales de los equipos y dispositivos existentes se deben sustituir o reutilizar.

Tanto Gundersen como Westerberg ponen en evidencia la importancia y necesidad del desarrollo de metodologías de retrofit de procesos que permitan disminuir o manejar la complejidad de su aplicación.

## **6.1. CONCLUSIONES**

En este documento se presenta una metodología para el retrofit de procesos químicos basada en una representación jerárquica. La metodología propuesta está formada por las siguientes cuatro etapas generales, las cuales satisfacen los objetivos planteados en la sección 1.2:

- 1) Extracción de la información.



- 2) Análisis y representación de la información.
- 3) Generación de alternativas de solución.
- 4) Evaluación de alternativas.

La metodología esta fundamentada en:

- La aplicación inversa del procedimiento de diseño jerárquico de Douglas [Douglas, 1988].
- La representación de procesos mediante diagramas de bloques genéricos de Turton [Turton y col., 1998].
- La estructura básica de los sistemas basados en conocimientos (base de conocimiento, motor de inferencia e interfaz de usuario) [Han y col., 1996]

La metodología que se plantea para el retrofit de proceso integra conocimientos relacionados con el retrofit, diseño, síntesis y análisis de procesos, los cuales se aplicaron al diseño e implementación de herramientas informáticas de apoyo al retrofit de procesos. Además de los conocimientos de ingeniería química antes mencionados, se incorporaron conocimientos del área de ingeniería informática para desarrollar un sistema basado en conocimientos utilizando algoritmos computacionales de comunicación, visualización y técnicas de inteligencia artificial.

La metodología se implementó en un Sistema Basado en Conocimientos (SBC). El SBC está formado por tres prototipos informáticos y una ontología que sirve de base para un lenguaje común entre los prototipos. Los prototipos son:

- HEAD (Hysys Extraction Data), el cual permite la extracción de información de procesos simulados con ayuda del simulador comercial Hysys.Plant™.
- AHA! (Automatic Hierarchical Abstraction tool) el cual realiza el análisis y la representación de la información proporcionada por HEAD utilizando un enfoque de modelos múltiples. Uno de los objetivos de AHA! es la generación de niveles de abstracción que faciliten al usuario comprender e identificar las secciones de un proceso químico.

- RETRO (Reverse Engineering Tool for Retrofit Options), el cual realiza una búsqueda de secciones susceptibles de mejora con base en información proporcionada por el usuario y unos criterios funcionales, para posteriormente generar alternativas de solución mediante un sistema de razonamiento basado en casos.

Respecto a la etapa 3 de la metodología propuesta (generación de alternativas) y con base en los resultados presentados en la sección 5.4, se concluye que es necesario mejorar el sistema de razonamiento basado en casos (CBR) debido a que las alternativas no fueron del todo satisfactorias. Este problema, sin embargo, es consecuencia de la falta de casos (información) en la base de casos del sistema CBR y no del funcionamiento del mismo.

En cuanto a la etapa 4 (evaluación de alternativas) se obtiene como conclusión:

- 1) la necesidad de implementar el modelo de comportamiento de los equipos y dispositivos de proceso (*Units*) o de la agrupación de éstos (*Meta-units*), que le permitan a un diseñador realizar pruebas de mejoras del proceso en cualquier nivel de abstracción sin depender de herramientas de simulación.
- 2) La necesidad de diseñar e implementa un sistema de ayuda a la toma de decisiones que permita al usuario acotar y disminuir el espacio búsqueda de soluciones.

El SBC ha sido validado con 50 procesos químicos. Ha sido aplicado detalladamente a los procesos de producción de amoníaco y acetona con resultados satisfactorios en cuanto a la reducción del tiempo y complejidad de las tareas de análisis, representación y generación de alternativas de solución durante el retrofit.

Cabe mencionar que la metodología está limitada a procesos continuos en estado estacionario sin manejo de sólidos o electrolitos.

Los avances y resultados de la investigación se han publicado o difundido:

- En 3 artículos en revistas internacionales (CACHE News, Computers & Chemical Engineering y la Revista Mexicana de Ingeniería Química).
- En 1 artículo de libro (CACHE vol. 14).
- En 5 Artículos en libros de congresos con revisores.
- En 10 congresos internacionales (7 ponencias y 3 posters) y 3 nacionales (3 posters).

Las referencias completas se encuentran en la sección denominada “Publicaciones y Congresos” en la página 133.

Además de lo anterior, la Fundación Caixa de Sabadell premio mi proyecto de investigación titulado “Desarrollo de herramientas para la reingeniería de procesos químicos” en la convocatoria “Premis Fundació Caixa Sabadell 2004” en el apartado de Estudios–Tesis Doctoral.

## 6.2. CONTRIBUCIONES

---

Las principales contribuciones de esta investigación son:

### ***Innovación:***

En Ingeniería Química no se ha desarrollado e implementado una metodología de retrofit de procesos químicos como la que aquí se presenta.

En el área de Inteligencia Artificial se ha ampliado la aplicación del enfoque de modelos múltiples en Ingeniería Química.

En cuanto a los prototipos que incorporan la metodología permiten:

- Extraer y analizar información de procesos químicos.

- Generar y representar un procesos químico en niveles de abstracción.
- Identificar secciones de proceso susceptibles de cambios o mejoras.
- Búsqueda y recuperación de experiencias pasadas emplearlas en la resolución de nuevos problemas.

**Utilidad:**

Reducir el tiempo de algunas de las tareas que involucra el retrofit de procesos.

Proporciona al usuario herramientas que le permiten manejar la complejidad tanto en las actividades del retrofit como en las de representación de procesos químicos ayudándole a una mejor comprensión de ambas.

## 6.3. TRABAJOS FUTUROS

De manera general, los aspectos que considero podrían ser líneas de investigación factibles y que le daría continuidad y soporte al trabajo realizado son:

- Integración con otras herramientas. En este sentido se podría analizar otros simuladores comerciales para poder realizar la etapa de extracción de información desde otras plataformas informáticas.
- Ampliación y formalización de la ontología. Para poder realizar el punto anterior es importante contar con un lenguaje común que permita interactuar las diferentes herramientas informáticas.
- Incorporación del modelo de comportamiento en los diferentes niveles de abstracción. En este sentido se podrían desarrollar los modelos de comportamiento para facilitar la etapa de adaptación de nuevas alternativas en cualquier nivel de abstracción.
- Extensión a otros procesos químicos. Debido a la limitación de la metodología, sería de especial interés extender la aplicación a procesos, tales como, bioprocesos o manejo de sólidos.

# REFERENCIAS

- [ATSDR, 2004] Agency for Toxic Substances and Disease Registry (2004). ToxFAQs™ for Ammonia. <http://www.atsdr.cdc.gov/tfacts126.html>
- [AUS-e-TUTE, 2005] AUS-e-TUTE (2005). Haber Process for the Production of Ammonia. <http://www.auseute.com.au/haberpro.html>.
- [Avramenko y Kraslawski, 2003] Avramenko, Y. and Kraslawski, A. (2003). The concept of similarity in case-based design. *Proceedings of ICPI-IJCAI-03*, pp. 58-63. Acapulco, México.
- [Avramenko et al., 2002] Avramenko, Y., Nyström, L., and Kraslawski, A. (2002). Selection of internals for reactive distillation column - Cased-Based Reasoning approach. *Proceedings of European Symposium on Computer Aided Process Engineering - 12*, (J. Grievink and J. v. Schijndel, edit.), Elsevier, pp. 157-162.
- [Avramenko et al., 2004] Avramenko, Y., Nyström, L., and Kraslawski, A. (2004). Selection of internals for reactive distillation column—case-based reasoning approach. *Computers and Chemical Engineering*, vol. 28 (1-2), pp. 37-44.
- [Bamopoulos et al., 1988] Bamopoulos, G., Nath, R., and Motard, R.L. (1988). Heuristic synthesis of nonsharp separation sequences. *AIChE J.*, vol. 34 (5), pp. 763-780.
- [Bañares-Alcántara, 1995] Bañares-Alcántara, R. (1995). Design support systems for process engineering--I. Requirements and proposed solutions for a design process representation. *Computers and Chemical Engineering*, vol. 19 (3), pp. 267-277.
- [Bañares-Alcántara y King, 1996] Bañares-Alcántara, R. and King, J.M.P. (1996). Design support systems for process engineering—III. Design rationale as a requirement for effective support. *Computers and Chemical Engineering*, vol. 21 (3), pp. 263-276.
- [Bañares-Alcántara y Lababidi, 1995] Bañares-Alcántara, R. and Lababidi, H.M.S. (1995). Design support systems for process engineering--II. KBDS: an experimental prototype. *Computers and Chemical Engineering*, vol. 19 (3), pp. 279-301.
- [Barnicki y Fair, 1990] Barnicki, S.D. and Fair, J.R. (1990). Separation system synthesis: a knowledge-based approach. 1. Liquid mixture separations. *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 29 (3), pp. 421-432.
- [Barnicki y Fair, 1992] Barnicki, S.D. and Fair, J.R. (1992). Separation system synthesis: a knowledge-based approach. 2. Gas/vapor mixtures. *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 31 (7), pp. 1679-1694.

- [Beltrame y Toppano, 1995] Beltrame, A. and Toppano, E. (1995). Prototype-based conceptual design: The SECS system. Application of AI in engineering. *Comp. Mechanics Pub.*, pp. 502-512.
- [Beng-Guang et al., 2000] Beng-Guang, R., Fan-Yu, H., Kraslawski, A., and Nyström, L. (2000). Study on the methodology for retrofitting chemical processes. *Chem. Engng. Technol.*, vol. 23 (6), pp. 479-484.
- [Biegler y Grossmann, 2004] Biegler, L.T. and Grossmann, I.E. (2004). Retrospective on optimization. *Computers and Chemical Engineering*, vol. 28 (8), pp. 1169-119.
- [Biegler et al., 1997] Biegler, L.T., Grossmann, I.E., and Westerberg, A.W. (1997). *Systematic methods of chemical process design*. Prentice Hall, New Jersey. USA.
- [Bonarini y Sassaroli, 1997] Bonarini, A. and Sassaroli, P. (1997). Opportunistic multimodel diagnosis with imperfect models. *Information Sciences*, vol. 103, pp. 161-185.
- [Britt et al., 1989] Britt, H.I., Wareck, J.S., and Smith, J.A. (1989). A computer-aided process synthesis and analysis environment. *Proceedings of Foundations of Computer-Aided Process Design*, (J. J. Sirola, I. E. Grossmann, and G. Stephanopoulos, edit.), CACHE-Elsevier, pp. 281-307.
- [CCAE, 2004] Confederación de Cooperativas Agrarias de España (2004). Análisis de situación: Gasóleo B. Madrid, España, 30 de septiembre.
- [Ceccaroni et al., 2002] Ceccaroni, L., Cortés, U., and Sanchez-Marre, M. (2002). OntoWEDSS: an ontology-underpinned decision-support system for wastewater management. *Proceedings of Integrated Assessment and Decision Support. First biennial meeting of the International Environmental Modelling and Software Society*, (A. E. Rizzoli and A. J. Jakeman, edit.), IEMSS, pp. 432-437.
- [Chandrasekaran, 1990] Chandrasekaran, B. (1990). Design problem solving: a task analysis. *AI Magazine*, vol. 11 (4), pp. 59-71.
- [Chittaro et al., 1993] Chittaro, L., Guida, G., Tasso, C., and Toppano, E. (1993). Functional and teleological knowledge in the multimodeling approach for reasoning about physical systems: A case study in diagnosis. *IEEE Trans. Sys. Man. Cybern.*, vol. 23 (6), pp. 1718-1751.
- [CIEC, 2005] Chemical Industry Education Centre (2005), <http://www.ciec.org.uk>.
- [Clark, 2002] Clark, J. (2002). *The Haber process*. <http://www.chemguide.co.uk/physical/equilibria/haber.html>.
- [Douglas, 1985] Douglas, J.M. (1985). A hierarchical decision procedure for process synthesis. *AIChE J.*, vol. 31, pp. 353-362.
- [Douglas, 1988] Douglas, J.M. (1988). *Conceptual design of chemical process*. Mc Graw Hill, New York.
- [Douglas, 1992] Douglas, J.M. (1992). Process synthesis for waste minimization. *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 31 (1), pp. 238-243.
- [Douglas, 1995] Douglas, J.M. (1995). Synthesis of separation system flowsheets. *AIChE J.*, vol. 41 (12), pp. 2522-2536.

- [Fernández et al., 2001] Fernández, D., Rodríguez-Martínez, A., Jiménez, L., and Bañares-Alcántara, R. (2001). ETSEQ-Code Creator, una herramienta para la interoperabilidad entre Hysys.Plant y Excel. *Primer encuentro Universitario sobre Simulación de Procesos y aplicaciones Hyprotech*. 18 y 19 de julio, Valencia, España.
- [Fernández et al., 2002] Fernández, D., Rodríguez-Martínez, A., Jiménez, L., and Bañares-Alcántara, R. (2002). Code Creator for Automatic HYSYS.Plant and MS-Excel Interoperability. *CACHE News*, vol. Spring issue.
- [Fisher et al., 1987] Fisher, W.R., Doherty, M.F., and Douglas, J.M. (1987). Screening of process retrofit alternatives. *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 26, pp. 2195-2204.
- [Fonyo et al., 1994] Fonyo, Z., Kürüm, S., and Rippin, D.W.T. (1994). Process development for waste minimization: The retrofitting problem. *Computers and Chemical Engineering*, vol. 18 (Suppl.), pp. S591-S595.
- [Grossmann, 2003] Grossmann, I.E. (2003). Review on nonlinear mixed-integer and disjunctive programming techniques. Department of Chemical Engineering, Carnegie Mellon University, Pittsburgh, June 2001/Rev. April 2002.
- [Grossmann y Biegler, 2004] Grossmann, I.E. and Biegler, L.T. (2004). Part II. Future perspective on optimization. *Computers and Chemical Engineering*, vol. 28 (8), pp. 1193-1218.
- [Grossmann y Kravanja, 1995] Grossmann, I.E. and Kravanja, Z. (1995). Mixed-integer nonlinear programming techniques for process systems engineering. *Computers and Chemical Engineering*, vol. 19 (Supplement 1), pp. S189-S204.
- [Gruber, 1993] Gruber, T.R. (1993). Toward principles for the design of ontologies used for knowledge sharing. Stanford University, Palo Alto, CA, USA,
- [Gundersen, 1990] Gundersen, T. (1990). Retrofit process design - Research and applications of systematics methods. *Proceedings of Foundations of Computers-Aided Process Design, CACHE*, (J. J. Sirola, I. E. Grossmann, and G. Stephanopoulos, edit.), Elsevier, pp. 213-240.
- [Halim et al., 2001] Halim, I., Palaniappan, C., and Srinivasan, R. (2001). An integrated methodology for developing inherently safer and environmentally benign processes. *Proceedings of European Symposium on Computer Aided Process engineering - 11*, (R. Gani and S. B. Jorgensen, edit.), Elsevier, pp. 1145-1150.
- [Han et al., 1995] Han, C., Stephanopoulos, G., and Douglas, J.M. (1995). Automation in design: the conceptual synthesis of chemical processing schemes, in *Advances in Chemical Engineering*, vol. 21, (G. Stephanopoulos and C. Han, Eds. San Diego, CA, Academic Press.
- [Han et al., 1996] Han, C., Stephanopoulos, G., and Liu, Y.A. (1996). Knowledge-based approaches in process synthesis. *AIChE Symposium Series*, vol. 92 (312), pp. 148-159.
- [Heever y Grossmann, 2003] Heever, S.A.V.D. and Grossmann, I.E. (2003). A strategy for the integration of production planning and reactive



- scheduling in the optimization of a hydrogen supply network. *Computers and Chemical Engineering*, vol. 23 (12), pp. 1813-1839.
- [Hertwig et al., 2001] Hertwig, T.A., Xu, A., Nagy, A.B., Pike, R.W., Hopper, J.R., and Yaws, C.L. (2001). A prototype system for economic, environmental and sustainable optimization of a chemical complex. *Proceedings of European Symposium on Computer Aided Process engineering - 11*, (R. Gani and S. B. Jorgensen, edit.), Elsevier, pp. 1017-1022.
- [Hyprotech, 2001] Hyprotech (2001). Introduction to Hysys.Plant Net vers. V.2.4.1. (Build 3870). AEA Technology Engineering Software, Hyprotech Europe, Barcelona,
- [Kheawhom y Hirao, 2001] Kheawhom, S. and Hirao, M. (2001). Decision support tools for process design and selection. *Proceedings of European Symposium on Computer Aided Process engineering - 11*, (R. Gani and S. B. Jorgensen, edit.), Elsevier, pp. 1023-1028.
- [Kheawhom y Hirao, 2002] Kheawhom, S. and Hirao, M. (2002). Decision support tools for process design and selection. *Computers and Chemical Engineering*, vol. 26, pp. 747-755.
- [Kheawhom y Hirao, 2004] Kheawhom, S. and Hirao, M. (2004). Decision support tools for environmentally benign process design under uncertainty. *Computers and Chemical Engineering*, vol. 28 (9), pp. 1715-1723.
- [Kirkwood et al., 1988] Kirkwood, R.L., Locke, M.H., and Douglas, J.M. (1988). A prototype expert system for synthesizing chemical process flowsheets. *Comp. Chem. Engng.*, vol. 12 (4), pp. 329-343.
- [Knuth, 2001] Knuth, D.E. (2001). *Things a computer scientist rarely talks about*. Stanford University, Stanford, CA. USA.
- [Kocis y Grossmann, 1988] Kocis, G.R. and Grossmann, I.E. (1988). Global optimum of nonconvex mixed integer non-linear programming (MINLP) problems in process synthesis. *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 27 (8), pp. 1407-1421.
- [Kolodner, 1993] Kolodner, J. (1993). *Case-based reasoning*. Morgan Kaufmann Publishers, San Mateo, CA. USA.
- [Kraslawski et al., 1995] Kraslawski, A., Koiranen, T., and Nyström, L. (1995). Case-based reasoning system for mixing equipment selection. *Computers and Chemical Engineering*, vol. 19 (Supplement 1), pp. 821-826.
- [Krovvidy y Wee, 1993] Krovvidy, S. and Wee, W.G. (1993). Wastewater treatment systems from case-based reasoning. *Machine Learning*, vol. 10 (3), pp. 341-363.
- [Lababidi et al., 2000] Lababidi, H.M.S., Alatiqi, I.M., and Nayfeh, L.J. (2000). Energy retrofit study of ammonia plant. *Applied Thermal Engng.*, vol. 20, pp. 1495-1503.
- [Lenz et al., 1998] Lenz, M., Bartsch-Spörl, B., Burkhard, H.-D., and Wess, S. (1998). *Case-based reasoning technology: from foundations to applications*. Springer-Verlag, Berlin.
- [Linnhoff, 1994] Linnhoff, B. (1994). Use pinch analysis to knock down capital cost and emissions. *Chem. Engng. Progr.*, vol. 90 (8), pp. 32-57.



- [Linnhoff y Hindmarsh, 1983] Linnhoff, B. and Hindmarsh, E. (1983). The pinch design methods for heat exchanger networks. *Chem. Engng. Sci.*, vol. 38 (5), pp. 745-763.
- [Linnhoff y Parker, 1984] Linnhoff, B. and Parker, S. (1984). Heat exchanger networks with process modifications. *Proceedings of IchemE Annl. Res. Mtg.*. Bath, England.
- [Linnhoff et al., 1988] Linnhoff, B., Polley, G.T., and Sahdev, V. (1988). General process improvements through pinch technology. *Chem. Engng. Progr.*, vol. 84, pp. 51-58.
- [Linnhoff y Vredevelde, 1984] Linnhoff, B. and Vredevelde, D.R. (1984). Pinch technology has come of age. *Chem. Engng. Progr.*, vol. 80, pp. 33-40.
- [Linnhoff y Witherell, 1986] Linnhoff, B. and Witherell, W.D. (1986). Pinch technology guides retrofit. *Oil & Gas J.*, vol. 84, pp. 54-65.
- [Mahalec y Motard, 1977a] Mahalec, V. and Motard, R.L. (1977a). Evolutionary search for an optimal limiting process flowsheet. *Computers and Chemical Engineering*, vol. 1, pp. 331-342.
- [Mahalec y Motard, 1977b] Mahalec, V. and Motard, R.L. (1977b). Procedures for the initial design of chemical processing systems. *Computers and Chemical Engineering*, vol. 1, pp. 57-68.
- [Modi et al., 1995a] Modi, A.K., Newell, A., Steier, D.M., and Westerberg, A.W. (1995a). Building a chemical process design system within Soar - 1. Design issues. *Computers and Chemical Engineering*, vol. 19 (1), pp. 75-89.
- [Modi et al., 1995b] Modi, A.K., Newell, A., Steier, D.M., and Westerberg, A.W. (1995b). Building a chemical process design system within Soar - 2. Learning issues. *Computers and Chemical Engineering*, vol. 19 (3), pp. 345-361.
- [Morgan, 1992] Morgan, S.W. (1992). Use process integration to improve process designs and the design process. *Chem. Engng. Progr.*, vol. 88 (9), pp. 62-68.
- [Nath y Motard, 1981] Nath, R. and Motard, R.L. (1981). Evolutionary synthesis of separation processes. *AIChE J.*, vol. 27 (4), pp. 578-587.
- [Nelson y Douglas, 1990] Nelson, D.A. and Douglas, J.M. (1990). A systematic procedure for retrofitting chemical plants to operate utilising different reaction paths. *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 29 (5), pp. 819-829.
- [Núñez et al., 2004] Núñez, H., Sánchez-Marrè, M., Cortés, U., Comas, J., Martínez, M., Rodríguez-Roda, I., and Poch, M. (2004). A comparative study on the use of similarity measures in case-based reasoning to improve the classification of environmental system situations. *Environmental Modelling and Software*, vol. 19 (9), pp. 809-819.
- [Núñez et al., 2002] Núñez, H., Sánchez-Marrè, M., Cortés, U., Comas, Q., Martínez, M., and Poch, M. (2002). Classifying environmental system situations by means of case-based reasoning: a comparative study. *Proceedings of International Environmental*

- Modelling and Software Society*, (A. E. Rizzoli and A. J. Jakeman, edit.), pp. 450-455.
- [Pajula et al., 1999] Pajula, E., Koironen, T., Seuranen, T., and Hurme, M. (1999). Computer aided process equipment design from equipment parts. *Computers and Chemical Engineering*, vol. 23 (Supplement), pp. S683-S686.
- [Pajula et al., 2001a] Pajula, E., Seuranen, T., and Hurme, M. (2001a). Selection of separation sequences by case-based reasoning. *Proceedings of European Symposium on Computer Aided Process engineering - 11*, (R. Gani and S. B. Jorgensen, edit.), Elsevier, pp. 469-474.
- [Pajula et al., 2001b] Pajula, E., Seuranen, T., Koironen, T., and Hurme, M. (2001b). Synthesis of separation processes by using case-based reasoning. *Computers and Chemical Engineering*, vol. 25 (4-6), pp. 775-782.
- [Pérez, 2004] Pérez, N. (2004). Repsol dedicará 24 millones "extras" a mejoras medioambientales. *Diari de Tarragona (Economía y Negocios)*. del 28 de marzo al 3 de abril, pp. 5
- [Pistikopoulos y Grossmann, 1988] Pistikopoulos, E.N. and Grossmann, I.E. (1988). Optimal retrofit design for improving process flexibility in linear systems. *Computers and Chemical Engineering*, vol. 12 (7), pp. 719-731.
- [Quantrille y Liu, 1991] Quantrille, T.E. and Liu, Y.A. (1991). *Artificial intelligence in chemical engineering*. Academic Press cop., San Diego, CA. USA.
- [Rapoport et al., 1994] Rapoport, H., Lavie, R., and Kehat, E. (1994). Retrofit design of new units into an existing plant: Case study: Adding new units to an aromatics plant. *Computers and Chemical Engineering*, vol. 18 (8), pp. 743-753.
- [Rodríguez-Roda et al., 2000a] Rodríguez-Roda, I., Poch, M., and Bañares-Alcántara, R. (2000a). Application of a support system to the design of wastewater treatment plants. *Artificial Intelligence in Engineering*, vol. 14 (1), pp. 45-61.
- [Rodríguez-Roda et al., 2000b] Rodríguez-Roda, I., Poch, M., and Bañares-Alcántara, R. (2000b). Conceptual design of wastewater treatment plants using a design support system. *Journal of Chemical Technology & Biotechnology*, vol. 75 (1), pp. 73-81.
- [Rodríguez-Roda et al., 1999] Rodríguez-Roda, I., Poch, M., Sánchez-Marrè, M., Cortés, U., and Lafuente, J. (1999). Consider a Case-Based System for Control of Complex Processes. *Chem. Engng. Progr.*, vol. June, pp. 39-45.
- [Rumbaugh et al., 1991] Rumbaugh, J., Blaha, M., Premerlani, W., Eddy, F., and Lorensen, W. (1991). *Object-oriented modeling and design*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J.
- [Sánchez-Marrè et al., 1997] Sánchez-Marrè, M., Cortés, U., Rodríguez-Roda, I., Poch, M., and Lafuente, J. (1997). Learning and adaptation in wastewater treatment plants through case-based reasoning. *Microcomputers in Civil Engineering*, vol. 12 (4), pp. 251-266.

- [Seader y Westerberg, 1977] Seader, J.D. and Westerberg, A.W. (1977). A combined heuristic and evolutionary strategy for synthesis of simple separation sequences. *AIChE J.*, vol. 23, pp. 951.
- [Seuranen et al., 2002] Seuranen, T., Pajula, E., and Hurme, M. (2002). Synthesis of azeotropic systems by case-based reasoning. *Proceedings of European Symposium on Computer Aided Process engineering - 12*, (J. Grievink and J. v. Schijndel, edit.), Elsevier, pp. 343-348.
- [Sheppard et al., 1991] Sheppard, C.M., Beltrani, L.T., and Motard, R.L. (1991). Constrained-directed nonsharp separation sequence design. *Chem. Engng. Comm.*, vol. 106, pp. 1-32.
- [Sirola, 1996] Sirola, J.J. (1996). Strategic process synthesis: Advances in the hierarchical approach. *Computers and Chemical Engineering*, vol. 20 (Supplement 2), pp. S1637-S1643.
- [Sirola et al., 1971] Sirola, J.J., Powers, G.J., and Rudd, D.F. (1971). Synthesis of systems designs. III. Toward a process concept generator. *AIChE J.*, vol. 17, pp. 677-682.
- [Smith y Linnhoff, 1987] Smith, R. and Linnhoff, B. (1987). Process integration using pinch technology. *Proceedings of ATEE Symp. Energy Mngmt in Industry*. Paris.
- [Smith et al., 2001] Smith, R.L., Mata, T.M., Young, D.M., Cabezas, H., and Costa, C.A.V. (2001). Designing efficient, economic and environmentally friendly chemical processes. *Proceedings of European Symposium on Computer Aided Process Engineering - 11*, (R. Gani and S. B. Jorgensen, edit.), Elsevier, pp. 1165-1170.
- [Stephanopoulos y Westerberg, 1976] Stephanopoulos, G. and Westerberg, A.W. (1976). Studies in process synthesis-II: Evolutionary synthesis of optimal process flowsheets. *Chem. Engng. Sci.*, vol. 31 (3), pp. 195-204.
- [SUO-WG, 2005] *Standard Upper Ontology Working Group (2005)*. <http://suo.iie.org>.
- [Sylvester et al., 2000] Sylvester, R.W., Smith, W.D., and Carberry, J. (2000). Information and modelling for greener process design. *AIChE Symp. Ser.*, vol. 96 (323), pp. 26-30.
- [Teck Chong, 1995] Teck Chong, T. (1995), Derivation and use of function in the design of chemical processes, MSc. Information Technology dissertation, Department of Artificial Intelligence, University of Edinburgh.
- [Tjoe y Linnhoff, 1986] Tjoe, T.N. and Linnhoff, B. (1986). Using pinch technology for process retrofit. *Chem. Engng.*, vol. 93, pp. 47-60.
- [Thompson y King, 1972] Thompson, R.W. and King, C.J. (1972). Systematic synthesis of separation schemes. *AIChE J.*, vol. 18, pp. 941.
- [Turton et al., 1998] Turton, R., Bailie, R.C., Whiting, W.B., and Shaeiwitz, J.A. (1998). *Analysis, synthesis and design of chemical process*. Prentice-Hall, New Jersey, USA.
- [Uerdingen et al., 2001] Uerdingen, E., Fischer, U., and Hungerbühler, K. (2001). A screening method for identifying economic improvement potentials in retrofit design. *Proceedings of European Symposium*

- on Computer Aided Process engineering - 11*, (R. Gani and S. B. Jorgensen, edit.), Elsevier, pp. 573-578.
- [Uerdingen et al., 2003] Uerdingen, E., Fischer, U., Hungerbühler, K., and Gani, R. (2003). Screening for profitable retrofit options of chemical processes: A new method. *AIChE J.*, vol. 49 (9), pp. 2400-2418.
- [Virkki-Hatakka et al., 1997] Virkki-Hatakka, T., Kraslawski, A., Koironen, T., and Nyström, L. (1997). Adaptation phase in case-based reasoning system for process equipment selection. *Computers and Chemical Engineering*, vol. 21 (Supplement 1), pp. S643-S648.
- [Watson, 1997] Watson, I. (1997). *Applying Case-Based Reasoning*. Morgan Kaufmann Publishers, San Francisco, CA. USA.
- [Westerberg, 2004] Westerberg, A.W. (2004). A retrospective on design and process synthesis. *Computers and Chemical Engineering*, vol. 28 (4), pp. 447-458.
- [Winston, 1992] Winston, P.H. (1992). *Artificial intelligence*. Addison-Wesley, Reading, MA.
- [Zheng et al., 1999] Zheng, A., Mahajanam, R.V., and Douglas, J.M. (1999). Hierarchical procedure for plantwide control system synthesis. *AIChE J.*, vol. 45 (6), pp. 1255-1265.

# PUBLICACIONES Y CONGRESOS

Los avances y resultados de la investigación se han publicado o difundido:

- En 3 artículos en revistas internacionales.
- En 1 artículo de libro.
- En 5 Artículos en libros de congresos con revisores.
- En 10 congresos internacionales (7 ponencias y 3 posters) y 3 nacionales (3 posters).

El presente apartado está dividido en dos secciones: publicaciones y congresos.

## PUBLICACIONES

### En revistas:

- 1) A. Rodríguez-Martínez, I. López-Arévalo, R. Bañares-Alcántara, A. Aldea (2004). Multi-model Knowledge Representation in the Retrofit of Processes. *Computers and Chemical Engineering*, vol. 28 (5), pp. 781-788.
- 2) I. López-Arévalo, A. Rodríguez-Martínez, R. Bañares-Alcántara, A. Aldea (2004). The Application of Ontologies in the Retrofit of Chemical Processes (in Spanish), *Revista Mexicana de Ingeniería Química*, vol. 3(1).
- 3) Fernández, D., Rodríguez-Martínez, A., Jiménez, L., and Bañares-Alcántara, R. (2002). Code Creator for Automatic HYSYS.Plant and MS-Excel Interoperability. *CACHE News*, vol. Spring issue.

### En colección de libro:

- 1) A. Rodríguez-Martínez, I. López-Arévalo, R. Bañares-Alcántara and A. Aldea (2003). A Multi-modelling Approach for the Retrofit of Processes. in European Symposium on Computer Aided Process Engineering–13. A. Kraslawski and I. Turunen (eds.), Elsevier Science, ISBN: 0-444-51368-X, pp. 269-274.

### En libros de congresos con evaluación:

- 1) I. López-Arévalo, A. Rodríguez-Martínez, R. Bañares-Alcántara, L. Jiménez, A. Aldea (2005). Generation of process alternatives using Case-Based Reasoning. *Proceeding of 7th World Congress of Chemical Engineering*, Glasgow, Scotland.
- 2) G. Calderón-Espinoza, A. Rodríguez-Martínez, J. Armengol, J. Vehí and M. Sainz (2005). Heat rate supervision of fossil power plant by modal interval analysis. *Proceeding of 7th World Congress of Chemical Engineering*, Glasgow, Scotland.
- 3) I. López-Arévalo, A. Rodríguez-Martínez, R. Bañares-Alcántara, A. Aldea (2003). Towards the Automatic Identification of Process Sections during the Redesign of Petroleum and Chemical Processes, Workshop on Intelligent Computing in the Petroleum Industry (ICPI 2003), IJCAI'03.
- 4) A. Rodríguez-Martínez, I. López-Arévalo, R. Bañares-Alcántara and A. Aldea (2003). Automatic Hierarchical Abstraction tool for the Retrofit of Processes. *Proceedings of the 4th European Congress of Chemical Engineering*, book 8, topic 9, European Federation of Chemical Engineering eds. ISBN: 84-88233-31-0.
- 5) A. Rodríguez-Martínez, I. Herrera, R. Bañares-Alcántara and M. Schuhmacher (2003). Retrofit of Processes and Environmental Analysis, a Decision Support Alternative in Process Engineering. *Proceedings of the 4th European Congress of Chemical Engineering*, book 8, topic 9, European Federation of Chemical Engineering eds. ISBN: 84-88233-31-0.

## CONGRESOS

### Presentación como ponencia.

- 1) I. López-Arévalo, A. Rodríguez-Martínez, R. Bañares-Alcántara, L. Jiménez, A. Aldea (2005). Generation of process alternatives using Case-Based Reasoning. *7th World Congress of Chemical Engineering* (accepted), 10-14 July, Glasgow, Scotland.



- 2) A. Rodríguez-Martínez, I. López-Arévalo, R. Bañares-Alcántara and A. Aldea (2004). Ontologías: Desarrollo y aplicación en Ingeniería Química. XXV Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química (XXV AMIDIQ), 4-7 mayo, Puerto Vallarta, México.
- 3) A. Rodríguez-Martínez, I. López-Arévalo, R. Bañares-Alcántara and A. Aldea (2003). Retrofit approach for developing sustainable chemical processes. SETAC-EUROPE 13th Anual Meeting, 27 april - 1 may, Hamburg, Germany.
- 4) A. Rodríguez-Martínez, I. López-Arévalo, R. Bañares-Alcántara and A. Aldea (2003). Multi-model knowledge representation in the retrofit of processes. *European Symposium on Computer Aided Process Engineering – 13 (ESCAPE-13)*, 1-4 june, Lappeenranta, Finland.
- 5) I. López-Arévalo, A. Rodríguez-Martínez, R. Bañares-Alcántara, L. Jiménez, A. (2003). Towards the Automatic Identification of Process Sections during the Redesign of Petroleum and Chemical Processes. *International Joint Conference on Artificial Intelligence – 03 (IJCAI-03)*, *Second workshop Intelligent Computing in the Petroleum Industry (ICPI-03)*, 9-15 august, Acapulco, México.
- 6) A. Rodríguez-Martínez, I. López-Arévalo, R. Bañares-Alcántara and A. Aldea (2003). Automatic Hierarchical Abstraction tool for the Retrofit of Processes. *4th European Congress of Chemical Engineering*, 21-25 september, Granada, España.
- 7) A. Rodríguez-Martínez, I. Herrera, R. Bañares-Alcántara and M. Schuhmacher (2003). Retrofit of Processes and Environmental Analysis, a Decision Support Alternative in Process Engineering. *4th European Congress of Chemical Engineering*, 21-25 september, Granada, España

#### **Presentación como póster.**

- 1) I. Lopez-Arevalo, A. Rodriguez-Martinez, A. Aldea, R. Bañares-Alcántara, L. Jimenez (2005). Redesign Support Framework based on Hierarchical Multiple Models. Nineteenth International Joint Conference on Artificial Intelligence (accepted). 30 july- 5 august, Edinburgh, Scotland.
- 2) G. Calderón-Espinoza, A. Rodríguez-Martínez, J. Armengol, J. Vehí and M. Sainz (2005). Heat rate supervision of fossil power plant by modal interval analysis. *7th World Congress of Chemical Engineering* (accepted), 10-14 july, Glasgow, Scotland.
- 3) A. Rodríguez-Martínez, I. López-Arévalo, R. Bañares-Alcántara and A. Aldea (2002). Integrated framework for the retrofit of processes. 9º Congreso Mediterráneo de Ingeniería Química, 26-29 de noviembre, Barcelona, España,.

- 4) Fernández, D., Rodríguez-Martínez, A., Jiménez, L., and Bañares-Alcántara, R. (2001). Usos de HYSYS en la abstracción de procesos. *Primer encuentro Universitario sobre Simulación de Procesos y aplicaciones Hyprotech*. 18-19 de julio, Valencia, España.
- 5) Fernández, D., Rodríguez-Martínez, A., Jiménez, L., and Bañares-Alcántara, R. (2001). ETSEQ-Code Creator, Una herramienta para la interoperabilidad entre HYSYS.Plant y Excel. *Primer encuentro Universitario sobre Simulación de Procesos y aplicaciones Hyprotech*. 18-19 julio, Valencia, España.
- 6) I. Herrera, Antonio Rodríguez-Martínez, I. Butnar, L. Jiménez (2001). Aplicación de la simulación en las actividades de ecodiseño a través de la integración de HYSYS.Plant y TEAM. *Primer encuentro Universitario sobre Simulación de Procesos y aplicaciones Hyprotech*. 18-19 de julio, Valencia, España.



# CURRICULUM VITAE

En junio de 1993 obtuve el grado de Ingeniero Químico en la Universidad Autónoma del Estado de Morelos (UAEM), México. De septiembre de 1993 a junio de 1995 realice la maestría en Ingeniería Química en el Instituto Tecnológico de Celaya, México.

En agosto de 1995 me incorporé como profesor de tiempo parcial en la Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería de la UAEM. En marzo de 1996 ingresé como investigador en el Departamento de Supervisión de Procesos del Instituto de Investigaciones Eléctricas (IIE), México. En el IIE participe en proyectos de diseño, desarrollo e implementación de sistemas de supervisión y control para centrales de generación eléctrica de Comisión Federal de Electricidad y refinerías de Petróleos Mexicanos. Desde mi ingreso en el IIE y hasta enero de 2000 compagine mi carrera docente en la UAEM y de investigación en el IIE.

En febrero de 2000, la UAEM me otorgó una beca para realizar el doctorado en Ingeniería Química y de Procesos en la Universitat Rovira i Virgili en Tarragona, España. En octubre de 2003 obtuve el Diploma de Estudios Avanzados. De octubre de 2003 a abril de 2005 realice la tesis doctoral desarrollando una metodología para el retrofit de procesos químicos basada en una representación jerárquica. La metodología fue implementada en un sistema basado en conocimiento mediante el diseño y programación de tres prototipos informáticos. Durante los cuatro años del doctorado conté con la supervisión del Dr. René Bañares-Alcántara.

Los resultados de la investigación realizada durante los cuatro años de doctorado han sido publicados en 3 artículos en revistas internacionales, 1 artículo en un libro y 5 artículos en libros de congresos internacionales. Además de las publicaciones, participé en 10 congresos internacionales (7 ponencias y 3 pósters) y 3 nacionales (3 pósters).

En octubre de 2004 la Fundación Caixa de Sabadell premio mi proyecto de investigación titulado “Desarrollo de herramientas para la reingeniería de procesos químicos” dentro de los Premis Fundació Caixa Sabadell 2004 en el apartado de Estudios–Tesis Doctoral.

# ABSTRACT

Industrial processes require periodic evaluations to verify their normal operation, as much in economical as in technical terms. These evaluations are necessary due to changes in markets, safety and environmental legislation. It is necessary to satisfy these demands in order to investigate process alternatives that allow the optimal use of existing resources with the possible minimum investment. One way to make this task is by means of retrofit.

The objective of this work is to develop a methodology for retrofit of chemical processes based on hierarchical representations. The concepts involved in the methodology are,

- The application in inverse manner of hierarchical procedure for conceptual design of Douglas [Douglas, 1988]
- The representation of processes by means of generic block diagrams from Turton [Turton et al., 1998].
- The structure of knowledge based systems (knowledge base, inference machine and user interface) [Han et al., 1996].

The proposed methodology has learning from retrofit, design, synthesis and analysis of processes, so that it was managed to design and implement support tools for retrofit of processes. Knowledge from computer science area in addition to knowledge from chemical engineering were applied in order to develop a knowledge-based system by using computational algorithms from communication, visualization and artificial intelligence techniques.

The methodology consists of four general steps,

1. Data extraction. Information of chemical process is extracted from an initial representation.
2. Analysis and representation of information. Extracted information is abstracted at several levels based on a set of hierarchical functions, precedence rules and user information.

3. Generation of alternatives. The alternatives are generated based on the new specification for the original process and a Case-Based Reasoning (CBR) system.
4. Adaptation and evaluation. The generated alternatives are evaluated until their new specifications are satisfied.

The methodology was implemented as Knowledge-Based System (KBS). The KBS has three prototypes and one ontology. The ontology is used as common language between the prototypes. The prototypes are,

- HEAD (Hysys Extraction Data) was developed in MS Visual Basic™. The goal is to extract information from a process flow diagram (PFD) which is simulated in Hysys.Plant™.
- AHA! (Automatic Hierarchical Abstraction tool) is a prototype developed in Java that generates different levels of abstraction from the initial PFD in order to identify sections where retrofit can be applied.
- RETRO (Reverse Engineering Tool for Retrofit Options) includes a CBR system to retrieve from a library cases with equipment/devices (*Units*) or groups of them (*Meta-units*) which were similar to the one selected by the user. A set of cases (*Units* and/or *Meta-units*) is obtained as output from the CBR system. The set is ordered according to similarity of cases. The user should take the most similar alternative and make the adaptation in a simulator (in our case, we have used Hysys.Plant™).

The KBS has been validated with 50 chemical processes. It has been applied in detail to the processes of ammonia and acetone production with satisfactory results in reduction of time and complexity of the analysis, representation and generation of alternatives of solution during retrofit tasks.

The advances and results of the research have been published in 9 articles (3 in international journals, 1 in a book collection and 5 in refereed conference papers). Also they have been presented in 10 international congresses (7 communications and 3 posters) and 3 nationals (3 posters).

# ANEXOS

## ANEXO 1.

**ESTRUCTURAS DE DATOS PARA EQUIPOS Y DISPOSITIVOS DE PROCESO**

## ANEXO 2.

**CÓDIGO FUENTE DE HEAD**

## ANEXO 3.

**SISTEMA DE REGLAS DE PRODUCCIÓN PARA EL MODELO TELEOLÓGICO**

## ANEXO 4.

**REGLAS DE AGRUPAMIENTO DE EQUIPOS DE PROCESO**

UNIVERSITAT ROVIRA I VIRGILI  
METODOLOGÍA PARA EL RETROFIT DE PROCESOS QUÍMICOS BASADA EN UNA REPRESENTACIÓN JERÁRQUICA  
Antonio Rodríguez Martínez  
ISBN:978-84-693-4062-2/DL:T-1161-2010

## Anexo 1

### Estructura de datos para equipos y dispositivos de proceso.

En las estructuras de datos se definen los campos de información de los equipos de proceso y componentes para la extracción de información de los ficheros del simulador comercial Hysys.Plant™. Están divididas en 6 clases principales:

1. Sistemas de Reacción.
2. Sistemas de Separación.
3. Cambio de Temperatura.
4. Cambio de Presión.
5. Cambio de Flujo.
6. Dispositivos de control y lógicos.

En cada una de las estructuras está definido el nombre del campo y el tipo de dato. El tipo de dato puede ser texto o numérico. Para el caso en que sea texto se incluye el número de caracteres máximo que podrá incluir y para los numéricos se define si será del tipo entero (int) o flotante (float). A continuación se muestran los campos correspondientes a cada una de las subclases de las clases antes mencionadas.

#### 1. Sistemas de Reacción.

##### 1.1. Reactor tipo tanque.

Atributo	Nombre de Campo en HEAD	Tipo de Dato	
		Texto (no. de caracteres)	Numérico
Nombre	Name	20	
No. de corrientes de entrada	no_stream_in		Int
Nombre de corriente entrada	name_stream_in	20	
No. de corrientes de salida	no_stream_out		Int
Nombres corriente salida	name_stream_out	20	
Caída de presión	Pressure_drop		Float
Volumen del tanque	Vessel_volume		Float
Porcentaje de liquido	Liquid_Function		Float
Tipo de reacción	Reaction_set	20	

## 1.2. Reactor tubular.

Atributo	Nombre de Campo en HEAD	Tipo de Dato	
		Texto (no. de caracteres)	Numérico
Nombre	Name	20	
No. de corrientes de entrada	no_stream_in		Int
Nombre de corriente entrada	name_stream_in	20	
No. de corrientes de salida	no_stream_out		Int
Nombres corriente salida	name_stream_out	20	
No. de tubos	no_tubes		Int
Diámetro de tubo	Diameter_tube		Float
Espesor de pared de tubo	Tube_wall_thickness		Float
Caída de presión	Pressure_drop		Float
Diámetro de partícula de catalizador	Diameter_particle		Float
Densidad de la porción sólida	Solid_density		Float
Tipo de reacción	Reaction_sets	20	

## 2. Sistemas de Separación.

### 2.1. Extractor líquido\_líquido.

Atributo	Nombre de Campo en HEAD	Tipo de Dato	
		Texto (no. de caracteres)	Numérico
Nombre	Name	20	
No. de corrientes de entrada	no_stream_in		Int
Nombre de corriente entrada	Name_stream_in	20	
No. de corrientes de salida	no_stream_out		Int
Nombres de corrientes de salida	name_stream_out	20	
No. de etapas	Stage_number		Float

### 2.2. Separador simple (flash).

Atributo	Nombre de Campo en HEAD	Tipo de Dato	
		Texto (no. de caracteres)	Numérico
Nombre	Name	20	
No. de corrientes de entrada	no_stream_in		Int
Nombre de corriente entrada	Name_stream_in	20	
No. de corrientes de salida	no_stream_out		Int
Nombres corriente salida	name_stream_out	20	
Nombre corriente vapor	Name_stream_out_vapor	20	
Nombre corriente líquido	Name_stream_out_liquid	20	



### 2.3. Separador de tres fases.

Atributo	Nombre de Campo en HEAD	Tipo de Dato	
		Texto (no. de caracteres)	Numérico
Nombre	Name	20	
No. de corrientes de entrada	No_stream_in		Int
Nombre de corriente entrada	Name_stream_in	20	
No. de corrientes de salida	No_stream_out		Int
Nombres corriente salida	Name_stream_out	20	
Nombre de corriente de vapor	Name_stream_vapour_out_vapour	20	
Nombre corriente liquida pesada	Name_stream_out_heavy_liquid_Product	20	

### 2.4. Columna de destilación (por etapas o empacadas).

Atributos	Nombre de Campo en HEAD	Tipo de Dato	
		Texto (no. de caracteres)	Numérico
Nombre	Name	20	
No. de corrientes de entrada	no_stream_in		Int
Nombre de corrientes entrada	name_stream_in	20	
No. de corrientes de salida	no_stream_out		Int
Nombre de corrientes de salida	name_stream_out	20	
No. de etapas de equilibrio	no_stage		Int
Valor del reflujo	reflux_ratio		Float

### 2.5. Absorbedor.

Atributos	Nombre de Campo en HEAD	Tipo de Dato	
		Texto (no. de caracteres)	Numérico
Nombre	Name	20	
No. de corrientes de entrada	no_stream_in		Int
Nombre de corriente entrada	name_stream_in	20	
No. de corrientes de salida	no_stream_out		Int
Nombres de corrientes de salida	name_stream_out	20	
No. de etapas	stage_number		Int



## 2.6. Adsorbedor.

Atributo	Nombre de Campo en HEAD	Tipo de Dato	
		Texto (no. de caracteres)	Numérico
Nombre	Name	20	
No. de corrientes de entrada	no_stream_in		Int
Nombre de corriente entrada	name_stream_in	20	
No. de corrientes de salida	no_stream_out		Int
Nombres de corrientes de salida	name_stream_out	20	
Nombre de corriente de salida de vapor	Name_strem_out_Vapor	20	
Nombre de corriente de salida de líquido	Name_strem_out_Liquid	20	
Nombre de corriente de salida de sólidos	name_strem_out_solid	20	

## 3. Temperature change.

### 3.1. Cambiador de calor (*Heat exchanger*).

Atributo	Nombre de Campo en HEAD	Tipo de Dato	
		Texto (no. de caracteres)	Numérico
Nombre	Name	20	
Nombre de la corriente de entrada lado tubo	Tube_side_feed	20	
Nombre de la corriente de salida lado tubo	Tube_side_product	20	
Nombre de la corriente de entrada lado coraza	Shell_side_feed	20	
Nombre de la corriente de salida lado coraza	Shell_side_product	20	
Area de transferencia de calor	Heat_transfer_area		Float
Longitud de tubos	Length_tubes		Float
No de tubos	No_tubes		Int
Perdidas de calor	Heat_loss		Float
Calor disponible	heat_available		Float
Calor requerido	heat_required		Float
Nombre corriente caliente	Name_hot_stream	20	
Nombre corriente fría	Name_cool_stream	20	

### 3.2. Calentador o Enfriador (*Heater o Cooler*)

Atributo	Nombre de Campo en HEAD	Tipo de Dato	
		Texto (no. de caracteres)	Numérico
Nombre	Name	20	
Nombre de corriente de entrada	name_stream_in	20	
Nombre de corriente de salida	name_stream_out	20	
Nombre de carga térmica	name_heat_load	20	
Cambio de temperatura	Temperature_change		Float
Caída de presión	Pressure_drop		Float

### 3.3. Enfriador de aire.

Atributo	Nombre de Campo	Tipo de Dato	
		Texto (no. de caracteres)	Numérico
Nombre	Name	20	
Nombre de la corriente de entrada	name_stream_in	20	
Nombre de la corriente de salida	name_stream_out	20	
Temperatura del aire a la entrada	Temperature_air_in		Float
Temperatura del aire a la salida	Temperature_air_out		Float

## 4. Pressure change.

### 4.1. Válvula.

Atributo	Nombre de Campo en HEAD	Tipo de Dato	
		Texto (no. de caracteres)	Numérico
Nombre	name	20	
Nombre corriente entrada	name_stream_in	20	
Nombre corriente salida	name_stream_out	20	
Cambio de presión (caída)	Pressure_change		Float



#### 4.2. Expansor.

Atributo	Nombre de Campo en Head	Tipo de Dato	
		Texto (no. de caracteres)	Numérico
Nombre	Name	20	
Nombre de corriente entrada	name_stream_in	20	
Nombre corriente salida	name_stream_out	20	
Nombre corriente de energía	name_stream_energy	20	
Cambio de presión (caída)	Pressure_change		Float

#### 4.3. Compresor.

Atributo	Nombre de Campo en Head	Tipo de Dato	
		Texto (no. de caracteres)	Numérico
Nombre	Name	20	
Nombre de corriente entrada	name_stream_in	20	
Nombre corriente salida	name_stream_out	20	
Nombre corriente de energía	name_stream_energy	20	
Cambio de presión (aumento)	Pressure_change		Float

#### 4.4. Bomba.

Atributo	Nombre de Campo en HEAD	Tipo de Dato	
		Texto (no. de caracteres)	Numérico
Nombre	Name	20	
Nombre de corriente entrada	name_stream_in	20	
Nombre corriente salida	name_stream_out	20	
Nombre corriente de energía	name_stream_energy	20	
Cambio de presión (aumento)	Pressure_change		Float

### 5. Cambio de flujo.

#### 5.1. Mezclador.

Atributo	Nombre de Campo en Head	Tipo de Dato	
		Texto (no. de caracteres)	Numérico
Nombre	name	20	
No. de corrientes de entrada	no_stream_in		Int
Nombres de corriente entrada	name_stream_in	20	
Nombre corriente salida	name_stream_out	20	

## 5.2. Divisor.

Atributo	Nombre de Campo en Head	Tipo de Dato	
		Texto (no. de caracteres)	Numérico
Nombre	name	20	
Nombre de corriente entrada	name_stream_in	20	
No. de corrientes de salida	no_stream_out		Int
Nombres corriente salida	name_stream_out	20	

## 5.3. Corrientes de energía.

Atributo	Nombre de Campo en Head	Tipo de Dato	
		Texto (no. de caracteres)	Numérico
Nombre	name_stream_energy	20	
Flujo de calor	heat_flow		Float

## 5.4. Corrientes de materia.

Atributo	Nombre de Campo en HEAD	Tipo de Dato	
		Texto (no. de caracteres)	Numérico
Nombre	Name	20	
Fracción de Vapor	Vapour/Phase Fraction		Float
Temperatura	Temperature		Float
Presión	Pressure		Float
Flujo Molar	Molar Flow		Float
Flujo Másico	Mass Flow		Float
Entalpía molar	Molar Enthalpy		Float
Entropía molar	Molar Entropy		Float
Flujo de calor	Heat Flow		Float
No. de compuestos	No_comp		Int
Nombre de compuestos	name_comp	20	
Fracción másica del compuesto	Mass_fraction		Float
Fracción molar del compuesto	Mole_fraction		Float



## 6. Dispositivos de control y lógicos.

### 6.1. Ajuste.

Atributo	Nombre de Campo en HEAD	Tipo de Dato	
		Texto (no. de caracteres)	Numérico
Nombre	Name	20	
Link (Objeto padre)	Link	20	
Variable ajustada	Adj_var	20	
Variable meta	Tar_var	20	
Valor de la variable meta	Tar_val		Float

### 6.2. Balance.

Atributo	Nombre de Campo en HEAD	Tipo de Dato	
		Texto (no. de caracteres)	Numérico
Nombre	Name	20	
No. de corrientes de entrada	no_stream_in		Float
Nombres de corrientes entrada	Name_stream_in	20	
No. de corrientes de salida	no_stream_out		Float
Nombres de corrientes salida	Name_stream_out	20	
Tipo de balance	Balance_type	20	

### 6.3. Reciclo.

Atributo	Nombre de Campo en HEAD	Tipo de Dato	
		Texto (no. de caracteres)	Numérico
Nombre	Name	20	
Nombre corriente de entrada	Name_stream_in	20	
Nombre corriente de salida	Name_stream_out	20	

### 6.4. Balance y Control (Digital Point / PID Controller / MPC Controller / Transfer Function / Selector\_Block / Set / Spreadsheet).

Atributo	Nombre de Campo en HEAD	Tipo de Dato	
		Texto (no. de caracteres)	Numérico
Nombre	Name	20	
Link (Objeto padre)	Link	20	

---

## Anexo 2

### Código fuente de HEAD

El código fuente está hecho con ayuda del editor Microsoft Visual.BASIC™. Está dividido en dos subrutinas principales: `CommandButton1_Click()` y `UpdateStreamInfo()`. Con la primera de ellas se inicia la ejecución del programa y con la segunda se extrae la información después de haber seleccionado el fichero de `Hysys.Plant™`.

La subrutina `UpdateStreamInfo()` se divide en:

1. Definición de variables y constantes.
2. Selección y apertura de ficheros del simulador `Hysys.Plant™`.
3. Subrutinas de lectura para cada uno de las siguientes 6 clases principales:
  - Logics
  - Flow change
  - Pressure change
  - Temperature change
  - Separation
  - Reaction

El total de objetos (equipos y dispositivos de proceso) que forman estas 6 clases son 31.

4. Fin de programa.

A continuación se presenta el detalle de cada una de las 4 secciones antes mencionadas:

#### 1. Definición de variables y constantes.

```
Option Explicit
'Public Function Initialize() As Boolean
Public Sub UpdateStreamInfo()
```

```
'Local Variables
Dim hyCase As SimulationCase
Dim hyApp As HYSYS.Application
Dim hyStreams, hyStreamsEnergy As Streams
Dim hyFlowsheet As Flowsheet
Dim hyStream, hyComponents As Object
```



Dim hyCompFrac As Variant  
 Dim hyFluidPackage As FluidPackage  
 Dim hyIndex As Long  
 Dim hyVal As Double  
 Dim hyOperations As Operations  
 Dim xlSheet As Excel.Worksheet  
 Dim filename As String  
 Dim xlApp As Excel.Application  
 Dim Initialize As Boolean  
 'constants  
 Dim i,j,k As Integer

\*\*\*\*\*

' N O M E N C L A T U R A

\*\*\*\*\*

'Hysys\_Name                      Visual\_Basic\_Aplication\_Name

'Logics

'-----  -----	
'Adjust	adjust
'Balance	balance
'Recycle	recycle
'Digital point	digitalop
'PID controller	fbcontrolop
'MPC controller	fbcontrolmpcop
'Transfer function	signalop
'Selector block	selectionop
'Set	setop
'Spreadsheet	spreadsheet

'Flow change equipment

'-----  -----	
'Mixer	mixerop
'Splitter	teeop

'Pressure change equipment

'-----  -----	
'Valve	valveop
'Expander	ExpanOp
'Compressor	compressor
'Pump	pumpop

'Heat Transfer equipment

'-----  -----	
'Cooler	coolerop
'Heater	heaterop
'Heat_Exchange	heatexop
'Air_Cooler	aircoolerop
'Fired_Heater	firedheaterop

'Separation equipment

'-----  -----	
'Liq_Liq_Extractor	liqliqextractor
'Flash	flashtank
'3 Phase Separator	sep3op





```
'Distillation column (trayed)    distillation
'Absorber                        absorber
'Reaction equipment
'-----||-----
'CSTR                            kineticreactorop
'Plug flow reactor              pfreactorop
*****
```

## 2. Selección y apertura de ficheros del simulador Hysys.Plant™.

```
'Open Hysys files
Set xlApp = GetObject(, "Excel.Application")
filename = xlApp.GetOpenFilename
If filename <> "False" Then
    Set hyCase = GetObject(filename)
End If
Initialize = True
'On Error GoTo CatchException
If Not Initialize Then Exit Sub
Dim xlRange As Excel.Range
```

## 3. Subrutinas de lectura para cada una de las 6 clases principales.

### 'Loop through the Logics

```
Set xlSheet = ThisWorkbook.Sheets("output")
Set hyOperations = hyCase.Flowsheet.Operations(oc_Logical)
Dim no_logical_op As Integer
no_logical_op = hyOperations.Count
For i = 0 To hyOperations.Count - 1
    'Device: adjust
    If hyOperations.Item(i).TypeName = "adjust" Then
        'Retrieve the type operation
        Set xlRange = xlSheet.Range("a" & 4 + i)
        xlRange.Value = "adjust"
        'Retrieve the Equip Names
        Set xlRange = xlSheet.Range("b" & 4 + i)
        xlRange.Value = hyOperations.Item(i).Name
        'Retrieve the SolutionType
        Set xlRange = xlSheet.Range("c" & 4 + i)
        If hyOperations.Item(i).SolutionType = 0 Then
            xlRange.Value = "SecantMethod"
        End If
        If hyOperations.Item(i).SolutionType = 1 Then
            xlRange.Value = "BroydenMethod"
        End If
        If hyOperations.Item(i).SolutionType = 2 Then
            xlRange.Value = "SimultaneousSolution"
        End If
        'Retrieve the AdjustedVariable
        Set xlRange = xlSheet.Range("d" & 4 + i)
        xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AdjustedVariable
        'Retrieve the TargetVariable
        Set xlRange = xlSheet.Range("e" & 4 + i)
        xlRange.Value = hyOperations.Item(i).TargetVariable
    End If
End For
```



```
'End of row
Set xlRange = xlSheet.Range("f" & 4 + i)
xlRange.Value = " @"
End If 'End of "adjust"

'Device: balanceop
If hyOperations.Item(i).TypeName = "balanceop" Then
'Retrieve the type operation
Set xlRange = xlSheet.Range("a" & 4 + i)
xlRange.Value = "balance"
'Retrieve the Equip Names
Set xlRange = xlSheet.Range("b" & 4 + i)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).Name
'Retrieve the AttachedFeeds
Set xlRange = xlSheet.Range("c" & 4 + i)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedFeeds.Count
For j = 0 To hyOperations.Item(i).AttachedFeeds.Count - 1
Set xlRange = xlSheet.Cells(4 + i, j + 4)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedFeeds(j)
Next j
'Retrieve the AttachedProducts
Set xlRange = xlSheet.Cells(4 + i, j + 4)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedProducts.Count
For j = 0 To hyOperations.Item(i).AttachedProducts.Count - 1
Set xlRange = xlSheet.Cells(4 + i, 4 + 1 + hyOperations.Item(i).AttachedFeeds.Count + j)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedProducts(j)
Next j
Set xlRange = xlSheet.Cells(4 + i, 4 + 1 + hyOperations.Item(i).AttachedFeeds.Count + j)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).BalanceOpType
If hyOperations.Item(i).BalanceOpType = 0 Then
xlRange.Value = "MoleAndHeat"
End If
If hyOperations.Item(i).BalanceOpType = 1 Then
xlRange.Value = "Mole"
End If
If hyOperations.Item(i).BalanceOpType = 2 Then
xlRange.Value = "Mass"
End If
If hyOperations.Item(i).BalanceOpType = 3 Then
xlRange.Value = "Heat"
End If
If hyOperations.Item(i).BalanceOpType = 4 Then
xlRange.Value = "General"
End If
If hyOperations.Item(i).BalanceOpType = 5 Then
xlRange.Value = "NotSet"
End If
If hyOperations.Item(i).BalanceOpType = 6 Then
xlRange.Value = "MassAndHeat"
End If
'End of row
Set xlRange = xlSheet.Cells(4 + i, 4 + 2 + hyOperations.Item(i).AttachedFeeds.Count +
hyOperations.Item(i).AttachedProducts.Count)
xlRange.Value = " @"
End If 'End of "balanceop"
```

```
                                'Device: recycle
If hyOperations.Item(i).TypeName = "recycle" Then
  'Retrieve the type operation
  Set xlRange = xlSheet.Range("a" & 4 + i)
  xlRange.Value = "recycle"
  'Retrieve the Equip Names
  Set xlRange = xlSheet.Range("b" & 4 + i)
  xlRange.Value = hyOperations.Item(i).Name
  'Retrieve the FeedStream
  Set xlRange = xlSheet.Range("c" & 4 + i)
  xlRange.Value = hyOperations.Item(i).FeedStream
  'Retrieve the ProductStream
  Set xlRange = xlSheet.Range("d" & 4 + i)
  xlRange.Value = hyOperations.Item(i).ProductStream
  'End of row
  Set xlRange = xlSheet.Range("e" & 4 + i)
  xlRange.Value = " @ "
End If 'End of "recycle"
```

#### **'DEVICES: DIGITALOP, FBCONTROLOP,**

```
If hyOperations.Item(i).TypeName = "digitalop" Or hyOperations.Item(i).TypeName = "fbcontrolop" Then
  'Retrieve the type operation
  Set xlRange = xlSheet.Range("a" & 4 + i)
  If hyOperations.Item(i).TypeName = "digitalop" Then
    xlRange.Value = "digital_point"
  Else: xlRange.Value = "pid_controller"
  End If
  'Retrieve the Equip Names
  Set xlRange = xlSheet.Range("b" & 4 + i)
  xlRange.Value = hyOperations.Item(i).Name
  'Retrieve the OutputObject
  Set xlRange = xlSheet.Range("c" & 4 + i)
  xlRange.Value = hyOperations.Item(i).OutputObject
  'End of row
  Set xlRange = xlSheet.Range("d" & 4 + i)
  xlRange.Value = " @ "
End If 'End of "digitalop"
```

```
                                'Device: fbcontrolmpcop
If hyOperations.Item(i).TypeName = "fbcontrolmpcop" Then
  'Retrieve the type operation
  Set xlRange = xlSheet.Range("a" & 4 + i)
  xlRange.Value = "mpc_controller"
  'Retrieve the Equip Names
  Set xlRange = xlSheet.Range("b" & 4 + i)
  xlRange.Value = hyOperations.Item(i).Name
  'Retrieve the OutputObject
  Set xlRange = xlSheet.Range("c" & 4 + i)
  xlRange.Value = hyOperations.Item(i).OPValue
  'End of row
  Set xlRange = xlSheet.Range("d" & 4 + i)
  xlRange.Value = " @ "
End If 'End of "fbcontrolmpcop"
```



```
                                'Device: signalop
If hyOperations.Item(i).TypeName = "signalop" Then
    'Retrieve the type operation
    Set xlRange = xlSheet.Range("a" & 4 + i)
    xlRange.Value = "transfer_function"
    'Retrieve the Equip Names
    Set xlRange = xlSheet.Range("b" & 4 + i)
    xlRange.Value = hyOperations.Item(i).Name
    'Retrieve the OutputObject
    Set xlRange = xlSheet.Range("c" & 4 + i)
    xlRange.Value = hyOperations.Item(i).Parent
    'End of row
    Set xlRange = xlSheet.Range("d" & 4 + i)
    xlRange.Value = " @ "
End If 'End of "signalop"
```

```
                                'Device: selectionop
If hyOperations.Item(i).TypeName = "selectionop" Then
    'Retrieve the type operation
    Set xlRange = xlSheet.Range("a" & 4 + i)
    xlRange.Value = "selector_block"
    'Retrieve the Equip Names
    Set xlRange = xlSheet.Range("b" & 4 + i)
    xlRange.Value = hyOperations.Item(i).Name
    'Retrieve the Parent
    Set xlRange = xlSheet.Range("c" & 4 + i)
    xlRange.Value = hyOperations.Item(i).NumberOfInputsValue
    xlRange.Value = hyOperations.Item(i).Parent
    'End of row
    Set xlRange = xlSheet.Range("d" & 4 + i)
    xlRange.Value = " @ "
End If 'End of "selectionop"
```

```
Next i 'End of the For by Logics devices
```

```
Set hyFluidPackage = hyCase.Flowsheet.FluidPackage
Set hyStreams = hyCase.Flowsheet.MaterialStreams
Dim no_material_stream As Integer 'No. of Material_Streams
no_material_stream = hyStreams.Count
```

```
'Loop through the Material Streams
For i = 0 To hyStreams.Count - 1
    'Retrieve the function3
    Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_logical_op, 1)
    xlRange.Value = "material_stream"
    'Retrieve the Stream Names
    Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_logical_op, 2)
    xlRange.Value = hyStreams.Item(i).Name
    'Retrieve the no_comp
    Dim no_comp As Integer 'Numero de componentes
    Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_logical_op, 3)
    xlRange.Value = hyFluidPackage.Components.Count
    no_comp = hyFluidPackage.Components.Count 'No. de componentes
    'Retrieve the name_comp
    For j = 0 To hyFluidPackage.Components.Count - 1
```

```
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_logical_op, 4 + j)
xlRange.Value = hyFluidPackage.Components.Item(j).Name
Next j
'Retrieve the Vapour Fraction
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_logical_op, 4 + no_comp)
xlRange.Value = hyStreams.Item(i).VapourFraction
'Temperature
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_logical_op, 4 + no_comp + 1)
xlRange.Value = hyStreams.Item(i).Temperature.GetValue("C")
'Pressure
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_logical_op, 4 + no_comp + 2)
xlRange.Value = hyStreams.Item(i).Pressure.GetValue("kPa")
'Mass Flow
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_logical_op, 4 + no_comp + 3)
xlRange.Value = hyStreams.Item(i).MassFlow.GetValue("kg/h")
'Molar Flow
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_logical_op, 4 + no_comp + 4)
xlRange.Value = hyStreams.Item(i).MolarFlow.GetValue("kgmole/h")
'Molar Enthalpy
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_logical_op, 4 + no_comp + 5)
xlRange.Value = hyStreams.Item(i).MolarEnthalpy.GetValue("kJ/kgmole")
'Molar Entropy
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_logical_op, 4 + no_comp + 6)
xlRange.Value = hyStreams.Item(i).MolarEntropy.GetValue("kJ/kgmole-C")
'Heat Flow
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_logical_op, 4 + no_comp + 7)
xlRange.Value = hyStreams.Item(i).HeatFlow.GetValue("kJ/h")
'Mass Fraction
Set hyFlowsheet = hyCase.Flowsheet
Set hyStream = hyFlowsheet.MaterialStreams.Item(i)
Set hyComponents = hyCase.BasisManager.FluidPackages.Item(0).Components
For j = 0 To hyFluidPackage.Components.Count - 1
    hyIndex = hyComponents.Index(j)
    hyCompFrac = hyStream.ComponentMassFractionValue
    hyVal = hyCompFrac(hyIndex)
    Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_logical_op, 4 + no_comp + 8 + j)
    xlRange.Value = hyVal
Next j
'Molar Fraction
For j = 0 To hyFluidPackage.Components.Count - 1
    hyIndex = hyComponents.Index(j)
    hyCompFrac = hyStream.ComponentMolarFractionValue
    hyVal = hyCompFrac(hyIndex)
    Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_logical_op, 4 + (no_comp * 2) + 8 + j)
    xlRange.Value = hyVal
Next j
'End of Material_Stream-row
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_logical_op, 4 + (no_comp * 2) + 8 + j)
xlRange.Value = "@"
Next i 'End of loop of Material Streams

'Loop through the Energy streams
Set hyStreamsEnergy = hyCase.Flowsheet.EnergyStreams
Dim no_energy_stream As Integer
no_energy_stream = hyStreamsEnergy.Count 'No. of energy streams
```



```
For i = 0 To hyStreamsEnergy.Count - 1
  'Retrieve the function3
  Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_material_stream + no_logical_op, 1)
  xlRange.Value = "energy_stream"
  'Retrieve the Streams Energy Names
  Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_material_stream + no_logical_op, 2)
  xlRange.Value = hyStreamsEnergy.Item(i).Name
  'Retrieve the Stream Energy Heat Flow in kW
  Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_material_stream + no_logical_op, 3)
  xlRange.Value = hyStreamsEnergy.Item(i).HeatFlow.GetValue("kJ/h")
  'End of energy_Stream-row
  Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_material_stream + no_logical_op, 4)
  xlRange.Value = "@"
Next i 'End of loop of Energy Streams
```

### 'Loop through Flow change equipment

```
'Loop through Mixer
Dim no_LO_MS_ES As Integer 'Sum of LogicalOperations, MaterialStreams and EnergyStreams
no_LO_MS_ES = no_material_stream + no_logical_op + no_energy_stream
Set hyOperations = hyCase.Flowsheet.Operations("mixerop")
Dim no_mixerop As Integer
no_mixerop = hyOperations.Count 'No. of mixers
For i = 0 To hyOperations.Count - 1
  'Retrieve the function3
  Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES, 1)
  xlRange.Value = "mixer"
  'Retrieve the Equip Name
  Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES, 2)
  xlRange.Value = hyOperations.Item(i).Name
  'Retrieve the no_stream_in
  Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES, 3)
  xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedFeeds.Count
  'Retrieve the name_stream_in
  For j = 0 To hyOperations.Item(i).AttachedFeeds.Count - 1
    Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES, 4 + j)
    xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedFeeds(j)
  Next j
  'Retrieve the name_stream_out
  For j = 0 To hyOperations.Item(i).AttachedProducts.Count - 1
    Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES, 4 + j +
hyOperations.Item(i).AttachedFeeds.Count)
    xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedProducts(j)
  Next j
  'End of Mixer-row
  Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES, 4 + hyOperations.Item(i).AttachedFeeds.Count +
hyOperations.Item(i).AttachedProducts.Count)
  xlRange.Value = "@"
Next i 'End of loop of Mixers

'Loop through Splitter
Set hyOperations = hyCase.Flowsheet.Operations("teeop")
Dim no_teeop As Integer
Dim no_LO_MS_ES_MX As Integer
no_teeop = hyOperations.Count 'No. of Splitters
```

```
no_LO_MS_ES_MX = no_LO_MS_ES + no_mixerop 'Sum of LogicalOperations, MaterialStreams,  
EnergyStreams and Mixers  
For i = 0 To hyOperations.Count - 1  
  'Retrieve the function3  
  Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX, 1)  
  xlRange.Value = "split"  
  'Retrieve the Equip Name  
  Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX, 2)  
  xlRange.Value = hyOperations.Item(i).Name  
  'Retrieve the Name_stream_in  
  Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX, 3)  
  'xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedFeeds.Name  
  xlRange.Value = hyOperations.Item(i).FeedStream  
  'Retrieve the no_stream_out  
  Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX, 4)  
  xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedProducts.Count  
  'Retrieve the name_stream_out  
  For j = 0 To hyOperations.Item(i).AttachedProducts.Count - 1  
    Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX, 5 + j)  
    xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedProducts(j)  
  Next j  
  'End of Spliter-row  
  Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX, 5 +  
hyOperations.Item(i).AttachedProducts.Count)  
  xlRange.Value = "@ "  
Next i 'End of loop of Splitters
```

#### **'Loop through Pressure change equipment**

```
'Loop through Valve  
Set hyOperations = hyCase.Flowsheet.Operations("valveop")  
Dim no_valve As Integer  
Dim no_LO_MS_ES_MX_TO As Integer  
no_valve = hyOperations.Count 'No. of Valves  
no_LO_MS_ES_MX_TO = no_LO_MS_ES_MX + no_teeop 'Sum of LogicalOperations, MaterialStreams,  
EnergyStreams, Mixers and Splitters  
For i = 0 To hyOperations.Count - 1  
  'Retrieve the function3  
  Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO, 1)  
  xlRange.Value = "valve"  
  'Retrieve the Equip Name  
  Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO, 2)  
  xlRange.Value = hyOperations.Item(i).Name  
  'Retrieve the Name_stream_in  
  Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO, 3)  
  xlRange.Value = hyOperations.Item(i).FeedStream  
  'Retrieve the Name_stream_out  
  Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO, 4)  
  xlRange.Value = hyOperations.Item(i).ProductStream  
  'Retrieve the pressure_drop  
  Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO, 5)  
  xlRange.Value = hyOperations.Item(i).PressureDrop  
  'End of valve-row  
  Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO, 6)  
  xlRange.Value = "@ "  
Next i 'End of loop of valves
```



```
'Loop through Expander
Set hyOperations = hyCase.Flowsheet.Operations("ExpandOp")
Dim no_expander As Integer
Dim no_LO_MS_ES_MX_TO_VA As Integer
no_expander = hyOperations.Count 'No. of expander
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA = no_LO_MS_ES_MX_TO + no_valve 'Sum of LogicalOperations,
MaterialStreams, EnergyStreams, Mixers, Splitters and Valves
For i = 0 To hyOperations.Count - 1
  'Retrieve the function3
  Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA, 1)
  xlRange.Value = "expander"
  'Retrieve the Equip Name
  Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA, 2)
  xlRange.Value = hyOperations.Item(i).Name
  'Retrieve the Name_stream_in
  Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA, 3)
  xlRange.Value = hyOperations.Item(i).FeedStream
  'Retrieve the Name_stream_out
  Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA, 4)
  xlRange.Value = hyOperations.Item(i).ProductStream
  'Retrieve the name_energy_stream
  Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA, 5)
  xlRange.Value = hyOperations.Item(i).EnergyStream
  'Retrieve the pressure_drop
  Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA, 6)
  xlRange.Value = hyOperations.Item(i).DeltaP
  'End of Expander-row
  Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA, 7)
  xlRange.Value = "@"
Next i 'End of loop of Expander

'Loop through Compressor
Set hyOperations = hyCase.Flowsheet.Operations("compressor")
Dim no_compressor As Integer
Dim no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX As Integer
no_compressor = hyOperations.Count 'No. of Compressor
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX = no_LO_MS_ES_MX_TO_VA + no_expander 'Sum of
LogicalOperations, MaterialStreams, EnergyStreams, Mixers, Splitters, Valves and Expanders
For i = 0 To hyOperations.Count - 1
  'Retrieve the function3
  Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX, 1)
  xlRange.Value = "compressor"
  'Retrieve the Equip Name
  Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX, 2)
  xlRange.Value = hyOperations.Item(i).Name
  'Retrieve the Name_stream_in
  Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX, 3)
  xlRange.Value = hyOperations.Item(i).FeedStream
  'Retrieve the Name_stream_out
  Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX, 4)
  xlRange.Value = hyOperations.Item(i).ProductStream
  'Retrieve the name_energy_stream
  Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX, 5)
  xlRange.Value = hyOperations.Item(i).EnergyStream
```



```
'Retrive the pressure_drop
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX, 6)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).DeltaP
'End of Compressor-row
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX, 7)
xlRange.Value = "@"
Next i 'End of loop of Compressor

'Loop through Pump
Set hyOperations = hyCase.Flowsheet.Operations("pumpop")
Dim no_pump As Integer
Dim pressure_drop As Double
Dim no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO As Integer
no_pump = hyOperations.Count 'No. of Pumps
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO = no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX + no_compressor 'Sum of
LogicalOperations, MaterialStreams, EnergyStreams, Mixers, Splitters, Valves, Expanders and Compressors
For i = 0 To hyOperations.Count - 1
'Retrive the function3
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO, 1)
xlRange.Value = "pump"
'Retrive the Equip Name
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO, 2)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).Name
'Retrive the Name_stream_in
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO, 3)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).FeedStream
'Retrive the Name_stream_out
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO, 4)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).ProductStream
'Retrive the name_energy_stream
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO, 5)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).EnergyStream
'Retrive the pressure_drop
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO, 6)
pressure_drop = hyOperations.Item(i).ProductPressure - hyOperations.Item(i).FeedPressure
xlRange.Value = pressure_drop
'End of Pump-row
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO, 7)
xlRange.Value = "@"
Next i 'End of loop of Pump
```

### **'Loop through Temperature change equipment**

```
'Loop through Heater
Set hyOperations = hyCase.Flowsheet.Operations("heaterop")
Dim no_heater As Integer
Dim no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU As Integer
no_heater = hyOperations.Count 'No. of Heaters
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU = no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO + no_pump 'Sum of
LogicalOperations, MaterialStreams, EnergyStreams, Mixers, Splitters, Valves, Expanders, Compressors and
Pump
For i = 0 To hyOperations.Count - 1
'Retrive the function3
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU, 1)
xlRange.Value = "heater"
'Retrive the Equip Name
```



```
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU, 2)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).Name
'Retrieve the Name_stream_in
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU, 3)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).FeedStream
'Retrieve the Name_stream_out
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU, 4)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).ProductStream
'Retrieve the name_heat_load
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU, 5)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).Duty.GetValue("kJ/h")
'Retrieve the pressure_drop
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU, 6)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).PressureDrop
'Retrieve the temperature_change
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU, 7)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).DeltaT
'End of Heater-row
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU, 8)
xlRange.Value = "@"
Next i 'End of loop of Heater

'Loop through Cooler
Set hyOperations = hyCase.Flowsheet.Operations("coolerop")
Dim no_cooler As Integer
Dim no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET As Integer
no_cooler = hyOperations.Count 'No. of Cooler
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET = no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU + no_heater
'Sum of LogicalOperations, MaterialStreams, EnergyStreams, Mixers, Splitters, Valves, Expanders, Compressors,
Pump and Heater
For i = 0 To hyOperations.Count - 1
'Retrieve the function3
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET, 1)
xlRange.Value = "cooler"
'Retrieve the Equip Name
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET, 2)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).Name
'Retrieve the Name_stream_in
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET, 3)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).FeedStream
'Retrieve the Name_stream_out
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET, 4)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).ProductStream
'Retrieve the name_heat_load in Kj/h
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET, 5)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).Duty
'Retrieve the pressure_drop
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET, 6)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).PressureDrop
'Retrieve the temperature_change
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET, 7)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).DeltaT
'End of Cooler-row
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET, 8)
xlRange.Value = "@"
```



```
Next i 'End of loop of Cooler

'Loop through Heat_ Exchanger
Set hyOperations = hyCase.Flowsheet.Operations("heatexop")
Dim no_heatexchanger As Integer
Dim no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL As Integer
no_heatexchanger = hyOperations.Count 'No. of Heat_ Exchanger
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL =
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET + no_cooler 'Sum of LogicalOperations, MaterialStreams,
EnergyStreams, Mixers, Splitters, Valves, Expanders, Compressors, Pump, Heater and Cooler
For i = 0 To hyOperations.Count - 1
'Retrieve the function3
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL, 1)
xlRange.Value = "heat_exchanger_h"
'Retrieve the Equip Name
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL, 2)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).Name
'Retrieve the Name_tube_side_stream_in
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL, 3)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).TubeSideFeed
'Retrieve the Name_tube_side_stream_out
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL, 4)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).TubeSideProduct
'Retrieve the Name_shell_side_stream_in
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL, 5)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).ShellSideFeed
'Retrieve the Name_shell_side_stream_out
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL, 6)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).ShellSideProduct
'Retrieve the heat_transfer_area [units : m2]
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL, 7)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).HeatTransferArea
'Retrieve the length_tubes [units : m2]
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL, 8)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).TubeLength
'Retrieve the no_tubes
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL, 9)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).NumberOfTubes
'Retrieve the heat_loss [units : kj/h]
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL, 10)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).HeatLoss
If hyOperations.Item(i).TubeSideFeed.Temperature.GetValue("C") >
hyOperations.Item(i).ShellSideFeed.Temperature.GetValue("C") Then
'Retrieve the heat_available [units : kj/h]
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL, 11)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).TubeSideProduct.HeatFlow.GetValue("kj/h") -
hyOperations.Item(i).TubeSideFeed.HeatFlow.GetValue("kj/h")
'Retrieve the heat_required [units : kj/h]
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL, 12)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).ShellSideProduct.HeatFlow.GetValue("kj/h") -
hyOperations.Item(i).ShellSideFeed.HeatFlow.GetValue("kj/h")
'Retrieve the name_hot_stream
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL, 13)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).TubeSideFeed
'Retrieve the name_cool_stream
```



```
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL, 14)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).ShellSideFeed
Else:
'Retrieve the heat_available [units : kj/h]
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL, 11)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).ShellSideProduct.HeatFlow.GetValue("kj/h") -
hyOperations.Item(i).ShellSideFeed.HeatFlow.GetValue("kj/h")
'Retrieve the heat_required [units : kj/h]
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL, 12)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).TubeSideProduct.HeatFlow.GetValue("kj/h") -
hyOperations.Item(i).TubeSideFeed.HeatFlow.GetValue("kj/h")
'Retrieve the name_hot_stream
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL, 13)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).ShellSideFeed
'Retrieve the name_cool_stream
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL, 14)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).TubeSideFeed
End If
'End of Heat_Exchanger-row
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL, 15)
xlRange.Value = " @"
Next i 'End of loop of Heat_Exchanger
```

#### **'Loop through Separation systems**

```
'Loop through Liquid_Liquid_Extractor
Set hyOperations = hyCase.Flowsheet.Operations("liqliqextractor")
Dim no_llextractor As Integer
Dim no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC As Integer
no_llextractor = hyOperations.Count 'No. of L-L_Extractor
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC =
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX + no_aircooler 'Sum of LogicalOperations,
MaterialStreams, EnergyStreams, Mixers, Splitters, Valves, Expanders, Compressors, Pump, Heater,
Cooler, HeatExchanger and AirCooler
For i = 0 To hyOperations.Count - 1
'Retrieve the function3
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC, 1)
xlRange.Value = "liq_liq_extractor"
'Retrieve the Equip Name
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC, 2)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).Name
'Retrieve the No_stream_in
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC, 3)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedFeeds.Count
For j = 0 To hyOperations.Item(i).AttachedFeeds.Count - 1
'Retrieve the Name_stream_in
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC, 4
+ j)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedFeeds(j).Name
Next j
'Retrieve the No_stream_out
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC, 4
+ j)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedProducts.Count
For k = 0 To hyOperations.Item(i).AttachedProducts.Count - 1
'Retrieve the Name_stream_out
```



```
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC , 5
+ j + k)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedProducts(k).Name
Next k
'Retrieve the No_Stages
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC, 5
+ j + k)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).ColumnFlowsheet.ColumnStages.Count
'End of Liquid_Liquid_Extractor-row
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 + no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC, 6
+ j + k)
xlRange.Value = " @"
Next i 'End of loop of Liquid_Liquid_Extractor

'Loop through Flash
Set hyOperations = hyCase.Flowsheet.Operations("flashtank")
Dim no_flash As Integer
Dim no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE As Integer
no_flash = hyOperations.Count 'No. of Flash
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE =
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC + no_llextractor 'Sum of LogicalOperations,
MaterialStreams, EnergyStreams, Mixers, Splitters, Valves, Expanders, Compressors, Pump, Heater,
Cooler, HeatExchanger, AirCooler and LL-Extractor
For i = 0 To hyOperations.Count - 1
'Retrieve the function3
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE, 1)
xlRange.Value = "flash"
'Retrieve the Equip Name
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE, 2)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).Name
'Retrieve the No_stream_in
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE, 3)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedFeeds.Count
For j = 0 To hyOperations.Item(i).AttachedFeeds.Count - 1
'Retrieve the Name_stream_in
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE, 4 + j)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedFeeds(j).Name
Next j
'Retrieve the No_stream_out
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE, 4 + j)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedProducts.Count
For k = 0 To hyOperations.Item(i).AttachedProducts.Count - 1
'Retrieve the Name_stream_out
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE, 5 + j + k)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedProducts(k).Name
Next k
'Retrieve the Name_stream_vapour
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE, 5 + j + k)
```



```
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).VapourProduct.Name
'Retrieve the Name_stream_liquid
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE, 6 + j + k)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).LiquidProduct.Name
'End of Flash-row
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE, 7 + j + k)
xlRange.Value = "@"
Next i 'End of loop of Flash

'Loop through 3_Phase_Separator
Set hyOperations = hyCase.Flowsheet.Operations("sep3op")
Dim no_sep3op As Integer
Dim no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL As Integer
no_sep3op = hyOperations.Count 'No. of 3_Phase_Separator
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL =
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE + no_flash 'Sum of LogicalOperations,
MaterialStreams, EnergyStreams, Mixers, Splitters, Valves, Expanders, Compressors, Pump, Heater,
Cooler, HeatExchanger, AirCooler, LL-Extractor and Flash
For i = 0 To hyOperations.Count - 1
'Retrieve the function3
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL, 1)
xlRange.Value = "3_phase_separator"
'Retrieve the Equip Name
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL, 2)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).Name
'Retrieve the No_stream_in
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL, 3)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedFeeds.Count
For j = 0 To hyOperations.Item(i).AttachedFeeds.Count - 1
'Retrieve the Name_stream_in
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL, 4 + j)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedFeeds(j).Name
Next j
'Retrieve the No_stream_out
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL, 4 + j)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedProducts.Count
For k = 0 To hyOperations.Item(i).AttachedProducts.Count - 1
'Retrieve the Name_stream_out
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL, 5 + j + k)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedProducts(k).Name
Next k
'Retrieve the Name_stream_vapour
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL, 5 + j + k)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).VapourProduct.Name
'Retrieve the Name_stream_liquid
```



```
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL, 6 + j + k)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).HeavyLiquidProduct.Name
'End of Distillation-row
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL, 7 + j + k)
xlRange.Value = "@"
Next i 'End of loop of 3_Phase_Separator

'Loop through Distillation
Set hyOperations = hyCase.Flowsheet.Operations("distillation")
Dim no_distillation As Integer
Dim no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL_3PS As Integer
no_distillation = hyOperations.Count 'No. of L-L_Extractor
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL_3PS =
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL + no_sep3op 'Sum of
LogicalOperations, MaterialStreams, EnergyStreams, Mixers, Splitters, Valves, Expanders, Compressors, Pump,
Heater, Cooler, HeatExchanger, AirCooler, LL-Extractor, Flash and 3PhaseSeparator
For i = 0 To hyOperations.Count - 1
'Retrieve the function3
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL, 1)
xlRange.Value = "trayed"
'Retrieve the Equip Name
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL, 2)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).Name
'Retrieve the No_stream_in
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL, 3)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedFeeds.Count
For j = 0 To hyOperations.Item(i).AttachedFeeds.Count - 1
'Retrieve the Name_stream_in
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL, 4 + j)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedFeeds(j).Name
Next j
'Retrieve the No_stream_out
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL, 4 + j)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedProducts.Count
For k = 0 To hyOperations.Item(i).AttachedProducts.Count - 1
'Retrieve the Name_stream_out
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL, 5 + j + k)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedProducts(k).Name
Next k
'Retrieve the No_Stages
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL, 5 + j + k)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).ColumnFlowsheet.ColumnStages.Count
'Retrieve the Reflux_ratio
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL, 6 + j + k)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).ColumnFlowsheet.RefluxRatio
```



```
'End of Distillation-row  
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +  
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL, 7 + j + k)  
xlRange.Value = "@"  
Next i 'End of loop of Distillation
```

### 'Loop through Reaction Systems

```
'Loop through CSTR  
Set xlSheet = ThisWorkbook.Sheets("output")  
Set hyOperations = hyCase.Flowsheet.Operations("kineticreactorop")  
Dim no_CSTR As Integer  
no_CSTR = hyOperations.Count 'No. of CSTR_reactor  
Dim no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL_3PS_DIS As Integer  
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL_3PS_DIS =  
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL_3PS + no_distillation 'Sum of  
LogicalOperations, MaterialStreams, EnergyStreams, Mixers, Splitters, Valves, Expanders, Compressors, Pump,  
Heater, Cooler, HeatExchanger, AirCooler, LL-Extractor, Flash, 3PhaseSeparator and Distillation  
For i = 0 To hyOperations.Count - 1  
'Retrieve the function3  
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +  
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL_3PS_DIS, 1)  
xlRange.Value = "continuous_stirred_tank_reactor"  
'Retrieve the Equip Name  
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +  
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL_3PS_DIS, 2)  
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).Name  
'Retrieve the No_stream_in  
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +  
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL_3PS_DIS, 3)  
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedFeeds.Count  
For j = 0 To hyOperations.Item(i).AttachedFeeds.Count - 1  
'Retrieve the Name_stream_in  
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +  
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL_3PS_DIS, 4 + j)  
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedFeeds(j).Name  
Next j  
'Retrieve the No_stream_out  
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +  
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL_3PS_DIS, 4 + j)  
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedProducts.Count  
For k = 0 To hyOperations.Item(i).AttachedProducts.Count - 1  
'Retrieve the Name_stream_out  
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +  
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL_3PS_DIS, 5 + j + k)  
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedProducts(k).Name  
Next k  
'Retrieve the Vessel_Volume [units - m3]  
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +  
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL_3PS_DIS, 5 + j + k)  
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).Volume.Value  
'Retrieve the Reaction_type  
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +  
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL_3PS_DIS, 6 + j + k)  
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).ReactionSet.Name  
'Retrieve the Pressure_drop [units - kPa]
```



```
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL_3PS_DIS, 7 + j + k)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).PressureDropValue
'Retrieve the Liquid_level [units - %]
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL_3PS_DIS, 8 + j + k)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).LiquidLevelValue
'End of CSTR-row
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL_3PS_DIS, 9 + j + k)
xlRange.Value = "@"
Next i 'End of loop of Liquid_Liquid_Extractor

'Loop through tubular_reactor
Set hyOperations = hyCase.Flowsheet.Operations("pfractorop")
Dim no_tubular_reactor As Integer
no_tubular_reactor = hyOperations.Count 'No. of tubular_reactor
Dim
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL_3PS_DIS_CSTR_CR_ER_GR As
Integer
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL_3PS_DIS_CSTR_CR_ER_GR
= no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL_3PS_DIS_CSTR_CR_ER +
no_gibbs_reactor 'Sum of LogicalOperations, MaterialStreams, EnergyStreams, Mixers, Splitters, Valves,
Expanders, Compressors, Pump, Heater, Cooler, HeatExchanger, AirCooler, LL-Extractor, Flash,
3PhaseSeparator, Distillation, CSTR, Conversion Reactor and Gibbs Reactor
For i = 0 To hyOperations.Count - 1
'Retrieve the function3
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL_3PS_DIS_CSTR_CR_ER_GR, 1)
xlRange.Value = "tubular_reactor"
'Retrieve the Equip Name
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL_3PS_DIS_CSTR_CR_ER_GR, 2)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).Name
'Retrieve the No_stream_in
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL_3PS_DIS_CSTR_CR_ER_GR, 3)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedFeeds.Count
For j = 0 To hyOperations.Item(i).AttachedFeeds.Count - 1
'Retrieve the Name_stream_in
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL_3PS_DIS_CSTR_CR_ER_GR, 4
+ j)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedFeeds(j).Name
Next j
'Retrieve the No_stream_out
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL_3PS_DIS_CSTR_CR_ER_GR, 4
+ j)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedProducts.Count
For k = 0 To hyOperations.Item(i).AttachedProducts.Count - 1
'Retrieve the Name_stream_out
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL_3PS_DIS_CSTR_CR_ER_GR, 5
+ j + k)
```



```
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).AttachedProducts(k).Name
Next k
'Retrieve the No_tubes
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL_3PS_DIS_CSTR_CR_ER_GR, 5
+ j + k)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).NumberOfTubes
'Retrieve the diameter_tubes [units - m]
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL_3PS_DIS_CSTR_CR_ER_GR, 6
+ j + k)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).TubeDiameterValue
'Retrieve the tube_wall_thickness [units - m]
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL_3PS_DIS_CSTR_CR_ER_GR, 7
+ j + k)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).TubeWallThicknessValue
'Retrieve the diameter_particle [units - m]
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL_3PS_DIS_CSTR_CR_ER_GR, 8
+ j + k)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).CatalystParticleDiameterValue
'Retrieve the solid_density [units - kg/m3]
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL_3PS_DIS_CSTR_CR_ER_GR, 9
+ j + k)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).CatalystSolidDensityValue
'Retrieve the reaction_type
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL_3PS_DIS_CSTR_CR_ER_GR, 10
+ j + k)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).ReactionSet.Name
'Retrieve the pressure_drop [units - kPa]
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL_3PS_DIS_CSTR_CR_ER_GR, 11
+ j + k)
xlRange.Value = hyOperations.Item(i).PressureDropValue
'End of tubular_reactor
Set xlRange = xlSheet.Cells(i + 4 +
no_LO_MS_ES_MX_TO_VA_EX_CO_PU_HET_COOL_HX_AC_LLE_FL_3PS_DIS_CSTR_CR_ER_GR, 12
+ j + k)
xlRange.Value = " @"
Next i 'End of loop of tubular_reactor
```

#### 4. Fin de programa

```
MsgBox "End of program"
End Sub
Private Sub CommandButton1_Click()
UpdateStreamInfo
End Sub
```

## Anexo 3

### Sistema de reglas de producción para el modelo teleológico

Con el sistema de reglas de producción se genera el modelo teleológico de los equipos y dispositivos de un proceso químico. Como se mencionó en la sección 4.3.1.2., el sistema realiza los siguientes pasos:

1. Identificación de la clase. Las *Units/Meta-units* están divididas en 5 clases: reacción, separación, cambio de temperatura, cambio de presión y cambio de flujo.
2. Lectura de parámetros según la clase. Esta información está especificada en la Tabla 3 según la clase y se utiliza para inferir la “hoja” correspondiente.
3. Inferencia o cálculo de las “palabras clave”. Las “palabras clave” son un conjunto de atributos que permiten especificar y generar el modelo teleológico.

Con base en los puntos anteriores, el presente Anexo está organizado en 5 secciones:

- A3.1. Estructuras de los árboles de decisiones para cada una de las 5 clases.
- A3.2. Nomenclatura para leer el árbol de decisiones.
- A3.3. Semántica de los modelos teleológicos para cada una de las 5 clases.
- A3.4. Definición y explicación de cómo inferir o calcular las “palabras clave”.
- A3.5. Ejemplos de modelos teleológicos.

#### **A3.1. Estructuras de los árboles de decisiones para cada una de las 5 clases.**

Una vez identificada la clase de una determinada *Unit/Meta-unit* se realiza una búsqueda de la hoja correspondiente en función de sus parámetros. La estructura básica se muestra en la Figura A3.1.

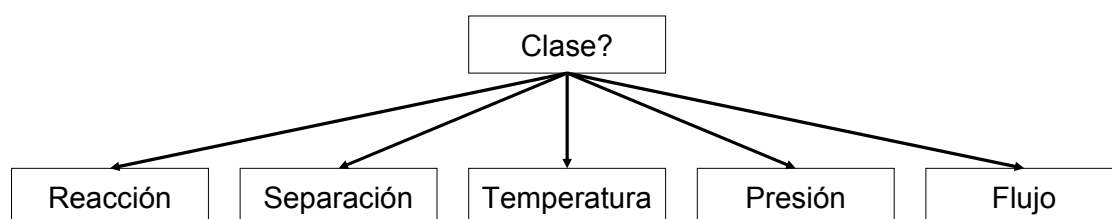


Figura A3.1. Árbol de decisiones para generar el modelo teleológico de *Units/Meta-units*.

Figura A3.1. Para Reacción (continuación).

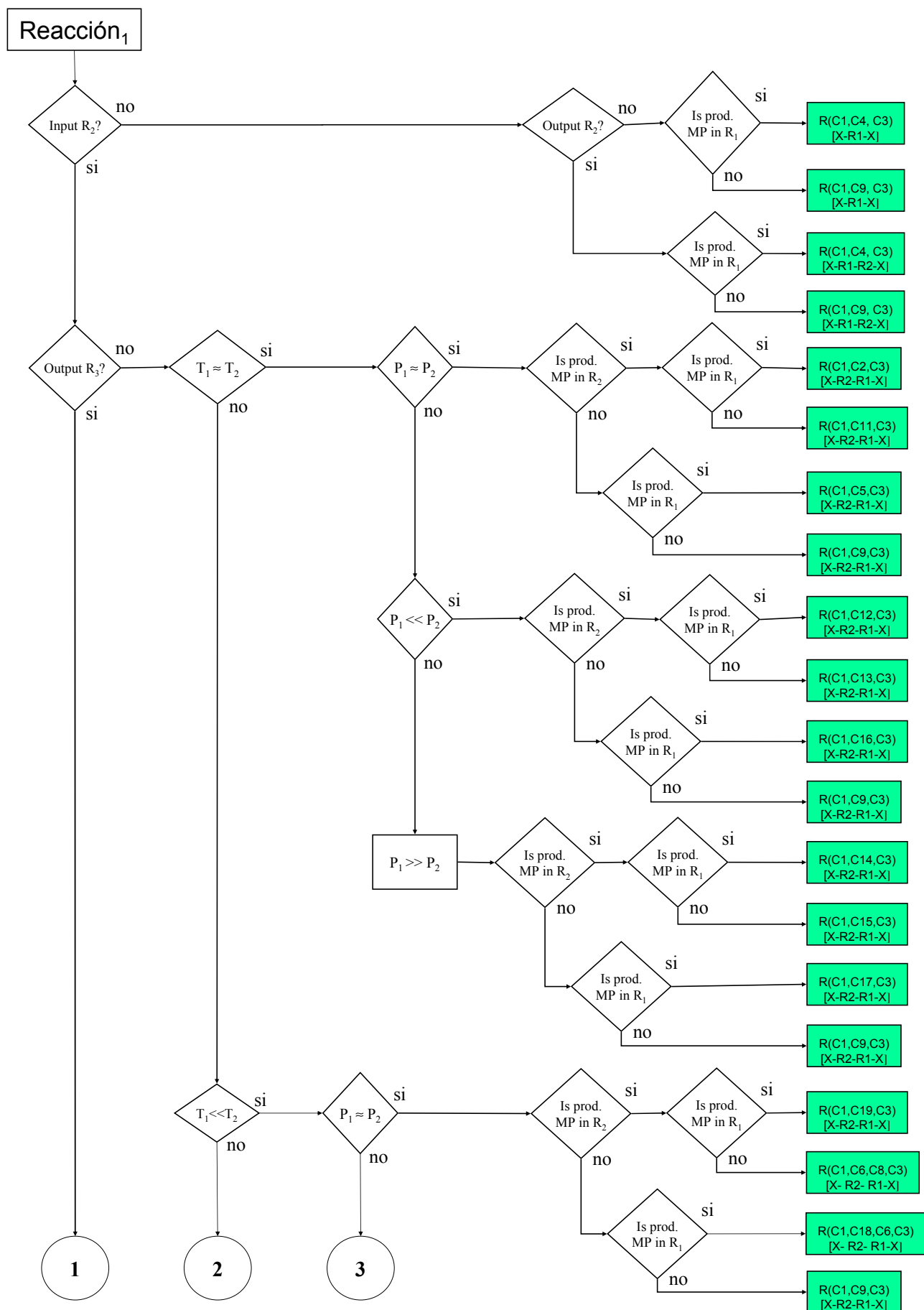


Figura A3.1. Para Reacción (continuación).

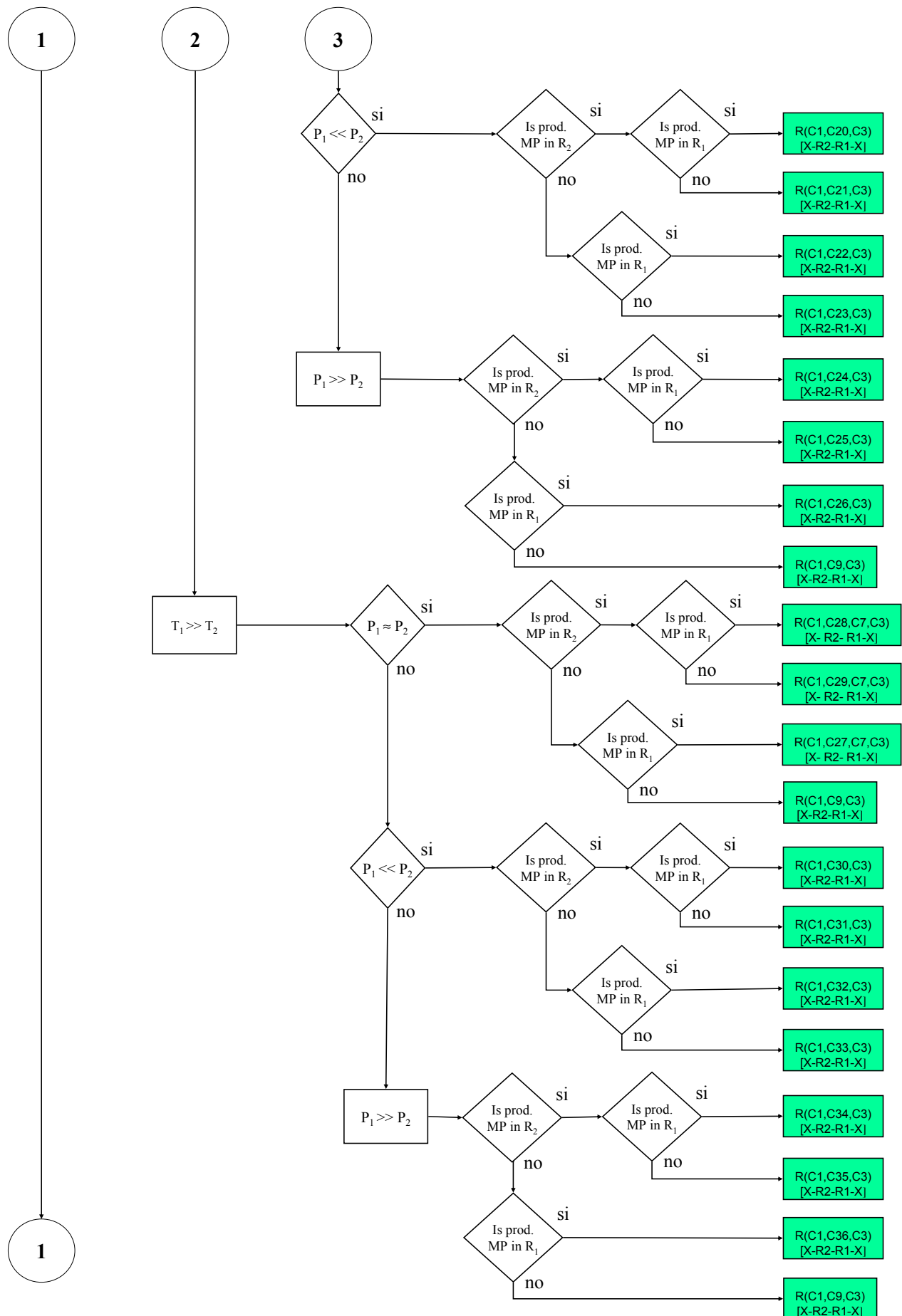


Figura A3.1. Para Reacción (continuación).

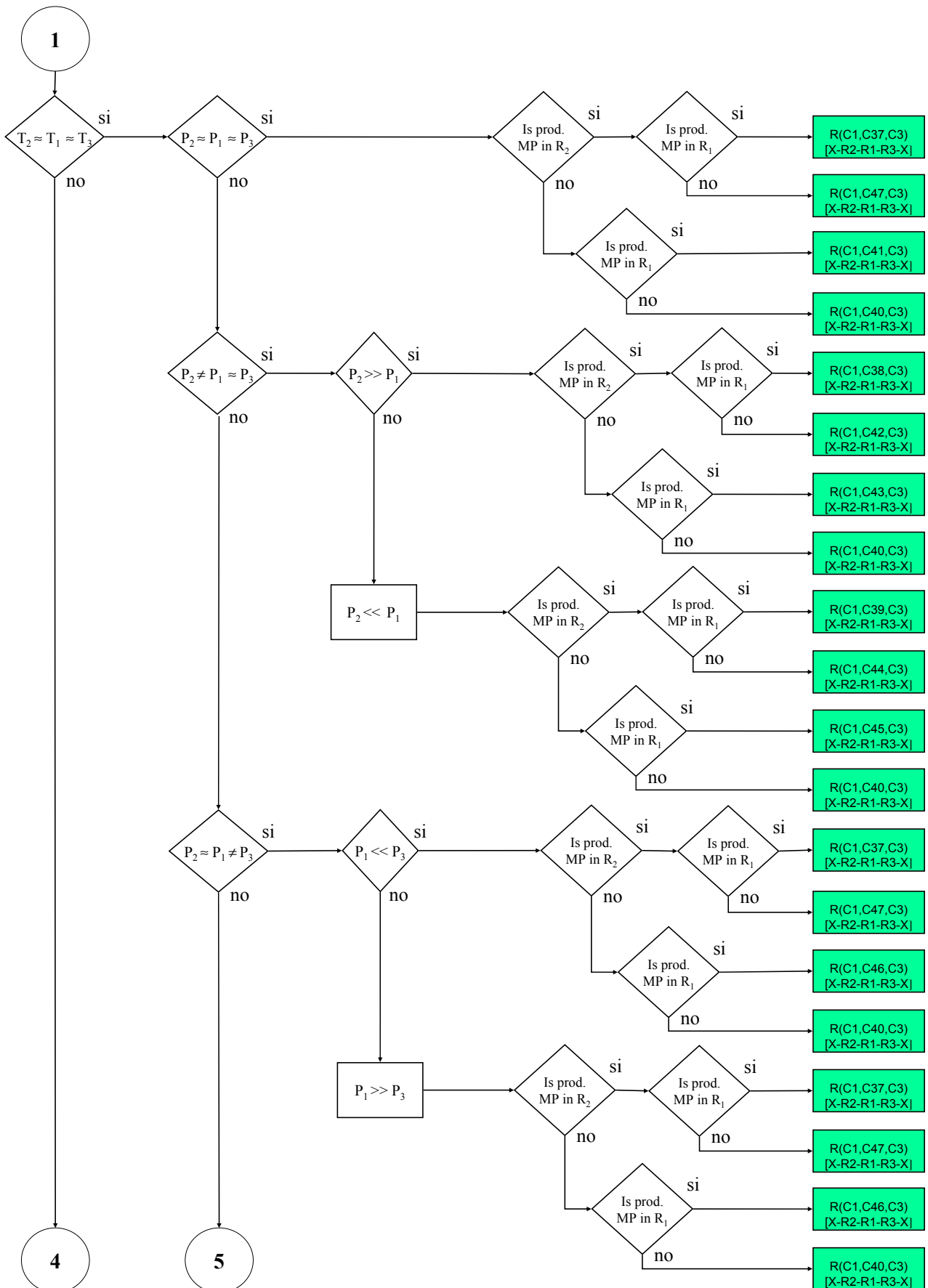


Figura A3.1. Para Reacción (continuación).

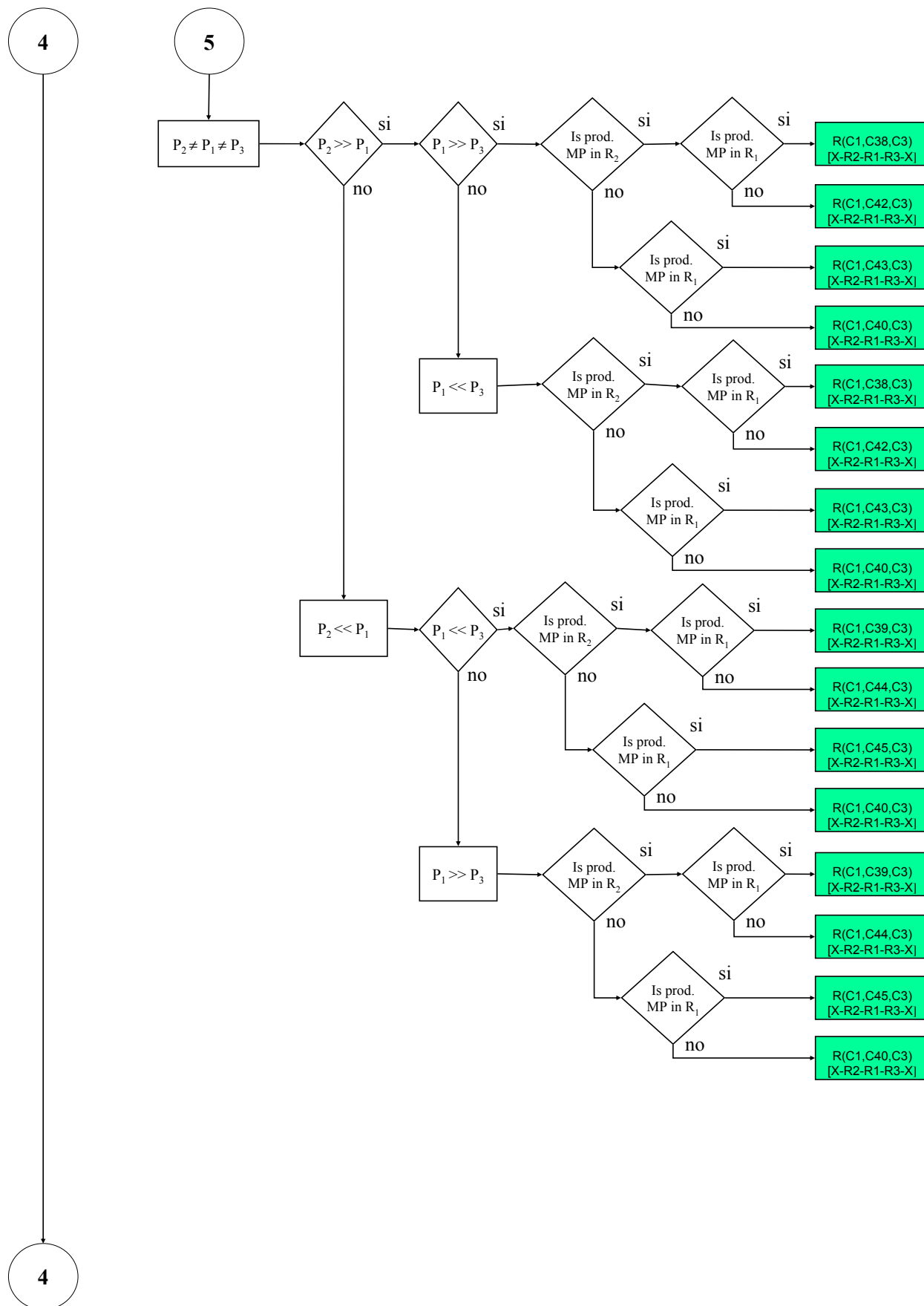


Figura A3.1. Para Reacción (continuación).

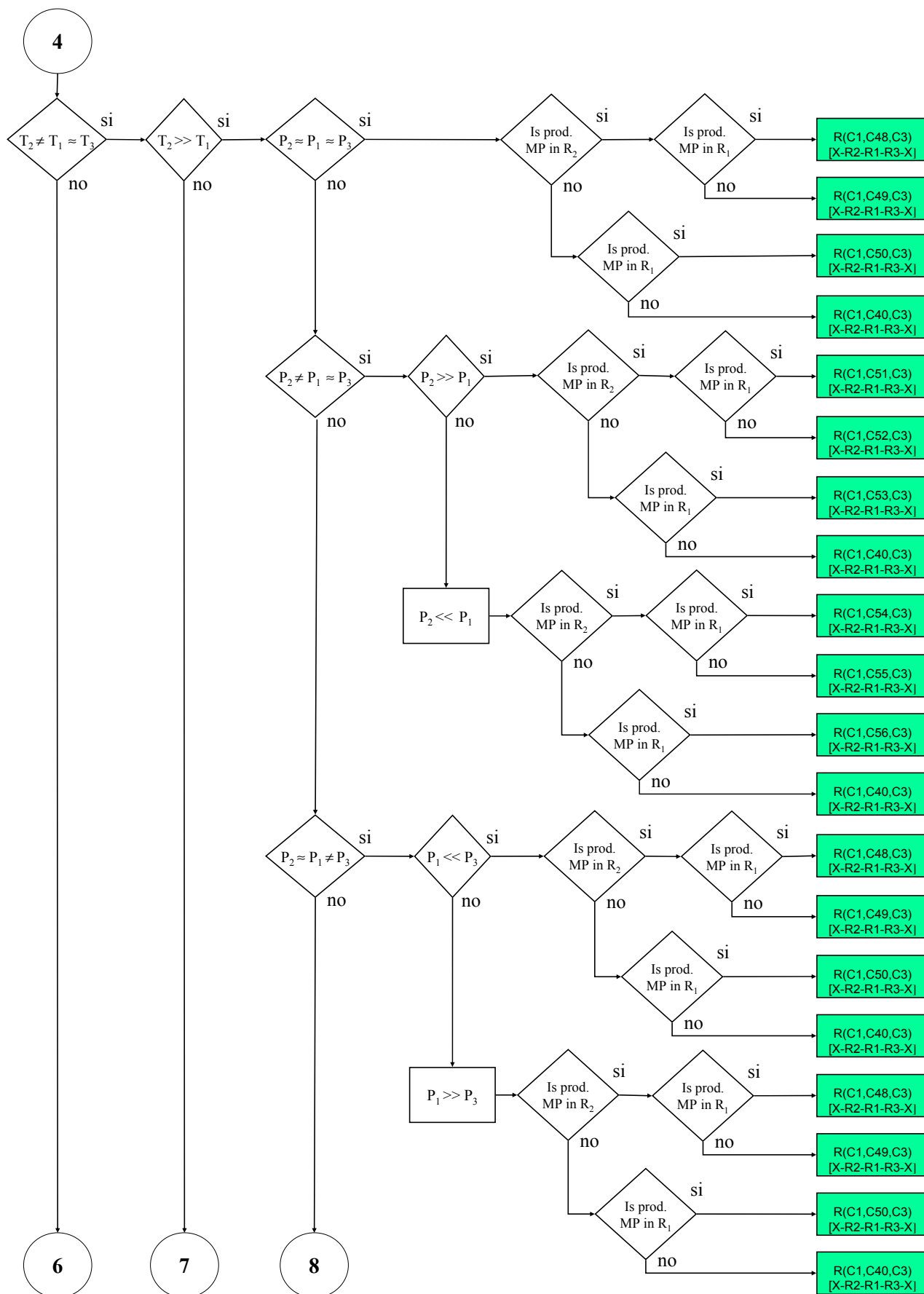




Figura A3.1. Para Reacción (continuación).

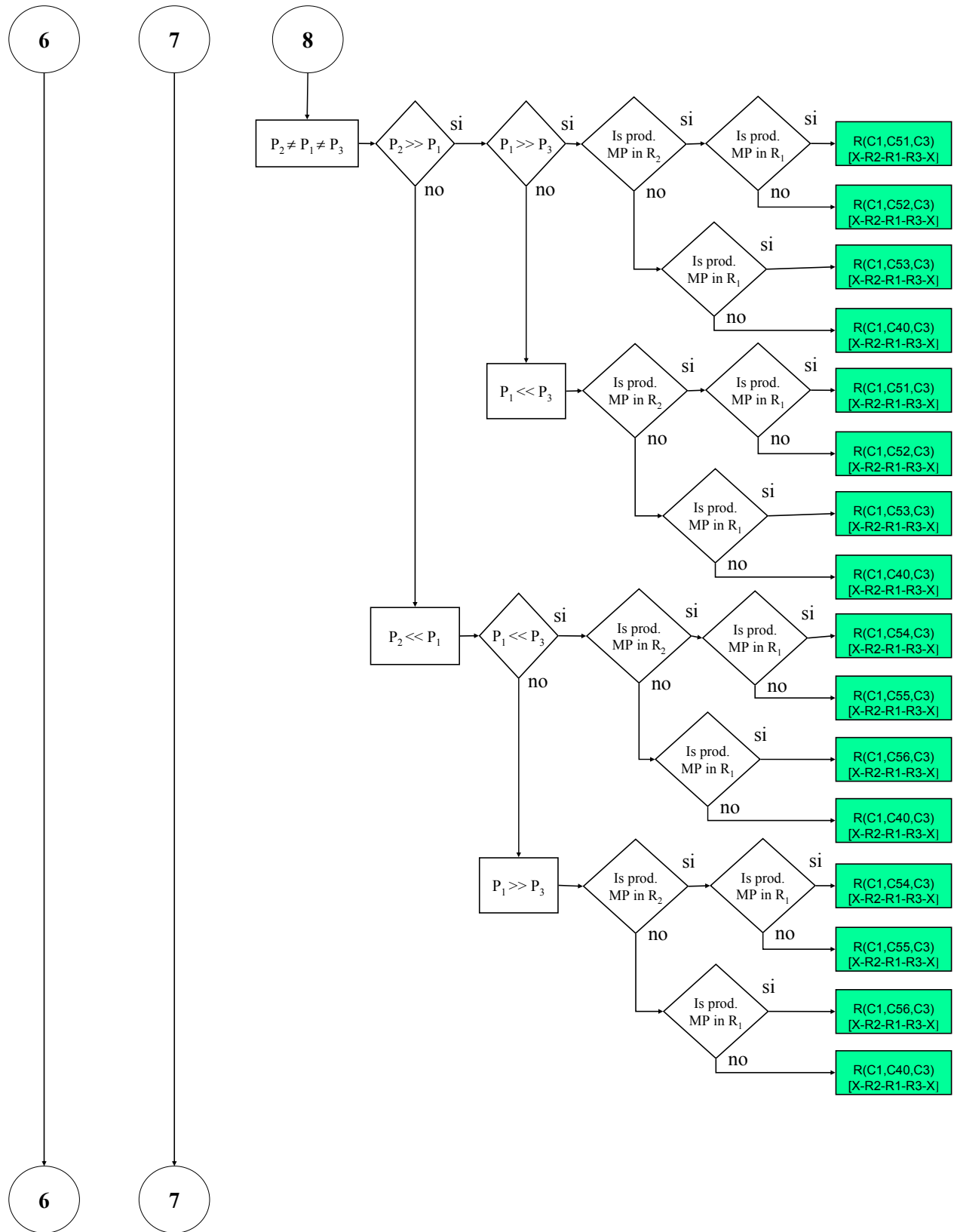


Figura A3.1. Para Reacción (continuación).

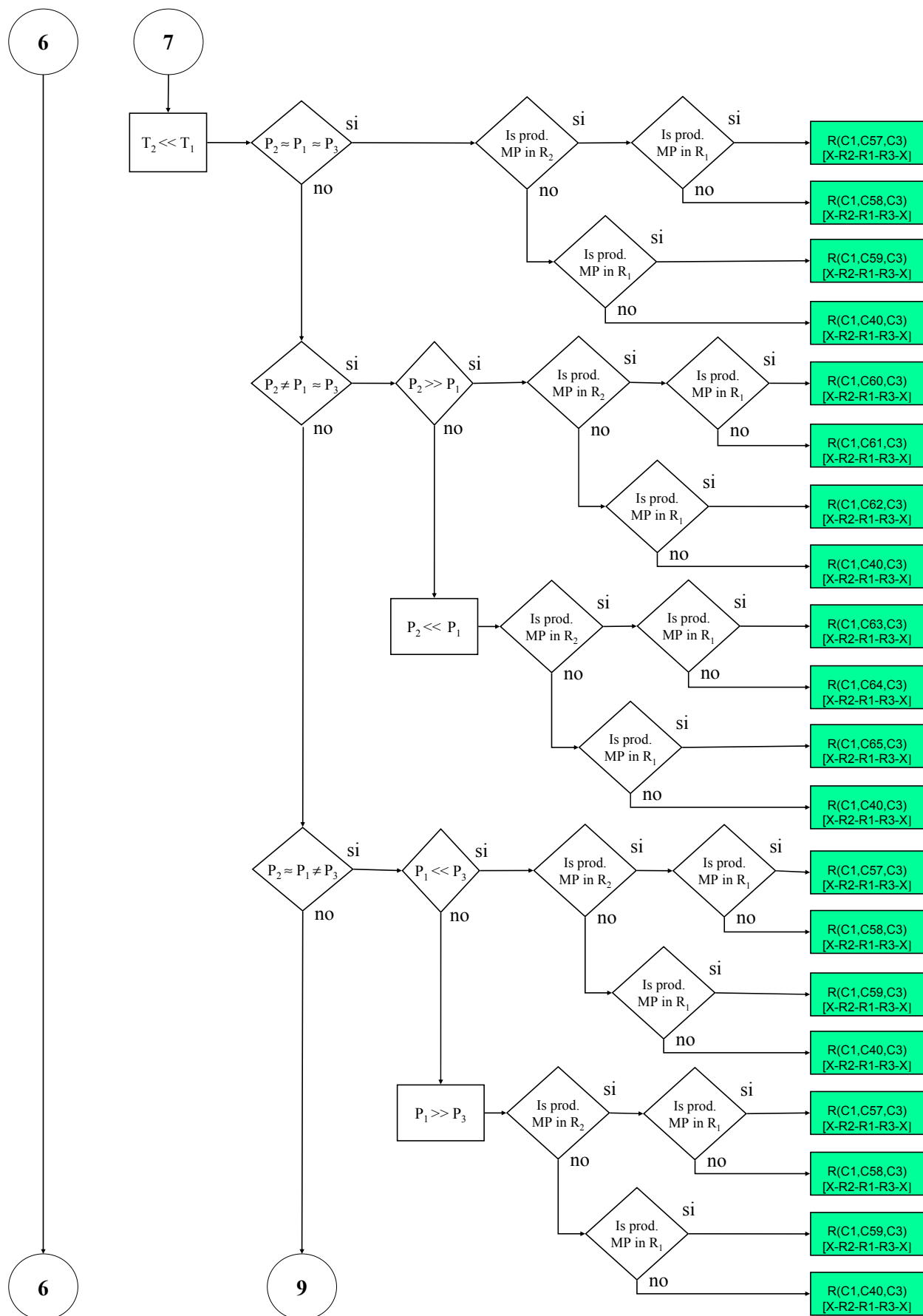


Figura A3.1. Para Reacción (continuación).

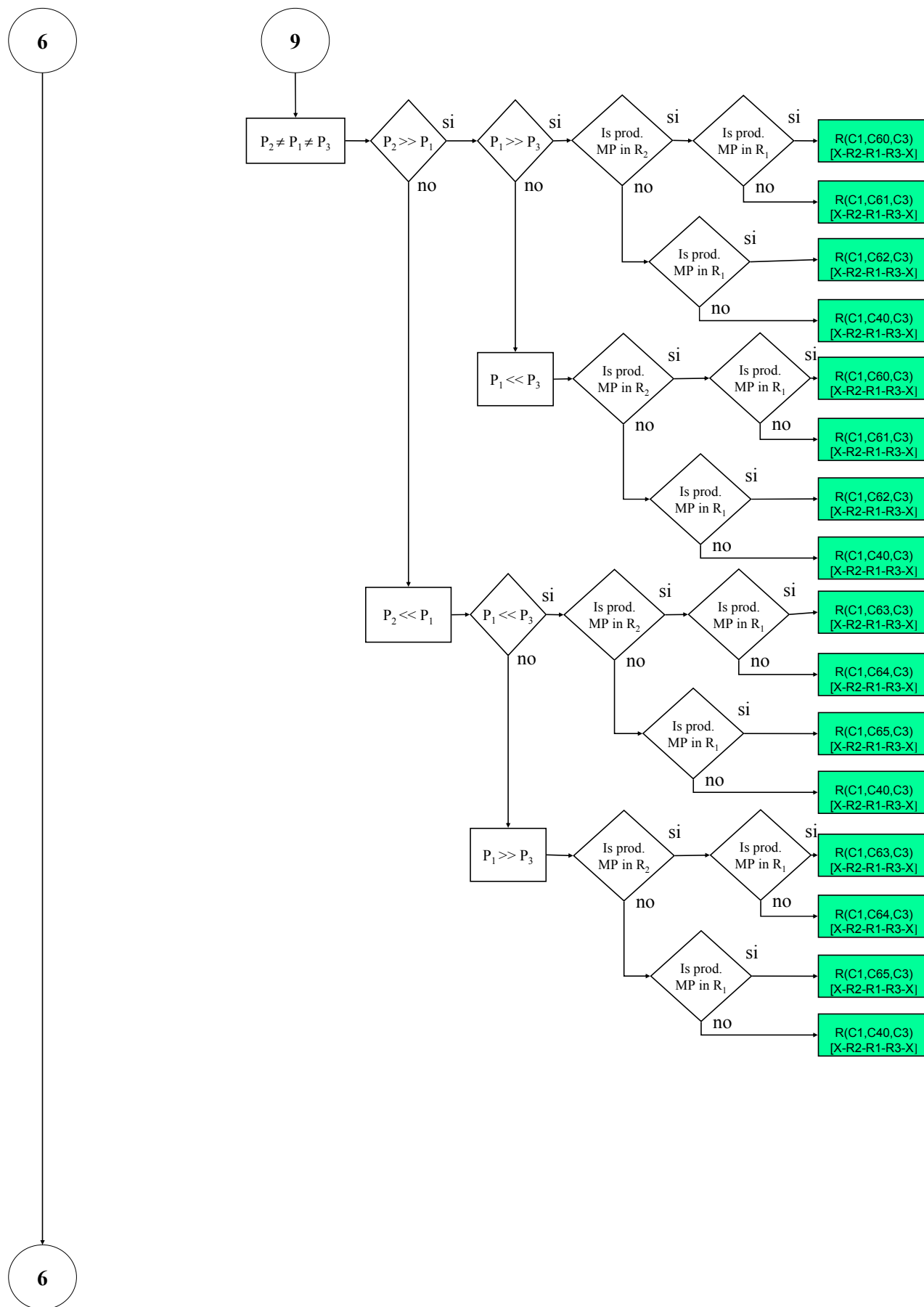




Figura A3.1. Para Reacción (continuación).

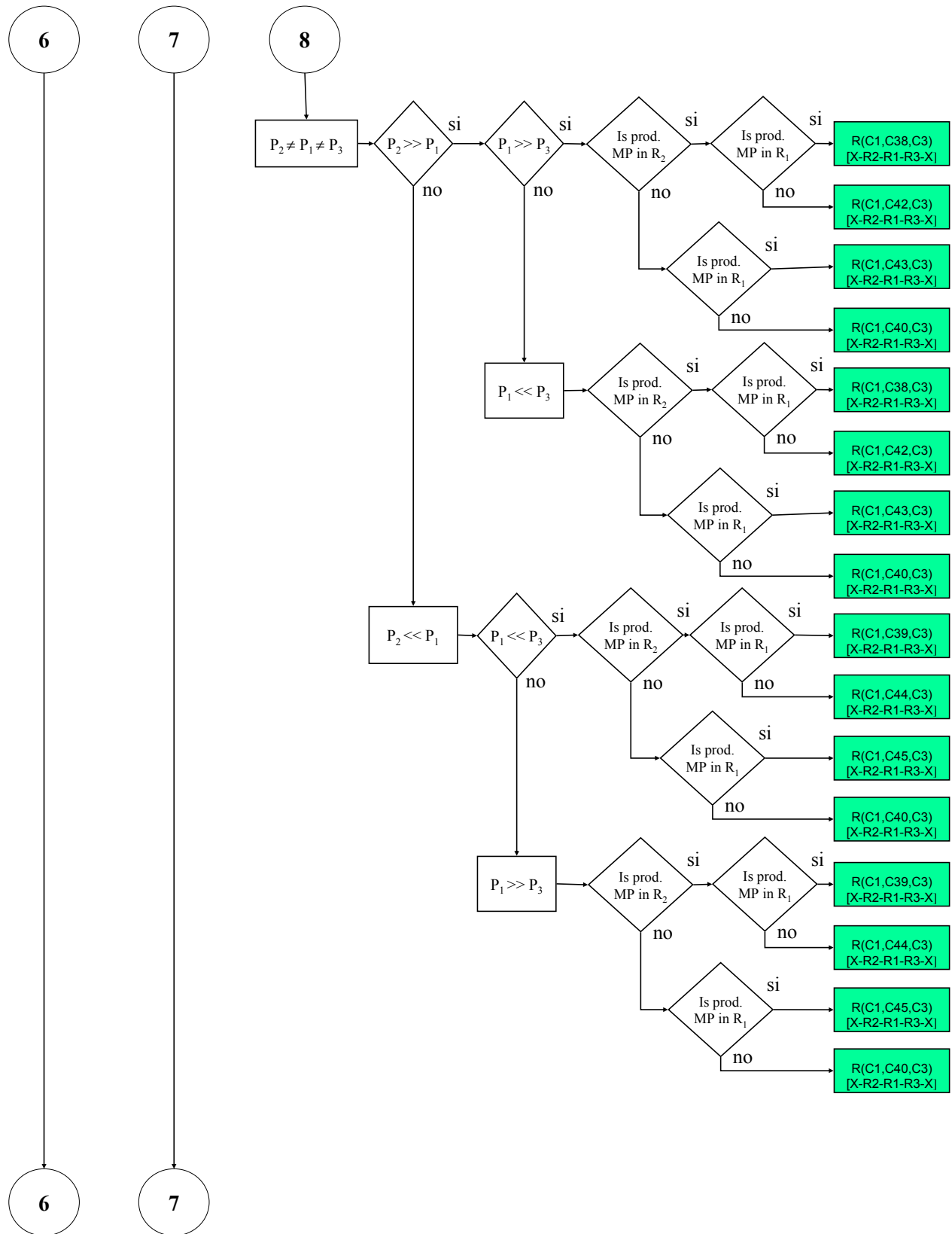




Figura A3.1. Para Reacción (continuación).

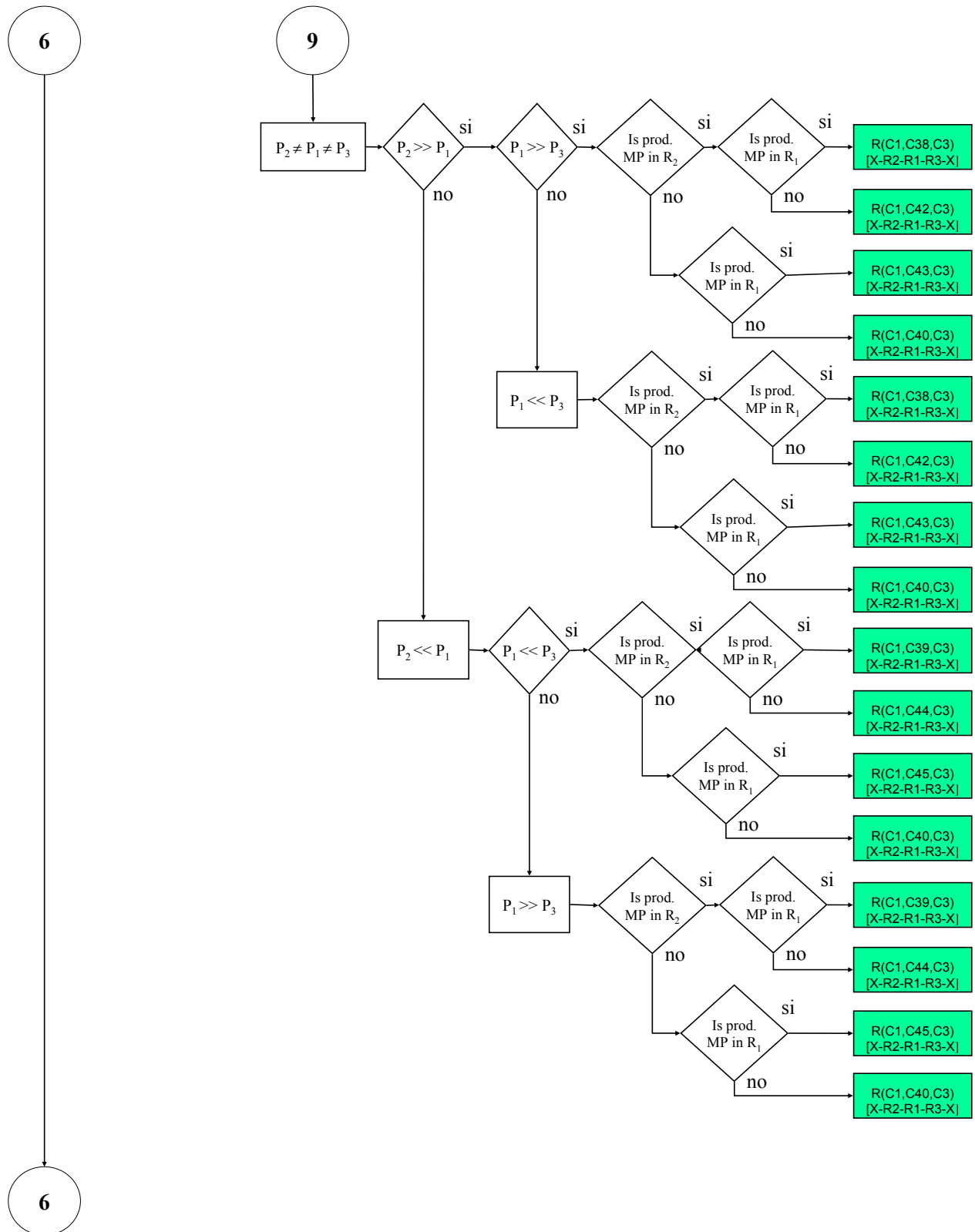


Figura A3.1. Para Reacción (continuación).

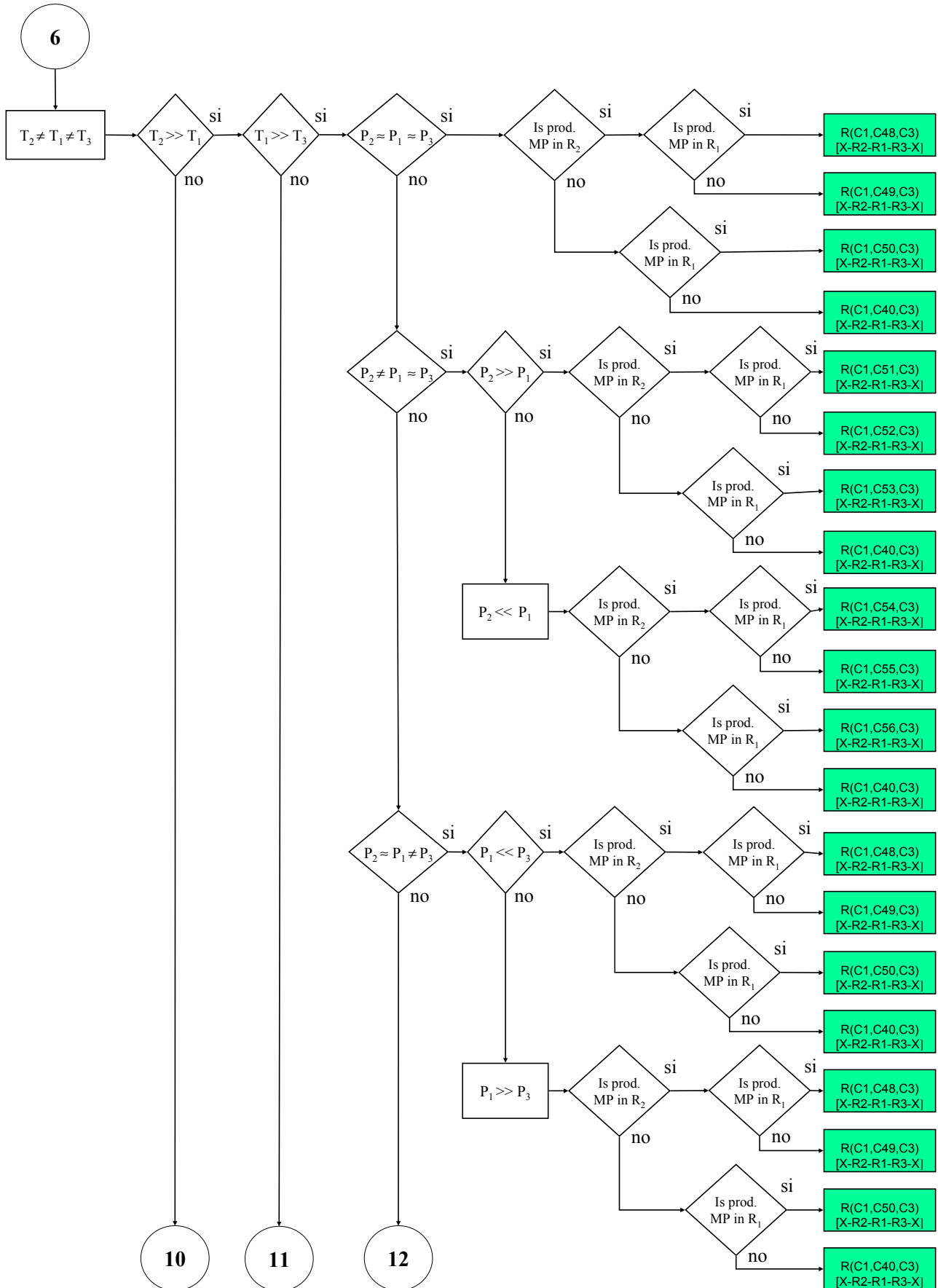




Figura A3.1. Para Reacción (continuación).

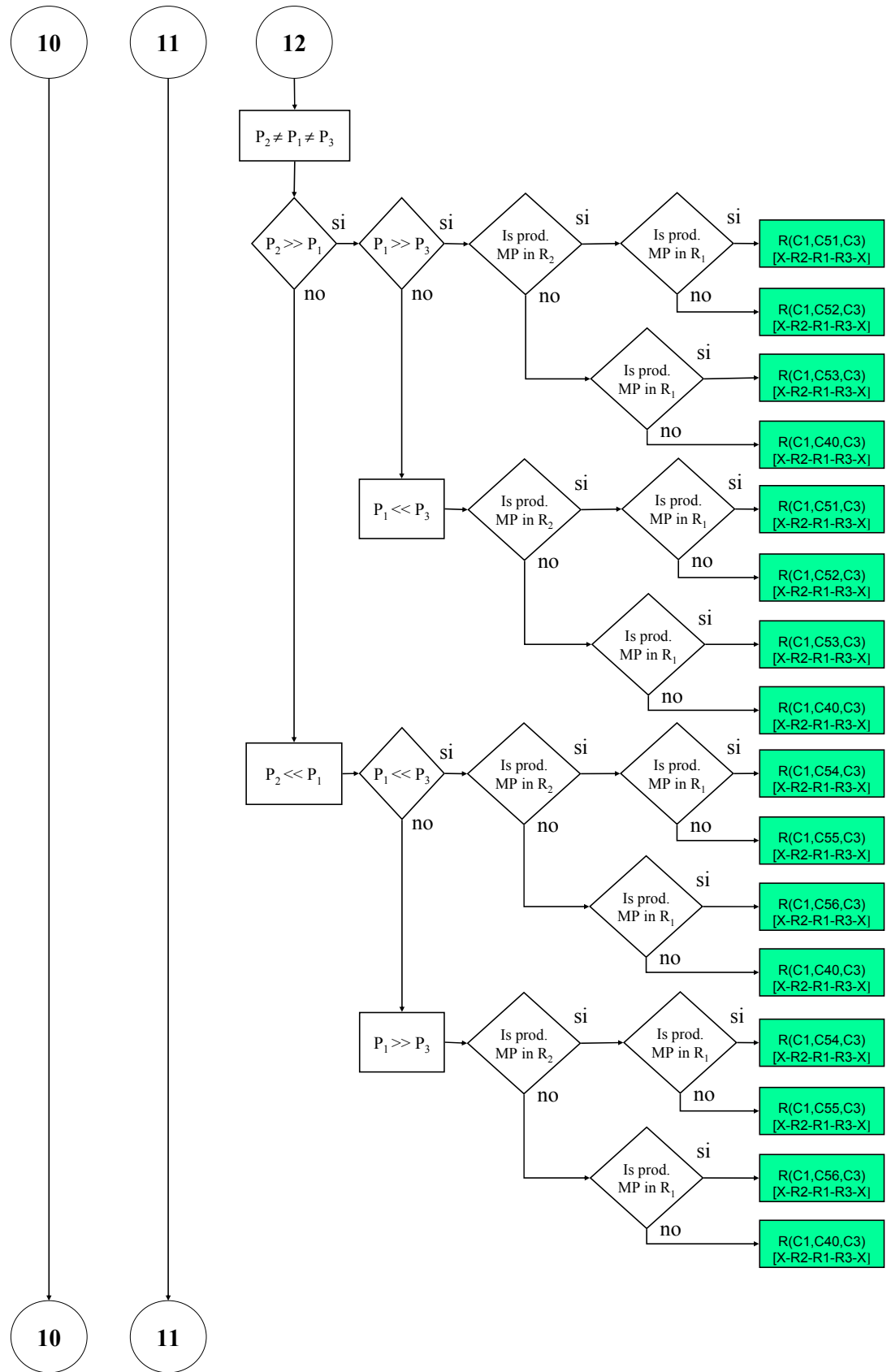


Figura A3.1. Para Reacción (continuación).

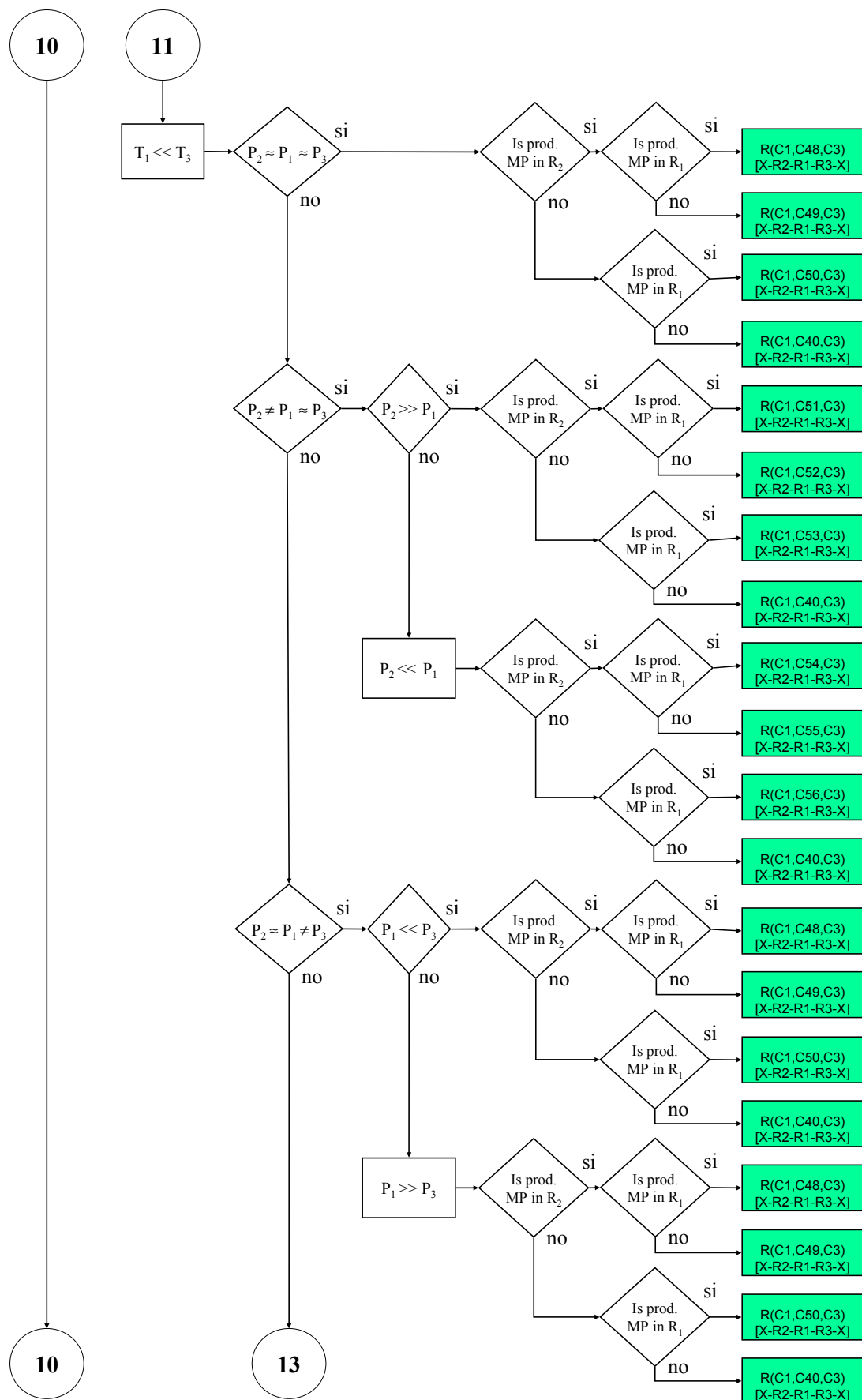


Figura A3.1. Para Reacción (continuación).

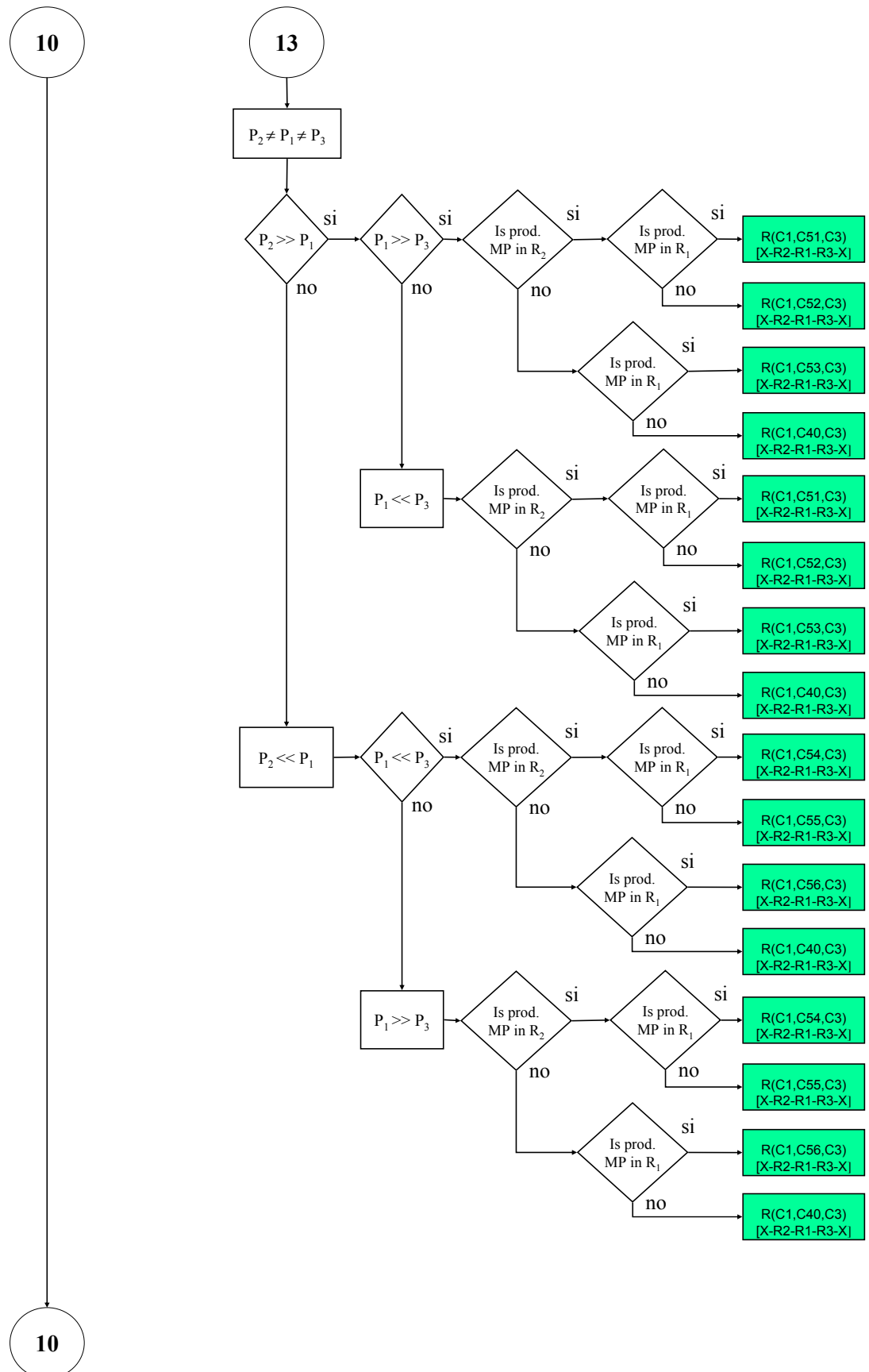


Figura A3.1. Para Reacción (continuación).

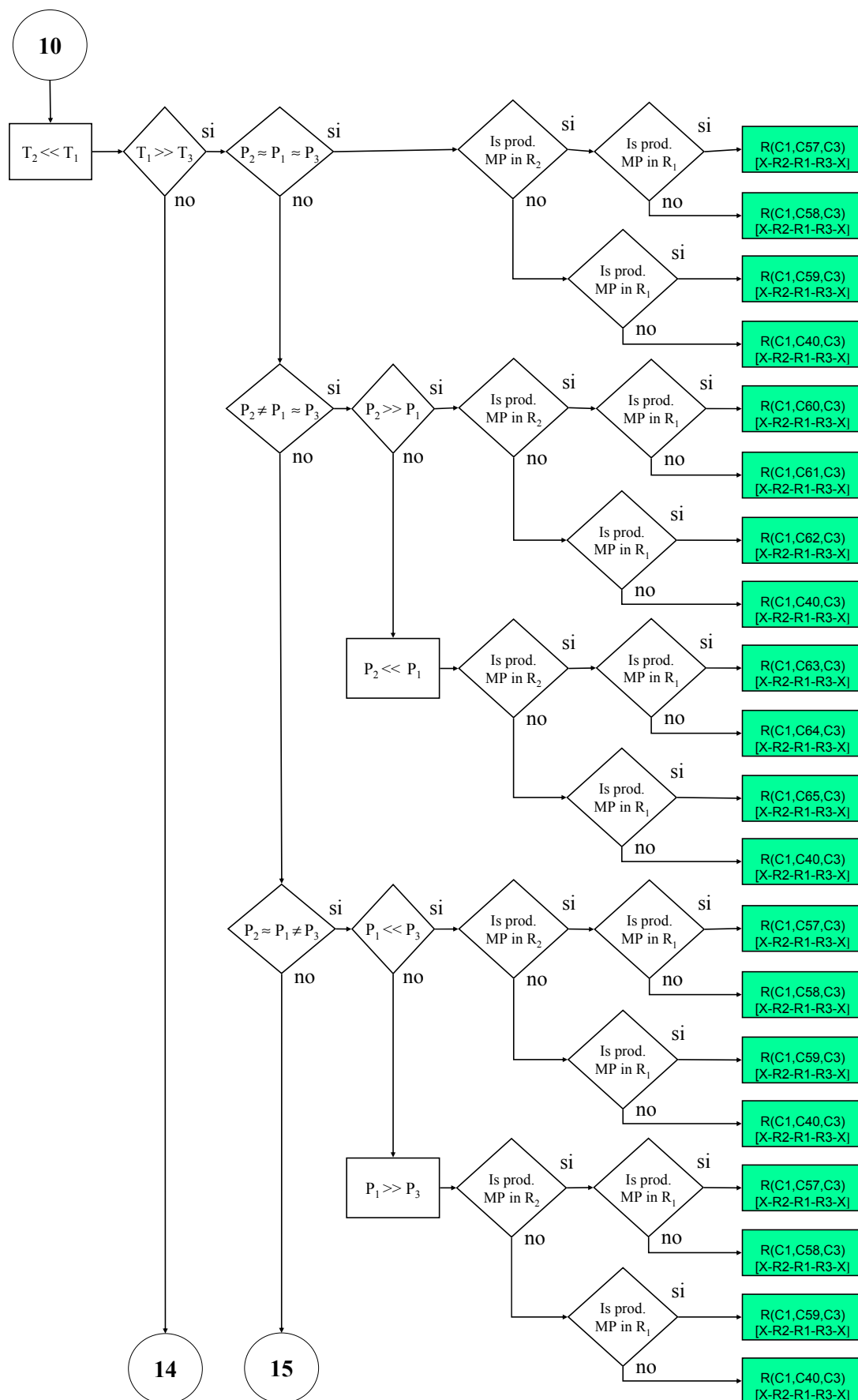


Figura A3.1. Para Reacción (continuación).

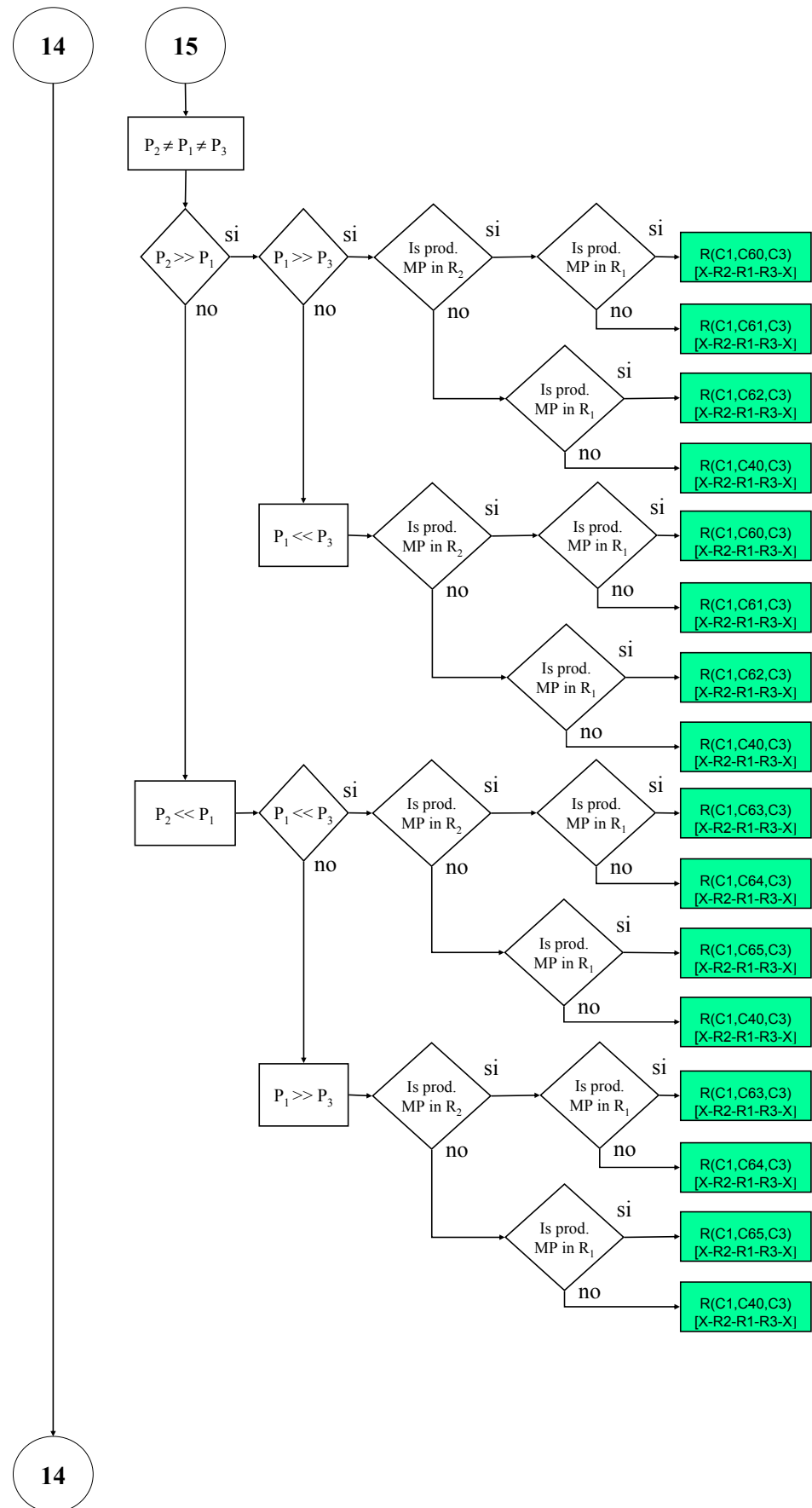


Figura A3.1. Para Reacción (continuación).

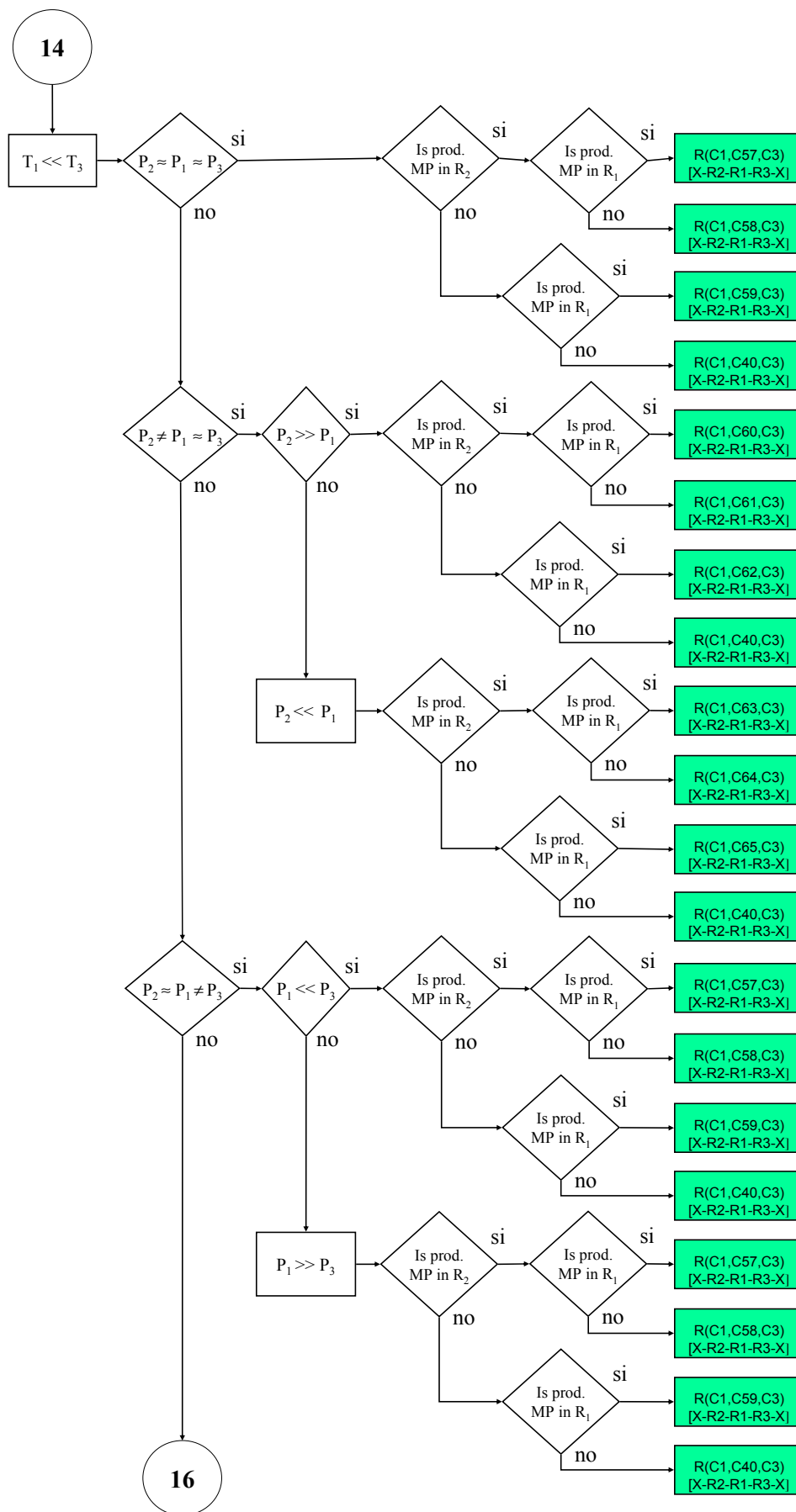


Figura A3.1. Para Reacción (continuación).

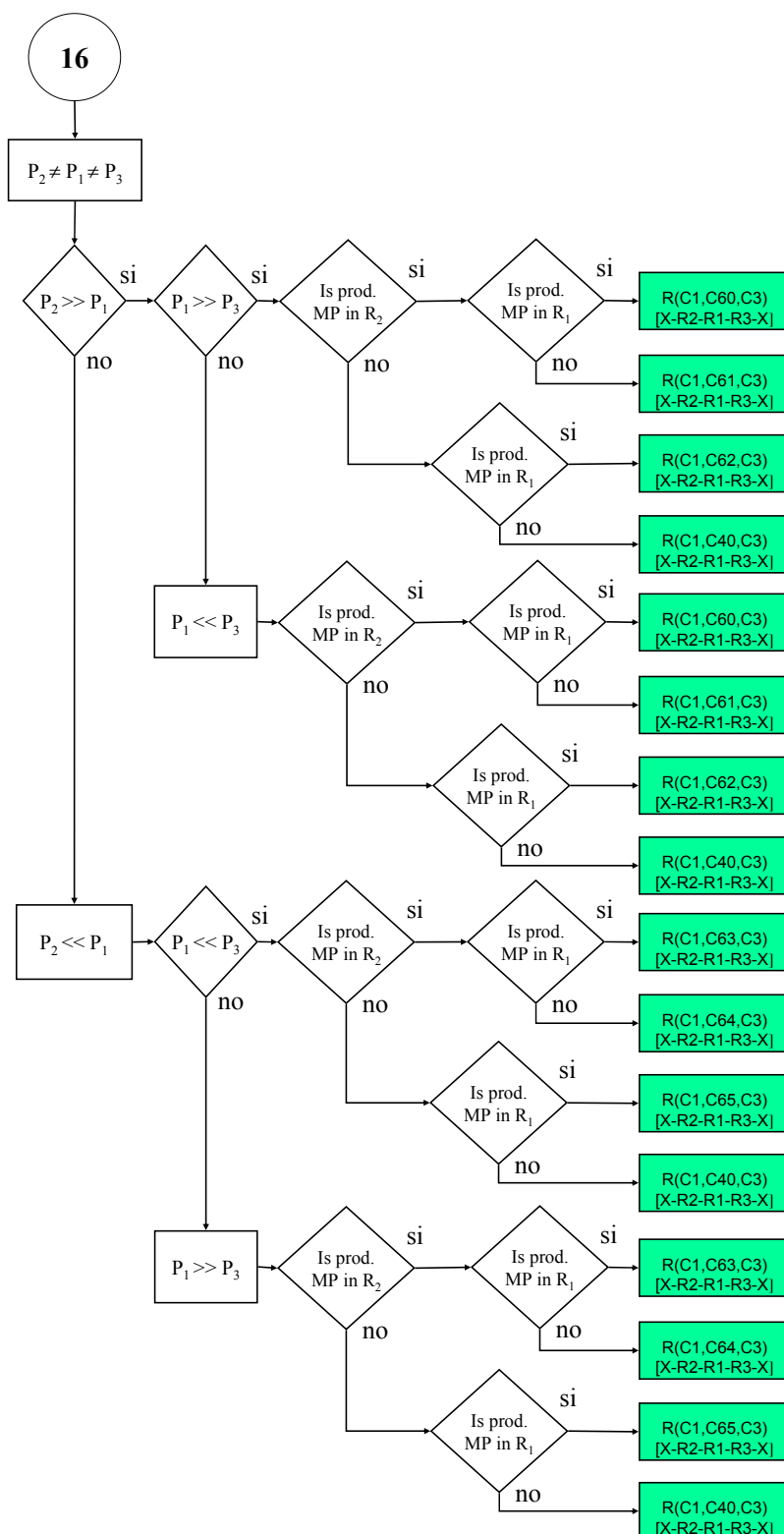


Figura A3.1. Para Separación y Temperatura (continuación).

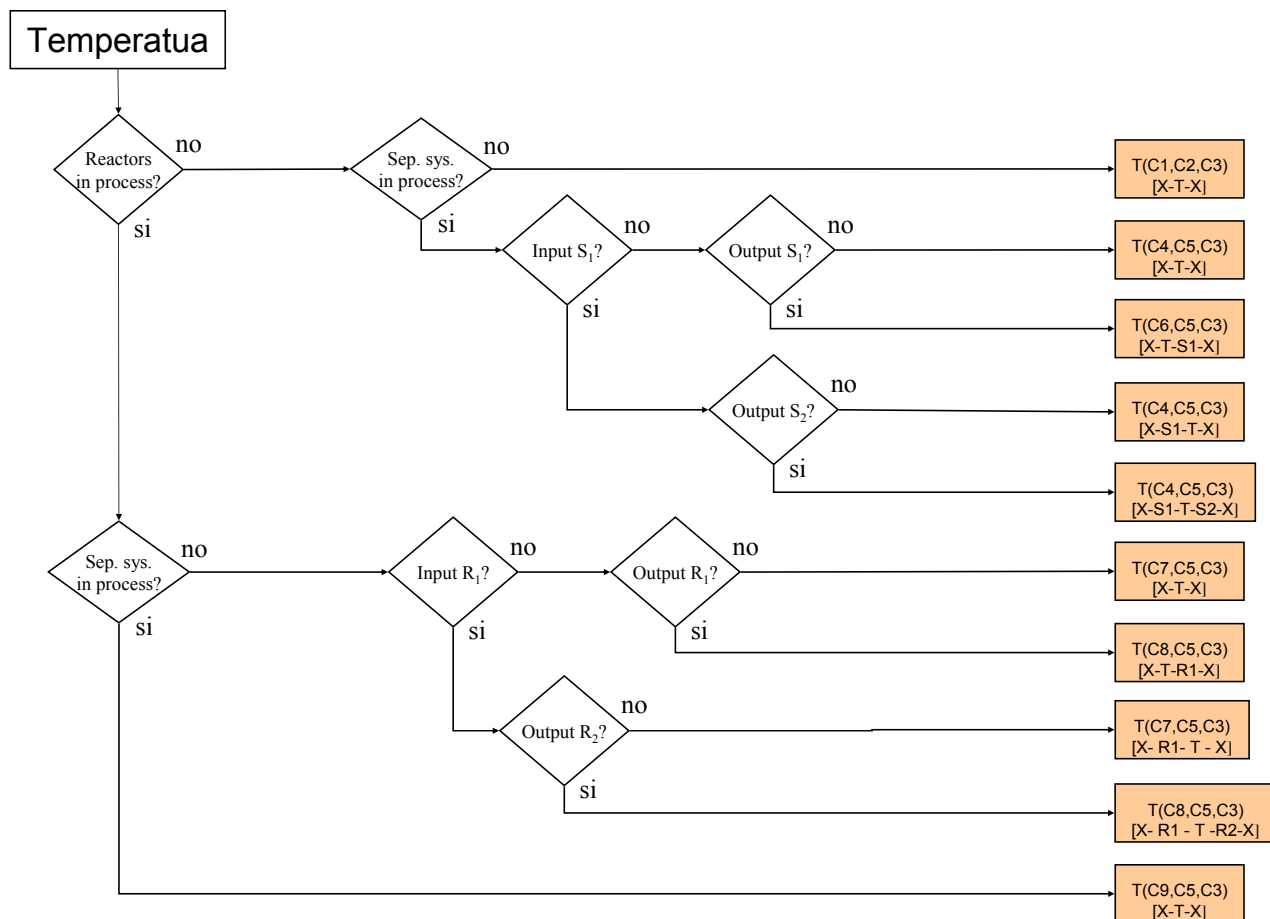
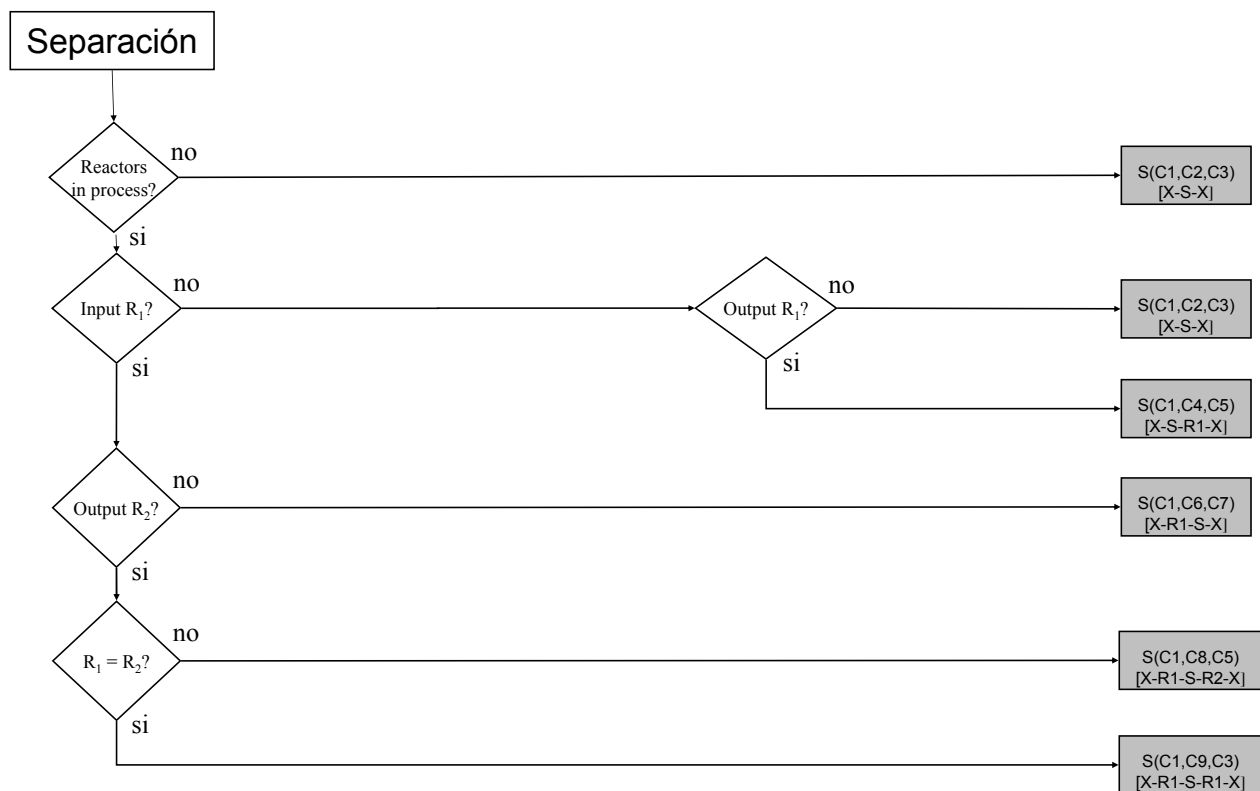
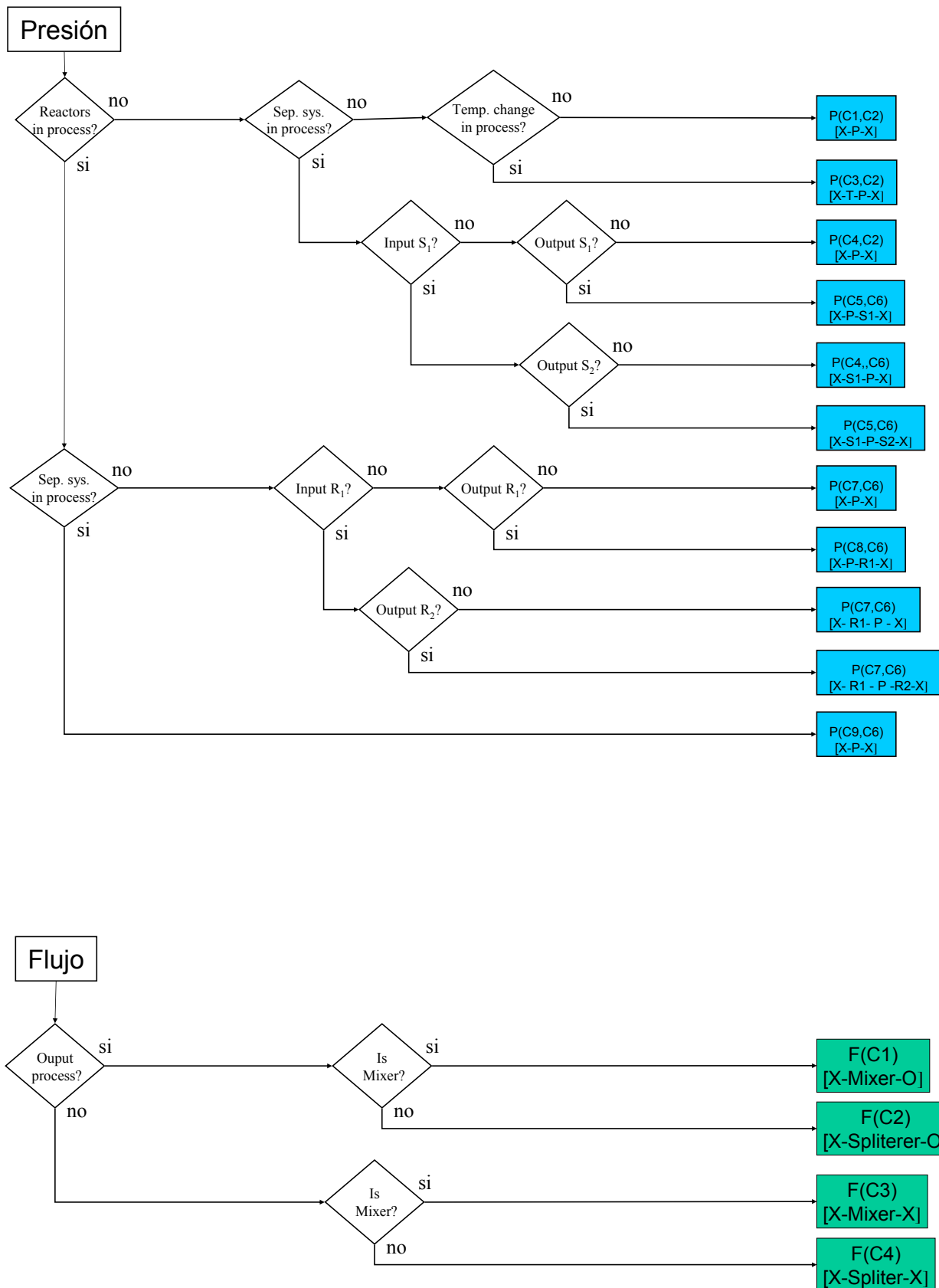




Figura A3.1. Para Presión y Flujo (continuación).



## A3.2. Nomenclatura para leer el árbol de decisiones.

### Letras

R	Reacción
S	Separación
T	Temperatura
P	Presión
F	Flujo
MP	Producto principal
X	Unit/Meta-unit con menor jerarquía que la Unit/Meta-unit en cuestion

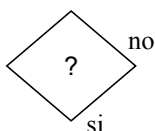
### Subíndices

1	Se refiere a la Unit/Meta-unit en cuestion y sus propiedades
2,3	Se refiere a la Unit/Meta-unit de entrada o salida y sus propiedades

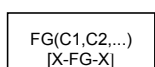
### Notas para Reacción.

≈	Los valores de las variables estan dentro de un +/- 10%
<< ó >>	Los valores de las variables estan fuera de un +/- 10%

### Símbolos



Interrogación sobre el modelo estructural o el valor de una variable de proceso



“Hoja” del árbol de decisiones. Esta compuesta de:

- FG - Funcion general de la *Unit/Meta-unit* en cuestion
- C1,C2,...,CN - Casos (*templates*) que aplican según se especifica en la semántica de los modelos teleológicos (ver sección A3.3)
- X-FG-X - Ejemplo del modelo estructural resultante.

### A3.3. Semántica de los modelos teleológicos para cada una de las 5 clases.

#### Reacción

Caso	Descripción
1	Transform reactants into main products and by-products.
2	Increase conversion [FAMILY_REACTANT] (reactant(s)) into [FAMILY_MAIN-PRODUCT] (main-product) in [CONVERSION_R1] %.
3	With temperature-outlet: [TEMPERATURE] ° C and pressure-outlet: [PRESSURE] kPa is achieved a conversion: [CONVERSION] % in [TYPE_PHASE] phase.
4	Transform [FAMILY_REACTANT] (reactant(s)) into [FAMILY_MAIN-PRODUCT] (main-product) and [FAMILY_BY-PRODUCT] (by-product).
5	Produce the main product (main-product) with a secondary reaction with the same condition that the previous reactor.
6	Take place a second reaction at lower temperature than the previous reaction. The DeltaT between the reactors is [T2-T1] °C.
7	Take place a second reaction at higher temperature than the previous reaction. The DeltaT between the reactors is [T1-T2] °C.
8	Quenching the reaction to prevent damage the main product and/or catalyst.
9	Produce the intermediate (NAME-by-product-intermediate) necessary in the next reactor.
10	Increase conversion [FAMILY_REACTANT] (reactant(s)) into [FAMILY_MAIN-PRODUCT] (main-product) in [CONVERSION_R1] % by increment of temperature.
11	Take place a second reaction with the same temperature and pressure than the previous reactor.
12	Increase conversion [FAMILY_REACTANT] (reactant(s)) into [FAMILY_MAIN-PRODUCT] (main-product) with lower pressure than the previous reactor.
13	Take place a second reaction with the same temperature but at lower pressure than the previous reactor.
14	Increase conversion [FAMILY_REACTANT] (reactant(s)) into [FAMILY_MAIN-PRODUCT] (main-product) with the same temperature but higher pressure than the previous reactor.
15	Take place a second reaction with the same temperature but higher pressure than the previous reactor.

### A3.3. Semántica de los modelos teleológicos para cada una de las 5 clases.

#### Reacción

Caso	Descripción
16	Produce the main product (main-product) with a secondary reaction with the same temperature but lower pressure than the previous reactor.
17	Produce the main product (main-product) with a secondary reaction with the same temperature but higher pressure than the previous reactor.
18	Produce the main product (main-product) with a secondary reaction with the same pressure but lower temperature than the previous reactor.
19	Increase conversion [FAMILY_REACTANT] (reactant(s)) into [FAMILY_MAIN-PRODUCT] (main-product) with the same pressure but lower temperature than the previous reactor.
20	Increase conversion [FAMILY_REACTANT] (reactant(s)) into [FAMILY_MAIN-PRODUCT] (main-product) with lower temperature and pressure than the previous reactor.
21	Take place a second reaction with lower temperature and pressure than the previous reactor.
22	Produce the main product (main-product) with a secondary reaction with lower temperature and pressure than the previous reactor.
23	Produce the intermediate (NAME-by-product-intermediate) necessary in the next reactor with lower temperature and pressure than the previous reactor.
24	Increase conversion [FAMILY_REACTANT] (reactant(s)) into [FAMILY_MAIN-PRODUCT] (main-product) with lower temperature and higher pressure than the previous reactor.
25	Take place a second reaction at lower temperature and higher pressure than the previous reactor.
26	Produce the main product (main-product) with a secondary reaction with lower temperature but higher pressure than the previous reactor.
27	Produce the main product (main-product) with a secondary reaction with the same pressure but higher temperature than the previous reactor.
28	Increase conversion [FAMILY_REACTANT] (reactant(s)) into [FAMILY_MAIN-PRODUCT] (main-product) with the same pressure but higher temperature than the previous reactor.

### A3.3. Semántica de los modelos teleológicos para cada una de las 5 clases.

#### Reacción

Caso	Descripción
29	Take place a second reaction with the same pressure but higher temperature than the previous reactor and heating the reaction to prevent damage the main product and/or catalyst.
30	Increase conversion [FAMILY_REACTANT] (reactant(s)) into [FAMILY_MAIN-PRODUCT] (main-product) with higher temperature and lower pressure than the previous reactor.
31	Take place a second reaction with higher temperature and lower pressure than the previous reactor and heating the reaction to prevent damage the main product and/or catalyst.
32	Produce the main product (main-product) with a secondary reaction at higher temperature and lower pressure than the previous reactor.
33	Produce the intermediate (NAME-by-product-intermediate) necessary in the next reactor with higher temperature and lower pressure than the previous reactor.
34	Increase conversion [FAMILY_REACTANT] (reactant(s)) into [FAMILY_MAIN-PRODUCT] (main-product) with higher temperature and pressure than the previous reactor.
35	Take place a second reaction with higher temperature and pressure than the previous reactor.
36	Produce main product (main-product) with a secondary reaction with higher temperature and pressure than the previous reactor.
37	Increase production of main product (main-product) in this second reactor in series with the same temperature and pressure than the previous reactor.
38	Increase production of main product (main-product) in this second reactor in series with the same temperature but lower pressure than the previous reactor.
39	Increase production of main product (main-product) in this second reactor in series with the same temperature but higher pressure than the previous reactor.
40	Produce the intermediate (NAME-by-product-intermediate) necessary in the next reactor in series.

### A3.3. Semántica de los modelos teleológicos para cada una de las 5 clases.

#### Reacción

Caso	Descripción
41	Produce main product (main-product) with a secondary reaction with the same temperature and pressure than the previous reactor in series.
42	Take place a second reaction with the same temperature but lower pressure than the previous reactor in series.
43	Produce the main product (main-product) with a secondary reaction with the same temperature but lower pressure than the previous reactor in series.
44	Take place a second reaction with the same temperature but higher pressure than the previous reactor in series.
45	Produce the main product (main-product) with a secondary reaction with the same temperature but higher pressure than the previous reactor in series.
46	Produce main product (main-product) with a secondary reaction with the same temperature and pressure than the previous reactor in series.
47	Take place a second reaction with the same temperature and pressure than the previous reactor in series.
48	Increase production of main product (main-product) in this second reactor in series with the same pressure but lower temperature than the previous reactor.
49	Take place a second reaction with the same pressure but lower temperature than the previous reactor in series.
50	Produce main product (main-product) with a secondary reaction with the same pressure but lower temperature than the previous reactor in series.
51	Increase production of main product (main-product) in this second reactor in series with lower temperature and pressure than the previous reactor.
52	Take place a second reaction with lower temperature and pressure than the previous reactor in series.
53	Produce the main product (main-product) with a secondary reaction with lower temperature and pressure than the previous reactor in series.
54	Increase production of main product (main-product) in this second reactor in series with lower temperature but higher pressure than the previous reactor.

### **A3.3. Semántica de los modelos teleológicos para cada una de las 5 clases.**

#### **Reacción**

Caso	Descripción
55	Take place a second reaction with lower temperature but higher pressure than the previous reactor in series.
56	Produce the main product (main-product) with a secondary reaction with lower temperature but higher pressure than the previous reactor in series.
57	Increase production of main product (main-product) in this second reactor in series with the same pressure but higher temperature than the previous reactor.
58	Take place a second reaction with the same pressure but higher temperature than the previous reactor in series.
59	Produce main product (main-product) with a secondary reaction with the same pressure but higher temperature than the previous reactor in series.
60	Increase production of main product (main-product) in this second reactor in series with higher temperature but lower pressure than the previous reactor.
61	Take place a second reaction with higher temperature but lower pressure than the previous reactor in series.
62	Produce the main product (main-product) with a secondary reaction with higher temperature but lower pressure than the previous reactor in series.
63	Increase production of main product (main-product) in this second reactor in series with higher temperature and pressure than the previous reactor.
64	Take place a second reaction with higher temperature and pressure than the previous reactor in series.
65	Produce the main product (main-product) with a secondary reaction with higher temperature and pressure than the previous reactor in series.

### A3.3. Semántica de los modelos teleológicos para cada una de las 5 clases.

#### Separación

Caso	Descripción
1	Separates and increases the concentration of chemical substances by means physico-chemical processes.
2	Separates the [SUBSTANCE-ROLE] ([substance.name]) by [TYPE-SEPARATION] from all chemical substances: [substance.name-substances].
3	Increases the concentration of [SUBSTANCE-ROLE] ([substance.name]) until [substance.mass_fraction] %mass.
4	Purifies by [TYPE-SEPARATION] the reactor feed.
5	Increases the concentration of reactants ([reactant.name]) until [reactants.mass_fraction] %mass.
6	Separates and purifies the main product ([main-product.name]) of by-products ([by-products.names]). by [TYPE-SEPARATION].
7	Separates and purifies the main product with a concentration of [main-product.mass_fraction] %mass.
8	Separates the products of reactants (by [TYPE-SEPARATION]) coming from reactor [reactor.input.name] as preparation before feed the reactor [reactor.output.name].



### A3.3. Semántica de los modelos teleológicos para cada una de las 5 clases.

#### Temperatura

Caso	Tipo de equipo	Descripción
1	Heater/Cooler/HE	Change the temperature of material stream(s) as part of an energy integration system.
2	Heater	Increase the temperature of [ROLE_INLET_STREAM] stream ([NAME-INLET-STREAM]).
	Cooler	Decrease the temperature of [ROLE_INLET_STREAM] stream ([NAME-INLET-STREAM]).
	HE	Interchange energy between <i>hot-stream</i> [NAME-HOT-STREAM: ROLE_INLET_STREAM] and <i>cold-stream</i> [NAME-COLD-STREAM: ROLE_INLET_STREAM] to save energy.
3	Heater	Increase the temperature (in [DELTA-TEMPERATURE] °C) of [ROLE_INLET_STREAM] +[EFFECT-PHASE].
	Cooler	Decrease the temperature (in [DELTA-TEMPERATURE] °C) of [ROLE_INLET_STREAM] +[EFFECT-PHASE].
	HE	Decrease the temperature of <i>hot-stream</i> (in [DELTA-TEMPERATURE] °C) +[EFFECT-PHASE]. In another hand, increase the temperature of <i>cold-stream</i> (in [DELTA-TEMPERATURE] °C) +[EFFECT-PHASE].
4	Heater/Cooler/HE	Change the temperature of material stream(s) as part of separation system.
5	Heater	Increase the temperature of [ROLE_INLET_STREAM] stream ([NAME-INLET-STREAM]) to provide the conditions required +[WHO-X-CONNECTED-TO-OUTPUT] ([NAME-EQUIPMENT-CONNECTED-TO-OUTPUT])

### A3.3. Semántica de los modelos teleológicos para cada una de las 5 clases.

#### Temperatura

Caso	Tipo de equipo	Descripción
5	Cooler  HE	Decrease the temperature of [ROLE_INLET_STREAM] stream ([NAME-INLET-STREAM]) to provide the conditions required +[WHO-X-CONNECTED-TO-OUTPUT] (+[NAME-EQUIPMENT-CONNECTED-TO-OUTPUT]).  Increase the temperature of <i>cold-stream</i> [NAME-COLD-STREAM: ROLE_INLET_STREAM] to provide the conditions required [WHO-X-CONNECTED-TO-OUTPUT_COLD-STREAM] (+[NAME-EQUIPMENT-CONNECTED-TO-OUTPUT])
6	Heater/Cooler/HE	Change the temperature of material stream(s) as part of separator feed preparation system.
7	Heater/Cooler/HE	Change the temperature of material stream(s) as part of a reaction process without separation system.
8	Heater/Cooler/HE	Change the temperature of material stream(s) as part of reactor feed preparation system.
9	Heater/Cooler/HE	Change the temperature of material stream(s).

### A3.3. Semántica de los modelos teleológicos para cada una de las 5 clases.

#### Presión

Caso	Tipo de equipo	Descripción
1	All	Change the pressure of material streams as part of a materials transport system.
2	Compressor/Pump	Increase the pressure in [DELTA-PRESSURE] kPa and transport the [TYPE-ROLE_INLET-STREAM] in [TYPE-PHASE] phase to [NAME-EQUIPMENT-OUTPUT].
	Expander/Valve	Decrease the pressure of [TYPE-ROLE_INLET-STREAM] stream coming from [NAME-EQUIPMENT-INTPUT].
3	All	Change the pressure of material stream(s) as part of an energy integration system.
4	All	Change the pressure of material stream(s) as part of separation system.
5	All	Change the pressure of material stream(s) as part of separator feed preparation system.
6	Compressor/Pump	Increase the pressure in [DELTA-PRESSURE] kPa of [TYPE-ROLE_INLET_STREAM] stream name/phase: [NAME-INLET-STREAM]/[TYPE-PHASE]) to provide the conditions required +[WHO-X-CONNECTED-TO-OUTPUT] (+[NAME-EQUIPMENT-CONNECTED-TO-OUTPUT])
	Expander/Valve	Decrease the pressure in [DELTA-PRESSURE] kPa of [TYPE-ROLE_INLET_STREAM] stream (name/phase:[NAME-INLET-STREAM]/[TYPE-PHASE]) to provide the conditions required +[WHO-X-CONNECTED-TO-OUTPUT] (+[NAME-EQUIPMENT-CONNECTED-TO-OUTPUT]).
7	All	Change the pressure of material stream(s) as part of a reaction process without separation systems.
8	All	Change the pressure of material stream(s) as part of reactor feed preparation system.
9	All	Change the pressure of material stream(s)

### A3.3. Semántica de los modelos teleológicos para cada una de las 5 clases.

#### Flujo

Caso	Tipo de equipo	Descripción
1 Mixer	1.1	Combines two or more inlet streams to produce a single outlet stream.
	1.2	Combines [NUMBER_INPUT_STREAM] whith the role(s): [LIST_ROLE_INPUT-STREAM] into a single outlet process stream.
	1.3	Combines [NUMBER_INPUT_STREAM] ( [LIST_NAME_INLET-STREAM] ) whith the mass flow: [MASS-FLOW-STREAM] (kg/h) into a single outlet process stream ([LIST_NAME_OUTLET-STREAM] )
2 Splitter	2.1	Divides inlet stream into multiple streams with the same conditions and composition as the inlet stream.
	2.2	Divides the inlet [LIST_ROLE_INPUT-STREAM] stream into [NUMBER_INPUT_STREAM] outlet streams before sending to outlet process.
	2.3	Divides mass flow ( [MASS-FLOW-STREAM] (kg/h) of inlet stream ( [LIST_NAME_INLET-STREAM]) into proportion: [LIST_QUOTIENT-MASS-FLOW] % of [LIST_NAME_OUTLET-STREAM] respectively before sending to outlet process.
3 Mixer	3.1	Combines two or more inlet streams to produce a single outlet strea.
	3.2	Combines [NUMBER_INPUT_STREAM] whith the role(s): [LIST_ROLE_INPUT-STREAM] into a single outlet stream as preparation to [NEXT_STEP] step.
	3.3	Combines [NUMBER_INPUT_STREAM] streams ([LIST_NAME_INLET-STREAM]) whith the mass flow: [MASS-FLOW-STREAM] (kg/h) into a single outlet process stream ([LIST_NAME_OUTLET-STREAM]) as preparation to [NEXT_STEP] step

### A3.3. Semántica de los modelos teleológicos para cada una de las 5 clases.

#### Flujo

Caso	Tipo de equipo	Descripción
4 Splitter	4.1	Divides inlet stream into multiple streams with the same conditions and composition as the inlet stream.
	4.2	Divides the inlet [LIST_ROLE_INPUT-STREAM] stream into [NUMBER_INPUT_STREAM] outlet streams as preparation to [NEXT_STEP] step.
	4.3	Divides mass flow ( [MASS-FLOW-STREAM] (kg/h) of inlet stream ( [LIST_NAME_INLET-STREAM] ) into proportion: [LIST_QUOTIENT-MASS-FLOW] % of [LIST_NAME_OUTLET-STREAM] respectively as preparation to [NEXT_STEP] step

## A3.4. Definición y explicación de cómo inferir o calcular las “palabras clave”.

### Reacción

Palabra clave	Descripción	Como inferirlo
[FAMILY_REACTANT]	Familia a la que pertenece el o los reactivos (REACTANT). Buscar en el archivo: Classification-Substance.xls hoja DB	Buscar el nombre de la sustancia en cuestión en la primer columna y asignarle el string de la segunda columna a keyword. Ejemplo: Si Reactant = Methane Entonces [FAMILY_REACTANT] = Alkane
[FAMILY_MAIN_PRODUCT]	Familia a la que pertenece una especie química. Buscar en el archivo: Classification-Substance.xls hoja DB	Lo mismo que [FAMILY_REACTANT] pero ahora para el “main-product” Ejemplo: Si MAIN_PRODUCT = Ammonia Entonces [FAMILY_MAIN_PRODUCT] = NitrogenCompound
[FAMILY_BY_PRODUCT]	Familia a la que pertenece una especie química. Buscar en el archivo: Classification-Substance.xls hoja DB	Lo mismo que [FAMILY_REACTANT] pero ahora para el “BY-PRODUCT” Ejemplo: Si BY_PRODUCT = Aniline Entonces [FAMILY_BY_PRODUCT] = Amine
[LIST_MAIN_PRODUCTS]	Es el nombre o los nombres de las especies químicas identificadas por el usuario como “MAIN_PRODUCTS”	Ver la lista de “definiciones” de roles por parte del usuario. El usuario identifica de las especies químicas presentes en el proceso el o los “Main-Product”
[LIST_REACTANTS]	Es el nombre o los nombres de las especies químicas identificadas por el usuario como “REACTANTS”	Ver la lista de “definiciones” de roles por parte del usuario. El usuario identifica de las especies químicas presentes en el proceso el o los “Reactants”
[CONVERSION]	Es el cociente entre la masa del reactivo que se consume en un reactor y la cantidad que se alimenta multiplicado por 100	Ver ec. A3.4.1.
[TEMPERATURE_OUTLET]	Es la temperatura de la corriente de salida del reactor	Ver el “stream” conectado a la salida del reactor y asignarle el valor de la TEMPERATURA del stream
[PRESSURE_OUTLET]	Es la presión de la corriente de salida del reactor	Ver el “stream” conectado a la salida del reactor y asignarle el valor de la PRESION del stream
[TYPE_PHASE]	Es el estado físico de la materia: sólido, líquido o gaseoso	Con ayuda del “FRACTION-VAPOUR” determinar la fase: Si FV = 0 Entonces “Liquid” Si FV entre 0 y 1 Entonces “Vapour” Si FV = 1 Entonces “Gaseous”

## A3.4. Definición y explicación de cómo inferir o calcular las “palabras clave”.

### Reacción

Palabra clave	Descripción	Como inferirlo
[DELTA_T2_-_DELTA_T1]	Es la diferencia de temperatura entre el reactor 1 y 2	Asignar el valor de la diferencia de la temperatura de los stream de salida del reactor 2 menos la temperatura del stream de salida del reactor 1 $[DELTA...] = T_{\text{reactor 2}} - T_{\text{reactor 1}}$
[DELTA_T1_-_DELTA_T2]	Lo mismo que el caso anterior pero invirtiendo el orden de las temperaturas	Asignar el valor de la diferencia de la temperatura de los stream de salida del reactor 2 menos la temperatura del stream de salida del reactor 1 $[DELTA...] = T_{\text{reactor 1}} - T_{\text{reactor 2}}$
[NAME_BY_PRODUCT_INTERMEDIATE]	Es la sustancia que el usuario a identificado como “Product Intermediate”	Asignar el nombre de la sustancia que el usuario a identificado como producto intermedio (Product Intermediate)

Cálculo de la conversión de un reactivo  $i$  en un reactor:

$$\text{Conversión } i = \left( 1 - \frac{[\text{mass\_fraction}]_i * \text{mass\_flow}]_{\text{output}}}{[\text{mass\_fraction}]_i * \text{mass\_flow}]_{\text{input}}} \right) * 100 \quad \text{Ec. (A3.4.1)}$$

## A3.4. Definición y explicación de cómo inferir o calcular las “palabras clave”.

### Separación

Palabra clave	Descripción	Como inferirlo
[SUSTANCE_ROLE]	Es el “rol” del stream que se le asigna en función de la concentración de la sustancia con mayor concentración.	Determinar la sustancia con mayor “mass-fraction” en el stream y asignar los campos según Tabla A3.4.1.
[NAME_SUSTANCE]	Es el nombre de la sustancia con mayor “mass-fraction” en el stream y que por ende le da el nombre al campo [SUSTANCE_ROLE]	Una vez se haya determinado la sustancia con mayor “mass-fraction” asignar el nombre de ésta al keyword
[TYPE_SEPARATION]	Es el tipo de sistema de separación	Los equipos de separación tienen ya una etiqueta del tipo de separación. Los posibles campos son: Flash, Distillation, Absorption, Stripping, Extractive distillation, Azeotropic distillation, Liquid-Liquid extraction, Crystallization, Adsorption, Membranes, Leaching, Drying.
[LIST_SUBSTANCES]	Es el nombre de la o las sustancia que se separan de [NAME_SUSTANCE]	Una vez determinada [NAME_SUSTANCE] el keyword [LIST_SUBSTANCE] será la lista de los nombres de las demás sustancias. Por ejemplo, si se tiene un stream con las sustancias A,B y C, y [NAME_SUSTANCE] es B, entonces [LIST_SUBSTANCE] será A,C NOTA: Si el “mass-fraction” de una sustancia es 0 (cero), ésta sustancia no formará parte de la lista.
[LIST_REACTANTS]	Es el nombre o los nombres de las especies químicas identificadas por el usuario como “REACTANTS”	Ver la lista de “definiciones” de roles por parte del usuario. El usuario identifica las sustancias presentes en el proceso o los “Reactants”
[LIST_MAIN_PRODUCTS]	Es el nombre o los nombres de las especies químicas identificadas por el usuario como “MAIN_PRODUCTS”	Ver la lista de “definiciones” de roles por parte del usuario. El usuario identifica las especies químicas presentes en el proceso o los “MAIN_PRODUCTS”
[LIST_BY_PRODUCTS]	Es el nombre o los nombres de las especies químicas identificadas por el usuario como “BY_PRODUCTS”	Ver la lista de “definiciones” de roles por parte del usuario. El usuario identifica las especies químicas presentes en el proceso o los “BY_PRODUCTS”
[NAME_INPUT_REACTOR]	Es el nombre del reactor o reactores que se encuentra conectado(s) a la entrada del sistema de separación	Ver el o los reactores conectados a la entrada del sistema de separación. Tomar los nombres del o los reactores y asignarlos al keyword
[NAME_OUTPUT_REACTOR]	Es el nombre del reactor o reactores que se encuentra conectado(s) a la salida del sistema de separación	Ver el o los reactores conectados a la salida del sistema de separación. Tomar los nombres del o los reactores y asignarlos al keyword



## A3.4. Definición y explicación de cómo inferir o calcular las “palabras clave”.

### Separación

Palabra clave	Descripción	Como inferirlo
[CONCENTRATION]	<p>Es la concentración en porcentaje masa (%mass) de una sustancia. En este caso es la sustancia que le da nombre:</p> <p>[NAME_SUSTANCE] en el caso 2, [LIST_REACTANTS] en el caso 5                      [LIST_MAIN_PRODUCT] en el caso 7.</p> <p>En general en los sistemas de Separación hay mas de un stream de salida. Aquí se deben considerar todos los stream de salida para determinar el que tiene mayor concentración de la sustancia que se desea separar.</p>	<ol style="list-style-type: none"> <li>Determinar cual es el caso que se va a aplicar:                              Caso 2                              Caso 5                              Caso 7</li> <li>Determinar los stream de salida del sistema de separación.</li> <li>En función del caso a aplicar determinar cual será la sustancia a buscar.                              * Caso 2 debe ser la que le de nombre a [NAME_SUSTANCE]                              * Caso 5 es la sustancia identificada como “Reactants”                              * Caso 7 es la sustancia identificada como “Main product”</li> <li>Una vez identificada la sustancia, determinar por comparación con todos los stream en cual se tiene el mayor “mass-fraction” de la sustancia en cuestión.</li> <li>Multiplicar por 100 el “mass-fraction” resultante del punto 4.</li> <li>Asignar el valor del punto 3 al keyword [CONCENTRATION]</li> </ol>

Tabla A3.4.1. Asignación del “rol” de una corriente de proceso [SUSTANCE\_ROLE].

[SUSTANCE_ROLE]	Condición que se debe cumplir
raw material	all input streams in case there are not reactor
utility	input streams for combustion, i.e. air, oil, fuel oil, fuel gas, natural gas.
	input streams for heat, i.e. Low (3-5 bar)/medium(10-15 bar)/high(40-50 bar) pressure steam
	input stream for cool, i.e. Cooling water (from cooling tower), river water, refrigerated water
	input energy stream, i.e. Electric heat (specify 220,440, 660 V service)
reactants	all the streams before they are fed the reactor
products	all the exit streams of the reactor
main product	high concentration of main product
by-product	high concentration of by-product(s)
recycle	gaseous reactants plus inert gas and/or gaseous by-products
	high concentration of reactants
	reversible by-products
vent	all gaseous by-products and feed impurities
Fuel	by-products to fuel
waste	by-products to waste treatment
solvent	high concentration of solvent

## A3.4. Definición y explicación de cómo inferir o calcular las “palabras clave”.

### Temperatura

Palabra clave	Descripción	Como inferirlo
[ROLE_INLET_STREAM]	<p>Es el “rol” del stream de entrada que se le asigna en función de la substancia con mayor concentración.</p> <p>NOTA:</p> <ol style="list-style-type: none"><li>Para el caso del HE habrá que determinar 2 [ROLE_INLET_STREAM]: uno para la hot-stream y otro para la cold-stream.</li><li>Es equivalente al keyword [SUSTANCE_ROLE] de los sistemas separación.</li></ol>	<p>Determinar la substancia con mayor “mass-fraction” en el stream de entrada y asignar los campos según Tabla A3.4.2.</p> <p>NOTA:</p> <p>En el caso del HE deben determinarse para la hot-stream y para la cold-stream.</p>
[NAME_INLET_STREAM]	<p>Es el nombre del stream de entrada al Heater o Cooler</p>	<ol style="list-style-type: none"><li>Determinar el stream de entrada al Heater o Cooler.</li><li>Asignar el nombre del stream al keyword</li></ol> <p>NOTA:</p> <p>Solo aplica para Heater y Cooler.</p>
[EFFECT_PHASE]	<p>Es el cambio físico que provoca un equipo de cambio de temperatura en un stream.</p>	<ol style="list-style-type: none"><li>Determinar los stream de entrada y salida de los equipos de cambio de temperatura.</li></ol> <p>NOTA:</p> <p>En el caso de Heater y Cooler solo hay una de entrada y una de salida.</p> <p>Para el caso de HE hay dos de entrada y dos de salida. El de mayor temperatura de entrada se identifica como “hot-stream” y el de menor como “cold-stream”</p> <ol style="list-style-type: none"><li>Con el dato de “FractionVapour” de los stream de entrada y salida aplicar los criterios de la Tabla A3.4.2. para determinar el campo [OBJECTIVE-TEMP].</li><li>En función del [OBJECTIVE TEMP] se determina el texto que debe tener [EFFECT-PHASE] como se muestra en la Tabla A3.4.3.</li><li>En la Tabla A3.4.3 los keyword [INPUT-TYPE-PHASE] y [OUTPUT-TYPE-PHASE] son la fase del stream de entrada y la fase del stream de salida respectivamente. Se evalúan en función del FractionVapour de los stream.</li></ol> <p>NOTA:</p> <p>Si <math>FV = 0</math> entonces TYPE-PHASE es “liquid”</p> <p>Si <math>FV</math> entre 0 y 1 entonces TYPE-PHASE es “vapour”</p> <p>Si <math>FV = 1</math> entonces TYPE-PHASE es “lgaseous”</p>

## A3.4. Definición y explicación de cómo inferir o calcular las “palabras clave”.

### Temperatura

Palabra clave	Descripción	Como inferirlo
[WHO_X_CONNECTED_TO_OUTPUT]	<p>Es el o los equipos que están conectados a la salida del equipo.</p> <p>NOTA: Aplica solo para Heater y Cooler</p>	<p>1. Determinar la función principal de los equipos conectados a la salida del equipo. Asignarlos a una variable X</p> <p>NOTA: Por ejemplo si hay 3 equipos y dos de ellos tienen la misma función principal, X solo tendrá el valor de 2. Así si hay 2 reactores y un separador, X será R,S. Si hay otro caso donde haya 1 reactor, 1 separador, 1 de cambio de temperatura, entonces, X será R,S,T</p> <p>2. Con el valor de X buscar el texto correspondiente en la Tabla A3.4.4 y asignárselo al keyword.</p>
[WHO_X_CONNECTED_TO_OUTPUT_COLD_STREAM]	<p>Es el mismo caso del keyword anterior pero para el HE.</p>	<p>1. Determinar la función principal de los equipos conectados a la salida del HE pero a la cold-stream. Asignarlos a una variable X</p> <p>NOTA: Por ejemplo si hay 3 equipos y dos de ellos tienen la misma función principal, X solo tendrá el valor de 2. Así si hay 2 reactores y un separador, X será R,S. Si hay otro caso donde haya 1 reactor, 1 separador, 1 de cambio de temperatura, entonces, X será R,S,T</p> <p>2. Con el valor de X buscar el texto correspondiente en la Tabla A3.4.4. y asignárselo al keyword.</p>
[DELTA_TEMPERATURE]	<p>Es la diferencia de temperatura entre el stream de entrada y el de salida para el caso del Heater y Cooler.</p> <p>Para el caso del HE es la diferencia de temperatura entre la entrada y salida del hot-stream por un lado, y la diferencia de temperatura entre la entrada y la salida del cold-stream.</p>	<p>1. Determinar los stream de entrada y salida del Heater y Cooler.</p> <p>2. Para Heater y Cooler: Toutput – Tinput Para HE: (Toutput – Tinput) del hot-stream (Toutput – Tinput) del cold-stream</p>
[NAME_EQUIPMENT_OUTPUT]	<p>Es el nombre del o los equipos conectados a las salidas del equipo de cambio de temperatura. Se presentan dos posibilidades:</p> <p>a. Para Heater y Cooler son los equipos conectados a la salida.</p> <p>b. Para HE son los equipos conectados a la “cold-stream”</p>	<p>Para Heater y Cooler: Ver los equipos de los equipos conectados a las salidas y traer los nombres.</p> <p>Para HE: Ver los equipos conectados a la salida del “cold-stream”</p>

## A3.4. Definición y explicación de cómo inferir o calcular las “palabras clave”.

### Temperatura

Palabra clave	Descripción	Como inferirlo
[NAME_HOT_STREAM: ROLE_INLET_STREAM]	Es el nombre y el “rol” del stream identificado como “hot-stream”  NOTA: Solo aplica para HE	1. Identificar la “hot-stream” 2. Buscar el nombre del hot-stream. El nombre asignarlo al keyword NAME_COLD_STREAM 3. Con ayuda de los mass-fraction de las sustancias de entrada identificar el “rol” del stream. Ver Tabla A3.4.1.
[NAME_COLD_STREAM: ROLE_INLET_STREAM]	Es el nombre y el “rol” del stream identificado como “cold-stream”  NOTA: Solo aplica para HE	1. Identificar la “cold-stream” 2. Buscar el nombre del cold-stream. El nombre asignarlo al keyword NAME_COLD_STREAM Con ayuda de los mass-fraction de las sustancias de entrada identificar el “rol” del stream. Ver Tabla A3.4.1.

Tabla A3.4.2. Determinación del keyword [OBJECTIVE-TEMP] en función del “FractionVapour” de las corrientes de proceso.

[OBJECTIVE-TEMP]	CONDITION
vaporize totally	Si $FV_{input} < 1$ y $FV_{output} = 1$
vaporize	Si $FV_{input} < 1$ y $0 < FV_{output} < 1$ y $FV_{input} < Fv_{output}$
Heat	1) Si $FV_{input} = 0$ y $FV_{output} = 0$ y $T_{input} < T_{output}$ ó
	2) Si $0 < FV_{input} < 1$ y $0 < FV_{output} < 1$ y $FV_{input} < Fv_{output}$ y $T_{input} < T_{output}$ ó
	3) Si $FV_{input} = 1$ y $FV_{output} = 1$ y $T_{input} < T_{output}$
condense totally	Si $FV_{input} > 0$ y $FV_{output} = 0$
condense	Si $FV_{input} > 0$ y $0 < FV_{output} < 1$ y $FV_{input} > Fv_{output}$
cool	1) Si $FV_{input} = 0$ y $FV_{output} = 0$ y $T_{input} > T_{output}$ ó
	2) Si $0 < FV_{input} < 1$ y $0 < FV_{output} < 1$ y $FV_{input} > Fv_{output}$ y $T_{input} > T_{output}$ ó
	3) Si $FV_{input} = 1$ y $Fv_{output} = 1$ y $T_{input} > T_{output}$
FVinput	Fracción Vaporizada de la corriente de ENTRADA
FVoutput	Fracción Vaporizada de la corriente de SALIDA
Tinput	Temperatura de la corriente de ENTRADA
Toutput	Temperatura de la corriente de SALIDA

Tabla A3.4.3. Determinación del keyword [EFFECT-PHASE] en función de [OBJECTIVE-TEMP].

If [OBJECTIVE-TEMP]	Then [EFFECT-PHASE] is:
vaporize totally	and produce a stream phase change ([INPUT-TYPE-PHASE] to [OUTPUT-TYPE-PHASE])
vaporize	and vaporize partially the stream
heat	and heat the stream
condense totally	and produce a stream phase change ([INPUT-TYPE-PHASE] to [OUTPUT-TYPE-PHASE])
condense	and condense partially the stream
cool	and cool the stream

### A3.4. Definición y explicación de cómo inferir o calcular las “palabras clave”.

#### Temperatura

Tabla A3.4.4. Determinación del *keyword* [WHO\_X\_CONNECTED\_TO\_OUTPUT] en función de las funciones principales de los equipos de la salida para temperatura.

Valor de X	Valor del keyword [WHO_X_CONNECTED_TO_OUTPUT]
If X = R	for reaction system
If X = S	for separation system
If X = T	for the next temperature step
If X = P	for the pressure step
If X = F	for flow step
If X = O	for its output of process
If X = R,S	for reaction and separation systems
If X = R,T	for reaction system
If X = R,P	for reaction system
If X = R,F	for reaction system
If X = R,O	for reaction system
If X = S,T	for separation system
If X = S,P	for separation system
If X = S,F	for separation system
If X = S,O	for separation system
If X = T,P	for the next temperature step
If X = T,F	for the next temperature step
If X = T,O	for the next temperature step and its output of process
If X = P,F	for the pressure step
If X = P,O	for the pressure step and its output of process
If X = F,O	for its output of process
If X = R,S,T	for reaction and separation systems
If X = R,S,P	for reaction and separation systems
If X = R,S,F	for reaction and separation systems
If X = R,S,O	for reaction and separation systems
If X = R,T,P	for reaction system
If X = R,T,F	for reaction system
If X = R,T,O	for reaction system
If X = R,P,F	for reaction system
If X = R,P,O	for reaction system
If X = R,F,O	for reaction system
If X = S,T,P	for separation system
If X = S,T,F	for separation system
If X = S,T,O	for separation system
If X = S,P,F	for separation system
If X = S,P,O	for separation system
If X = S,F,O	for separation system
If X = T,P,F	for the next temperature and pressure steps
If X = T,P,O	for the next temperature and pressure steps and its output of process
If X = T,F,O	for the next temperature step and its output of process
If X = P,F,O	for the pressure step and its output of process
If X = R,S,T,P	for reaction and separation systems
If X = R,S,T,F	for reaction and separation systems
If X = R,S,T,O	for reaction and separation systems
If X = S,T,P,F	for separation system
If X = S,T,P,O	for separation system
If X = T,P,F,O	for the next temperature and pressure steps and its output of process
If X = R,S,T,P,F	for reaction and separation systems
If X = R,S,T,P,O	for reaction and separation systems
If X = S,T,P,F,O	for separation system
If X = R,S,T,P,F,O	for reaction and separation systems

## A3.4. Definición y explicación de cómo inferir o calcular las “palabras clave”.

### Presión

Palabra clave	Descripción	Como inferirlo
[TYPE_PHASE]	Es el estado físico de la materia: sólido, líquido o gaseoso	Con ayuda del “FRACTION-VAPOUR” determinar la fase del stream de entrada: Si $FV = 0$ Entonces “Liquid” Si $FV$ entre 0 y 1 Entonces “Vapour” Si $FP = 1$ Entonces “Gaseous”
[ROLE_INLET_STREAM]	Es el “rol” del stream de entrada que se le asigna en función de la sustancia con mayor concentración.	Determinar la sustancia con mayor “mass-fraction” en el stream de entrada y asignar los campos según Tabla A3.4.1.
[NAME_EQUIPMENT_INPUT]	Es el nombre del equipo que esta conectado a la entrada del equipo de presión.	1. Identificar el equipo que esta conectado a la entrada del equipo de presión. 2. Asignar el nombre del equipo al keyword
[NAME_EQUIPMENT_OUTPUT]	Es el nombre del equipo que esta conectado a la salida del equipo de presión.	1. Identificar el equipo que esta conectado a la salida del equipo de presión. 2. Asignar el nombre del equipo al keyword
[NAME_INLET_STREAM]	Es el nombre del stream que esta conectado a la entrada del equipo de presión.	1. Identificar el stream que esta conectado a la entrada del equipo de presión. 2. Asignar el nombre del equipo al keyword
[WHO_X_CONNECTED_TO_OUTPUT]	Es el o los equipos que están conectados a la salida del equipo.	1. Determinar la función principal de los equipos conectados a la salida del equipo. Asignarlos a una variable X NOTA: Por ejemplo si hay 3 equipos y dos de ellos tienen la misma función principal, X solo tendrá el valor de 2. Así si hay 2 reactores y un separador, X será R,S. Si hay otro caso donde haya 1 reactor, 1 separador, 1 de cambio de temperatura, entonces, X será R,S,T 2. Con el valor de X buscar el texto correspondiente en la Tabla A3.4.1 y asignárselo al keyword.
[DELTA_PRESSURE]	Es la diferencia de presión entre el stream de salida menos el de entrada	1. Ver el stream de entrada al equipo de presión y obtener el valor de la presión (este valor será $P_{input}$ ) 2. Ver el stream de salida del equipo de presión y obtener el valor de la presión (este valor será $P_{output}$ ) 3. Calcular la diferencia: $P_{output} - P_{input}$ Y asignárselo al keyword

### A3.4. Definición y explicación de cómo inferir o calcular las “palabras clave”.

#### Presión

Tabla A3.4.5. Determinación del *keyword* [WHO\_X\_CONNECTED\_TO\_OUTPUT] en función de las funciones principales de los equipos de la salida para presión.

Valor de X	Valor del keyword [WHO_X_CONNECTED_TO_OUTPUT]
If X = R	for reaction system
If X = S	for separation system
If X = T	for temperature change step
If X = P	for the next pressure step
If X = F	for flow change step
If X = O	for its output of process
If X = R,S	for reaction and separation systems
If X = R,T	for reaction system
If X = R,P	for reaction system
If X = R,F	for reaction system
If X = R,O	for reaction system
If X = S,T	for separation system
If X = S,P	for separation system
If X = S,F	for separation system
If X = S,O	for separation system
If X = T,P	for temperature change step
If X = T,F	for temperature change step
If X = T,O	for temperature change step and its output of process
If X = P,F	for the next pressure step
If X = P,O	for the next pressure step and its output of process
If X = F,O	for its output of process
If X = R,S,T	for reaction and separation systems
If X = R,S,P	for reaction and separation systems
If X = R,S,F	for reaction and separation systems
If X = R,S,O	for reaction and separation systems
If X = R,T,P	for reaction system
If X = R,T,F	for reaction system
If X = R,T,O	for reaction system
If X = R,P,F	for reaction system
If X = R,P,O	for reaction system
If X = R,F,O	for reaction system
If X = S,T,P	for separation system
If X = S,T,F	for separation system
If X = S,T,O	for separation system
If X = S,P,F	for separation system
If X = S,P,O	for separation system
If X = S,F,O	for separation system
If X = T,P,F	for temperature change and pressure steps
If X = T,P,O	for temperature change and pressure steps and its output of process
If X = T,F,O	for temperature change step and its output of process
If X = P,F,O	for the next pressure change step and its output of process
If X = R,S,T,P	for reaction and separation systems
If X = R,S,T,F	for reaction and separation systems
If X = R,S,T,O	for reaction and separation systems
If X = S,T,P,F	for separation system
If X = S,T,P,O	for separation system
If X = T,P,F,O	for temperature change and pressure steps and its output of process
If X = R,S,T,P,F	for reaction and separation systems
If X = R,S,T,P,O	for reaction and separation systems
If X = S,T,P,F,O	for separation system
If X = R,S,T,P,F,O	for reaction and separation systems



## A3.4. Definición y explicación de cómo inferir o calcular las “palabras clave”.

### Flujo

Palabra clave	Descripción	Como inferirlo
[NUMBER_INLET_STREAM]	Es el número de streams de entrada al Mixer	<ol style="list-style-type: none"><li>1. Determinar el número de stream que entran a un Mixer</li><li>2. Asignar el número al keyword</li></ol>
[LIST_ROLE_INLET_STREAM]	Es el “rol” de los streams de entrada al Mixer. Este “rol” se asigna en función de la sustancia con mayor concentración en cada stream.	<ol style="list-style-type: none"><li>1. Determinar la sustancia con mayor “mass-fraction” en cada uno de los stream de entrada al Mixer y asignar los campos según Tabla A3.4.1.</li><li>2. Con estos “roles” se forma una lista para todos los stream de entrada.</li></ol> <p>NOTA: Si hay 3 streams de entrada y dos de ellos tienen el mismo “rol”, entonces el keyword solo tendrá 2 roles. Por ejemplo, si entran 3 stream con los roles: Main-product, solvent y by-product, el keyword será: Main-product, solvent, product</p>
[LIST_QUOTIENT_MASS_FLOW]	Es la proporción en que se divide el mass-flow de un stream de entrada a un Splitter.	<ol style="list-style-type: none"><li>1. Identificar el número de streams de salida del Splitter.</li><li>2. Identificar el mass-flow de cada uno de los streams de salida</li><li>3. Dividir el mass-flow de cada uno de los streams de salida entre el mass-flow del stream de entrada y multiplicarlo por 100.</li><li>4. El keyword será una lista con los valores de los cocientes de cada uno de los streams de salida</li></ol> <p>NOTA: Ejemplo. Si hay un stream de entrada al Splitter con un mass-flow de 10 kg/h y hay 2 streams de salida con un mass-flow de 3 y 7 kg/h respectivamente, el keyword será: Aplicando los pasos descritos anteriormente</p> <ol style="list-style-type: none"><li>1. No. de stream de salida:</li><li>2. 3, 7</li><li>3. <math>(3/10)*100</math>, <math>(7/10)*100</math></li><li>4. 30, 70</li></ol>
[LIST_NAME_INLET_STREAM]	Es el nombre de los streams de entrada.	<ol style="list-style-type: none"><li>1. Identificar el número de streams conectados a la entrada del dispositivo en cuestión.</li><li>2. Asignar el nombre de los streams conectados a la entrada del dispositivo en cuestión y generar una lista.</li></ol>



## A3.4. Definición y explicación de cómo inferir o calcular las “palabras clave”.

### Flujo

Palabra clave	Descripción	Como inferirlo
[MASS_FLOW_INLET_STREAM]	Es el flujo másico (mass-flow) de el o los stream(s) de entrada al dispositivo de flujo	<ol style="list-style-type: none"><li>1. Identificar el número de streams conectados a la entrada del dispositivo en cuestión.</li><li>2. Asignar el mass-flow de cada uno de los stream(s) conectados a la entrada del dispositivo en cuestión y generar una lista.</li></ol>
[LIST_NAME_OUTLET_STREAM]	Es el nombre de los streams de salida.	<ol style="list-style-type: none"><li>1. Identificar el número de streams conectados a la salida del dispositivo en cuestión.</li><li>2. Asignar el nombre de los streams conectados a la salida del dispositivo en cuestión y generar una lista.</li></ol>
[NEXT_STEP]	Es el o los sistemas que están conectados a la salida del dispositivo en cuestión	<ol style="list-style-type: none"><li>1. Determinar la función principal de los equipos conectados a la salida del equipo.</li><li>2. Asignarlos a una variable X</li></ol> <p>NOTA: Por ejemplo si hay 3 equipos y dos de ellos tienen la misma función principal, X solo tendrá el valor de 2. Así si hay 2 reactores y un separador, X será R,S. Si hay otro caso donde haya 1 reactor, 1 separador, 1 de cambio de temperatura, entonces, X será R,S,T</p> <ol style="list-style-type: none"><li>2. Con el valor de X buscar el texto correspondiente en la Tabla A3.4.6. y asignárselo al keyword.</li></ol>

### A3.4. Definición y explicación de cómo inferir o calcular las “palabras clave”.

#### Flujo

Tabla A3.4.6. Determinación del *keyword* [WHO\_X\_CONNECTED\_TO\_OUTPUT] en función de las funciones principales de los equipos de la salida para flujo.

Valor de X	Valor del keyword [WHO_X_CONNECTED_TO_OUTPUT]
If X = R	reaction system
If X = S	separation system
If X = T	temperature change
If X = P	the next pressure
If X = F	flow change
If X = O	its output of process
If X = R,S	reaction and separation systems
If X = R,T	reaction system
If X = R,P	reaction system
If X = R,F	reaction system
If X = R,O	reaction system
If X = S,T	separation system
If X = S,P	separation system
If X = S,F	separation system
If X = S,O	separation system
If X = T,P	temperature change
If X = T,F	temperature change
If X = T,O	temperature change and its output of process
If X = P,F	the next pressure
If X = P,O	the next pressure and its output of process
If X = F,O	its output of process
If X = R,S,T	reaction and separation systems
If X = R,S,P	reaction and separation systems
If X = R,S,F	reaction and separation systems
If X = R,S,O	reaction and separation systems
If X = R,T,P	reaction system
If X = R,T,F	reaction system
If X = R,T,O	reaction system
If X = R,P,F	reaction system
If X = R,P,O	reaction system
If X = R,F,O	reaction system
If X = S,T,P	separation system
If X = S,T,F	separation system
If X = S,T,O	separation system
If X = S,P,F	separation system
If X = S,P,O	separation system
If X = S,F,O	separation system
If X = T,P,F	temperature change and pressure s
If X = T,P,O	temperature change and pressure s and its output of process
If X = T,F,O	temperature change and its output of process
If X = P,F,O	the next pressure change and its output of process
If X = R,S,T,P	reaction and separation systems
If X = R,S,T,F	reaction and separation systems
If X = R,S,T,O	reaction and separation systems
If X = S,T,P,F	separation system
If X = S,T,P,O	separation system
If X = T,P,F,O	temperature change and pressure s and its output of process
If X = R,S,T,P,F	reaction and separation systems
If X = R,S,T,P,O	reaction and separation systems
If X = S,T,P,F,O	separation system
If X = R,S,T,P,F,O	reaction and separation systems

## A3.5. Ejemplos de modelos teleológicos.

### Reacción

Ejemplo 1. Dado el siguiente diagrama de flujo de proceso para la producción de Amoniaco de la Figura A3.4.2., se desea conocer el modelo teleológico del reactor PFR-100.

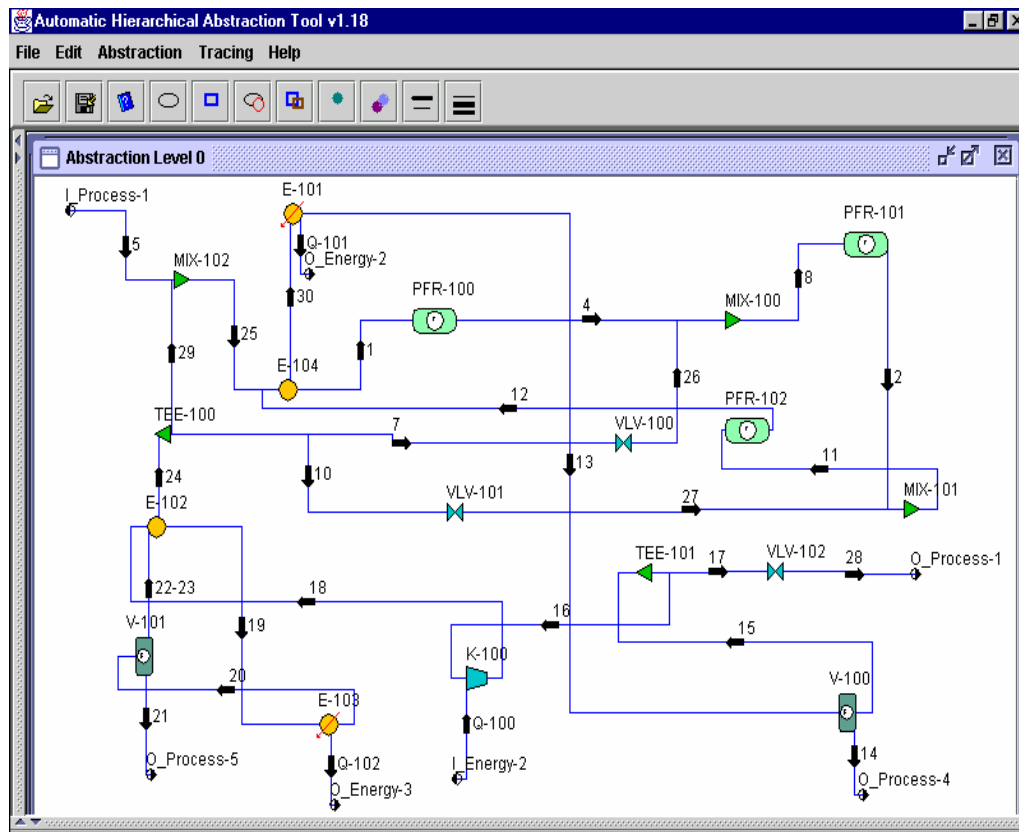


Figura A3.4.2. Representación del nivel de abstracción 0 del proceso de Amoniaco.

Para el PFR-100:

Modelo estructural:  $T_{E-104} - R_{PRF-100} - F_{MIX-101}$

Especies químicas:  $N_2, H_2$  (reactivos) y

$NH_3$  (producto principal)

Nota: No hay R a la entrada o salida

Datos del proceso (AHA!):

$T_1 = 393.1 \text{ } ^\circ\text{C}$

$P_1 = 1.497e04 \text{ kPa}$

Conversión: 22.19

La hoja a la que se llega es:

**R(C1,C4, C3)  
[X-R<sub>1</sub>-X]**

El modelo teleológico para el PFR-100 con base en la información del proceso y la hoja sería:

- C1 Transform reactants into main products and by-products
- C4 Transform  $N_2, H_2$  (reactant(s)) into  $NH_3$  (main-product).
- C3 With temperature-outlet:  $393.1 \text{ } ^\circ\text{C}$  and pressure-outlet:  $1.49e04 \text{ kPa}$  is achieved a conversion: 22.19% in gaseous phase

## A3.5. Ejemplos de modelos teleológicos.

### Reacción

Ejemplo 2. Dado el siguiente diagrama de flujo de proceso para la producción de Amoniaco de la Figura A3.4.3., se desea conocer el modelo teleológico de la Meta-unit MU2-1-reaction.

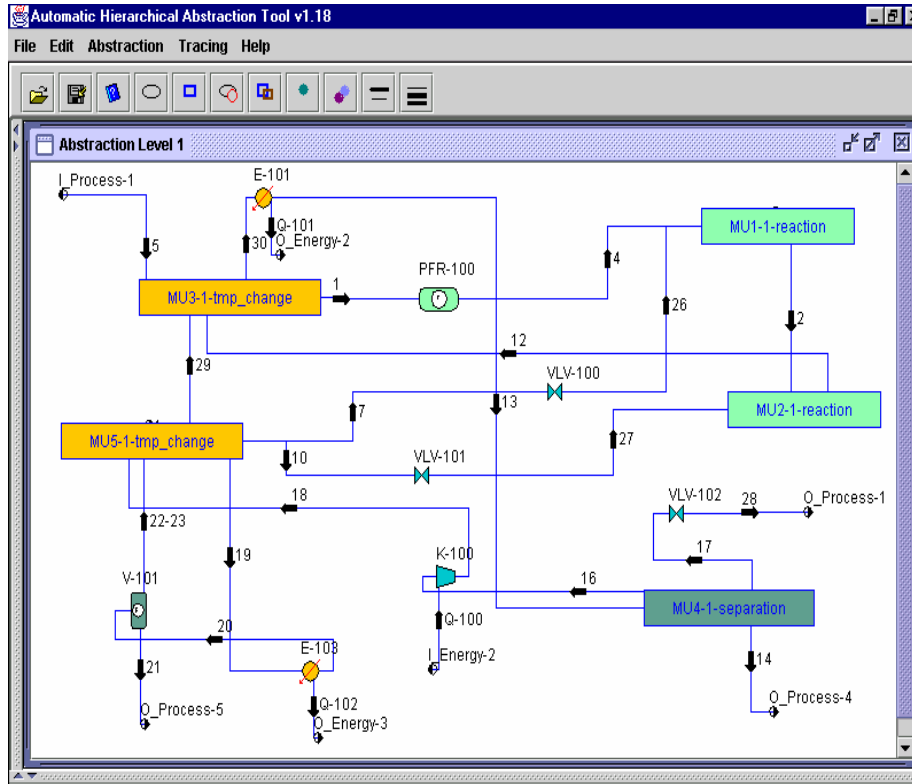


Figura A3.4.3. Representación del nivel de abstracción 1 del proceso de Amoniaco.

Para la Meta-unit "MU2-1-reaction":

Modelo estructural:  $(R_{MU1-reaction} \& P_{VLV-101}) - R_{MU2-1-reaction} - T_{MU3-1-tmp\_change}$

NOTA:

R tiene dos entradas (MU de reacción y *Unit* Válvula) y 1 salida (MU de Temperatura)

Especies químicas:  $N_2, H_2$  (reactivos) y  $NH_3$  (producto principal)

Datos del proceso AHA!:

$T_1 = 393.1 \text{ }^\circ\text{C}$        $T_2 = 393.1 \text{ }^\circ\text{C}$   
 $P_1 = 1.497e04 \text{ kPa}$      $P_2 = 1.496e04 \text{ kPa}$   
 Se prod. MP in  $R_2$ ? : Si  
 Se prod. MP in  $R_1$ ? : Si  
 Conversión:  $2.07e-02$

Con esta información se llega a la rama:

**R(C1,C2,C3)**  
**[X-R2-R1-X]**

El modelo teleológico para el MU2-1-reaction con base en la información del proceso y la hoja sería:

- C1 Transform reactants into main products and by-products
- C2 Increase conversion  $N_2, H_2$  (reactant(s)) into  $NH_3$  (main-product) in  $2.07e-02$  %
- C3 With temperature-outlet:  $393.1 \text{ }^\circ\text{C}$  and pressure-outlet:  $1.49e04 \text{ kPa}$  is achieved a conversion:  $2.07e-02$  % in gaseous phase

## A3.5. Ejemplos de modelos teleológicos.

### Separación

Ejemplo 3. Dado el diagrama de flujo de proceso para la producción de Amoniaco de la Figura A3.4.2., se desea conocer el modelo teleológico del sistema de separación V-101.

Para el V-101:

Modelo estructural:  $T_{E-103} - S_{V-101} - (T_{E-102} \& \text{OutputProcess}_{21})$

Especies químicas:  $N_2, H_2$  (reactivos) y

$NH_3$  (producto principal)

Nota: Hay reactores pero no a la entrada o a la salida del V-100

Datos del proceso (AHA!):

$T = 34.9 \text{ }^\circ\text{C}$

$P = 1.497e04 \text{ kPa}$

Concentración  $NH_3$ : 95.3 %

La hoja a la que se llega es:

S(C1,C2,C3)  
[X-S-X]

El modelo teleológico para el V-101 con base en la información del proceso y la hoja sería:

- C1 Separate and increase the concentration of chemical substances by means physico-chemical processes
- C2 Separate the main product ( $NH_3$ ) by flash from all chemical substances:  $N_2, H_2$ .
- C3 Increase the concentration of  $NH_3$  until 95.3 %

## A3.5. Ejemplos de modelos teleológicos.

### Temperatura

Ejemplo 4. Dado el diagrama de flujo de proceso para la producción de Amoniaco de la Figura A3.4.2., se desea conocer el modelo teleológico del enfriador (cooler) E-101.

Para el E-101:

Modelo estructural:  $T_{E-104} - T_{E-101} - S_{V-100}$

Especies químicas:  $N_2, H_2$  (reactivos) y  
 $NH_3$  (producto principal)

Nota: No hay reactores a la entrada o a la salida pero si hay un sistema de separación (V-100) a la salida del E-101.

La hoja a la que se llega es:

T(C9,C5,C3)  
[X-S-X]

Datos del proceso:

[ROLE\_INLET\_STREAM] = Products

[NAME-INLET-STREAM] = 30

[WHO-X-CONNECTED-TO-OUTPUT] : S, "for separation system"

[DELTA-TEMPERATURE] =  $34.98 - 194.1 = -159.12$

[EFFECT-PHASE] : and cool the stream ([OBJECTIVE-TEMP] = "Cool")

$$FV_{input} = 1$$

$$FV_{output} = 1$$

[OBJECTIVE-TEMP] = "Cool" ( $FV_{input} = 1$  and  $FV_{output} = 1$  and  $T_{input} > T_{output}$ )

+ [NAME-EQUIPMENT-CONNECTED-TO-OUTPUT] = V-100

El modelo teleológico para el E-101 con base en la información del proceso y la hoja sería:

- C9      Change the temperature of material stream(s)
- C5      Decrease the temperature of Products stream (30) to provide the conditions required for separation system (V-100).
- C3      Decrease the temperature (in  $-159.12$  °C) of Products and cool the stream

## A3.5. Ejemplos de modelos teleológicos.

### Presión

Ejemplo 5. Dado el diagrama de flujo de proceso para la producción de Amoniaco de la Figura A3.4.2., se desea conocer el modelo teleológico del compresor K-100.

Para el K-100:

Modelo estructural:  $F_{TEE-101} - P_{K-100} - T_{E-102}$

Especies químicas:  $N_2, H_2$  (reactivos) y

$NH_3$  (producto principal)

Nota: No hay reactores ni sistemas de separación a la entrada o a la salida del K-100.

La hoja a la que se llega es:

P(C9,C6)  
[X-T-X]

Datos del proceso:

[DELTA-PRESSURE] =  $1.505E+04 - 1.494E+04 = 110$

[TYPE-ROLE\_INLET\_STREAM] = Products

[NAME-INLET-STREAM] = 16

[TYPE-PHASE] = gaseous

[WHO-X-CONNECTED-TO-OUTPUT] : T, "for temperature change step"

+ [NAME-EQUIPMENT-CONNECTED-TO-OUTPUT] = E-102

El modelo teleológico para el K-100 con base en la información del proceso y la hoja sería:

- C9      Change the pressure of material stream(s)
- C5      Increase the pressure in 110 kPa of Products stream (name/phase: 16/ gaseous) to provide the conditions required for temperature change step

## A3.5. Ejemplos de modelos teleológicos.

### Flujo

Ejemplo 6. Dado el diagrama de flujo de proceso para la producción de Amoniaco de la Figura A3.4.2., se desea conocer el modelo teleológico del mezclador MIX-100.

Para el MIX-100:

Modelo estructural:  $(R_{PFR-100} \& P_{VLV-100}) - F_{MIX-100} - R_{PFR-101}$

Especies químicas:  $N_2, H_2$  (reactivos) y

$NH_3$  (producto principal)

Nota: No hay reactores ni sistemas de separación a la entrada o a la salida del K-100.

La hoja a la que se llega es:

F(C3)  
[X-Mixer-X]

Datos del proceso:

[NUMBER\_INPUT\_STREAM]: 2

[LIST\_ROLE\_INPUT-STREAM]: reactants

[NEXT\_STEP]: reaction

[LIST\_NAME\_INLET-STREAM]: 4, 26

[MASS-FLOW-STREAM]: 6.2e05, 258.6

[LIST\_NAME\_OUTLET-STREAM]: 8

El modelo teleológico para el MIX-100 con base en la información del proceso y la hoja sería:

Combines two or more inlet streams to produce a single outlet stream.

Combines 2 with the role(s): reactants into a single outlet stream as preparation to reaction step.

Combines 2 streams (4, 26) with the mass flow: 6.2e05, 258.6 (kg/h) into a single outlet process stream (8) as preparation to reaction step



---

## Anexo 4

### Reglas de agrupamiento de equipos de proceso.

Las reglas de agrupamiento forman parte del “motor” de inferencia de **AHA!**. A continuación se describen las reglas de agrupamiento para cada uno de los equipos de proceso genéricos descritos en la Tabla 2, así como para los dispositivos denominados lógicos (logics). Estos últimos dispositivos forman parte del ambiente de simulación Hysys.Plant™ y son considerados como información del estado dinámico que un proceso puede tener al momento de extraer información.

#### 1. Sistemas de Reacción.

Estas unidades de proceso tienen como función general la transformación de la materia mediante reacciones químicas. Debido a que los sistemas de reacción son los que tienen mayor jerarquía, éstos son los últimos en agruparse. Existen dos casos genéricos: 1) Reactor tipo tanque y Reactor tubular. En ambos casos la información que debe guardarse al momento de agruparse es:

Nombre
Nivel de abstracción
No. de corrientes de entrada
Nombre de corriente entrada
No. de corrientes de salida
Nombres corriente salida

#### 2. Sistemas de Separación.

Estas unidades de proceso tienen como función general la separación de la materia mediante cambios físico-químicos.

Para este tipo de unidades de proceso existen varias posibilidades de agrupamiento:



- a) No hay reactores en el DFP: Los equipos de separación se agruparan en una metaunit. Esta estructura será el último nivel de abstracción que se pueda obtener del DFP en cuestión.
- b) Si hay reactores en el DFP: Los equipos de separación se agruparán formando la estructura denominada metaunit antes de agruparse a los sistemas de reacción.

2.1. Extractor Líquido-líquido. En este tipo de separación la corriente de alimentación está en fase líquida y el agente de separación es un solvente líquido. El principio de separación es la diferencia de solubilidad. La información que se heredará será:

Nombre
Nivel de abstracción
No. de corrientes de entrada
Nombre de corriente entrada
No. de corrientes de salida
Nombres de corrientes de salida
No. de etapas

2.2. Separador simple (*flash*). En este tipo de separación la corriente de alimentación puede ser líquido y/o vapor. El agente de separación que se utiliza es un cambio de presión o la transferencia de calor. Como resultado de la separación, se obtienen dos corrientes de proceso en fase vapor y una en fase líquida. El principio de separación es la diferencia de volatilidad. La información que se heredará será:

Nombre
Nivel de abstracción
No. de corrientes de entrada
Nombre de corriente entrada
Nombre corriente vapor
Nombre corriente líquido

2.3. Separador de 3 fases. La operación de este equipo de separación es idéntico al separador flash a diferencia de que en éste se obtienen tres corrientes de producto:

una de vapor, una que contiene a los líquidos ligeros y otra a los líquidos pesados.

La información que se heredará será:

Nombre
Nivel de abstracción
No. de corrientes de entrada
Nombre de corriente entrada
No. de corrientes de salida
Nombre de corriente de vapor
Nombre corriente líquida ligera
Nombre corriente líquida pesada

2.4. Columna de destilación. La operación de este equipo de separación es idéntico al separador flash a diferencia de que en éste se utiliza solo la transferencia de calor como agente de separación y varias etapas (platos o empaque) de separación. La información que se heredará será:

Nombre
Nivel de abstracción
No. de corrientes de entrada
Nombre de corrientes entrada
No. de corrientes de salida
Nombre de corrientes de salida
No. de etapas

2.5. Absorbedor. Hay dos posibles casos: cuando es una columna para absorción de vapor o de líquido. Para el caso de la absorción de vapor la corriente de alimentación está en fase vapor y se utiliza como agente de separación un líquido absorbente. El principio de separación es la diferencia de volatilidad. La información que se heredará será la misma que en caso anterior. Para cuando se haga absorción de un líquido la alimentación esta en fase líquida y el agente de separación es una vapor absorbente.

2.6. Adsorbedor. En este tipo de separación la alimentación esta en fase vapor o líquido y se utiliza como agente de separación un sólido adsorbente. El principio de

separación es la capacidad de adsorción del sólido. La información que se heredará será:

Nombre
Nivel de abstracción
No. de corrientes de entrada
Nombre de corriente entrada
Nombre de corriente de salida de vapor
Nombre de corriente de salida de líquido
Nombre de corriente de salida de sólidos

### 3. Cambio de Temperatura.

Estas unidades de proceso tiene como función general un cambio de temperatura.

3.1. Calentador/Enfriador (Heater/Cooler). Será agrupado al equipo de proceso que este conectado a la salida del calentador o enfriador. La información que se heredará será:

Nombre
Nivel de abstracción
Nombre de corriente de entrada
Nombre de corriente de salida
Nombre de carga térmica
Cambio de temperatura

Nota: La representación visual de la nueva *Meta-unit* deberá indicar que la corriente de entrada es el resultado de una agrupación. El nuevo nombre de la corriente de salida será "NombreCorrienteEntrada+NombreCorrienteSalida". Además deberá de indicarse que hay una carga térmica de entrada (para el caso del Calentador) o salida (para el caso del Enfriador) a la *Meta-unit*.

3.2. Cambiador de calor (*Heat exchanger*). En el cambiador de calor hay dos corriente de entrada: lado tubo y lado coraza. Se deben comparar las temperaturas de las entradas para determinar cual es la mas caliente. Una vez determinada la corriente de entrada caliente, el cambiador de calor se dividirá en dos "seudo-cambiadores" de calor. Estos dos seudo-cambiadores se clasificarán en "lado

caliente” y “lado frío”. El que corresponda a “lado caliente” será agrupado al equipo de proceso que este conectado a la corriente de proceso previamente identificada como caliente. La información que heredará a la nueva *Meta-unit* es el campo denominado “Calor disponible”. Por otro lado, el que corresponda a “lado frío” será agrupado al equipo de proceso que este conectado a la corriente de proceso identificada como fría. La información que heredará a la nueva *Meta-unit* es el campo denominado “Calor requerido”.

Nota: La representación visual de las nuevas *Meta-units* deberá indicar:

- a) De los cuatro equipos de proceso conectados en un cambiador de calor (2 en lado tubo y 2 en lado coraza) se harán 2 conexiones. Una entre los equipos conectados a las corrientes de lado tubo y otra con las corrientes de lado coraza. Los nuevos nombres de estas 2 corrientes serán el formado por los nombres de la corrientes caliente y fría respectivamente.
- b) Deberá indicarse que hay una cantidad de energía “disponible” para el caso de la nueva *Meta-unit* caliente y una cantidad de energía “requerida” para el caso de la nueva *Meta-unit* fría. La energía disponible y requerida serán determinadas como la diferencia del flujo de calor de la corriente caliente y fría respectivamente.

3.3. Enfriador de aire. Será agrupado al equipo de proceso que este conectado a la salida del calentador de aire. La información que se heredará será:

Nombre
Nivel de abstracción
Nombre de la corriente de entrada
Nombre de la corriente de salida
Calor requerido

Nota: La representación visual de la nueva *Meta-unit* deberá indicar que la corriente de entrada es el resultado de una agrupación. El nuevo nombre de la corriente de



---

salida será “NombreCorrienteEntrada+NombreCorrienteSalida”. Además deberá de indicarse que hay una carga térmica de salida a la metaunit.

#### 4. Cambio de Presión.

Estas unidades de proceso tiene como función general un cambio de presión.

4.1. Válvula. Será agrupada al equipo que esté conectado a la salida. La información que se heredara será:

Nombre
Nivel abstracción
Nombre corriente entrada
Nombre corriente salida
Caída de presión

Para el caso en el que la válvula se encuentre como último dispositivo de salida de proceso, ésta se agrupara al equipo de proceso que se encuentre conectado a la entrada de la válvula. Para el caso en que este como primer dispositivo de entrada al proceso, la válvula será agrupada al equipo de proceso que este conectado a la salida de la misma.

Nota: La representación visual de la nueva *Meta-unit* deberá indicar que la corriente de entrada es el resultado de una agrupación. El nuevo nombre de la corriente de entrada de la *Meta-unit* estará formado por los campo de la válvula “NombreCorrienteEntrada+NombreCorrienteSalida”.

4.2. Expansor. Será agrupado al equipo que esté conectado a la entrada. La información que se heredará será:

Nombre
Nivel de abstracción
Nombre de corriente de entrada
Nombre de corriente de salida
Nombre de carga térmica
Cambio de presión

Nota: La representación visual de la nueva metaunit deberá indicar que la corriente de salida es el resultado de una agrupación. El nuevo nombre de la corriente de salida será “NombreCorrienteEntrada+NombreCorrienteSalida”. Además deberá de indicarse que hay una carga térmica de salida a la *Meta-unit*.

4.3. Compresor. Será agrupado al equipo de proceso que este conectado a la salida del compresor. La información que se heredará será:

Nombre
Nivel de abstracción
Nombre de corriente entrada
Nombre corriente salida
Nombre de carga térmica
Cambio de presión

Nota: La representación visual es igual que pare el caso del expansor.

4.4. Bomba. Será agrupada al equipo de proceso que este conectado a la salida de la bomba. La información que se heredará y la representación es la misma que para el caso del compresor.

## 5. Cambio de Flujo.

Este tipo de dispositivos tienen como función general la mezcla o división de corrientes de materia de proceso.

5.1. Mezclador. Será agrupado al equipo con que se encuentre conectado a la corriente de salida del mezclador. La nueva *Meta-unit* heredará la siguiente información del mezclador:

Nombre
Nivel de abstracción
No. de corrientes de entrada
Nombres de corriente entrada
Nombre corriente salida



---

Nota: La representación visual de la nueva *Meta-unit* deberá contener el mismo número de entradas que tenía el mezclador.

5.2. Divisor. Será agrupado al equipo que se encuentre conectado a la corriente de entrada. La nueva metaunit heredará la siguiente información del divisor:

Nombre
Nivel de abstracción
Nombre de corriente entrada
No. de corrientes de salida
Nombres corriente salida

Nota: La representación visual de la nueva metaunit deberá contener el mismo número de salidas que tenía el divisor así como al identificador de la corriente. Los nombres de las corrientes de salida se mantienen.

## 6. Logic devices.

De la información que se obtiene del DFP de Hysys.Plant™, se cuenta con los dispositivos lógicos. Este tipo de dispositivos contiene información sobre las necesidades del proceso relacionadas con balances de materia y controlabilidad. La información se heredará al equipo que esté conectado a la corriente de entrada con que cuenta. La información que se heredará a la nueva *Meta-unit* será:

Nombre
Nivel de abstracción
Nombre de corriente entrada
Nombre de corriente salida