

Application of simulation tools to HAZOP analysis of exothermic reaction processes

Aplicación de herramientas de simulación al análisis HAZOP en procesos con reacción exotérmica

Oswaldo A. Azuaje G¹, Andrés Rosales¹, Francisco Da Silva¹

¹Universidad Central de Venezuela, Facultad de Ingeniería, Escuela de Ingeniería Química. Caracas, Venezuela.

Cite as

Azuaje GOA, Rosales A, Da Silva F. Application of simulation tools to HAZOP analysis of exothermic reaction processes. SAP Biomedical & Chemical Engineering Innovation. 2024; 3:102. <https://doi.org/10.56294/evk2024102>

Publication History

Submitted: 06-06-2023

Revised: 23-09-2023

Accepted: 19-12-2023

Published: 01-01-2024

ABSTRACT

Introduction: the article addressed the integration between process simulation and HAZOP studies as a tool for risk analysis in the chemical industry. It was identified that, despite the effectiveness of traditional HAZOP, its qualitative nature and dependence on expert judgment limited its scope in complex systems. In response, it was proposed to review the use of simulation - in steady state and dynamic - as a support to improve the identification and evaluation of deviations in industrial processes, especially in CSTR type reactors.

Development: the principles of chemical process simulation and its application using tools such as Aspen HYSYS were described. The advantages of mathematical modeling for predicting the behavior of a system in the face of disturbances were analyzed. In particular, a case of propylene glycol production in a CSTR reactor was studied, highlighting the influence of parameters such as temperature, reactant flow and unstable operating zones. Key concepts of the HAZOP study, the LOPA methodology and the design of protection layers were reviewed and linked to data obtained from detailed simulations. Visual tools such as bifurcation diagrams and operational windows were exemplified.

Conclusions: the review evidenced that the use of simulation strengthens risk analyses by complementing the HAZOP approach with quantitative data. This combination improved the accuracy of the analysis, reduced the study execution time and increased the reliability of the results. It was concluded that the integration of advanced simulators represents a key trend in the evolution towards more digitized and efficient risk management.

Keywords: HAZOP; Dynamic Simulation; CSTR Reactor; Risk Analysis; Operational Windows.

RESUMEN

Introducción: el artículo abordó la integración entre simulación de procesos y estudios HAZOP como herramienta para el análisis de riesgos en la industria química. Se identificó que, a pesar de la efectividad del HAZOP tradicional, su carácter cualitativo y dependiente del juicio experto limitaba su alcance ante sistemas complejos. En respuesta, se planteó revisar el uso de simulación —en estado estacionario y dinámico— como apoyo para mejorar la identificación y evaluación de desviaciones en procesos industriales, especialmente en reactores tipo CSTR.

Desarrollo: se describieron los principios de la simulación de procesos químicos y su aplicación mediante herramientas como Aspen HYSYS. Se analizaron las ventajas del modelado matemático para prever el comportamiento de un sistema frente a perturbaciones. Particularmente, se estudió un caso de producción de propilenglicol en un reactor CSTR, destacando la influencia de parámetros como temperatura, flujo de reactivos y zonas de operación inestable. Asimismo, se revisaron conceptos clave del estudio HAZOP, la metodología LOPA y el diseño de capas de protección, vinculándolos con datos obtenidos de simulaciones detalladas. Se ejemplificaron herramientas visuales como diagramas de bifurcación y ventanas operacionales. **Conclusiones:** la revisión evidenció que el uso de simulación fortalece los análisis de riesgos al complementar el enfoque HAZOP con datos cuantitativos. Esta combinación permitió mejorar la precisión del análisis, reducir el tiempo de ejecución del estudio y elevar la confiabilidad de los resultados. Se concluyó que la integración de simuladores avanzados representa una tendencia clave en la evolución hacia una gestión de riesgos más digitalizada y eficiente.

Palabras clave: HAZOP; Simulación Dinámica; Reactor CSTR; Análisis de Riesgos; Ventanas Operacionales.

INTRODUCCIÓN

Los procesos industriales modernos, particularmente en la industria química, están expuestos a una amplia gama de riesgos debido a condiciones operativas exigentes, interacciones complejas entre sistemas y la posibilidad de fallas humanas o mecánicas. Por ello, el análisis de riesgos se ha consolidado como una práctica esencial para garantizar la seguridad, la eficiencia operativa y la protección del medio ambiente.

Entre las técnicas más utilizadas para la evaluación de peligros se encuentra el análisis HAZOP (Hazard and Operability Study), ampliamente adoptado en la industria de procesos por su capacidad de identificar desviaciones operacionales y proponer medidas preventivas. Sin embargo, su aplicación tradicional puede ser intensiva en tiempo y depender en exceso de la experiencia subjetiva del equipo técnico.

En los últimos años, la integración de herramientas de simulación de procesos -tanto en estado estacionario como dinámico- ha comenzado a transformar la forma en que se evalúan los riesgos. Estas simulaciones permiten analizar de forma más precisa y anticipada el comportamiento de sistemas complejos, brindando apoyo al análisis de seguridad desde la etapa de diseño.

Objetivo

Explorar el estado actual del uso de la simulación en el contexto de los estudios HAZOP, haciendo énfasis en aplicaciones relevantes al diseño y operación de reactores tipo CSTR con reacciones exotérmicas. Se analizan diversos enfoques metodológicos, casos de estudio recientes y herramientas computacionales utilizadas, con el fin de evaluar las ventajas, limitaciones y oportunidades de mejora en la integración entre simulación y análisis de riesgos.

DESARROLLO

Simulación de Procesos

La simulación de procesos químicos consiste en representar un proceso mediante un modelo matemático que involucra el cálculo de los balances de masa y energía acoplados con el equilibrio de fases y con ecuaciones de transporte y cinética química. De esta manera, se busca predecir el comportamiento de un proceso de estructura conocida, y en el que algunos de los datos preliminares de los equipos que lo conforman también son conocidos, con el fin de evaluar el desempeño de un proceso y prevenir fallas dentro del mismo. El análisis del proceso está basado en un modelo matemático constituido por un grupo de ecuaciones que relacionan las variables del proceso (temperaturas, presiones, flujos y composiciones) con variables de diseño como las áreas superficiales, configuraciones geométricas, entre otras. Los modelos matemáticos utilizados en las simulaciones de procesos contienen ecuaciones lineales, no lineales y diferenciales, que representan equipos, propiedades fisicoquímicas, conexiones entre los equipos, las operaciones del proceso y sus especificaciones.⁽¹⁾

Las simulaciones de procesos se efectúan por medio de los simuladores comerciales de procesos. Un simulador de procesos no es más que un programa de computador utilizado para modelar el comportamiento de un proceso químico. Los simuladores de procesos permiten:

- Predecir el comportamiento de un proceso.
- Analizar de forma simultánea diferentes casos, al cambiar los valores de las variables principales del proceso.
- Optimizar las condiciones de operación de plantas existentes o nuevas.
- Hacer seguimiento de una planta durante toda su vida útil, con el fin de prever ampliaciones o mejoras en el proceso.

Simulación en Estado Estacionario

La simulación en estado estacionario consiste en la resolución de un modelo matemático anteriormente descrito, pero sin involucrar la variable del tiempo. Se dice que el proceso opera en estado estacionario (o régimen permanente) cuando las propiedades de las corrientes se mantienen invariables en el tiempo.⁽²⁾ Este comportamiento por lo general se expresa por medio de ecuaciones algebraicas no lineales.

Simulación Dinámica

Por otra parte, la simulación dinámica consiste en resolver el modelo matemático del sistema estudiado incluyendo dentro del análisis la variable del tiempo. En contraposición al estado estacionario, en el modo dinámico las variables del proceso cambian con el tiempo.⁽²⁾ En este caso el modelo matemático estará conformado por un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias cuya variable diferencial es el tiempo. Por medio de la simulación dinámica, es posible monitorear el comportamiento de las variables principales del proceso al incluir dentro del análisis a los sistemas de control y su respuesta ante perturbaciones propias de la operación normal de una planta industrial.

Descripción del Proceso

El proceso de producción de propilenglicol se basa en la reacción de hidrólisis del óxido de propileno. En la figura 1 se muestra un esquema básico del proceso estudiado.

Como se puede observar en el esquema mostrado, el proceso inicia con la entrada de las corrientes de materias primas al mezclador. En este equipo se mezclan las corrientes de óxido de propileno, agua, y una corriente de recirculación rica en agua obtenida en una etapa posterior del proceso. Cabe destacar que frecuentemente la corriente de óxido de propileno tiene en su composición una cantidad considerable de metanol antes de entrar al proceso. El metanol se añade a la mezcla para mejorar la solubilidad entre el óxido de propileno y el agua.⁽¹⁾ Este proceso consta básicamente de dos etapas; la etapa de reacción y la etapa

de separación. La etapa de reacción tiene lugar una vez que la corriente de salida del mezclador ingresa al reactor. En la figura 2 se muestra un esquema de la reacción utilizada comúnmente en la producción de propilenglicol.

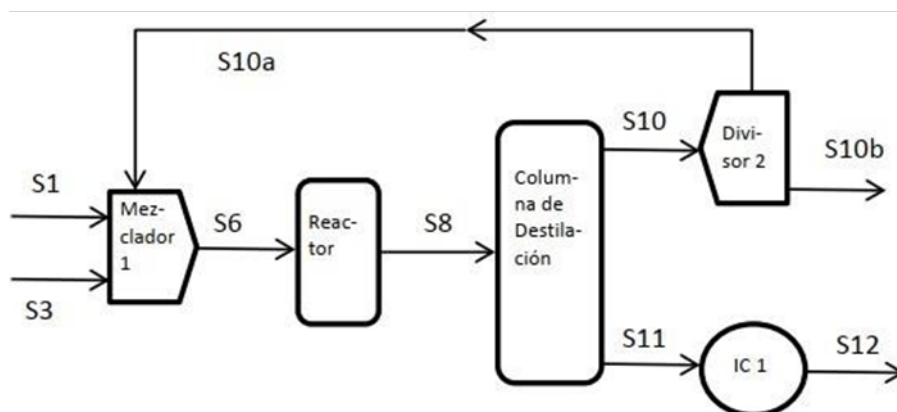


Figura 1. Esquema básico del proceso de producción de propilenglicol a partir de óxido de propileno⁽³⁾

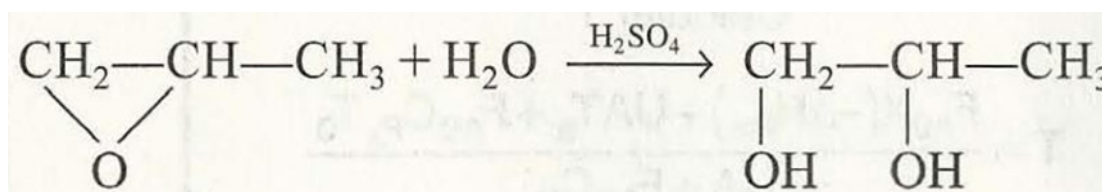


Figura 2. Esquema de la reacción de hidrólisis de óxido de propileno⁽⁴⁾

La reacción de hidrólisis se lleva a cabo en un reactor de tanque continuamente agitado (CSTR) a presión atmosférica, y como dicha reacción es exotérmica es necesario mantener la temperatura del reactor en 60°C mediante el uso de una corriente de agua de enfriamiento. Con esta temperatura es posible obtener entre 90-98 % de conversión en la reacción. Una vez que se ha completado la reacción, se obtiene una mezcla de propilenglicol, agua, metanol, y en menor medida óxido de propileno. En la etapa de separación se utiliza una columna de destilación que tiene como función separar el propilenglicol de los demás componentes, esta empieza en el momento en que la columna recibe la corriente de efluentes provenientes del reactor. Una fracción de la corriente que sale por el tope de la columna se recircula al mezclador para aumentar la conversión en la reacción. De este modo también se logra extraer el óxido de propileno que quedó sin reaccionar por medio de una corriente de purga.⁽³⁾ Por último, se tiene la corriente de fondo de la columna la cual contiene el propilenglicol que es el producto de interés. Como la corriente de fondo sale de la columna a una temperatura elevada, esta se envía posteriormente a un intercambiador de calor para reducir su temperatura antes de que el producto sea almacenado en el tanque.

Caso de estudio: condiciones de diseño del reactor, sistema de control y seguridad

Los datos del caso de estudio se tomaron de la referencia principal que justifica la ejecución de este trabajo.⁽⁵⁾ La temperatura de entrada de los reactivos es de 26°C. La reacción se lleva a cabo en un reactor con un volumen de 2 m³ a una presión de 2000 KPa. Los flujos molares normales de operación son de 10 mol/s para el óxido y de 6 mol/s para el agua. El reactor cuenta con una chaqueta de enfriamiento, se usa como fluido de enfriamiento agua con un flujo de 150 mol/s y a una temperatura de 15°C. El coeficiente global de transferencia de calor por el área superficial de transferencia (es decir, UA) del sistema de enfriamiento es 7000 W/°C. La figura 3 muestra un diagrama de flujo de proceso simplificado del equipo para llevar a cabo la reacción de hidrólisis del óxido de propileno.

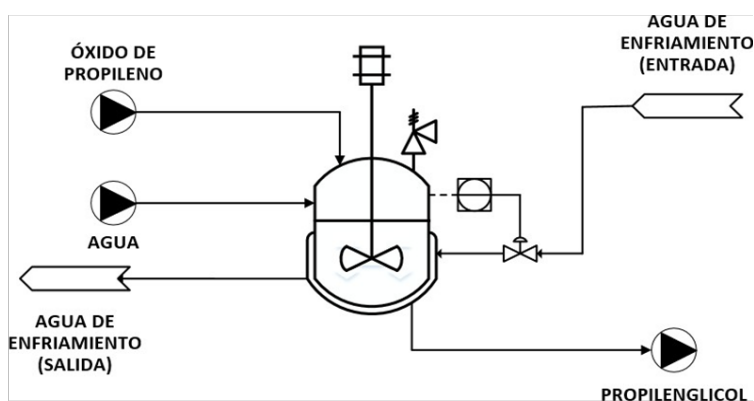


Figura 3. Diagrama de flujo simplificado del reactor utilizado para la reacción de hidrólisis de óxido de propileno

El objetivo principal de la operación del reactor es obtener propilenglicol con una conversión del agua mayor al 90 % en la salida. Las condiciones de la alimentación podrían variar si se actualizan los requerimientos de producción dentro de la planta o si se presentan fallas inesperadas. En estos casos, los parámetros de salida, especialmente la temperatura, pueden fluctuar y derivar en consecuencias peligrosas debido a la existencia de múltiples estados estacionarios dentro del proceso. Con respecto a la seguridad en la operación del equipo, la temperatura del reactor no debe exceder los 97°C, ya que temperaturas superiores a este límite pueden provocar la evaporación de la mezcla de reactivos. Cruzar este límite es completamente inaceptable y puede provocar incidentes graves dentro de la planta. Como medida de seguridad para prevenir esa situación y mantener la conversión deseada de los reactivos, se incorpora dentro del proceso como primera capa de protección el control de temperatura del reactor. En este lazo de control la temperatura es la variable controlada y el flujo de agua de enfriamiento es la variable manipulada. Se utiliza la estrategia de control típica de retroalimentación. Aunque el diagrama de flujo de proceso simplificado no los muestra, el reactor también debe contar con controladores de flujo para los reactivos, y un controlador de nivel de líquido dentro del recipiente.

Análisis de Seguridad de Procesos

Los análisis de riesgos en plantas de procesos se idearon con la finalidad de mejorar las condiciones de seguridad en las instalaciones mediante la reducción de riesgos, y la aplicación de medidas para prevenir accidentes y cualquier tipo de daños al personal, los equipos, y el medio ambiente que se encuentren involucrados con el proceso analizado. Estos análisis se basan en la aplicación de todo tipo de normas, leyes, códigos y algoritmos concernientes al ámbito de la seguridad industrial, además de la implementación de métodos de análisis de riesgos como el árbol de fallas (FTA), HAZOP, HAZID, HAZAN, entre otros.⁽⁶⁾ El diseño de los sistemas de seguridad en plantas de procesos requiere una evaluación de riesgos mediante algún método de análisis de peligros del proceso (PHA). El PHA a implementar debe ajustarse a la complejidad del proceso; si el proceso es complejo debería usarse un estudio HAZOP, mientras que para procesos menos complejos debería usarse un método menos riguroso, como las listas de verificación, el análisis modal de fallas y efectos (FMEA) o el árbol de fallas.⁽⁷⁾

Análisis de capas de protección del proceso (LOPA)

El análisis de capas de protección (LOPA) es una técnica de gestión de riesgos comúnmente usada en la industria de procesos que puede proporcionar una evaluación semicuantitativa más detallada de los riesgos y las capas de protección asociadas con los escenarios peligrosos. El análisis LOPA es un medio para identificar los escenarios que presentan el riesgo más significativo y determinar si las consecuencias pueden reducirse mediante la aplicación de principios de diseño inherentemente más seguro.⁽⁸⁾

Capas de Protección del Proceso

El diseño y el funcionamiento de una planta de procesos puede contar con un sistema instrumentado de seguridad para garantizar condiciones seguras de trabajo para el personal de la planta, la integridad de los equipos y las instalaciones, el cumplimiento de las normativas ambientales, y las medidas adecuadas para manejar posibles emergencias.

El concepto más usado en el diseño de procesos para proyectar un sistema de seguridad robusto se basa en la disposición de múltiples capas de protección. Las capas de protección típicas incluyen; el diseño del proceso, el sistema de control básico del proceso, el sistema de alarmas, entre otras. Las capas deben diseñarse de forma tal que cada una de ellas se active si la anterior ha fallado en su propósito.⁽⁹⁾ En la figura 4 se muestran las capas de protección que integran típicamente el sistema de seguridad de una planta de procesos.

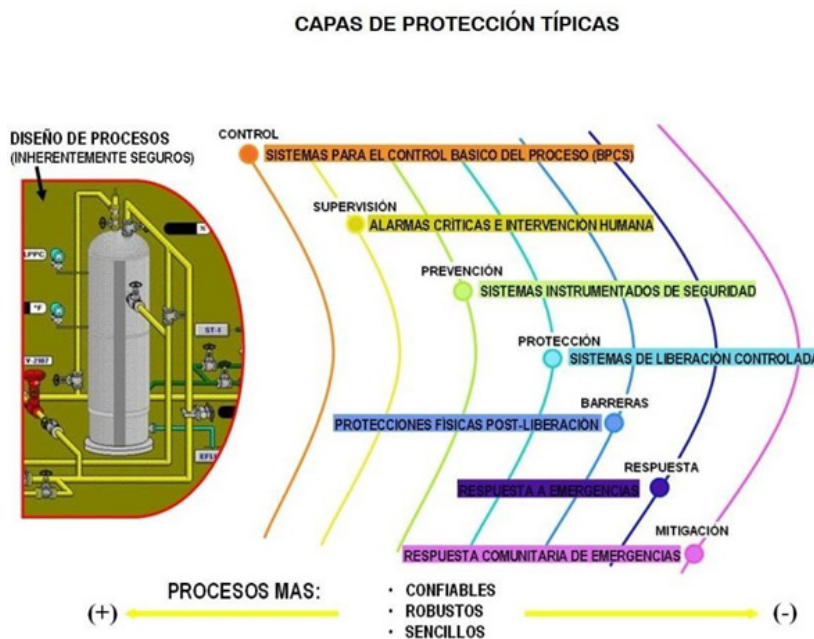


Figura 4. Capas de Protección del Proceso⁽⁹⁾

Diseño del Proceso

La capa de protección más básica es el diseño seguro del proceso y los equipos. Si el proceso es inherentemente seguro, es mucho menos probable que ocurran incidentes. De igual manera, dado que los equipos del proceso son los principales medios que manejan los productos químicos procesados, así como las altas presiones y temperaturas, es importante que el diseño de los mismos sea capaz de soportar desviaciones en las condiciones de operación manteniendo su funcionamiento de una manera estable y segura, para así evitar poner en riesgo la integridad de las instalaciones u otros equipos.

Sistema de Control Básico del Proceso (BPCS)

El sistema de control básico del proceso tiene como función mantener la planta operando en condiciones seguras de temperaturas, presiones, flujos, niveles y composiciones. El sistema de control del proceso debe mantener el proceso dentro de límites razonables, cercanos a una operación de estado estacionario. Para cumplir su cometido el sistema debe contar con los controladores necesarios, y con las estrategias de control adecuadas para asegurar la obtención del producto con la cantidad y la calidad requeridas, además de resguardar la seguridad de los operadores y la integridad de los equipos.

Análisis de peligros y operatividad en plantas de procesos (HAZOP)

El estudio HAZOP es un procedimiento formal utilizado para identificar peligros en instalaciones donde se llevan a cabo procesos químicos. El procedimiento ha demostrado ser efectivo para identificar peligros y es bien aceptado por la industria química. En este método, la idea básica es permitirle a la mente pensar libremente, pero a la vez de forma controlada para considerar todas las posibles maneras en las cuales podrían ocurrir fallas operativas o del proceso. Antes de iniciar el estudio HAZOP es necesario que se encuentre disponible toda la información detallada del proceso, esto incluye las últimas actualizaciones de; los diagramas de flujo del proceso (DFP's), los diagramas de tuberías e instrumentación (DTI's), las especificaciones de los equipos, los materiales de construcción, y los balances de masa y energía.⁽⁷⁾ El estudio HAZOP completo es elaborado por un equipo multidisciplinario compuesto por profesionales experimentados de diversas áreas, que se reúnen periódicamente para analizar un proceso y determinar las causas de las desviaciones que pueden tener lugar dentro del mismo. En la figura 5 se puede observar un modelo de tabla utilizada en los estudios HAZOP.

Título: GUÍA PARA LA REALIZACIÓN DE ESTUDIOS HAZOP (Hazard and Operability Analysis)			Código: SCOR-G-02			Revisión: 0		
			Fecha: 12 febrero 2007					
			Página: 21 de 45					

ANEXO II. MODELOS DE TABLA HAZOP												
Modelo para HAZOP de proceso												
REPSOLYPF, S.A.						ESTUDIO DE PELIGROS Y OPERABILIDAD (Hazard and Operability study - HAZOP)						
Proyecto: ...						P&ID: ...						
Nodo: (n) ...						Revisión: ...						
Intención del nodo: ...						Fecha: ...						
Parámetro: (*) ...						Intención del parámetro: ...						
Palabra guía	Desviación	Causas	Escenario	Consecuencias	Salvaguardas	C	P	E	R	Acciones	Por	Ref.

(*) Opcionalmente el "Parámetro" se puede manejar como una columna adicional delante de la columna "Palabra Guía".

Figura 5. Modelo típico de tabla usada para un estudio HAZOP⁽¹⁰⁾

El objetivo fundamental de un estudio HAZOP es examinar todo el diseño de un proceso para detectar desviaciones en las condiciones de operación y en las interacciones del proceso que pudieran ocasionar situaciones peligrosas o problemas de operabilidad. Entre estas se encuentran las siguientes:

- Peligros para la seguridad o la salud del personal.
- Daños a los equipos o a las instalaciones.
- Daños al medio ambiente.
- Peligros durante el arranque y parada de la planta.
- Problemas para operar o para realizar mantenimiento.
- Alteraciones en la calidad del producto.
- Parada imprevista (emergencia) de la planta.

Nodo

Los nodos son secciones en las cuales se divide el diagrama de tuberías e instrumentación de una planta al aplicar el método HAZOP, para ser estudiadas de manera individual. Esto facilita la identificación de circunstancias peligrosas en ciertas zonas del proceso.

Generalmente un nodo es un equipo principal, un tramo de tubería, o un conjunto de equipos y tramos de tuberías funcionalmente interconectados.⁽¹⁰⁾

Existen dos tipos de nodos:

- Nodos de proceso: cada nodo agrupa a líneas y equipos analizando la evolución del proceso por medio de las condiciones de operación.
- Nodos globales: son nodos que abarcan todas las instalaciones sujetas al estudio HAZOP. Se utilizan para efectuar análisis “de tubería hacia fuera”, intentando identificar las circunstancias externas al proceso (implantación, fugas, etc.) que pueden propiciar la aparición o el desarrollo de situaciones de accidente.

La selección de los nodos es crítica dentro de la aplicación del HAZOP, ya que en la práctica se ha demostrado que seleccionar de forma incorrecta los nodos impacta negativamente en el resultado del estudio. Los nodos deben numerarse y ser definidos de forma clara e inequívoca para impedir posibles errores en la interpretación de la extensión. Además, deben incluirse las referencias necesarias de los equipos, válvulas y líneas principales asociados a cada nodo.

Parámetro

Los parámetros son las variables del proceso a desviar (temperatura, presión, flujo, nivel, etc.) en un estudio HAZOP.⁽¹⁰⁾

Palabra Guía

El procedimiento del método HAZOP tiene como base la utilización de una serie de palabras guías para desviar de manera sistemática los parámetros del proceso seleccionados. En la práctica, y especialmente en procesos continuos, el análisis queda representado casi exclusivamente por un grupo reducido de palabras guías estandarizadas.⁽¹⁰⁾ El significado de las palabras guías utilizadas con mayor frecuencia con relación a la desviación que estas producen en un parámetro se muestran en la siguiente tabla.

Tabla 1. Palabras guías más usadas en el método HAZOP		
Palabras Guías Obligatorias		
Inglés	Español	Significado
No	No/Sin	Negación de la intención de diseño
More	Más	Incremento cuantitativo de un parámetro de proceso (cuyo valor es posible medir a través de un instrumento)
Less	Menos	Decremento cuantitativo de un parámetro de proceso (cuyo valor es posible medir a través de un instrumento)
Other than	Otro	Sustitución o modificación alternativa en el parámetro utilizado
Reverse	Inverso	Opuesto a la dirección de proceso prevista o contrario a la elección programada
Opcionales		
Inglés	Español	Significado
As well as	Además de	Incremento o modificación cualitativa
Part of	Parte de	Decremento o modificación cualitativa

Para hacer estudios HAZOP de procesos discontinuos, en los que el tiempo, el orden de operación o la secuencia de desarrollo es un aspecto importante, pueden requerirse nuevas palabras guías. Sin embargo, en esos casos también es posible utilizar las palabras guía estandarizadas añadiéndoles significados adicionales.

Desviación

Las desviaciones se generan combinando las palabras guía con los parámetros del proceso:

Palabra guía + Parámetro = Desviación

Es de vital importancia que las desviaciones generadas sean realistas y consistentes con el estudio. Para ciertos procesos o nodos algunas de estas combinaciones pueden ser no realistas, por lo que no se debe perder el tiempo con ellas. Debido a que no todas las combinaciones de parámetros y palabras guías son compatibles, es necesario tener en cuenta las incompatibilidades de algunas palabras guías con algunos parámetros del proceso al momento de generar desviaciones.⁽¹⁰⁾ La siguiente tabla especifica las palabras guía que pueden aplicarse a los principales parámetros que deben ser analizados obligatoriamente:

Tabla 2. Palabras guías que pueden aplicarse a los principales parámetros del proceso

Palabra guía	Parámetro	No/Sin (No)	Más (More)	Menos (Less)	Inverso (Reverse)	Otro (Other than)
Nivel			x	x		
Flujo		x	x	x	x	
Presión			x	x		
Temperatura			x	x		
Composición						x
Servicio		x				
Contención		x				

Causa

La determinación de las causas de las desviaciones de los parámetros del proceso es la parte más crítica de un estudio HAZOP, ya que es sobre lo que se debe actuar en primer lugar. En la determinación de las causas no se deben considerar las fallas de diseño y/o montaje.⁽¹⁰⁾

Existen tres clases básicas de causas que deben ser analizadas:

- Fallas de los equipos o instrumentos.
- Fallas humanas.
- Eventos externos.

Escenario

Un escenario es una situación de peligro generada por una desviación en un proceso, que puede ocasionar daños en caso de que se desarrolle por completo y sin control.⁽¹⁰⁾

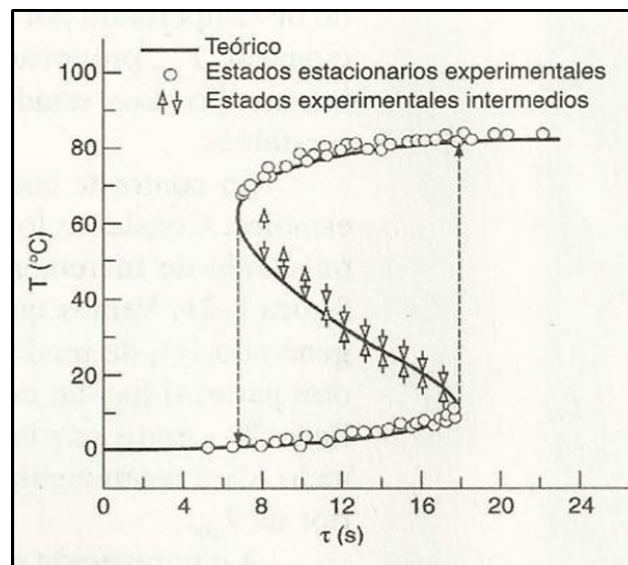
Consecuencia

Las consecuencias son los daños que puede generar el escenario planteado en caso de desarrollarse totalmente en forma de accidente (incendio, explosión, dispersión toxica, etc.).⁽¹⁰⁾

Salvaguarda

Una salvaguarda es una acción diseñada para prevenir las causas o contrarrestar las consecuencias de las desviaciones.

Multiplicidad de estados estacionarios

**Figura 6.** Diagrama de múltiples estados estacionarios⁽⁴⁾

En la operación de los reactores de tipo CSTR, cuando se lleva a cabo una reacción exotérmica se produce un fenómeno en el cual aparecen múltiples estados estacionarios. Para verificar la existencia de la multiplicidad de estados estacionarios se deben resolver gráficamente los balances de masa y energía en para el reactor. Cuando hay más de una intersección entre las curvas del balance de masa y energía se presenta un conjunto de condiciones que satisfacen ambos balances, y por esta razón se producen múltiples estados estacionarios en los cuales puede operar el reactor. A continuación, se presenta una imagen extraída de la bibliografía consultada para ejemplificar esta definición.

Diagrama de múltiples estados estacionarios

El diagrama de múltiples estados estacionarios es un gráfico en el que se pueden visualizar los numerosos puntos de operación que se pueden encontrar para un reactor CSTR con reacción exotérmica. Este diagrama generalmente muestra la temperatura del reactor en función de la temperatura de entrada del reactivo, o en función del flujo de entrada. En este diagrama también aparecen representados los puntos de ignición y de extinción, unos puntos que representan condiciones muy particulares dentro de la operación del reactor. La ignición aparece cuando la temperatura del reactor aumenta de manera súbita ante un ligero cambio en la variable perturbada, este es un punto de enlace en el que se pasa de un estado estacionario inferior a un estado estacionario superior, mientras que la extinción conlleva a una caída súbita de la temperatura de operación del equipo, mediante este enlace el reactor pasa de un estado superior a uno inferior. En la siguiente figura se puede apreciar un ejemplo de este diagrama.

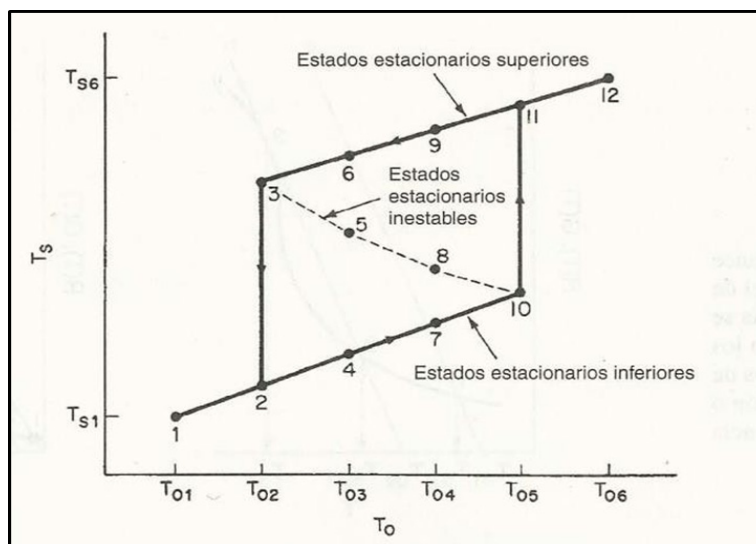


Figura 7. Diagrama de múltiples estados estacionarios, en función de la temperatura de entrada del reactivo⁽⁴⁾

Descontrol en un reactor CSTR

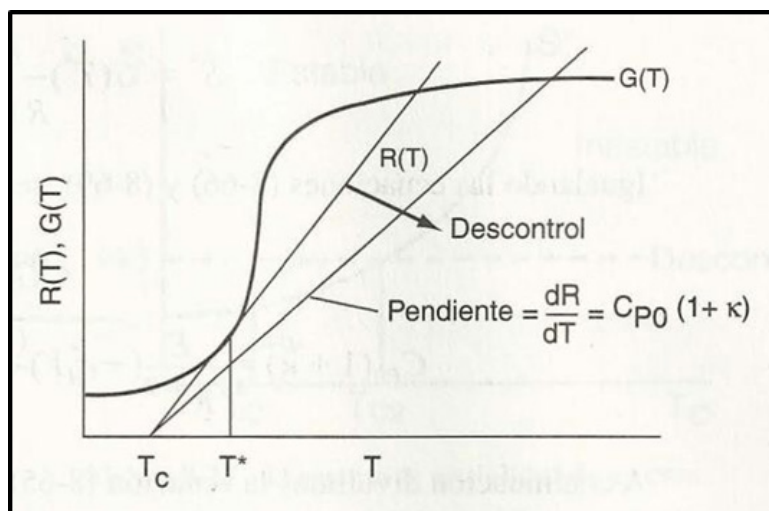


Figura 8. Descontrol en un CSTR⁽⁴⁾

En muchos sistemas con reacciones, si la temperatura llega a elevarse por encima de un punto en particular, la operación puede ser indeseable o inclusive peligrosa. Con una temperatura elevada en el reactor pueden aparecer reacciones secundarias no deseadas, y en otros casos puede presentarse una evaporación de los reactivos. Esta situación se conoce como descontrol (aunque esta también es el punto de ignición descrito en el apartado anterior). Gráficamente, se dice que el punto de ignición se alcanza cuando la curva de calor retirado se desplaza alejándose del punto de tangencia con respecto a la curva de calor generado. Una representación gráfica del descontrol se puede observar en la figura 8.

Diagrama de estabilidad del reactor

El diagrama de estabilidad de un reactor de tipo CSTR es un diagrama que muestra las regiones de operación estable e inestable del reactor. Para desarrollar este diagrama deben utilizarse variables compuestas, estas son variables que a su vez tienen dependencia con respecto a otras variables del proceso de reacción que normalmente son conocidas y pueden medirse de manera directa, tales

como; el coeficiente y el área de transferencia de calor, la capacidad calorífica y el flujo de alimentación de la mezcla, la temperatura de la alimentación y la del fluido de enfriamiento, además de los datos cinéticos de la reacción. En la siguiente figura se puede apreciar un ejemplo de un diagrama de este tipo.

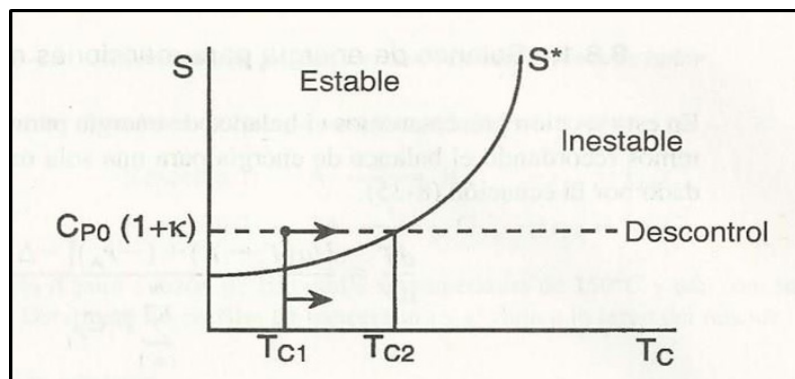


Figura 9. Diagrama de estabilidad de un CSTR⁽⁴⁾

Ventana operacional

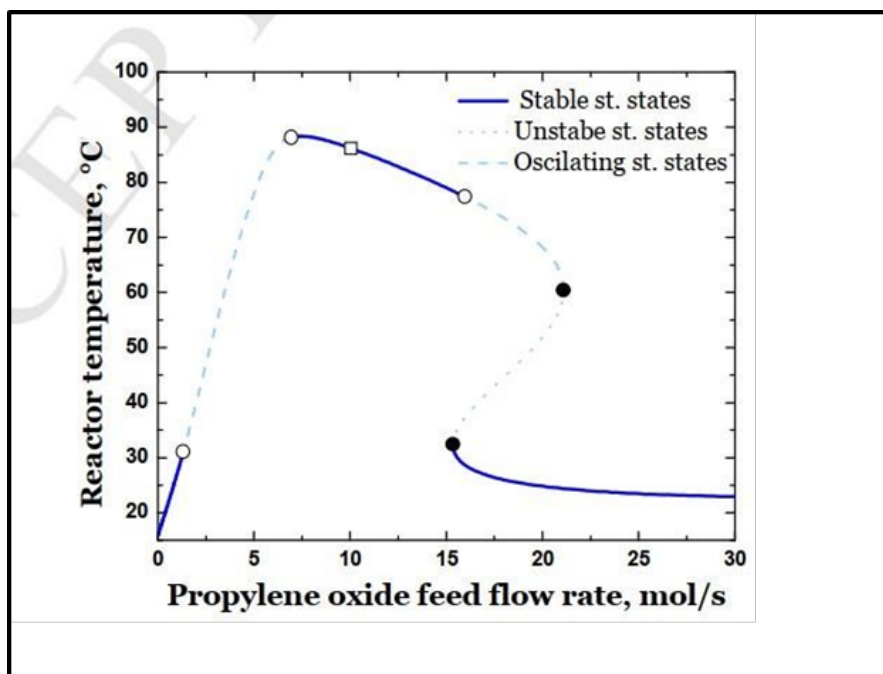


Figura 10. Ventana operacional de un reactor CSTR⁽⁴⁾

Las ventanas operacionales de los equipos son representaciones de los límites de operación segura para las variables de un proceso, de manera que, si alguna de las variables se desvía de dichos límites durante un periodo determinado de tiempo mientras este se lleva a cabo la integridad del equipo puede verse gravemente afectada. En el diseño de procesos, un objetivo importante es asegurar que los rangos de condiciones de operación especificadas puedan alcanzarse de manera satisfactoria. Para cumplir ese objetivo es necesario realizar un análisis en el que se tomen decisiones claves con respecto al proceso, como el tipo de proceso, su estructura, y la capacidad de los equipos, además de determinar los mejores valores para las variables claves del proceso que permitan a la planta alcanzar las condiciones requeridas. El resultado de este análisis debe ser un diseño que pueda mantenerse operando dentro de las zonas seguras de las ventanas operacionales de los equipos.⁽¹¹⁾ Las ventanas operacionales generalmente se representan de manera gráfica, y dentro del análisis de procesos es fundamental estar familiarizado con ellas y saber utilizarlas de manera adecuada. En el caso de los reactores de tipo CSTR con reacción exotérmica, se puede asumir como la ventana de operación un diagrama que contenga la curva de temperatura en función de la variable sujeta a ser evaluada (en el caso de este trabajo, el flujo de óxido de propileno), así como ciertos puntos característicos relacionados con el funcionamiento del reactor. Un ejemplo de ventana operacional para este equipo se muestra en la figura 10.

En el gráfico mostrado se tienen los puntos de ignición y de extinción representados por los puntos rellenos de color negro, y los puntos de bifurcación de Hopf por los círculos de color blanco. El punto de operación normal del reactor está representado por el cuadrado blanco.

Estados estacionarios estables

En los estados estacionarios estables, la temperatura del reactor se mantiene estable desde el arranque del reactor durante el tiempo que este se mantenga operando. De igual manera, la temperatura del reactor se puede volver a estabilizar en alguno de dichos puntos si llega a presentarse alguna perturbación, luego de un corto periodo de tiempo.

Estados inestables

En la zona inestable se observa que la temperatura del reactor presenta una gran vulnerabilidad ante cualquier perturbación que llegue a presentarse dentro del proceso, puede llegar repentinamente a saltar hacia un valor superior o inferior con mucha facilidad. Estos puntos se encuentran ubicados entre los puntos de ignición y de extinción.^(12,13)

Si los requerimientos del proceso lo ameritan, se puede usar un controlador riguroso para operar en alguno de estos puntos. La estabilidad de los diferentes estados estacionarios puede analizarse graficando las curvas de calor generado y calor retirado en función de la temperatura, y hallando las temperaturas de los puntos de intersección entre ambas curvas. En la figura que se presenta a continuación, extraída de la bibliografía consultada, se tiene un ejemplo del gráfico que se utiliza comúnmente para determinar si los estados estacionarios encontrados son estables o inestables.^(14,15)

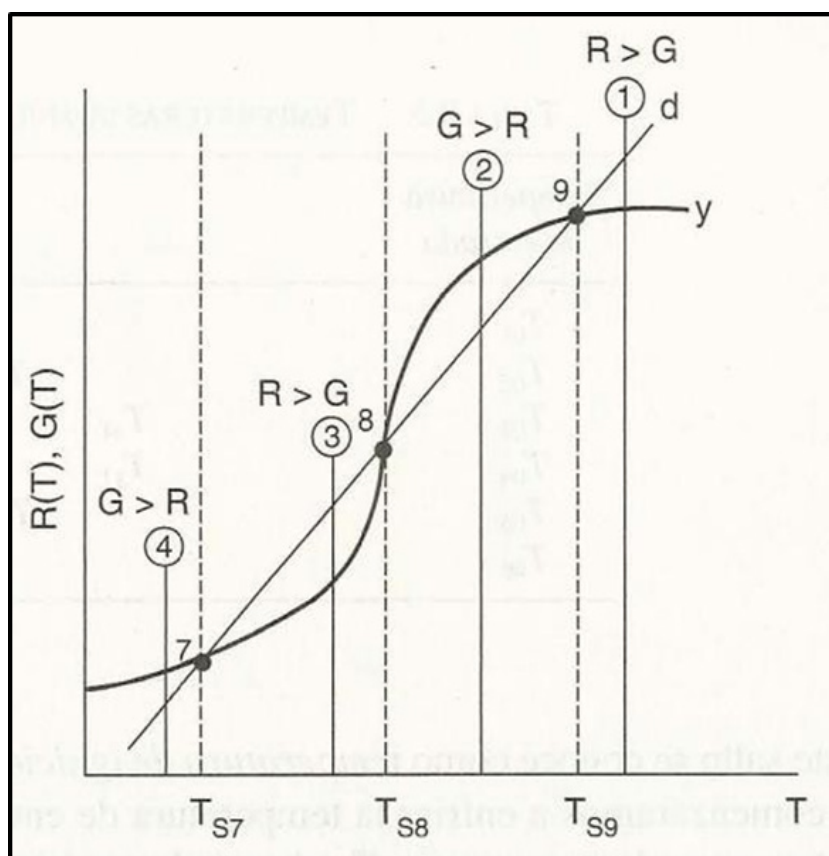


Figura 11. Diagrama de estabilidad en múltiples temperaturas⁽⁴⁾

Estados oscilantes

En el caso de los estados oscilantes la temperatura no logra alcanzar el estado estacionario a lo largo del tiempo. Estos estados son los menos deseables para la operación del equipo, ya que pueden llevar al mismo con mayor facilidad a una situación de descontrol.

Establecimiento de las desviaciones del HAZOP

Siguiendo la metodología base de este estudio⁽⁵⁾ una vez que se ha construido la ventana operacional del reactor se debe seleccionar el punto de operación normal del reactor, así como los valores de las desviaciones de aumento y disminución del flujo de óxido de propileno, de manera tal que por medio de la simulación dinámica se observen los estados inestables y oscilantes que se alcanzan al introducir las desviaciones, con el propósito de identificar las zonas seguras de operación para el equipo.

Diagrama de familias de soluciones de estados estacionarios

Si se sobreponen las curvas de la temperatura del reactor para diferentes flujos de agua de enfriamiento, se puede obtener una familia de curvas para la temperatura del reactor. Una representación gráfica de esta familia de curvas se puede apreciar en la figura 12.

Diagrama de bifurcación

El diagrama de bifurcación de Hopf es una representación gráfica en la cual se incluyen curvas de los puntos de bifurcación de

Hopf, curvas de ignición y de extinción, además de los puntos iniciales y finales de la operación del reactor desde el arranque hasta el final de un cierto periodo de tiempo luego de introducir perturbaciones, y los efectos de dichas perturbaciones y las acciones de los controladores.⁽¹⁶⁾ También se incluye la identificación de las zonas de estabilidad, inestabilidad, y zonas oscilantes. Un ejemplo del diagrama de bifurcación de Hopf se tiene en la figura mostrada a continuación:

En este punto es importante señalar que en este diagrama se encuentra representada la curva mostrada en el diagrama de estabilidad del reactor (figura 9) como las curvas de color verde oscuro. Estas curvas de color verde representan los puntos de ignición y extinción. Por su parte, la curva de color azul representa los puntos de bifurcación de Hopf.

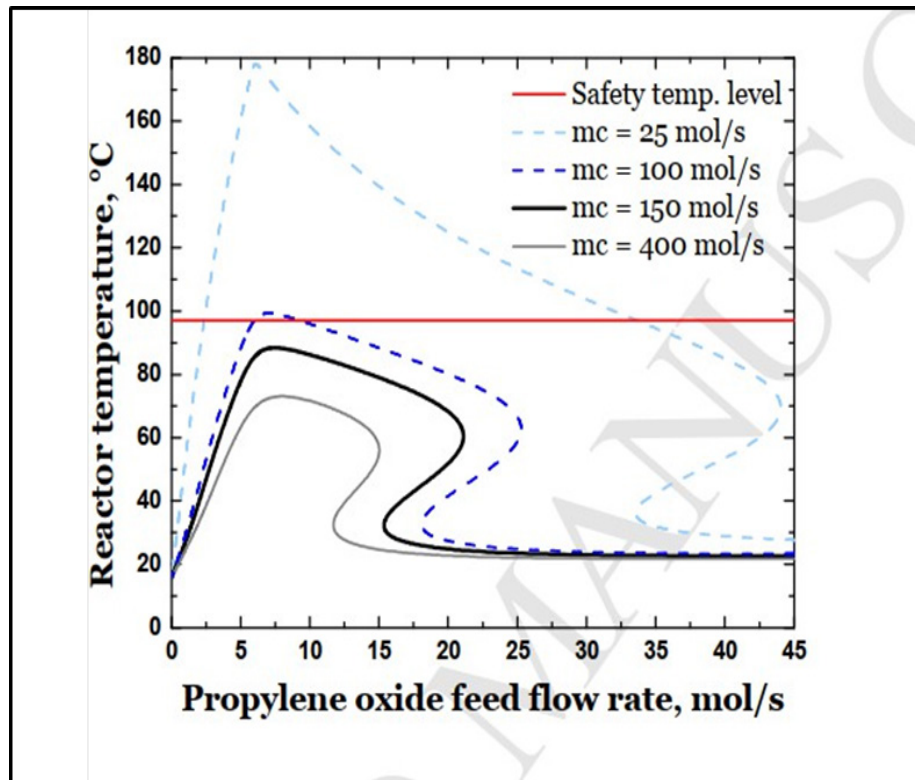


Figura 12. Diagrama de soluciones de estados estacionarios, para varios flujos de agua de enfriamiento⁽⁵⁾

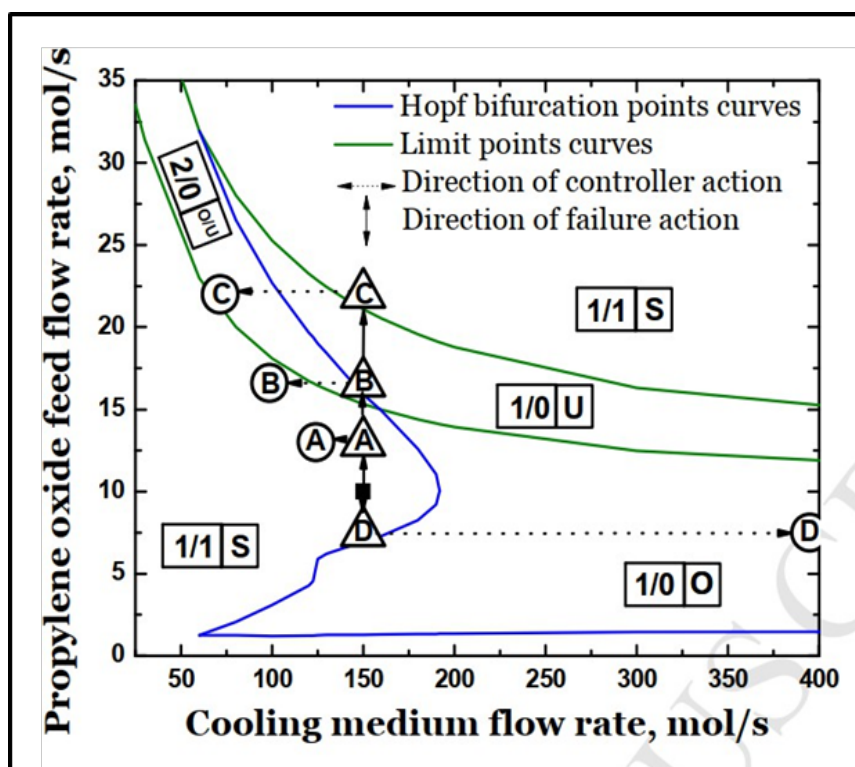


Figura 13. Diagrama de bifurcación de Hopf⁽⁵⁾

CONCLUSIONES

El presente artículo de revisión ha permitido evidenciar la importancia de integrar herramientas de simulación con los métodos tradicionales de análisis de riesgos, en particular con el estudio HAZOP, dentro del ámbito de la ingeniería de procesos químicos. En este contexto, se ha destacado el papel fundamental que desempeña la simulación —tanto en estado estacionario como dinámico— en la predicción del comportamiento de sistemas complejos y en la identificación temprana de condiciones operativas peligrosas.

La aplicación de simulaciones permite representar con mayor precisión el funcionamiento real de los equipos de proceso, como es el caso del reactor de tanque continuamente agitado (CSTR), el cual es ampliamente utilizado en procesos industriales con reacciones exotérmicas. Estas simulaciones no solo proporcionan información detallada sobre variables clave como temperatura, presión y flujo, sino que también permiten anticipar fenómenos críticos como la aparición de múltiples estados estacionarios, zonas inestables u oscilantes, y puntos de ignición o extinción que no podrían ser fácilmente detectados con métodos exclusivamente cualitativos.

El uso complementario de modelos dinámicos en estudios HAZOP representa una mejora significativa frente al enfoque convencional, ya que posibilita la evaluación más realista de desviaciones operativas, las consecuencias asociadas y la efectividad de las salvaguardas implementadas. En particular, metodologías basadas en simulación dinámica, como las desarrolladas por Janosovsky⁽¹²⁾, permiten delimitar ventanas operacionales seguras y construir diagramas de bifurcación que enriquecen la base de análisis del equipo multidisciplinario responsable del estudio de riesgos.

Además, el artículo ha expuesto cómo herramientas de análisis como LOPA y el diseño de capas de protección pueden beneficiarse de datos derivados de simulaciones detalladas, mejorando así la calidad de la toma de decisiones en materia de seguridad.

En conclusión, la incorporación de simuladores avanzados como Aspen HYSYS en el análisis HAZOP ofrece un camino prometedor para modernizar la ingeniería de seguridad de procesos. Esta integración no solo reduce la incertidumbre asociada al juicio experto, sino que también puede disminuir el tiempo de ejecución del estudio, aumentar la confiabilidad de los resultados, y contribuir significativamente a la operación segura, estable y eficiente de las plantas químicas. A medida que la industria avance hacia la digitalización, el uso combinado de métodos tradicionales y tecnologías de simulación se consolidará como una práctica esencial en la gestión moderna de riesgos industriales.

FINANCIACIÓN

Los autores no recibieron financiación para el desarrollo de la presente investigación.

CONFLICTO DE INTERESES

Los autores declaran que no existe conflicto de intereses.

CONTRIBUCIÓN DE AUTORÍA

Conceptualización: Oswaldo A. Azuaje G, Andrés Rosales, Francisco Da Silva.

Curación de datos: Oswaldo A. Azuaje G, Andrés Rosales, Francisco Da Silva.

Análisis formal: Oswaldo A. Azuaje G, Andrés Rosales, Francisco Da Silva.

Redacción – borrador original: Oswaldo A. Azuaje G, Andrés Rosales, Francisco Da Silva.

Redacción – revisión y edición: Oswaldo A. Azuaje G, Andrés Rosales, Francisco Da Silva.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Gil I, Guevara J, García J, Leguizamón A, Rodríguez G. Process Analysis and Simulation in Chemical Engineering. Springer; 2016. 10.1007/978-3-319-14812-0.
2. Arce E. La simulación como herramienta de desarrollo en la Ingeniería Química. 1995. https://www.academia.edu/2043783/La_simulaci3n_como_herramienta_de_desarrollo_en_la_Ingenier3a_Qu3mica.
3. Hernández E. Diseño de un caso base de una planta de producción de Glicol de Propileno. Matanzas: Universidad de Matanzas “Camilo Cienfuegos”; 2012. [http://cict.umcc.cu/repositorio/tesis/Trabajos%20de%20Diploma/Ingenier3a%20Qu3mica/2012/Dise%20no%20de%20un%20caso%20base%20de%20una%20planta%20de%20producci3n%20de%20Glicol%20de%20Propileno%20\(Ede%20l%20Hern3ndez%20Bustos\).pdf](http://cict.umcc.cu/repositorio/tesis/Trabajos%20de%20Diploma/Ingenier3a%20Qu3mica/2012/Dise%20no%20de%20un%20caso%20base%20de%20una%20planta%20de%20producci3n%20de%20Glicol%20de%20Propileno%20(Ede%20l%20Hern3ndez%20Bustos).pdf).
4. Fogler HS. Elementos de ingeniería de las reacciones químicas. 4th ed. Pearson Prentice Hall; 2008.
5. Danko M, Janosovsky J, Labovsky J, Jelemensky L. Integration of process control protection layer into a simulation-based HAZOP tool. J Loss Prev Process Ind. 2019. <https://doi.org/10.1016/j.jlp.2018.12.006>.
6. Pereira J. Análisis de riesgos en una planta de compresión utilizando como herramienta la simulación del proceso. Trabajo Especial de Grado. Universidad Central de Venezuela; 2016.
7. Crowl DA, Louvar JF. Chemical Process Safety: Fundamentals with Applications. 2nd ed. Prentice Hall; 2002.

8. Willey R. Layer of Protection Analysis. *Procedia Eng.* 2014;84:835–43. DOI: 10.1016/j.proeng.2014.10.405.
9. Petróleos de Venezuela, S.A. (PDVSA). *Manual de Ingeniería de Riesgos: PDVSA IR-S-01, Filosofía de Diseño Seguro.* Venezuela; 2010.
10. Ibarra J. Guía para la realización de estudios HAZOP (HAZard and OPerability analysis) 2007 https://www.academia.edu/29813154/GUÍA_PARA_LA_REALIZACIÓN_DE_ESTUDIOS_HAZOP_HAZard_and_OPerability_analysis.
11. Marlin T. Teaching Operability in Undergraduate Chemical Engineering Design Education. 2007. DOI: 10.18260/1-2--1502.
12. Janosovsky J, Danko M, Labovsky J, Jelemensky L. Development of a Software Tool for Hazard Identification Based on Process Simulation. *Chem Eng Trans.* 2019. <https://doi.org/10.3303/CET1977059>.
13. Danko M, Janosovsky J, Labovsky J, Labovska Z, Jelemensky L. Use of LOPA Concept to Support Automated Simulation-Based HAZOP Study. *Chem Eng Trans.* 2018;67:283–8. <https://doi.org/10.3303/CET1867048>.
14. López J, Méndez S. Validación de un estudio HAZOP realizado mediante la metodología tradicional usando la simulación del proceso. Trabajo Especial de Grado. Universidad Central de Venezuela; 2023.
15. Maraima Y. Metodología para estudios de peligros de procesos en la seguridad funcional de una planta típica de compresión, haciendo uso del Digital Twin de la planta. Trabajo Especial de Grado. Universidad Central de Venezuela; 2022.
16. Zhang J, Zhang L, Hu J, Lind M, Zhang X, Jørgensen SB, et al. An integrated qualitative and quantitative modeling framework for computer-assisted HAZOP studies. *AIChE J.* 2014. DOI: <https://doi.org/10.1002/aic.14593>.