

134

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO



FACULTAD DE QUIMICA



BIENENES PROFESIONALES
FACULTAD DE QUIMICA

OPTIMIZACION EN LINEA DE UNA BATERIA DE
SEPARACION DE HIDROCARBUROS

T E S I S

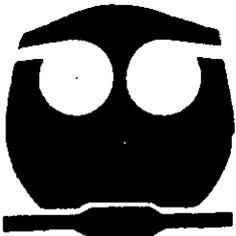
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE
INGENIERA QUIMICA
P R E S E N T A
GABRIELA ROMAN MORENO

L

MEXICO, D.F.

279890

2000





Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

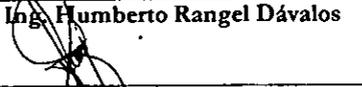
Jurado Asignado:

Presidente: Prof. Antonio Valiente Barderas
Vocal: Prof. José Antonio Ortíz Ramírez
Secretario: Prof. Humberto Rangel Dávalos
1° Suplente: Prof. Ambrosio Chávez Chavarría
2° Suplente: Prof. Humberto Ramírez Castañeda

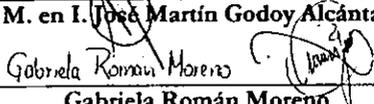
Sitio donde se desarrolló el tema: Instituto Mexicano Petróleo

Asesor: 

Ing. Humberto Rangel Dávalos

Supervisor Técnico: 

M. en I. José Martín Godoy Alcántar

Sustentante: 

Gabriela Román Moreno

Agradecimientos y Dedicaciones

A quien Es el que Es. El que todo lo puede. El que nada pide y El que todo lo da.

Muchas gracias. Señor.

A quien es capaz de inspirar todo el amor, toda ternura y toda esperanza. Muchas gracias. Señora linda.

A la mujer más importante y amada de mi vida, mi ejemplo, mi orgullo y la razón de mi fuerza, gracias mamá, por todo el esfuerzo y amor que nunca se acaban.

A mi padre, por todo su amor, dedicación y ayuda que siempre me ha brindado, gracias papá.

A Horacio, Maribel, Perla y Jazmín, por ser mi compañía y la alegría de toda la vida, muchas gracias.

A Rigo, por ser el mejor de mis amigos, mi compañero y el amor de mi vida, te amo, gracias corazón.

A mi familia de quienes he recibido más de lo que pudiera pedir, gracias.

A mis amigos, todos por estar conmigo y enseñarme a vivir y por prometer una amistad para siempre. Gracias a todos y recuerden que cuentan conmigo.

Al Ing. Humberto Rangel Dávalos por apoyarme a mí y a todos mis compañeros, por encausar nuestro entusiasmo y por dejarnos demostrar lo que podemos hacer.

Al Ing. Victor Manuel Casasola por darme la oportunidad de pertenecer a su grupo de trabajo.

Al M. en I. José Martín Godoy Alcántar y al M. en I. Ricardo Lopezlena por todo su tiempo y apoyo que me brindaron, sin lo cual este trabajo no hubiera sido posible.

Al Grupo de ISE por su apoyo y amistad.

A todos mis profesores de la Facultad de Química que me enseñaron a respetar y a valorar esta hermosa profesión y cuya enseñanza prometo hacer realidad.

A todas las personas que han ayudado a mi formación personal y profesional.

A la Facultad de Química.

A la Universidad Nacional Autónoma de México, por el orgullo de ser universitaria.

Y a mi México.

Nuevamente gracias y con todo respeto les dedico este trabajo.

ÍNDICE

CAPÍTULO I

Introducción.....	5
-------------------	---

CAPÍTULO II

Aspectos Generales de la Industria Petrolera.....	9
---	---

CAPÍTULO III

Descripción del Proceso de Separación de Hidrocarburos.....	13
---	----

CAPÍTULO IV

Optimización y Control.....	37
-----------------------------	----

CAPÍTULO V

Algoritmos de Optimización y Control para una Batería de Separación de Hidrocarburos.....	81
---	----

CAPÍTULO VI

Simulación.....	93
-----------------	----

CAPÍTULO VII

Conclusiones.....	111
-------------------	-----

CAPÍTULO VIII

Bibliografía.....	113
-------------------	-----

ÍNDICE DE APÉNDICES.....	117
--------------------------	-----

Capítulo I

INTRODUCCIÓN

En la actualidad, la forma más efectiva de obtener el máximo beneficio de las instalaciones de producción respondiendo a las variaciones del mercado con una inversión de capital mínima se puede lograr integrando todos los aspectos de la automatización del proceso de toma de decisiones: medición y monitoreo de variables de proceso, control, optimización y logística.

Cada una de las etapas de automatización juega un papel único y complementario para permitir a una compañía responder rápidamente a los cambios del mercado. Sin embargo, aunque el único objetivo de los sistemas de control era mantener una operación estacionaria del proceso, la integración mencionada impone requerimientos más estrictos.

De esta manera, la implantación de tales sistemas integrados está forzando a los procesos a operar en un rango más amplio de condiciones. Como consecuencia, el problema que cualquier sistema de control debe resolver es el siguiente:

Actualizar en tiempo real (en línea) las variables manipuladas para satisfacer múltiples criterios cambiantes de la planta[®].

Actualmente la tendencia en la industria petrolera nacional se dirige hacia la integración de todos los aspectos de la automatización construyendo la infraestructura necesaria para la aplicación de técnicas de optimización y control de procesos a gran escala. Esto ha estimulado la investigación y desarrollo de esta área en el Instituto Mexicano del Petróleo.

El proceso de separación de hidrocarburos es uno de los más importantes en la industria petrolera y desde el punto de vista del área de control adquiere un gran interés por el impacto económico y en la seguridad operacional de las personas y de las instalaciones.

El trabajo de tesis consiste en desarrollar una plataforma de simulación confiable para poder evaluar la factibilidad técnica de la aplicación de metodologías de optimización en línea y control automático a un modelo dinámico del proceso de separación de hidrocarburos. También se desarrolla un algoritmo para la optimización en línea del modelo matemático que consiste de una batería de tres separadores bifásicos horizontales. El modelo matemático incluye el cálculo de propiedades termodinámicas del proceso con ecuación de estado.

En el desarrollo del trabajo se incluye el uso de rutinas desarrolladas en el área de Control Avanzado del Grupo de Ingeniería en Sistemas Electrónicos (Instituto Mexicano del Petróleo) sobre la plataforma de programación de MATLAB para el modelado y control de la batería de separación.

OBJETIVOS

- ◆ Estudiar técnicas de control avanzado.
- ◆ Desarrollar una aplicación en el lenguaje de programación de MATLAB para la evaluación de controladores avanzados.
- ◆ Optimización en línea de un modelo matemático de una batería de separación de hidrocarburos

ESTRUCTURA DE LA TESIS

Este trabajo está dividido en 8 Capítulos y 3 Apéndices. En el capítulo II se da una perspectiva general de la Industria Petrolera, la situación en la que se encuentra y las tendencias que favorecen la implantación de algoritmos de control como los que se analizan en el capítulo IV.

El capítulo III se refiere al proceso de separación de hidrocarburos tal como se realiza en las instalaciones de producción y se hace énfasis en la termodinámica que explica el fenómeno que se presenta y en los criterios para la optimización de éste proceso. Al final, se incluye el modelo dinámico de un separador bifásico, útil para aplicar las técnicas de control avanzado.

En el capítulo IV se resume el resultado de la investigación realizada en el campo de control y optimización de procesos.

En los capítulos V y VI se desarrolla el trabajo experimental que conforma esta tesis. Se elige la técnica de optimización y se llevan a cabo las simulaciones con la herramienta de Simulink de MATLAB para evaluar los algoritmos desarrollados comparando los resultados con datos de un proyecto realizado en el IMP. Los algoritmos de cálculo elaborados se presentan en el Apéndice I y la herramienta usada se describe en el Apéndice II. Con base en los resultados, que se presentan en el Apéndice III, se exponen las conclusiones del trabajo en el capítulo VII. Finalmente, el capítulo VIII lista la bibliografía consultada para la documentación y el desarrollo de la tesis.

Capítulo II

ASPECTOS GENERALES DE LA INDUSTRIA PETROLERA

En el capítulo II, se da el panorama económico que se presentó de 1997 a 1999 con respecto a la industria petrolera, y que es la situación que abre paso a la implantación de sistemas de control más sofisticados dentro de las plantas existentes (y en las que surgirán) debido a las exigencias de integración de plantas y de generación de máximos beneficios con el menor costo.

Desde los últimos meses de 1997 y hasta finales de 1998 la industria petrolera internacional atravesó por una de las etapas más críticas de su historia. Los precios alcanzados a finales de 1998 fueron similares en términos reales a los que prevalecían hace más de 25 años. El factor más importante que mantuvo los precios bajos en 1998 fue la disminución en el ritmo de la expansión económica mundial.

MERCADO NACIONAL

En 1998 la industria petrolera nacional enfrentó el escenario internacional más difícil de los últimos doce años. La disminución continua del precio internacional del petróleo crudo afectó las economías de todos los países petroleros.

A pesar de la crisis, la economía mexicana se caracterizó por un crecimiento muy dinámico durante el primer trimestre de 1998 aunque después mostró una desaceleración hacia finales del cuarto trimestre. No obstante, la economía logró por tercer año consecutivo crecer por encima de la tasa de la población. El comportamiento de la demanda interna de productos y de gas natural evolucionó en forma congruente con la economía nacional.

El precio promedio de exportación de la canasta de crudos mexicanos en 1998 se ubicó en 10.16 dólares por barril, inferior en 6.30 dólares por barril con respecto al registrado en 1997, y en términos relativos la disminución fue equivalente a 38.3%. En diciembre de 1998, los precios de los crudos mexicanos registraron una de las mayores caídas con un precio promedio de 7.67 dólares por barril, la cotización más baja del año se registró el 10 de diciembre, cuando el precio de la mezcla del crudo de exportación cayó a 6.91 dólares por barril^(2P).

IMPACTO DE LA SITUACIÓN ECONÓMICA EN LA INDUSTRIA DEL PETRÓLEO

La disminución de los precios del crudo afectó los resultados financieros de las grandes empresas. La magnitud y la duración de esta situación aumentó y aceleró el cambio estructural de la industria. Las nuevas condiciones económicas y una mayor incertidumbre respecto al futuro promovieron los procesos de integración vertical y horizontal en la industria petrolera internacional con el fin de reducir costos y riesgos. Los países exportadores de petróleo adoptaron la tendencia a controlar la oferta ante una capacidad excedente y de esta forma evitaron que los precios cayeran aún más.

En el último año, en México y en otros países exportadores se trabajó en la búsqueda de soluciones a la crisis, el objetivo central de corto plazo que se persigue es la recuperación de los ingresos derivados del petróleo (los resultados financieros en 1998 de empresas como Petróleos Mexicanos, muestran esta prioridad).

Al igual que lo están haciendo otras empresas, Petróleos Mexicanos debe contener y reducir los costos y los gastos de operación. De no hacerlo pondría en riesgo su capacidad competitiva, además pondría en riesgo su futuro al asignar al gasto corriente una mayor proporción de los recursos escasos de que dispone, en lugar de destinarlos a la inversión productiva⁽¹⁶⁾.

TENDENCIA DE LA INDUSTRIA PETROLERA

Se está resolviendo el problema sobre la escala y estructura de la industria petrolera mundial con la tendencia a las megafusiones que se dieron en 1998 y que continuarán en el futuro. La dimensión que han alcanzado las nuevas empresas y los procesos implicados de integración vertical y horizontal están redefiniendo la industria. Estos procesos son un ejemplo para la industria petrolera mexicana en relación con su desarrollo posterior al año 2000.

En el caso de México, PEMEX-Refinación alentó la construcción de estaciones de servicio en todo el país, la remodelación integral de las existentes y la adopción de estándares exigentes de seguridad y de protección ambiental.

Una de las prioridades de PEMEX-Refinación se orientó a lograr mayor eficiencia operativa. Para ello se aumentó la disponibilidad y confiabilidad de las unidades de proceso y de servicios auxiliares en las refinerías. A pesar de ello, los resultados aún no son satisfactorios, es necesario ampliar los márgenes de refinación y mejorar la rentabilidad de este organismo. Además, deben modificarse las prácticas industriales y reducir costos, así como invertir en infraestructura, en la renovación y rehabilitación de equipos y en nuevas plantas de proceso.

En PEMEX-Refinación se estructuró un programa ambicioso de inversión en las refinerías y en su cadena logística. Estas inversiones buscan hacer frente al crecimiento y cambio de estructura de la demanda de productos petrolíferos.

La escala del programa es grande por la dimensión del mercado mexicano y sus perspectivas de expansión, así como por retrasos importantes en la inversión en este sector. Además, la entrada en vigor de nuevas normas ambientales obliga a modificar el patrón de la demanda de

los productos derivados del petróleo, principalmente combustibles. Como ejemplo, se modificará la metalurgia de las unidades de destilación y se construirán unidades de conversión profunda debido a la necesidad de procesar una mayor proporción de crudo Maya, también es necesario invertir en plantas que mejoren la calidad de las gasolinas y el diesel. En esto consiste el programa de reconfiguración de refinerías. Se optó por hacer estas inversiones en las actuales refinerías para aprovechar la infraestructura existente y el personal calificado que ahí labora para aumentar su rentabilidad y proteger de la obsolescencia a las más antiguas. El programa de inversión en las refinerías forma parte de la estrategia de inversión que favorece el aumento de la capacidad productiva de crudo pesado y el aprovechamiento del gas natural⁽¹⁴⁾.

Todo lo anterior, está enfocado a planear y explotar en forma cada vez más racional los recursos petroleros del país. El cálculo de las reservas totales del petróleo al primero de enero de 1999, ascendió a cerca de 47 mil millones de barriles y las de gas seco a más de 56 millones de millones de pies cúbicos⁽¹⁴⁾; esto proporciona elementos para integrar una perspectiva dinámica de largo plazo, que orienta la acción en el futuro.

IMPORTANCIA DE LA IMPLANTACIÓN DE SISTEMAS DE CONTROL Y OPTIMIZACIÓN

Es imperativo que, ahora los esfuerzos para “optimizar” las instalaciones de producción sean mayores, ha quedado claro que uno de los objetivos principales es lograr los máximos beneficios en la producción y, una vez en su punto óptimo, mantener bajo control estas condiciones. Sin embargo, el tipo de control no debe ser único; es decir, el sistema de control debe ser capaz de someterse a las condiciones cambiantes que pudieran presentarse debidas a las fluctuaciones que se manifiestan en el mercado y que afectan la configuración de la producción.

La jerarquía de la automatización industrial se ha modificado de manera permanente y continua durante la década pasada. Las técnicas de control avanzado han sido más ampliamente aplicadas como una tecnología clave en muchas plantas⁽⁴¹⁾.

Las herramientas de paquetes de software para el modelado de procesos, simulación y diseño de controladores han contribuido a aplicaciones de muchas técnicas de control.

Actualmente, se llevan a cabo investigaciones en sistemas de control y optimización avanzados y se han aplicado con éxito en equipos aislados monitoreando su desempeño, que ha sido muy satisfactorio. Sin embargo, es bien sabido que un proceso químico no puede tratarse como pequeñas identidades aisladas, así que el reto desde hace ya un buen tiempo es, lograr lo que se conoce como optimización a gran escala y mantener este proceso de “gran escala” en su punto óptimo a través del tiempo. No se espera que de una sola vez se logre la optimización de todo un complejo petroquímico o una planta de proceso en general, pero un buen comienzo es el estudio cuidadoso de la respuesta de cada una de las etapas de un proceso (separación, endulzamiento, *cracking*, etc.).

Desde el punto de vista de la forma de desarrollo del sistema total de producción los factores más importantes y que deben entenderse ampliamente son: el entendimiento apropiado del proceso a ser controlado, el mantenimiento del mayor tiempo de corrida de los sistemas de

control, el mejoramiento de las tecnologías relacionadas al sistema de control incluyendo hardware y software y más. La solución a los puntos anteriores se da con la tecnología reciente de simulación con modelos dinámicos rigurosos. Con la educación en nuevas tecnologías y el estudio de las necesidades de aplicaciones de control, se espera la evaluación positiva para la promoción de la tecnología de control⁽⁴⁾.

En el Grupo de Ingeniería en Sistemas Electrónicos, el área de Control Avanzado (que se encuentra en contacto con grupos nacionales dedicados al estudio de éstas y más técnicas), se ha iniciado el estudio de técnicas de control avanzado para aplicarlas a unidades de separación de hidrocarburos.

En las instalaciones petroleras de México, no se tiene conocimiento de técnicas de control avanzado aplicadas en sus instalaciones, sin embargo, es importante empezar a considerar el uso de técnicas de optimización a gran escala conjuntamente con el llamado control avanzado haciendo evaluaciones técnico-económicas de los resultados factibles.

Capítulo III

DESCRIPCIÓN DEL PROCESO DE SEPARACIÓN DE HIDROCARBUROS

Este capítulo, centra la atención en el proceso de separación gas-aceite del crudo (al cual será aplicado un proceso de optimización) proveniente del cabezal de pozo ya que es el proceso sobre el cual se basa el presente trabajo. Se da una breve descripción del proceso, se establece el criterio de optimización que se seleccionó para el trabajo, se presentan las ecuaciones que explican la termodinámica del proceso y así mismo se establece el procedimiento de cálculo para las variables más importantes, además se presenta un modelo dinámico de un separador de hidrocarburos. Por último, se da una breve descripción del equipo de separación más común.

MANEJO DE HIDROCARBUROS

ANTECEDENTES

El petróleo líquido, como se produce en la cabeza del pozo, generalmente está asociado con gas natural y contaminado con agua y sólidos en suspensión. Del crudo deben eliminarse la mayor parte de esas impurezas antes de enviarse al mercado o a los centros de refinación.

En la figura 3.1. se presenta un esquema general del proceso que se sigue para la obtención del producto deseado.

El gas natural se separa del petróleo crudo en las Baterías de Separación, para después aplicar a cada fase los procesos de tratamiento y acondicionamiento que se requieran para su distribución y venta.

Los yacimientos de hidrocarburos que aportan la mayor producción nacional de aceite crudo están localizadas en la zona de Campeche y en el área Mesozoica de Chiapas y Tabasco, asociados al crudo se obtienen altos volúmenes de gas que se caracteriza en general por ser amargo, húmedo y rico en licuable. La producción nacional se maneja a través de las regiones: Norte, Sur, Marina Noreste y Marina Suroeste⁽¹⁾.

Entre las principales especificaciones del petróleo crudo para su comercialización se encuentran: la densidad API, ya que en el mercado se prefieren los crudos ligeros (mayor densidad API) y la Presión de Vapor Reid (PVR), a fin de que el aceite no experimente pérdidas sustanciales por evaporación durante su almacenamiento.

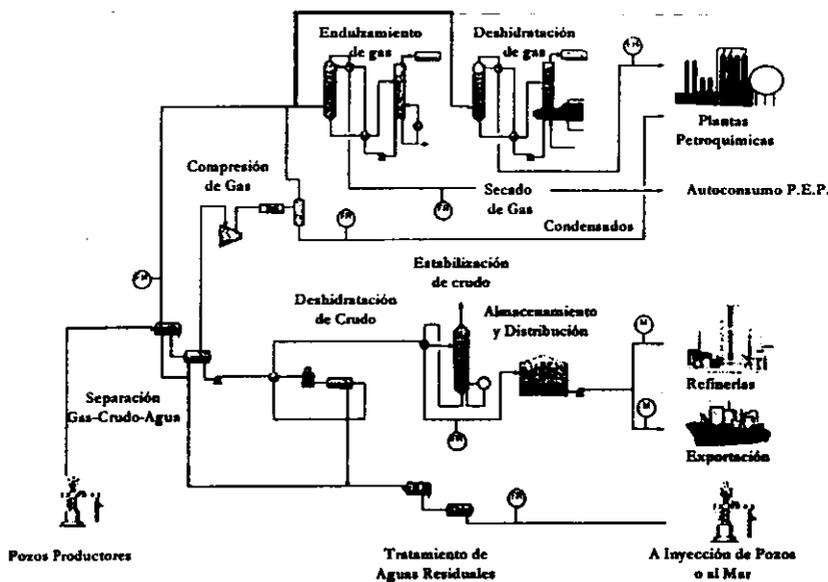


Figura 3.1. Esquema Típico de Operaciones de Producción, Tratamiento y Acondicionamiento de Gas y Crudo para su Transporte y Almacenamiento

PROCESO DE SEPARACIÓN DE HIDROCARBUROS

Es necesario separar del crudo la mayor parte de las fracciones ligeras antes de enviarse a tanques de almacenamiento atmosférico; de otra forma parte de éstas vaporizan en el tanque, lo que significa pérdidas del producto y daños al ambiente.

El proceso de remoción de hidrocarburos con alta presión de vapor (componentes ligeros) de la corriente de crudo se conoce como estabilización. Lo anterior garantiza el tener un crudo con las condiciones apropiadas para su transporte y almacenamiento, evitando con ello los riesgos y pérdidas mencionadas. Se considera un producto estable, aquel que no vaporiza a presión atmosférica de almacenamiento y temperatura ambiente.

La presión de vapor del crudo y el contenido de ácido sulfhídrico son los dos parámetros más importantes que están relacionados con la estabilidad del crudo.

El aceite que se produce en yacimientos petrolíferos es una mezcla de hidrocarburos formado por las siguientes fracciones:

- ◆ Fracción ligera: metano, etano, propano.
- ◆ Butano

- ◆ Fracciones más pesadas: pentano, hexano y más pesados.

La atención se centra en la separación gas-aceite. La separación gas-aceite es la primera operación que se lleva a cabo en las instalaciones de la industria petrolera y se lleva a cabo en equipos llamados simplemente separadores que, según sus características, pueden ser bifásicos o trifásicos según el número de fases involucradas; y verticales, horizontales o esféricos según su configuración física.

Al proceso que se lleva a cabo en la separación se le conoce como vaporización "flash" (o instantánea) que ocurre cuando una sustancia o mezcla de sustancias se lleva a una presión menor a la actual lo que hace que ocurra una vaporización parcial. En un separador la alimentación proveniente de la cabeza del pozo se lleva al equilibrio a la presión o temperatura del separador.

BATERÍAS DE SEPARACIÓN

La recuperación de hidrocarburos líquidos en la superficie puede incrementarse si se coloca un mayor número de etapas de separación en el proceso de producción; la mayoría de las veces se operan varios separadores en serie cuyas presiones van disminuyendo sucesivamente.

Generalmente, el número de etapas que se requieren para la mejor separación y mayor recuperación de aceite, depende de varios factores, por ejemplo, de la presión y flujo del cabezal de alimentación.

El diagrama que sirve de base para el presente estudio es el de la figura 3.2:

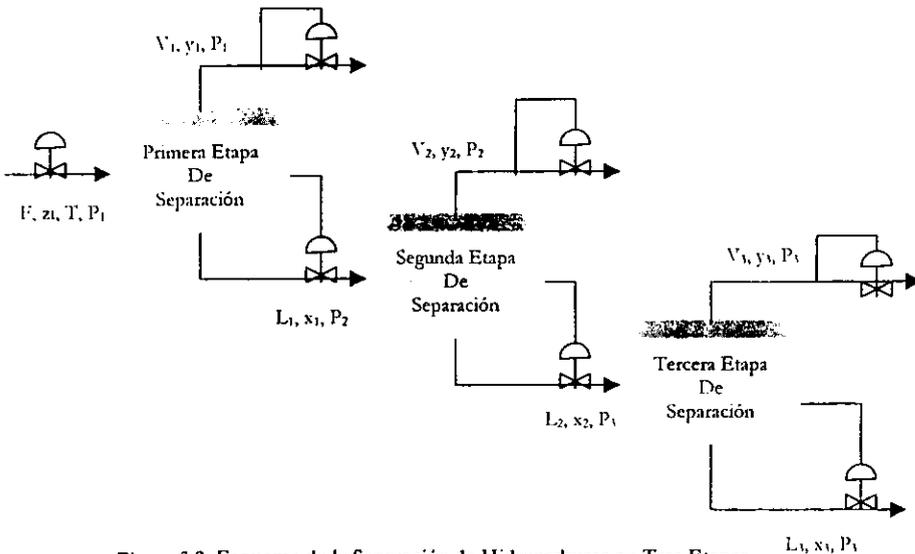


Figura 3.2. Esquema de la Separación de Hidrocarburos en Tres Etapas

En un sistema de este tipo, la última etapa de separación es por lo general, la etapa de almacenamiento por lo que el flujo de vapor en esta etapa debe ser prácticamente cero.

Se observa que se hace el cambio de presión a una menor a la anterior por medio de una válvula.

El cálculo de las variables del proceso es exactamente igual como si se tratara de una sola etapa de separación *flash* como se explica más adelante, con la diferencia de que los datos de alimentación para las dos últimas etapas se generan a partir de la información que resulta del cálculo de la primera.

Por ejemplo, para el primer separador, el flujo de entrada es F y su composición es z , para el segundo separador, el flujo de líquido que sale del primer separador se transforma en su alimentación al igual que la composición.

CRITERIOS DE OPTIMIZACIÓN

No siempre el objetivo fundamental es la separación eficiente de las fases líquida y gaseosa. En algunos casos puede ser más importante: incrementar el ritmo de la producción, reducir los costos por compresión, obtener mayor cantidad de aceite estabilizado, recuperar mayor cantidad de hidrocarburos líquidos, etc.

CONDICIONES DE SEPARACIÓN

Para establecer las condiciones de separación más apropiadas, de acuerdo con las características de los fluidos producidos, se deben considerar las siguientes variables de control:

- a) El tipo, el tamaño, y dispositivos internos del separador.
- b) El tiempo de residencia del aceite.
- c) Las etapas de separación.
- d) Las presiones y temperaturas de separación.
- e) El lugar de instalación de los separadores.

Existe una combinación de estas variables que permite obtener la separación requerida a un costo mínimo. La selección de las condiciones de separación depende de los objetivos de producción. Generalmente estos objetivos están orientados a la obtención de:

- a) Alta eficiencia en la separación del aceite y del gas.
- b) Mayores ritmos de producción.
- c) Mayor recuperación de hidrocarburos líquidos.
- d) Menores costos por compresión.
- e) Aceite y/o gas estabilizados.

En la presente tesis sólo se tomó en cuenta el punto c). Como los hidrocarburos producidos de mayor valor comercial son los líquidos, por lo general, la eficiencia del proceso de separación

se relaciona con la cantidad de hidrocarburos licuables que contiene la fase gaseosa que sale de los separadores. El diseño de un sistema de separación gas-aceite depende principalmente de la presión de vapor máxima que se fije en las bases de diseño así como de la composición de los fluidos producidos.

Los grados API son la variable para establecer el criterio, debido a su comportamiento frente a la presión⁴, resulta que es posible modificar la presión, en este caso, de la segunda etapa de separación (la presión de la primera etapa depende de la presión del cabezal del pozo y la de la tercera es la presión atmosférica) para que se logre la máxima recuperación de aceite. De esta manera, entre mayor es la cantidad de grados API contenidos en el aceite, se tiene una densidad relativa menor (ver definición de grados API más adelante en este capítulo) y por lo tanto un hidrocarburo más ligero.

Observando la gráfica de la figura 3.3., se tiene que al valor óptimo de presión con respecto a los grados API, también corresponde un valor óptimo en cuanto al factor volumen y en cuanto a la relación gas-aceite (ver definiciones más adelante). Por lo tanto, se consideró suficiente tomar en cuenta sólo los grados API:

Como factor importante, es necesario establecer en términos matemáticos la curva descrita en la figura 3.3., es decir, la presión es la variable independiente y los grados API son la variable dependiente, la relación entre ambas variables es descrita por una función cuadrática unimodal y continua en el rango de presiones establecido. Esta definición es útil para establecer el procedimiento de optimización que el sistema requiere.

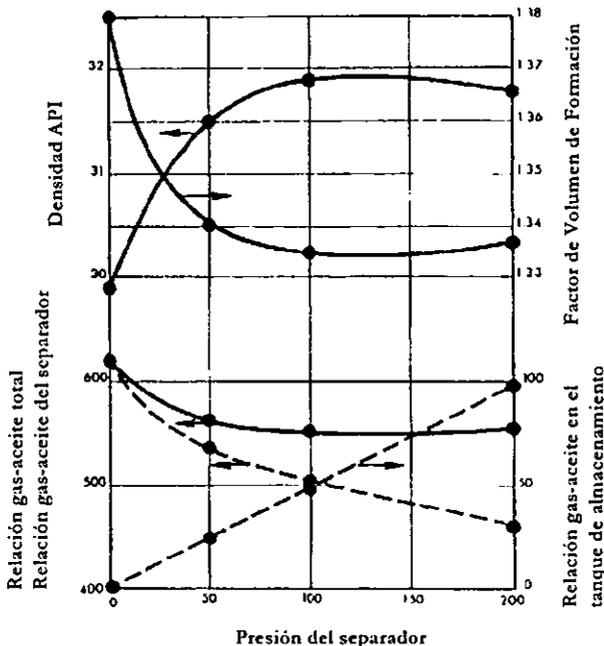


Figura 3.3. Comportamiento de densidad API, factor de volumen de formación y de la relación gas-aceite

EQUILIBRIO LÍQUIDO – VAPOR

El cálculo de las propiedades de los fluidos y el equilibrio de fases es una herramienta general e importante en la ingeniería química. Las instalaciones superficiales de producción de hidrocarburos manejan en sus primeras etapas un flujo formado por una mezcla de diferentes componentes de hidrógeno y carbono que se encuentran tanto en fase líquida como en fase vapor. Cada uno de los componentes posee diferentes propiedades (densidad, presión de vapor, capacidades caloríficas, etc).

El equilibrio es una condición estática en la cual no ocurren cambios con respecto al tiempo en las propiedades macroscópicas de un sistema. El equilibrio vapor-líquido (EVL) se refiere a los sistemas en los cuales una sola fase líquida está en equilibrio con su vapor. El EVL se aplica al cálculo de evaporación *flash*. El nombre se originó por el hecho de que un líquido, a una presión igual o mayor que su presión en el punto de burbuja “se evapora instantáneamente” o se evapora parcialmente cuando la presión se reduce por debajo de la presión del punto de burbuja, produciendo un sistema de dos fases, una de vapor y una de líquido en “equilibrio”.

CONCEPTOS BÁSICOS^(12, 38)

La condición necesaria para que exista el equilibrio entre n fases es que los potenciales químicos de cada uno de los componentes en cada fase sean iguales, es decir:

$$\mu_i^{(1)} = \mu_i^{(2)} = \mu_i^{(3)} = \dots = \mu_i^{(n)} \quad \text{fases: (1), (2), (3) ... (n) para el componente } i$$

El potencial químico se define como:

$$\mu_i = \left(\frac{\delta G}{\delta n_i} \right)_{P, T, n_j}$$

donde G es la energía de Gibbs, n_i es el componente i -ésimo, P es la presión, T es la temperatura y n_j es el componente j -ésimo. El potencial químico no se puede expresar como una magnitud absoluta además los valores numéricos del potencial químico son difíciles de relacionar con otras magnitudes. El potencial químico tiende a un valor infinito negativo cuando la presión se aproxima a cero. Por ello, el μ_i no es útil directamente para los cálculos de equilibrio entre fases, y se emplea la fugacidad, una magnitud derivada.

La fugacidad (f_i) se puede considerar como una pseudo presión; es una medida de la tendencia del componente i en una mezcla a escapar de su fase respectiva. Las fugacidades de un componente en todas las fases son iguales en el equilibrio y, para un gas ideal puro; la fugacidad es igual a la presión. La fugacidad se define como:

$$f_i = C\{T\} \exp\left(\frac{\mu_i}{RT}\right)$$

Debido a la estrecha relación entre fugacidad y presión, es conveniente definir su cociente para una sustancia pura como:

$$v_i^0 = \frac{f_i^0}{P}$$

Donde v_i^0 es el coeficiente de fugacidad de la especie pura y f_i^0 es la fugacidad de la especie pura ya sea líquida (L), o vapor (v). Este mismo concepto de fugacidad fue ampliado para la definición de solución ideal

$$f_n = y_i f_n^0$$

$$f_{il} = x_i f_{il}^0$$

Para representar las desviaciones de ambos tipos de idealidad es conveniente definir los siguientes coeficientes de fugacidad para una mezcla:

$$\phi_v = \frac{f_v}{y_i P}$$

$$\phi_{il} = \frac{f_{il}}{x_i P}$$

Los valores de estos coeficientes han sido calculados rigurosamente usando ecuaciones de estado (Ver ecuación de Peng – Robinson más adelante).

RELACIONES DE EQUILIBRIO ENTRE FASES

Una relación de equilibrio es la relación entre las fracciones molares de una especie en dos fases que se encuentran en equilibrio. Para el caso de vapor líquido, la relación de equilibrio se le denomina K o relación de equilibrio vapor-líquido, que para el caso ideal se representa como:

$$K_i = \frac{y_i}{x_i}$$

Para formar una relación de equilibrio se sustituyen las fugacidades por las expresiones equivalentes en función de las fracciones molares:

$$f_v = \phi_v y_i P$$

$$f_{il} = \phi_{il} x_i P$$

Para el equilibrio líquido-vapor $f_v = f_{il}$; por lo tanto la expresión equivalente de la relación de equilibrio para una mezcla real queda como sigue:

$$K_i = \frac{\phi_{iL}}{\phi_{iV}}$$

Para los cálculos de etapas de equilibrio que intervienen en la separación de dos o más componentes, se definen factores de separación formando cocientes de relación de equilibrio. Para el caso de vapor líquido, se define la volatilidad relativa como

$$\alpha_j = K_j / K_f$$

ECUACIONES DE ESTADO

Las ecuaciones de estado en la termodinámica clásica proporcionan un medio de obtener el conocimiento de entalpías y densidades además de relaciones de equilibrio entre fases a partir de relaciones Presión-Volumen-Temperatura (PVT). Se pueden aplicar a mezclas utilizando reglas de mezclado para combinar constantes de las especies puras.

La forma más simple de una ecuación de estado es la ecuación de los gases reales que agrega a la ecuación de los gases ideales el factor de compresibilidad de un fluido:

$$Z_m = \frac{PV_m}{RT}$$

Donde m representa a una fase, líquida o vapor, la P es la presión del sistema, V es el volumen molar, R es la constante universal de los gases y T la temperatura absoluta del sistema. El factor de compresibilidad Z representa la desviación de la idealidad.

Las ecuaciones de estado cúbicas han demostrado ser las más prácticas para cálculos de ELV; a temperaturas debajo de las críticas, se obtienen tres raíces reales usando una expresión equivalente de la ecuación en función del factor de compresibilidad, correspondiendo el valor mayor de Z a una fase de vapor, y el menor valor de Z a una fase líquida.

Las constantes críticas T_c y P_c son por si solas insuficientes para generalizar el comportamiento termodinámico. Dicha generalización mejora incorporando a la ecuación una tercera constante que representa las diferencias genéricas de las curvas de presión de vapor reducidas. El factor acéntrico introducido por Pitzer es la constante agregada, toma en cuenta las diferencias de forma molecular, siendo cero para las moléculas de simetría esférica.

Para mezclas multicomponentes hay que aplicar procedimientos analíticos de cálculo, representando las propiedades termodinámicas preferentemente mediante ecuaciones algebraicas. Puesto que las propiedades de la mezcla dependen de la temperatura, presión y composición de las fases, tales ecuaciones tienden a ser complicadas. Es importante disponer de correlaciones exactas de propiedades termodinámicas con el fin de diseñar el equipo para que opere a condiciones económicas.

PUNTO DE BURBUJA Y PUNTO DE ROCÍO

Se le llama punto de burbuja a las condiciones de presión y temperatura cuando se presenta la primer burbuja de vapor de una sustancia o mezcla en estado líquido. El punto de rocío es cuando se forma la primer gota de líquido de una sustancia o mezcla en estado vapor a ciertas condiciones de temperatura y presión. Se dice que un vapor está saturado cuando se encuentra en su punto de rocío y está sobrecalentado si se encuentra por arriba de éste. Un líquido está saturado cuando se encuentra en su punto de burbuja, si está por debajo de éste, el líquido está subenfriado. El criterio del punto de burbuja y del punto de rocío es útil para saber si una mezcla se encuentra en su región de dos fases. En la figura 3.4 se presenta el diagrama de equilibrio de fases típico para una mezcla de hidrocarburos.

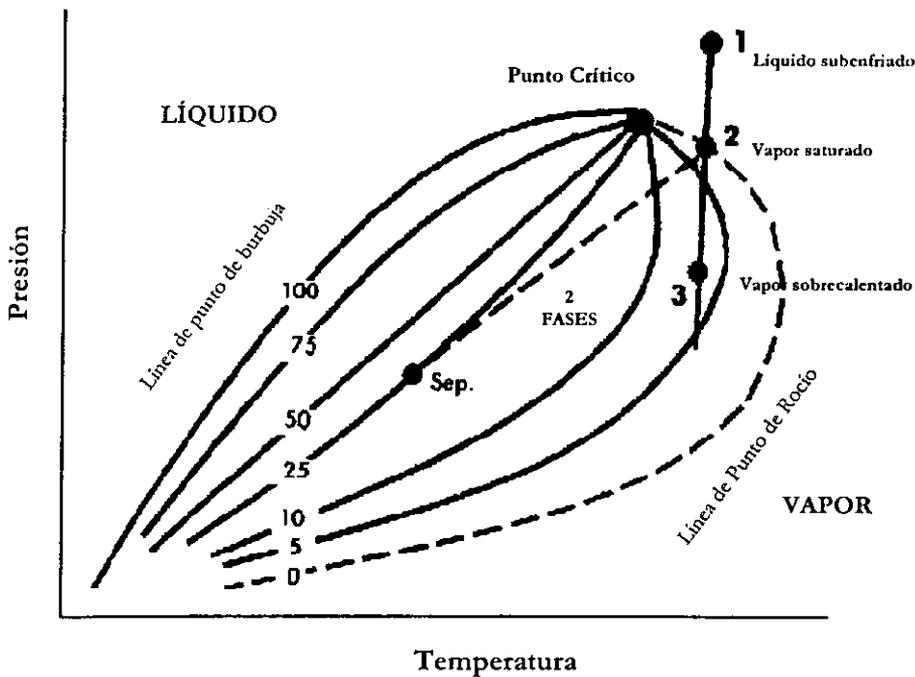


Figura 3.4. Diagrama de Fases para una Mezcla de Hidrocarburos

Criterio del punto de burbuja:

$$f(0) = \sum_{i=1}^N z_i K_i - 1$$

Si $f(0) < 0$, la mezcla está por debajo de su punto de burbuja (líquido subenfriado)

Si $f(0) = 0$, la mezcla está en su punto de burbuja (líquido saturado)

Criterio del punto de rocío:

$$f(1) = 1 - \sum_{i=1}^{N_c} \frac{z_i}{K_i}$$

Si $f(1) > 0$, la mezcla está por encima de su punto de rocío (vapor sobrecalentado)

Si $f(1) = 1$, la mezcla está en su punto de rocío (vapor saturado)

Por último, si $f(0) > 0$ y $f(1) < 0$ entonces la mezcla se halla en la región de dos fases y es posible llevar a cabo un proceso de separación flash.

La función f se deriva del análisis de balance de materia de un sistema y se presenta más adelante como la función $F(\varphi)$.

PROPIEDADES DE LOS FLUIDOS

Densidad

La densidad de los hidrocarburos es medida de dos maneras:

1. Densidad relativa
2. Densidad API

Densidad Relativa de un líquido

La densidad relativa (γ) es una medida del peso del líquido comparada con la del agua. La densidad del crudo es por lo general de 0.85. Su peso es sólo el 85% del peso de agua.

$$\gamma = \frac{\rho}{\rho_{H_2O}}$$

Donde ρ es la densidad del petróleo y ρ_{H_2O} es la densidad del agua. La densidad (ρ) se puede calcular mediante la siguiente ecuación, se requieren las densidades de los componentes puros (incluyendo la de la fracción pesada) y la masa molecular de la mezcla:

$$\rho_0 = \frac{\sum_{i=1}^{N_c} x_i \rho_i MW_i}{\sum_{i=1}^{N_c} x_i MW_i}$$

Donde ρ_i es la densidad del componente i puro a condiciones estándar y MW_i es el peso molecular del componente i .

Densidad API

La densidad API es una medida de la densidad del crudo y de sus productos líquidos a 15°C (60°F).

Una densidad relativa baja significa que se tienen un líquido ligero. La densidad API es al contrario, a una densidad API baja, el líquido es pesado, y a una alta densidad API, el líquido es ligero.

La densidad API está relacionada con la densidad relativa por medio de la siguiente ecuación:

$$^{\circ}API = \frac{141.5}{\gamma} - 131.5$$

Presión de Vapor Reid (PVR)

Es una manera de evaluar la estabilización del petróleo crudo. La PVR de un crudo es un indicador de la tendencia del crudo para desprenderse de los hidrocarburos gaseosos. La cantidad de componentes ligeros en el crudo depende de la presión del cabezal del pozo y de la relación gas-aceite de la corriente del mismo. Las unidades para indicar la PVR son psia.

La prueba de la PVR da una aproximación de la presión de vapor de un líquido del petróleo a una temperatura de 38°C (100°F).

Relación Gas-Aceite

Es la relación que existe entre el volumen del gas y el volumen del aceite en una mezcla de hidrocarburos a condiciones estándar. Se expresa en m³ gas/m³ aceite.

Densidad Relativa de un Gas

El peso de un gas es medido comparando su peso con el del aire. La densidad relativa del aire es, por lo tanto, 1.0. El gas natural tiene una densidad relativa de 0.6 a 0.65. Todos los hidrocarburos gaseosos, excepto el metano, son más pesados que el aire. Sus densidades relativas son mayores de 1.0. La densidad relativa también es un factor en la determinación de riesgos de fugas de vapores de hidrocarburos, si la densidad relativa del vapor es mayor a 1.0, el vapor es más pesado que el aire, por lo tanto permanecerá en la superficie.

Humedad

Es la cantidad de agua en fase vapor presente en el aire de la atmósfera o en otros gases de la industria.

La cantidad de agua que el gas contiene depende de su presión y temperatura. El agua se remueve del gas para prevenir la condensación en tuberías y evitar altos consumos de combustible en los equipos.

La forma de expresar la humedad es mediante el punto de rocío.

Caracterización de la Fracción Pesada (C_7+)

La fracción pesada está compuesta por todos los componentes de la mezcla que contienen más de 7 carbonos y es de suma importancia que se conozcan sus propiedades. Se han desarrollado diversas correlaciones, tales como la de Kesler-Lee, Riazi-Daubert, Rowe, Edmister, etc⁽³⁵⁾. La mayoría de estas correlaciones requieren la gravedad específica y el punto de burbuja como parámetros de correlación. La selección de estos parámetros es muy importante ya que una pequeña diferencia provoca grandes variaciones en los resultados.

La correlación que se usó en este trabajo fue la correlación de Rowe. Inicialmente se supone que la fracción C_7+ se comporta como una parafina normal de hidrocarburo. Se usa el número de átomos de carbono " n_m " como parámetro único de la correlación y con las siguientes fórmulas se tienen las propiedades críticas y la temperatura de ebullición normal:

$$T_c(C_7+) = 1.8(961 - 10^a)$$

$$P_c(C_7+) = \frac{10^{5+Y}}{T_c(C_7+)}$$

$$T_b(C_7+) = 0.0004347T_c(C_7+)^2 + 265$$

Donde:

$T_c(C_7+)$	Temperatura crítica del C_7+ (R)
$P_c(C_7+)$	Presión crítica del C_7+ , (lb/in ² abs)
$T_b(C_7+)$	Temperatura de burbujeo del C_7+ , (R)

a y Y son parámetros de la ecuación, calculados con:

$$a = 2.95597 - 0.090597n_m^{2/3}$$

$$Y = -0.0137726826n_m + 0.6801481651$$

" n_m " es el número de átomos de carbono, calculado con:

$$n_m = \frac{MW(C_7+) - 2}{14}$$

$MW(C_7+)$ es la masa molecular de la fracción C_7+

Para calcular el factor acéntrico, se usó la ecuación desarrollada por Edmister:

$$\omega(C_7+) = \frac{3 \log[P_c(C_7+) / 14.70]}{7 \frac{T_i}{T_b}} - 1$$

TEORÍA DEL PROCESO DE SEPARACIÓN

Los fluidos que se manejan en la industria del petróleo son altamente no ideales. En un estudio comparativo⁽¹⁾ se encontró que para predicciones de propiedades para el equilibrio líquido-vapor en fluidos petroleros, las ecuaciones de estado de Peng Robinson (PR), Patel-Teja (PT) y Schmidt-Wenzel (SW) se comportan mejor, sin embargo la ecuación de Peng-Robinson es la más usada.

La ecuación de Peng-Robinson⁽²⁷⁾ es función de las propiedades críticas y del factor acéntrico:

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^2 + ubV + wb^2}$$

Donde:

$$u = 2$$

$$w = -1$$

$$a = \frac{0.45724R^2T_c^2}{P_c} \left[1 + f_\omega(1 - T_r^{1/2}) \right]^2$$

$$b = \frac{0.07780RT_c}{P_c}$$

$$f_\omega = 0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2$$

y ω es el factor acéntrico.

Con esta expresión se pueden derivar otras para el cálculo de las propiedades que se requieran y ayuden a caracterizar el sistema. Las ecuaciones que resultan son aplicables tanto a fases líquida y vapor usando la composición de la fase y el factor de compresibilidad adecuados.

La forma equivalente en función del factor de compresibilidad, para la ecuación de PR es como sigue:

$$Z^3 - (1 - B^*)Z^2 + (A^* - 3B^{*2} - 2B^*)Z - A^*B^* + B^{*2} + B^{*3} = 0$$

Donde:

$$A^* = \frac{aP}{R^2T^2}$$

$$B^* = \frac{bP}{RT}$$

La raíz más grande del polinomio es el factor de compresibilidad del vapor y la raíz más pequeña es el factor de compresibilidad del líquido y se utilizan para evaluar los coeficientes de

fugacidad, para evaluar las fugacidades de las fases y poder calcular las relaciones de equilibrio para los componentes de una mezcla.

Para encontrar valores de los coeficientes de fugacidad, se tienen las siguientes ecuaciones basadas en la ecuación de PR:

$$\ln(\phi_{i,m}) = \frac{b_i}{b_m}(Z_m - 1) - \ln(Z_m - B_m) + \frac{A_m}{B_m \sqrt{8}} \ln \left[\frac{2Z_m + (2 + \sqrt{8})B_m}{2Z_m + (2 - \sqrt{8})B_m} \right] \left(\frac{b_i}{b_m} - \frac{2}{a_m} \sum_{k=1}^N x_{k,m} a_{i,k} \right)$$

donde m se refiere al estado de la mezcla, ya sea líquido (L) o vapor (V). a_i y b_i son los parámetros de la ecuación de estado de Peng-Robinson, a_m y b_m son los parámetros de mezclado que se definen como:

$$a_m = \sum_{i=1}^{N_i} \sum_{j=1}^{N_j} x_{i,m} x_{j,m} a_{i,j}$$

$$b_m = \sum_{i=1}^N x_{i,m} b_i$$

y

$$a_{i,j} = (1 - k_{i,j}) \sqrt{(a_i \alpha_i)(a_j \alpha_j)}$$

$$\alpha = \left[1 + (0.37464 + 1.54226\omega - 0.15613\omega^2)(1 - \sqrt{T_r}) \right]^2$$

T_r es la temperatura reducida ($T_r = T_c/T$), y k_{ij} representa el parámetro de interacción binaria que es específico para cada par de componentes i y j en una mezcla, se asume que es independiente de la composición de la mezcla, de la presión y temperatura de la mezcla y se determina a partir de datos experimentales. Los parámetros A_m y B_m se definieron anteriormente.

CÁLCULO DE FLASH ISOTÉRMICO

Considerando inicialmente un sistema de separación de una sola etapa como la figura 3.5:

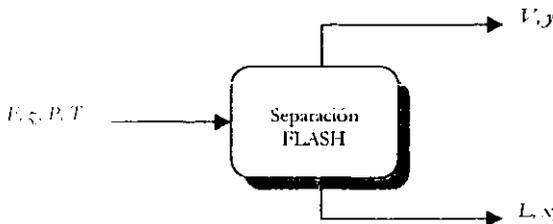


Figura 3.5. Esquema del proceso de separación flash de una etapa

Se parte de que la temperatura T y presión P de equilibrio de una mezcla multicomponente están especificadas además del flujo F , y la composición de cada componente i , z_i . El problema es encontrar el flujo y la composición de cada componente en las mezclas de salida del proceso tanto de la fase vapor (V, y), como de la fase líquida (L, x).

El balance de materia general es:

$$F = L + V$$

El balance de materia para cada componente i es:

$$Fz_i = Vy_i + Lx_i$$

El procedimiento de cálculo no es directo debido a que la ecuación de balance de materia por componente es no lineal para V, L, y_i y x_i . El procedimiento que se describe está basado en el que se encuentre en el artículo publicado por Guehria et al.⁽¹¹⁾

Dividiendo ambas ecuaciones de balance entre F , y poniendo el balance por componente en función del flujo de vapor:

$$z_i = \left(1 - \frac{V}{F}\right)x_i + y_i \frac{V}{F}$$

$$z_i = \varphi y_i + (1 - \varphi)x_i$$

Donde φ se define como la fracción de vaporización y $\varphi = V/F$.

El proceso tiene restricciones impuestas por las fracciones mol implicadas, es decir:

$$\sum_{i=1}^{N_i} z_i = 1$$

$$\sum_{i=1}^{N_i} x_i = 1$$

$$\sum_{i=1}^{N_i} y_i = 1$$

Donde N_i es el número de componentes. Las últimas dos ecuaciones no pueden ser usadas simultáneamente, pues dada una se define la segunda combinando las ecuaciones de balance.

Sabiendo que $K_i = \frac{y_i}{x_i}$ se obtiene las expresiones para las fracciones de las fases líquida y vapor:

$$x_i = \frac{z_i}{1 + \varphi(K_i - 1)}, \quad 1 \leq i \leq N_c$$

$$y_i = \frac{K_i z_i}{1 + \varphi(K_i - 1)}, \quad 1 \leq i \leq N_c$$

El valor inicial de K_i puede calcularse con la correlación de Wilson como sigue:

$$K_i = \frac{P_{i,i} \exp \left[5.37(1 + \omega_i) \left(1 - \frac{T_{c,i}}{T} \right) \right]}{P}$$

subsecuentemente, tomando en cuenta que el criterio de equilibrio termodinámico se puede escribir como $f_{i,L} = f_{i,V}$, ($1 \leq i \leq N_c$), es decir $F_i = \frac{f_{i,L}}{f_{i,V}} = 1$, la relación de equilibrio puede calcularse como:

$$K_i = \frac{\left(\frac{f_{i,L}}{x_i P} \right)}{\left(\frac{f_{i,V}}{y_i P} \right)} = F_i \frac{y_i}{x_i}$$

y $f_{i,L}$ y $f_{i,V}$ se pueden calcular a partir de las ecuaciones que se presentaron anteriormente.

El paso principal en el cálculo, es la solución de la siguiente función para φ :

$$\Gamma(\varphi) = \sum_{i=1}^{N_c} y_i - \sum_{i=1}^{N_c} x_i = \sum_{i=1}^{N_c} \frac{z_i (K_i - 1)}{1 + \varphi(K_i - 1)} = 0$$

Primero se hace una evaluación de la zona en la que se encuentra la mezcla, es decir si está en la zona de fase líquida, en la de vapor o en la de ambas fases. Se calcula Γ para $\varphi=0$ y para $\varphi=1$ resultando los siguientes casos:

Si $\Gamma(0) > 0$ y $\Gamma(1) < 0$, se tienen dos fases y se procede al cálculo para conocer φ .

Si $\Gamma(0) < 0$, entonces $\varphi=0$. La mezcla está por debajo de su punto de burbuja (fase líquida).

Si $\Gamma(0)=0$, la mezcla está en su punto de burbuja.

Si $\Gamma(1) > 0$, entonces $\varphi=1$. La mezcla está por arriba de su punto de rocío (fase vapor).

Si $\Gamma(1)=0$, la mezcla está en su punto de rocío.

Esta ecuación puede resolverse por tanteo probando valores de φ comprendidos entre 0 y 1 hasta que $\Gamma(\varphi)=0$. Sin embargo, los métodos más ampliamente utilizados se basan en el método de Newton. Se calcula un valor de predicción de la raíz φ para la iteración $k+1$ a partir de:

$$\varphi^{k+1} = \varphi^k - \frac{\Gamma(\varphi^k)}{\Gamma'(\varphi^k)}$$

donde la derivada es:

$$\Gamma'(\varphi^k) = \sum_{i=1}^{N_c} \frac{z_i (1 - K_i)^2}{[1 + \varphi^k (K_i - 1)]^2}$$

La iteración se puede iniciar suponiendo $\varphi^0=0.5$. Los valores de φ^{k+1} estarán restringidos a valores entre 0 y 1.

El procedimiento de cálculo se puede resumir, por lo tanto en :

- 1) Cálculo inicial de K con la correlación de Wilson
- 2) Calcular el valor de φ .
- 3) Calcular los valores de x_s, y_s .
- 4) Verificar si $\Gamma(\varphi)=0$
- 5) Si no se cumple, evaluar nuevos valores de K con los coeficientes de fugacidad.
- 6) Si se cumple calcular:

$$V = F\varphi$$

$$x_i = \frac{z_i}{1 + \varphi(k_i - 1)}$$

$$y_i = x_i k_i$$

$$L = F - V$$

Y de esta manera quedan definidas las variables de interés para el cálculo flash isotérmico. Como se explicó anteriormente, el cálculo es el mismo en el caso de una batería de separación asignando los valores correctos a las variables correspondientes.

MODELO DINÁMICO DE UN SEPARADOR BIFÁSICO⁽²⁰⁾

En el área de Control Avanzado del GISE en el IMP, se desarrolló el modelo dinámico de un separador bifásico para aplicaciones de control avanzado. En el capítulo IV, se descubre la importancia de este modelo y de la expresión del separador en ecuaciones de estado.

El modelo dinámico del separador, describe un proceso no lineal que tiene tres variables manipuladas (variables de control), el gasto de vapor que se desaloja, F_1 ; el gasto de líquido

que se desaloja, F_{Lj} y el gasto de alimentación, F_p . Las salidas del proceso (variables controladas) son el nivel de aceite del separador h , y la presión del vapor, P . La presión de la fase gaseosa y el nivel del aceite del separador se consideran disponibles para medición y si no se controla F_p se puede considerar que el sistema es perturbado por cambios en el flujo de alimentación.

El modelo dinámico riguroso del proceso de separación requiere del empleo de las ecuaciones fundamentales de transporte, cantidad de movimiento, energía y materia. El modelo matemático que se usó para la simulación se derivó a partir de las ecuaciones de balance de masa y energía, no se toman en consideración efectos de difusión, cambios en cantidad de movimiento, ni variación en la eficiencia de separación por características de los internos del separador.

Por lo tanto, se tiene que para un separador bifásico horizontal las ecuaciones dinámicas son las siguientes:

Del balance másico:

$$\frac{dh}{dt} = \frac{1}{\rho_L A_T(h)} (LF_f - F_L) - \frac{V_L(h)}{\rho_L A_T(h)} \frac{d\rho_L}{dt}$$

y

$$\frac{d\rho_L}{dt} = \frac{M_L}{Z_L RT} \frac{dP}{dt} + \frac{P}{Z_L RT} \frac{dM_L}{dt} - \frac{PM_L}{Z_L RT^2} \frac{dT}{dt}$$

Definiendo los términos restantes:

$$\frac{dM_L}{dt} = \sum_{i=1}^n M_i \frac{dx_i}{dt}$$

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{LF_f}{\rho_L V_L(h)} (z_i - x_i)$$

$$k_1 \frac{dT}{dt} = Cp_f F_f T_f - (Cp_v F_v + Cp_L F_L) T + UA_s (T_{cs} - T) - (\rho_L Cp_L - \rho_G Cp_G) TA_T(h) \frac{dh}{dt}$$

$$k_1 = \rho_L Cp_L V_L(h) + \rho_G Cp_G V_G(h)$$

$$\frac{dP}{dt} = \frac{Z_G TR}{M_G V_G(h)} (VF_f - F_v) - \frac{P}{M_G} \frac{dM_G}{dt} + \frac{PA_T(h)}{V_G(h)} \frac{dh}{dt} + \frac{P}{T} \frac{dT}{dt}$$

$$\frac{dM_G}{dt} = \sum_{i=1}^n M_i K_i \frac{dx_i}{dt}$$

Donde:

h es la altura del nivel del líquido en el separador

$A_T(h)$ es el área de la interfaz líquido-vapor

- ρ_l es la densidad de la fase líquida
 l es el flujo de la fase líquida
 $V_l(h)$ es el volumen ocupado por la fase líquida
 $V_v(h)$ es el volumen ocupado por la fase vapor
 M_l es la masa de la fase líquida
 M_v es la masa de la fase vapor

LINEALIZACIÓN DEL MODELO

El modelo considera como estados del proceso: P , T , $\rho_{1,i}$, x_i ($i=1, \dots, n$) y h . En la práctica la variación de la temperatura y la densidad es muy pequeña, por lo que para propósitos de control puede considerarse constante, es decir, solo se cuenta con tres estados (P , x_i y h). La linealización se hace con el fin de poder aplicar técnicas de control lineal. El modelo linealizado queda de la forma:

$$\begin{aligned}\dot{X} &= AX + BU \\ Y &= CX\end{aligned}$$

X representa el vector de los estados del sistema: $X=(x_1, x_2, \dots, h, P)^T$

U representa el vector de las entradas del sistema: $U=(F_p, F_1, F_2)^T$

Y representa el vector de las salidas del sistema: $Y=(P, h)^T$

A , B , C , son matrices de constantes propias de cada sistema y se definen a continuación:

$$A = \begin{pmatrix} a_1^1 & \dots & 0 & a_1^{n+1} & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & a_n^n & a_n^{n+1} & 0 \\ 0 & \dots & 0 & a_{n+1}^{n+1} & 0 \\ a_{n+2}^1 & \dots & a_{n+2}^n & a_{n+2}^{n+1} & a_{n+2}^{n+2} \end{pmatrix}$$

Y los elementos están dados por:

$$a_i^i = -\frac{LF_i}{\rho_l V_l(h)}$$

$$a_i^{n+1} = \frac{LF_i (x_i - z_i) A_T(h)}{\rho_l [V_l(h)]^2}, \quad i=1, 2, \dots, n$$

$$a_{n+1}^{n+1} = \frac{(h-r)(LF_l - F_l)}{2\rho_l l^2 (2hr - h^2)^2}$$

$$a_{n+2} = \frac{Z_G TR M_i K_i (F_V - VF_i)}{V_G(h) M_G^2} + \frac{PL F_i M_i K_i}{\rho_L V_L(h) M_G} \left[1 + \frac{1}{M_G} \sum_{j=1}^n M_j K_j (z_j - x_j) \right], \text{ siempre que } 0 < i \leq n$$

$$a_{n+1} = \frac{A_T(h) Z_G TR}{V_G^2(h) M_G} (F_V - VF_i) + \frac{A_T(h) P}{V_G^2(h) \rho_L} (F_L - LF_i)$$

$$a_{n+2} = \frac{A_T(h) LF_i - F_L}{V_G(h) \rho_L A_T(h)} - \frac{LF_j}{M_G \rho_L V_L(h)} \sum_{i=1}^n M_i K_i (z_i - x_i)$$

La matriz B queda definida como:

$$B = \begin{bmatrix} b^1 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ b_n^1 & 0 & 0 \\ b_{n+1}^1 & b_{n+2}^2 & 0 \\ b_{n+2}^1 & b_{n+2}^2 & b_{n+2}^3 \end{bmatrix}$$

Donde:

$$b_i^1 = \frac{(z_i - x_i)L}{\rho_L V_L(h)}, i=1, 2, \dots, n$$

$$b_{n+1}^1 = \frac{L}{\rho_L A_T(h)}$$

$$b_{n+1}^2 = \frac{-1}{\rho_L A_T(h)}$$

$$b_{n+2}^1 = \frac{1}{V_G(h)} \left(\frac{Z_G TR V}{M_G} + \frac{PL}{\rho_L} \right)$$

$$b_{n+2}^2 = \frac{-P}{\rho_L V_G(h)}$$

$$b_{n+2}^3 = -\frac{Z_G TR}{M_G V_G(h)}$$

Finalmente, la matriz C está dada por:

$$C = \begin{bmatrix} 0 & \dots & 0 & 0 & 1 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

EQUIPO DE SEPARACIÓN

Por último, se da una breve descripción del equipo usado para la primer etapa de separación de los hidrocarburos^{17,18}.

Los separadores son dispositivos para eliminar y coleccionar los líquidos del gas natural, son piezas fundamentales en el procesamiento de gas y petróleo crudo; se usan para separar un flujo combinado de líquido y de gas quedando relativamente libres el uno del otro.

Existen diferentes tipos de equipos de separación, el separador apropiado se selecciona con base a diferentes factores como son: la presión y temperatura de operación, relación de flujos gas-aceite, localización del equipo, y otros, destacándose que de una selección acertada depende que se alcance la eficiencia esperada.

En la actualidad existe una gran variedad de internos que ayudan a aumentar grandemente la eficiencia de separación por lo que al equipo que los contiene se le denomina "separador de alta eficiencia".

Los separadores se clasifican como bifásicos, si separan el gas de la corriente total de líquido y trifásicos si además de la corriente total se separa el agua.

Los separadores son fabricados en tres formas básicas: horizontales, verticales y esféricos. Cada uno tiene ventajas y desventajas y su selección depende de que tan bien se alcancen los objetivos deseados al menor costo.

Separador Vertical

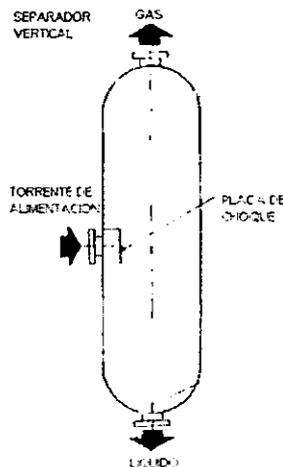


Figura 3.6. Esquema de un Separador Vertical

Ventajas:

- ◆ Maneja mayor cantidad de lodos y arena sin arrastre ni taponamiento.
- ◆ Mayor capacidad para manejo de baches de líquido que la especificada por el fabricante.
- ◆ El control del nivel del líquido no es crítico, puesto que se puede emplear un flotador vertical, logrando que el control de nivel sea más sensible a los cambios.
- ◆ Fácil de limpiar.

Desventajas:

- ◆ Su transporte es complicado cuando se encuentra montado en un patín.
- ◆ Se necesita un diámetro mayor que el de los horizontales para manejar la misma cantidad de gas.
- ◆ Es de mayor costo que el separador horizontal.
- ◆ El mantenimiento de la válvula de seguridad y algunos otros controles puede ser complicada.

Separador Horizontal

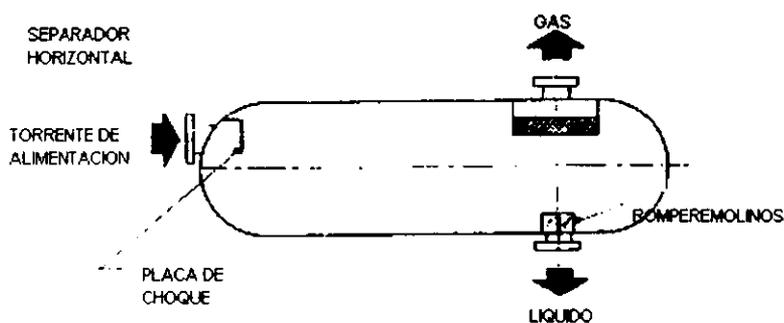


Figura 3.7. Esquema de un Separador Vertical

Ventajas:

- ◆ Es menos costoso que el separador vertical.
- ◆ Es fácil de embarcar en paquete (aún montado en un patín)
- ◆ Mayor facilidad de instalación con respecto a los separadores verticales.
- ◆ Mayor capacidad para el manejo de gas.
- ◆ Mayor área de interfase, lo que facilita la liberación de las burbujas de gas.
- ◆ Son muy adecuados para manejar aceite con alto contenido de espuma.

Desventajas:

- ◆ Difícil de limpiar cuando se presenta arena, lodo y parafinas.

- ◆ Requiere de mayor área para llevar a cabo la sedimentación. Es necesario colocar varios drenes a lo largo de su longitud para desalojar los sólidos.
- ◆ Requiere de mayor área para su instalación.
- ◆ Menos eficiente para manejar baches de líquido.

Separados Esférico

Ventajas:

- ◆ Más barato que los separadores horizontal o vertical.
- ◆ De tamaño compacto.
- ◆ Más económico para las instalaciones individuales de pozos de alta presión, por sus diferentes tamaños.

Desventajas:

- ◆ Tiene limitaciones de espacio para la separación y manejo de baches de líquido.

Internos de los Separadores

El separador cuenta con varios dispositivos mecánicos para lograr una buena separación. Algunos de estos dispositivos son:

- ◆ Placas desviadoras.
- ◆ Rompe olas.
- ◆ Placas desespumantes.
- ◆ Rompedor de torbellinos (vortex)
- ◆ Extractor de niebla.

Todos ellos tienen como único fin eliminar la mayor cantidad de fenómenos que se presentan dentro del separador y que evitan una separación eficiente.

CAPÍTULO IV

CONTROL Y OPTIMIZACIÓN

En este capítulo se hace una revisión de los métodos tanto clásicos como modernos de optimización y control. Se establece la teoría sobre la que se basan y se presentan las ecuaciones que las representan. Con el estudio de este capítulo, sin embargo, se toma la idea fundamental de la optimización en línea y, en conjunto con lo presentado en el capítulo anterior, se puede proceder a realizar la parte de simulación correspondiente a este trabajo.

OPTIMIZACIÓN

El incremento del costo de la energía y el aumento de exigencias ambientales han afectado la industria química. Se han hecho modificaciones en las condiciones de operación y en los procedimientos de diseño con el fin de reducir los costos y cumplir con exigencias. Se ha puesto énfasis en mejorar la eficiencia y en incrementar la factibilidad de las plantas existentes en lugar de su expansión. La optimización se ha usado para estos fines.

La optimización es una de las más grandes herramientas en el proceso de toma de decisiones, resuelve una gran variedad de problemas en el diseño, construcción, operación y análisis de plantas químicas (y muchos otros procesos industriales). La optimización se relaciona con los campos de la ciencia, ingeniería y los negocios; tiene que ver con la selección de la mejor solución de entre todas las posibles mediante métodos cuantitativos eficientes.

Sin embargo, debido a la complejidad de las plantas químicas, la optimización completa de ellas es complicada, entonces se aplica la suboptimización que involucra la optimización de una fase de una operación de un problema ignorando algunos factores que tienen algún efecto en otros sistemas o procesos en la planta. La suboptimización es con frecuencia necesaria debido a las consideraciones económicas y prácticas, limitaciones en tiempo y en mano de obra.

El alcance de un problema de optimización puede ser desde la planta entera hasta una sola pieza de un equipo. La complejidad del análisis depende del uso que tendrán los resultados, la disponibilidad de datos exactos, y el tiempo disponible para llevar a cabo la optimización. Se trabaja en el mejoramiento del diseño inicial y de la operación para cumplir con la mayor producción, el mayor beneficio, el costo mínimo, el menor consumo de energía, etc. En la operación de las plantas, los beneficios surgen del mejoramiento de su desempeño global.

CARACTERÍSTICAS ESENCIALES DE LOS PROBLEMAS DE OPTIMIZACIÓN

La formulación de un problema de optimización debe ser vía expresiones matemáticas. Cada problema de optimización contiene tres categorías esenciales⁽⁶⁾:

- | | |
|--|----------------------|
| 1. Al menos una función objetivo a ser optimizada. | } modelo del proceso |
| 2. Restricciones de igualdad. | |
| 3. Restricciones de desigualdad. | |

Solución factible: Es una serie de variables que satisfacen las restricciones al grado de precisión deseado.

Solución óptima: Es un conjunto de valores de las variables que satisfacen los componentes de las restricciones y también proporcionan un valor óptimo para la función objetivo.

La notación matemática clásica de un problema de optimización es:

Minimizar:

$$f(x) \quad \text{Función objetivo}$$

Sujeta a:

$$h(x) = 0 \quad \text{Restricciones de igualdad}$$

$$g(x) \geq 0 \quad \text{Restricciones de desigualdad}$$

Donde x es un vector de n variables (x_1, x_2, \dots, x_n), $h(x)$ es un vector de ecuaciones de dimensiones m_1 , y $g(x)$ es un vector de desigualdades de dimensiones m_2 . El número total de restricciones es $m = (m_1 + m_2)$. Esta formulación requiere la identificación de los elementos esenciales de la definición de una aplicación dada.

La función objetivo: Representa beneficio, costo, energía, campo, etc., en términos de las variables clave del proceso que está siendo analizado.

Las restricciones: Describen las interrelaciones de las variables clave.

A continuación se presenta una breve explicación de métodos de optimización lineal y no lineal (para más detalle sobre este resumen, ver Taha⁽⁴⁹⁾).

PROGRAMACIÓN LINEAL

La PL es un modelo de asignación de recursos que busca la mejor distribución de recursos limitados a un número de actividades en competencia⁽⁴⁹⁾. La PL puede resolverse mediante un método gráfico donde se identifica la característica esencial de este tipo de problemas: la búsqueda de la mejor solución sobre los puntos extremos del espacio de soluciones. El uso práctico de la solución gráfica de PL está limitado a problemas de dos variables, sin embargo se ha desarrollado el método simplex que es un procedimiento algebraico para resolver el problema de PL general.

Un modelo de PL puede incluir restricciones del tipo de desigualdad e igualdad. Las variables pueden ser no negativas o irrestrictas (no restringidas en signo). La forma estándar de un problema de PL tiene las siguientes propiedades:

1. Todas las restricciones son ecuaciones con segundo miembro no negativo.
2. Todas las variables son no negativas.
3. La función objetivo puede ser de maximización o de minimización.

Así se hace necesario el uso de variables de holgura o de exceso si las restricciones son del tipo \leq o \geq respectivamente para poder convertirlas en ecuaciones.

Tabla 4.1. Formulación de la forma estándar para un problema de programación lineal

FORMA NORMAL	FORMA ESTÁNDAR PARA RESOLVER POR PL
<p>Maximizar $z = 3x_1 + 2x_2$</p> <p>Sujeta a:</p> <p>$x_1 + 2x_2 \leq 6$</p> <p>$2x_1 + 2x_2 \leq 8$</p> <p>$x_1 + 2x_2 \leq 1$</p> <p>$x_1 \leq 2$</p>	<p>Maximizar $z = 3x_1 + 2x_2$</p> <p>Sujeta a:</p> <p>$x_1 + 2x_2 + s_1 = 6$</p> <p>$2x_1 + 2x_2 + s_2 = 8$</p> <p>$-x_1 + 2x_2 + s_3 = 6$</p> <p>$x_1 + s_4 = 2$</p>

Donde Las variables s son “variables de holgura”, en caso de que existieran variables del tipo \geq en la formulación original, se usan variables de exceso.

EL MÉTODO SIMPLEX

El método simplex está basado en el concepto de que la solución óptima está asociada siempre con un punto extremo del espacio de soluciones.

El método simplex emplea un proceso iterativo que principia en un punto extremo factible, normalmente el origen, y se desplaza sistemáticamente de un punto extremo factible a otro hasta que se llega por último al punto óptimo.

En general el modelo estándar incluirá m ecuaciones y n incógnitas.

Para determinar los puntos extremos directamente a partir de la forma estándar, se observa que un punto extremo se identifica únicamente en forma geométrica como una intersección de los planos frontera del espacio de soluciones. Como la forma estándar tiene más incógnitas ($=n$) que ecuaciones ($=m$), los puntos extremos se identifican haciendo $(n-m)$ variables igual a cero y después resolviendo para determinar las m incógnitas restantes. Un requisito obligatorio para la selección de $(n-m)$ variables que se harán igual a cero es que las m variables restantes tengan una solución no negativa única (de lo contrario no representarían un punto extremo).

En términos algebraicos, las soluciones únicas que resultan de hacer $(n-m)$ variables igual a cero se denominan soluciones básicas. Si una solución básica satisface las restricciones de no negatividad, se le conoce como solución básica factible. Las variables que se hacen igual a cero se llaman variables no básicas, las restantes se conocen como variables básicas.

Los pasos del algoritmo simplex son los siguientes:

0. Mediante el uso de la forma estándar, determinar una solución factible básica inicial, inicializando $n-m$ variables adecuadas (no básicas) al nivel cero.
1. Seleccionar una variable que entra (variable no básica actual que “entrará” en el conjunto de variables básicas en la siguiente iteración) de entre las variables no básicas actuales (cero) que, cuando se incrementan arriba de cero, puedan mejorar el valor de la función objetivo. Si no existe ninguna, la solución básica actual es óptima. De lo contrario, ir al paso 2.
2. Seleccionar una variable que sale (variable básica actual que “saldrá” de la solución básica en la iteración siguiente) de entre las variables básicas actuales que deben hacerse igual a cero (volverse no básicas) cuando la variable que entra se vuelve básica.
3. Determinar la nueva solución básica haciendo que la variable que entra sea básica y que la variable que sale sea no básica. Ir al paso 1.

Condición de Optimalidad. La variable que entra en el proceso de maximización (minimización) es la variable no básica con el coeficiente más negativo (positivo) en la función z . Cuando todos los coeficientes no básicos de la ecuación z son no negativos (no positivos), se llega al óptimo.

Condición de factibilidad. Para los problemas de maximización y minimización, la variable que sale es la variable básica que tiene la razón más pequeña (con denominador positivo).

Tomando como ejemplo la forma estándar de la tabla 4.1., haciendo $z-3x_1-2x_2=0$; se construye la tabla 4.2.

La Tabla 4.2. representa la solución básica inicial, las variables básicas iniciales son las variables de holgura cuyos valores se dan en la columna de la solución, y por lo tanto x_1 y x_2 , las variables no básicas, son iguales a cero, y se proporciona así una solución básica factible.

Por lo tanto, para mejorar el valor de la función objetivo, se selecciona una variable no básica para “entrar” en caso de maximización, se selecciona la variable x_1 que es la que tiene el coeficiente más negativo, la variable que sale es de las variables básicas la que al dividir el valor correspondiente a la columna de solución entre su valor correspondiente en la columna de la variable que entra da el menor valor, en este caso para s_1 $6/1=6$, s_2 $4/2=4$ (s_1 y s_2 no aplican por dar un valor negativo y nulo respectivamente); es decir, la variable que entra es s_2 , después se normaliza la fila que corresponde a s_2 y mediante un procedimiento Gauss-Jordan, se hacen cero el resto de los valores de la columna, quedando solo el valor unitario que se normaliza. El

procedimiento se repite hasta que los coeficientes correspondientes a la fila de z , sean todos positivos.

Tabla 4.2. Tabla usada para aplicar el método simplex para la solución de un problema de PL

Variable básica	z	x_1	x_2	s_1	s_2	s_3	s_4	Solución	
z	1	-3	-2	0	0	0	0	0	Ecuación z
s_1	0	1	2	1	0	0	0	6	Ecuación s_1
s_2	0	2	1	0	1	0	0	8	Ecuación s_2
s_3	0	-1	1	0	0	1	0	1	Ecuación s_3
s_4	0	0	1	0	0	0	1	2	Ecuación s_4

La tabla final es la 4.3.

Tabla 4.3. Tabla óptima con la solución al problema planteado.

Variable básica	z	x_1	x_2	s_1	s_2	s_3	s_4	Solución	
z	1	0	0	$1/3$	$1/3$	0	0	$12^{2/3}$	Ecuación z
x_1	0	0	1	$2/3$	$-1/3$	0	0	$4/3$	Ecuación s_1
x_2	0	1	0	$-1/3$	$2/3$	0	0	$10/3$	Ecuación s_2
s_3	0	0	0	-1	1	1	0	3	Ecuación s_3
s_4	0	0	0	$2/3$	$1/3$	0	1	$2/3$	Ecuación s_4

Lo que da como solución:

$$\begin{aligned}x_1 &= 3^{1/3}, \\x_2 &= 1^{1/3},\end{aligned}$$

Esta tabla es óptima porque ninguna de las variables no básicas tiene un coeficiente negativo en z .

TEORÍA DE OPTIMIZACIÓN CLÁSICA

La teoría de optimización clásica considera el uso del cálculo diferencial para determinar punto de máximos y mínimos (extremos) para funciones restringidas y no restringidas. Éstos métodos pueden ser no adecuados para cálculos numéricos eficientes pero proporcionan la base para visualizar la mayoría de los algoritmos de programación no lineal.

DEFINICIONES

Un **punto extremo de una función** $f(X)$ define un máximo o un mínimo de la función. X_0 es un **máximo** si el valor de f en cada punto en el entorno de X_0 no excede a $f(X_0)$. Análogamente, X_0 es un **mínimo** si para f en cada punto en el entorno de X_0 no es menor que $f(X_0)$. En los extremos de una función la primera derivada (pendiente) de f se anula, pero si un punto con pendiente cero no es un extremo (máximo o mínimo) entonces es lo que se conoce como un **punto de inflexión**.

Condiciones necesarias y suficientes para los puntos extremos.

Existen teoremas que establecen las condiciones necesarias y suficientes para que una función $f(X)$ de n variables tenga extremos.

a) Una condición necesaria para que X_0 sea un punto extremo de $f(X)$ es que:

$$\nabla f(X_0) = 0$$

*Sin embargo, la condición también se satisface para los puntos de inflexión. Por lo tanto, estas condiciones son necesarias pero no suficientes para identificar los puntos extremos, por ello, es más apropiado referirse a los puntos obtenidos a partir de la solución de la ecuación anterior como **puntos estacionarios**.*

b) Una condición suficiente para que un punto estacionario X_0 sea un extremo es que la matriz Hessiana (o de Hesse) H evaluada en X_0 sea:

- i) positiva definida cuando X_0 es un punto mínimo, y
- ii) negativa definida cuando X_0 es un punto máximo

donde la matriz Hessiana se define como:

$$H = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{pmatrix}$$

b) Si en un punto estacionario y_0 de $f(y)$ las primeras $n-1$ derivadas se anulan y $f''(y) \neq 0$, entonces en $y=y_0$ ocurre que $f(y)$ tiene:

- i) un punto de inflexión si n es impar, y
- ii) un punto extremo si n es par. Este punto extremo será un máximo si $f''(y) < 0$ y un mínimo si $f''(y) > 0$.

PROBLEMAS DE EXTREMOS NO RESTRINGIDOS

MÉTODO DE NEWTON-RAPHSON

El método de Newton-Raphson es un procedimiento iterativo para resolver ecuaciones simultáneas no lineales, es parte de los métodos conocidos como métodos de gradiente para optimizar numéricamente funciones no restringidas.

$$f_i(X) = 0, \quad i=1, 2, \dots, m$$

Sea X^k un punto dado. Por el desarrollo de Taylor

$$f_i(X) \cong f_i(X^k) + \nabla f_i(X^k)(X - X^k), \quad i=1, 2, \dots, m$$

Las condiciones originales pueden aproximarse por:

$$f_i(X^k) + \nabla f_i(X^k)(X - X^k) = 0 \quad i=1, 2, \dots, m$$

Esta ecuación puede escribirse en notación matricial como

$$A_k + B_k(X - X^k) = 0$$

Así

$$X = X^k - B_k^{-1} A_k$$

Donde A_k y B_k son matrices con los valores que resultan de evaluar la función y su gradiente en el punto k . La idea del método es comenzar desde el punto inicial X^0 . Utilizando la ecuación anterior, siempre puede determinarse un nuevo punto X^{k+1} a partir de X^k . El procedimiento finaliza cuando $X^m \approx X^{m+1}$.

PROBLEMAS DE EXTREMOS RESTRINGIDOS

Se incluye la optimización de funciones continuas, sujetas a condiciones o restricciones laterales. Tales restricciones pueden ser en forma de ecuación o de desigualdad.

RESTRICCIONES DE IGUALDAD

MÉTODO DE DERIVADAS RESTRINGIDAS (JACOBIANO)

Considérese el problema

$$\text{Minimizar } z = f(X)$$

Sujeta a

$$g(X) = 0$$

donde

$$X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$$

$$g = (g_1, g_2, \dots, g_m)^T$$

Se usan derivadas restringidas para resolver el problema anterior para encontrar una expresión de forma cerrada para las primeras derivadas parciales de $f(X)$ en todos los puntos que satisfacen $g(X)$. Los puntos estacionarios correspondientes se identifican por lo tanto, como los puntos en los cuales dichas derivadas parciales se anulan. Analizando el caso donde se tienen m ecuaciones < a n incógnitas:

Sea

$$X = (Y, Z)$$

Donde

$$Y = (y_1, y_2, \dots, y_m) \text{ y } Z = (z_1, z_2, \dots, z_{n-m})$$

Son las variables dependientes e independientes, respectivamente, correspondiendo al vector X . Escribiendo los vectores f y g en términos de Y y Z y obteniendo el gradiente:

$$\nabla f(Y, Z) = (\nabla_Y f, \nabla_Z f)$$

$$\nabla g(Y, Z) = (\nabla_Y g, \nabla_Z g)$$

Definiendo

$$J = \nabla_Y g = \begin{pmatrix} \nabla_Y g_1 \\ \vdots \\ \nabla_Y g_m \end{pmatrix}$$

$$C = \nabla_Z g = \begin{pmatrix} \nabla_Z g_1 \\ \vdots \\ \nabla_Z g_m \end{pmatrix}$$

$J_{m \times m}$ se conoce como **matriz jacobiana** y $C_{m \times (n-m)}$ es la **matriz de control**. Usando las definiciones anteriores, el conjunto original de ecuaciones se convierte en:

$$\partial f(Y, Z) = \nabla_Y f \partial Y + \nabla_Z f \partial Z$$

y

$$J \partial Y = -C \partial Z$$

Por lo tanto

$$\partial Y = -J^{-1} C \partial Z$$

Este conjunto de ecuaciones relaciona el efecto de variación en ∂Z (siendo Z el vector independiente) sobre ∂Y . Obteniendo ∂f como una función de ∂Z

$$\partial f(Y, Z) = (\nabla_Y f - \nabla_Y f J^{-1} C) \partial Z$$

De esta ecuación, la derivada restringida con respecto al vector independiente Z está dado por

$$\nabla_C f = \frac{\partial_C f(Y, Z)}{\partial_C Z} = \nabla_Z f - \nabla_Y f J^{-1} C$$

donde $\nabla_Y f$ representa el vector gradiente restringido de f con respecto a Z . Por consiguiente, $\nabla_Y f(Y, Z)$ debe ser nulo en los puntos estacionarios.

Las condiciones de suficiencia son similares a las desarrolladas anteriormente, sin embargo, la matriz hessiana corresponderá al vector independiente Z , mientras que los elementos de la matriz hessiana deben ser las segundas derivadas restringidas. Es decir, $\nabla_Y f = 0$.

MÉTODO DE LAGRANGE

El método de Lagrange identifica los puntos estacionarios de problemas de optimización con restricciones de igualdad.

Sea

$$L(X, \lambda) = f(X) - \lambda g(X)$$

La función L se llama función de Lagrange y los parámetros λ , multiplicadores de Lagrange. Las ecuaciones

$$\frac{\partial L}{\partial \lambda} = 0 \text{ y } \frac{\partial L}{\partial X} = 0$$

proporcionan las condiciones necesarias para los puntos estacionarios y por lo tanto la función de Lagrange puede utilizarse directamente para generar las condiciones necesarias, es decir, la optimización se hace sobre la función de Lagrange $L(X, \lambda)$.

Las condiciones de suficiencia se determinan definiendo

$$H^B = \begin{pmatrix} 0 & P \\ P^T & Q \end{pmatrix}_{(m+n) \times (m+n)}$$

donde

$$P = \begin{pmatrix} \nabla g_1(X) \\ \vdots \\ \nabla g_m(X) \end{pmatrix}_{m \times n} \text{ y } Q = \left[\frac{\partial^2 L(X, \lambda)}{\partial x_i \partial x_j} \right]_{n \times n}, \text{ para toda } i \text{ y } j.$$

La matriz H^B se conoce como matriz hessiana en la frontera.

Dado el punto estacionario (X_n, λ_n) , para la función de Lagrange $L(X, \lambda)$ y la matriz hessiana en la frontera H^n evaluada en (X_n, λ_n) , entonces X_n es

1. Un punto de máximo si, comenzando con el menor principal del determinante de orden $(2m+1)$, los últimos $(n-m)$ menores principales del determinante de H^n forman una configuración de signos alternos comenzando con $(-1)^{m+1}$.
2. Un punto de mínimo si, comenzando con el menor principal del determinante de orden $(2m+1)$, los últimos $(n-m)$ menores principales del determinante de H^n tienen el signo de $(-1)^m$.

Las condiciones anteriores son suficientes para identificar un punto extremo, pero no necesarias, es decir, un punto estacionario puede ser un punto extremo sin satisfacer las condiciones anteriores. Existen condiciones que son suficientes y necesarias para los puntos extremos pero su complejidad requiere de un conocimiento más profundo.

RESTRICCIONES DE DESIGUALDAD

El método de Lagrange puede en forma restringida extenderse para manejar restricciones de desigualdad, pero solo se expondrán las llamadas condiciones de Kuhn-Tucker que proporcionan la teoría básica para la programación no lineal.

CONDICIONES DE KUHN-TUCKER

Las condiciones necesarias de Kuhn-Tucker son para identificar los puntos estacionarios de un problema restringido no lineal sujeto a restricciones de desigualdad. Estas condiciones son también suficientes bajo ciertas limitaciones.

Considere el problema

$$\text{Maximizar } z = f(X)$$

Sujeto a

$$g(X) \leq 0$$

Las restricciones de desigualdad pueden convertirse en ecuaciones sumando las variables de holgura no negativas apropiadas, por consiguiente sea $S_i^2 (\geq 0)$ la cantidad de holgura sumada a la i -ésima restricción $g_i \leq 0$, definiendo

$$S = (S_1, S_2, \dots, S_m)^T \text{ y } S^2 = (S_1^2, S_2^2, \dots, S_m^2)^T$$

donde m es el número total de restricciones de desigualdad. La función de Lagrange es ahora

$$L(X, S, \lambda) = f(X) - \lambda [g(X) + S^2]$$

Dadas las restricciones

$$g(X) \leq 0$$

una condición necesaria para la optimalidad es que λ sea no negativa (o bien no positiva) para problemas de maximización (o bien, minimización). Las siguientes restricciones se obtienen tomando las derivadas parciales de L con respecto a X , S , y λ .

Las condiciones de Kuhn-Tucker necesarias para que X y λ sean un punto estacionario del problema de maximización anterior se resumen como sigue:

$$\begin{aligned} \lambda &\geq 0 \\ \nabla f(X) - \lambda \nabla g(X) &= 0 \\ \lambda_i g_i(X) &= 0 \quad i=1, 2, \dots, m \\ g(X) &\leq 0 \end{aligned}$$

ALGORITMOS DE PROGRAMACIÓN NO LINEAL

Los métodos de solución de programación no lineal se pueden clasificar en términos generales como procedimiento directos o indirectos. Ejemplos de los métodos directos son los algoritmos del gradiente, donde el máximo (mínimo) de un problema se busca siguiendo la tasa de incremento (disminución) más rápida de la función objetivo en un punto. En los métodos indirectos, el problema original se transforma primero en un problema auxiliar del cual se determina el óptimo. Algunos ejemplos de estas situaciones son la programación cuadrática, la programación separable y la programación estocástica.

ALGORITMOS NO LINEALES IRRESTRICITOS

MÉTODO DE BÚSQUEDA DIRECTA

Los métodos de búsqueda directa se han desarrollado principalmente para funciones de una sola variable. Aunque esto puede parecer trivial, desde el punto de vista práctico se muestra que la optimización de funciones de una sola variable puede evolucionar como parte de los algoritmos para funciones de varias variables.

La idea general de búsqueda directa es muy simple. Primero, se identifica un intervalo (llamado intervalo de incertidumbre) que se sabe incluye el óptimo. Entonces sistemáticamente se reduce el tamaño del intervalo en una forma que garantice que el óptimo no se pierde. El procedimiento no determina el óptimo exacto, pero en lugar de esto minimiza la longitud del intervalo que incluye el punto óptimo. Teóricamente la longitud del intervalo que incluye el óptimo puede hacerse tan pequeña como se desee.

Una de las limitaciones del método es que la función se supone unimodal dentro del intervalo de búsqueda. Esto garantiza únicamente un óptimo local. Además no existe ningún intervalo finito en el cual la pendiente de la función sea cero. Con esta hipótesis adicional, la función optimizada puede denominarse estrictamente unimodal.

Método de búsqueda dicotómica

Supóngase que el intervalo inicial en el cual ocurre un óptimo local se define como $a \leq x \leq b$. Supóngase también que se maximiza la función $f(x)$. Definiendo dos puntos x_1 y x_2 simétricamente con respecto de a y b , tal que los intervalos $a \leq x \leq x_1$ y $x_2 \leq x \leq b$ se traslapen en una cantidad finita Δ . Ahora se evalúa $f(x_1)$ y $f(x_2)$. Los casos que resultan son los siguientes:

1. Si $f(x_1) > f(x_2)$, x^* (x óptima) debe estar entre a y x_2 .
2. Si $f(x_1) < f(x_2)$, $x_1 < x^* < b$.
3. Si $f(x_1) = f(x_2)$, $x_1 < x^* < x_2$.

Estos resultados se deducen directamente de la unimodalidad de $f(x)$. En cada uno de los casos, el intervalo o los intervalos que no incluyan x^* se descartan en iteraciones futuras.

El resultado de la búsqueda anterior es que el máximo de $f(x)$ se localiza ahora a un intervalo más pequeño. El nuevo intervalo puede, por lo tanto, dividirse en dos intervalos en la misma forma seguida por $a \leq x \leq b$. Continuando con esta forma uno puede deducir (en el límite) el intervalo en el cual se encuentra el máximo local a la longitud Δ . Esto significa que Δ debe seleccionarse razonablemente pequeña.

MÉTODO DEL GRADIENTE

La idea general es generar puntos sucesivos comenzando en un punto inicial dado, en la dirección del aumento más rápido (maximización) de la función. Aquí el gradiente de la función en un punto es el que indica la tasa más rápida de aumento. El método de Newton-Raphson presentado anteriormente es un ejemplo de este tipo de métodos. El método se basa en resolver las ecuaciones simultáneas que representan la solución necesaria para optimalidad, simplemente $\nabla f(x) = 0$.

ALGORITMOS NO LINEALES RESTRINGIDOS

El problema de programación no lineal general restringido puede definirse como

$$\text{Maximizar (o minimizar) } z = f(x)$$

Sujeto a

$$g(x) \leq 0$$

Las condiciones de no negatividad de $x \geq 0$ se suponen que son parte de las restricciones dadas. También al menos una de las funciones $f(x)$ y $g(x)$ es no lineal.

No existe ningún algoritmo general para manejar modelos no lineales principalmente debido al comportamiento irregular de las funciones no lineales, así que los métodos existentes se clasifican como métodos directos y métodos indirectos. Los métodos indirectos básicamente

resuelven el problema no lineal tratando con uno o más problemas lineales que se extraen del problema original. Los métodos directos atacan el problema no lineal en sí mismo determinando puntos de búsqueda sucesivos. La idea es convertir problemas restringidos en irrestringidos para aplicar los métodos del gradiente con algunas modificaciones.

Sólo se presenta el método indirecto llamado programación cuadrática porque es la base para métodos avanzados, como SQP, (Programación Cuadrática Sucesiva) que es la técnica más ampliamente usada en la mayoría de las paqueterías comerciales de optimización de procesos⁽¹⁹⁾.

PROGRAMACIÓN CUADRÁTICA

Un modelo de programación cuadrática se define como sigue:

$$\text{Maximizar (o minimizar) } z = CX + X^T DX$$

Sujeta a

$$AX \leq P_0, X \geq 0$$

donde

$$X = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$$

$$C = (c_1, c_2, \dots, c_n)$$

$$P_0 = (b_1, b_2, \dots, b_m)^T$$

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

$$D = \begin{pmatrix} d_{11} & \cdots & d_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ d_{n1} & \cdots & d_{nn} \end{pmatrix}$$

La función $X^T DX$ define una forma cuadrática, donde D es una matriz simétrica. La matriz D se supone negativa definida si el problema es de maximización, y positiva definida si es de minimización. Esto significa que z es estrictamente convexa en X para minimización y estrictamente cóncava para maximización. Las restricciones se suponen lineales en este caso, lo que garantiza un espacio de soluciones convexo.

La solución de este problema se presenta enseguida.

$$\text{Maximizar } z = CX + X^T DX$$

Sujeto a

$$G(X) = \begin{pmatrix} A \\ -I \end{pmatrix} X - \begin{pmatrix} P_0 \\ 0 \end{pmatrix} \leq 0$$

Sean

$$\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m)^T \quad \text{y} \quad U = (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n)^T$$

los multiplicadores de Lagrange correspondientes a los dos conjuntos de restricciones $AX \leq P_0$ y $-X \leq 0$, respectivamente. La aplicación de condiciones de Kuhn-Tucker proporcionan:

$$\lambda \geq 0, U \geq 0$$

$$\nabla_z - (\lambda^T, U^T) \nabla G(X) = 0$$

$$\lambda_i \left(b_i - \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \right) = 0, \quad i=1, 2, \dots, m$$

$$\mu_j x_j = 0, \quad j=1, 2, \dots, n$$

$$AX \leq P_0, \quad -X \leq 0$$

Ahora bien,

$$\nabla_z = C + 2X^T D$$

$$\nabla G(X) = \begin{pmatrix} A \\ -I \end{pmatrix}$$

Sean $S = P_0 - AX \geq 0$ las variables de holgura de las restricciones. Las condiciones anteriores se reducen a

$$-2X^T D + \lambda^T A \cdot U^T = C$$

$$AX + S = P_0$$

$$\mu_j x_j = 0 = \lambda_i s_i \quad \text{para toda } i \text{ y para toda } j$$

$$\lambda, U, X, S \geq 0$$

Observando que $D^T = D$, la transpuesta del primer conjunto de ecuaciones es

$$-2DX + A^T \lambda \cdot U = C^T$$

Por lo tanto, las condiciones necesarias anteriores pueden combinarse como sigue

$$\begin{pmatrix} -2D & A^T & -I & 0 \\ A & 0 & 0 & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ \lambda \\ U \\ S \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C^T \\ P_0 \end{pmatrix}$$

$$\mu_j x_j = 0 = \lambda_i s_i \quad \text{para toda } i \text{ y toda } j$$

$$\lambda, U, X, S \geq 0$$

Excepto por las condiciones $\mu_{x_j} = 0 = \lambda_j S_j$, las ecuaciones restantes son funciones lineales en X , λ , U y S . El problema por lo tanto es equivalente a resolver un conjunto de ecuaciones lineales, mientras que se satisfacen las condiciones adicionales $\mu_{x_j} = 0 = \lambda_j S_j$. Debido a que z es estrictamente cóncava y el espacio de soluciones es convexo, la solución factible que satisface todas estas condiciones debe dar directamente la solución óptima. De las condiciones impuestas sobre z y el espacio de soluciones (esto es, z es estrictamente cóncava y el espacio de soluciones convexo), la solución al conjunto anterior de ecuaciones (cuando existe) debe ser única.

OPTIMIZACIÓN DINÁMICA

Los métodos clásicos presentados solo se aplican a problemas de programación estática, es decir, no aplican para una acción secuencial óptima. Un problema de optimización dinámica establece el problema de cual es la magnitud óptima para una variable en cada periodo de tiempo dentro de un periodo de planeación.

La solución de un problema de optimización dinámica toma la forma de una trayectoria óptima en el tiempo para cada variable determinando el mejor valor para la variable en cada momento.

Es posible considerar la optimización dinámica en términos de una secuencia de tiempo, y también puede verse en el horizonte de planeación como una secuencia de etapas en un proceso, es decir, un problema de toma de decisiones en múltiples etapas⁽⁹⁾.

El problema de optimizar grandes procesos, cuya naturaleza es dinámica y está sometido a diversas perturbaciones externas, se puede resolver de diversas formas⁽¹⁰⁾:

1. Suponer que el proceso es estático y realizar una optimización en estado permanente.
2. Suponer que el proceso cambia lentamente de un estado a otro y es posible realizar los ajustes necesarios en tiempo real optimizando como si tuviera una secuencia de procesos estacionarios.
3. Tomar el problema con toda su complejidad y considerarlo un proceso dinámico.

El primer punto es lo que se llama optimización estática (fuera de línea), el segundo, optimización en tiempo en línea y el tercero corresponde al estudio del control óptimo.

Optimización en tiempo real se refiere a las técnicas de optimización que por medio de un programa que opera continuamente en el tiempo van ajustando los puntos de operación de cada elemento del proceso como sea necesario.

La importancia de realizarlo en tiempo real radica en que al ocurrir perturbaciones temporales, el sistema responda automáticamente ajustándose a las nuevas condiciones para operar siempre de la mejor manera. En contraste, la optimización fuera de línea, puede perder validez con el

paso del tiempo debido a que el modelo quizá no represente adecuadamente al proceso real al transcurrir el tiempo o también debido a variaciones en los puntos de operación.

La teoría de control óptimo, usa tres tipos de variables, la variable tiempo, la de estado, y una variable de control. Una de las dificultades es que los modelos de los procesos deben actualizarse. Además, no es suficiente conocer los puntos de operación óptimos del proceso, es necesario forzar al proceso a mantenerse en esos valores.

Las técnicas de optimización en línea casi siempre se complementan con algoritmos de control de manera que el controlador obligue al proceso a ajustarse a los puntos de operación (*set points*) que indique el algoritmo de optimización. Estos algoritmos pueden ser algoritmos tradicionales (controladores PID) o bien algoritmos de control avanzado. En esta misma sección, se hace referencia a MPC (Control Predictivo Basado en Modelo) que es una familia de controladores avanzados y se incluye una amplia explicación de su fundamento y las ecuaciones que lo representan.

Afortunadamente, las soluciones de este tipo de problemas pueden encontrarse con la ayuda de paquetes de software. Entre los paquetes de propósito general de optimización más populares están Matlab y Mathematica de Mathworks (Natick, Mass) y Wolfram Research (Champaign, IL), respectivamente; contienen algoritmos precodificados para resolver los problemas de optimización más complejos. Si el usuario puede detallar las condiciones, objetivos y restricciones de un problema en términos matemáticos, cualquier paquete puede resolverlo numéricamente⁽⁴²⁾.

OPTIMIZACIÓN A GRAN ESCALA

Hay diversas metodologías para este tipo de optimización, pero debido a su complejidad, los métodos pueden ser desde heurísticos hasta matemáticamente sofisticados. En la literatura se encontró por ejemplo, un trabajo de Luyben et. al. ⁽²¹⁾ donde establece 9 pasos esenciales para la optimización y control a gran escala, que en forma resumida son los siguientes:

1. Establecer objetivos de control
2. Determinar grados de libertad del sistema de control
3. Establecer sistema de manejo de energía
4. Establecer rapidez de producción
5. Control de calidad del producto y manejo de restricciones de seguridad, operativas y ambientales
6. Inventarios de control y fijación de flujo en cada lazo de recirculación
7. Checar el balance por componentes
8. Control de las operaciones unitarias individuales
9. Optimización económica o controlabilidad dinámica mejorada.

Luyben establece que el problema de control total de la planta radica en desarrollar una estrategia de control para un complejo entero y un proceso integrado que satisfaga los objetivos de diseño de la planta.

Particularmente, se maneja este procedimiento para procesos industriales donde *se satisfacen los dos principios fundamentales de la ingeniería química: la conservación total de masa y de energía, además de los principios fundamentales de control total de la planta: manejo de energía, rapidez de producción, calidad del producto, restricciones de operación, seguridad y ambientales, inventarios de presión de gas y nivel de líquidos, composición de los reactivos, balances de componentes, y optimización económica o del proceso.*

Por otra parte, en un documento de Chang et. al.⁽⁶⁾, se establece el problema de optimización a gran escala de manera diferente. El problema original es descompuesto a lo largo del eje del tiempo para formar muchos subproblemas pequeños, y se crea un problema de alto nivel que usa un estado inicial y terminal de los subproblemas como parámetros de coordinación.

En tal esquema, el problema de alto nivel es un problema de optimización de parámetros. Los subproblemas son problemas de control óptimo que tienen un horizonte de tiempo más corto y están totalmente desacoplados de manera que pueden resolverse en paralelo.

Está demostrado que el problema de dos niveles tiene el mismo punto óptimo global que el problema original, y por ejemplo, el algoritmo de optimización paralelo de dos niveles se puede resolver por el método de Newton (para el problema de alto nivel) y por la técnica de programación diferencial dinámica (para los subproblemas de bajo nivel).

En resumen, sus características principales incluyen la descomposición sobre el eje del tiempo, coordinación usando estados iniciales y terminales de los subproblemas, y el procesamiento paralelo. La solución de alto nivel es de naturaleza de lazo abierto, mientras que el control de bajo nivel, es una forma variada lineal de retroalimentación.

En la actualidad, se piensa que el problema de optimización a gran escala se ha resuelto mediante la aplicación de varias formas comerciales de **Control Predictivo basado en Modelo (MPC)**⁽²¹⁾. Se ha observado que MPC es aplicado en forma satisfactoria en la industria petroquímica pero aún está un poco lejos de ser aplicado en la industria química en general.

CONTROL AUTOMÁTICO

La historia del control es sumamente interesante, existe una bibliografía extensa que da una visión de como el control ha evolucionado y se ha ido ajustando poco a poco a las diversas necesidades de la industria en general, aunque en la industria química su aplicación ha sido más complicada debido a la gran variedad de fenómenos (físicos y químicos) que se involucran.

Lewis⁽¹⁷⁾ da una breve descripción de cómo evolucionó la teoría del control. A grandes rasgos, se puede decir que del año 1868 hasta principios del año 1900 se presenta el llamado periodo primitivo del control automático. Después, al periodo comprendido entre 1900 hasta 1960 aproximadamente, se le llama el periodo clásico, y al periodo de 1960 hasta el tiempo presente se le llama el periodo del control automático moderno, y con la rapidez con que se modifican y mejoran las técnicas de control se puede decir que la gente dedicada al estudio del control está viviendo la época del control post-moderno.

En el presente trabajo se investigó acerca del periodo de control moderno y en el trabajo experimental se aplicó un sistema de control clásico, por lo tanto se presenta una introducción de ambas etapas y se deja ver que, lejos de estar divididos, están íntimamente ligados.

PERIODO CLÁSICO DE LA TEORÍA DEL CONTROL

El control que se desarrolló antes de este periodo se le llamó control primitivo y su desarrollo estaba basado en el análisis en el dominio del tiempo. El periodo clásico se caracteriza por el uso de técnicas en el dominio de la frecuencia, este periodo surgió después de la segunda Guerra Mundial. La aproximación en el dominio de la frecuencia era apropiada para sistemas lineales invariantes en el tiempo debido a la naturaleza gráfica que de su análisis. La respuesta a la frecuencia de la mayoría de los procesos se define como el comportamiento en estado estacionario cuando es forzado por una entrada sinusoidal. Hay tres diferentes tipos de gráficas para mostrar cómo la razón de la magnitud y el ángulo de fase varían con la frecuencia, las cuales son las gráficas de Nyquist, Bode y Nichols⁽²²⁾. Funciona de la mejor manera cuando se trabaja con sistemas de una sola entrada y una sola salida (sistemas SISO, *single input-single output*). Los diseños del control clásico tuvieron cierto éxito con los sistemas no lineales, rechazando el ruido, un sistema de control puede ser diseñado para ser robusto a las variaciones de los parámetros del sistema, y para medir errores y perturbaciones externas. Las técnicas clásicas se pueden usar en una versión linealizada de un sistema no lineal, dando buenos resultados en un punto de equilibrio alrededor del cual el comportamiento del sistema es aproximadamente lineal.

FILOSOFÍA DEL CONTROL CLÁSICO

Sobre la base de las transformadas (integrales), se aplica principalmente a sistemas lineales invariantes en el tiempo. No se requiere una descripción exacta de la dinámica interna del sistema, es decir, solo interesa el comportamiento de entrada/salida del sistema. El diseño se puede realizar a mano usando técnicas gráficas. Estos métodos requieren gran intuición y ofrecen una amplia variedad de soluciones posibles.

Un sistema real tiene perturbaciones y ruidos en las mediciones y puede no ser descrito de manera exacta por el modelo matemático que se use para el diseño. La teoría clásica se usa para diseñar sistemas de control robustos sólo para ciertas perturbaciones. Un diseño robusto se logra usando conceptos como el de ganancia. Compensadores simples como PID se usan generalmente en la estructura del control. Una vez diseñado el compensador puede ser sintonizado en línea. Esta teoría es difícil de aplicar a sistemas MIMO (múltiples entradas/múltiples salidas) y de lazos múltiples. Debido a la interacción de los lazos de control en un sistema multivariable, cada función de transferencia SISO (una entrada/una salida) puede tener propiedades aceptables y ser robusto en términos de la respuesta al escalón, pero el movimiento de control coordinado del sistema puede ser inaceptable.

PERIODO MODERNO DE LA TEORÍA DE CONTROL

Con la llegada de la era espacial, el diseño de los controladores en Estados Unidos regresó de las técnicas en el dominio de la frecuencia de la teoría del control clásico a las técnicas de ecuaciones diferenciales de finales de 1800 que se manejaban en el dominio del tiempo.

Después de 1 año, las principales limitaciones de la teoría de control clásico fueron superadas cuando en 1960 se publicaron artículos por Kalman y colaboradores. En ellos se discuten: el trabajo de Lyapunov sobre control en el dominio del tiempo de sistemas no lineales; los sistemas de control óptimo donde se proporcionan las ecuaciones de diseño para el Regulador Cuadrático Lineal (LQR); y la teoría de filtros que da las ecuaciones de diseño del filtro de Kalman.

El punto importante es que es una aproximación en el dominio del tiempo haciéndolo más aplicable a sistemas variables en el tiempo lineales y no lineales. Se introdujo el álgebra lineal y las matrices, para que los sistemas con múltiples entradas y múltiples salidas pudieran ser tratados fácilmente. La aproximación tiene que ver con la dinámica interna de un sistema y no solo con su comportamiento de entrada/salida.

FILOSOFÍA DEL CONTROL MODERNO

El diseño de controladores modernos es fundamentalmente una técnica en el dominio del tiempo. Se requiere un modelo en el espacio de los estados del sistema a ser controlado. La versión lineal es un vector de una ecuación diferencial de primer orden de la forma:

$$\begin{aligned}\dot{x} &= Ax + Bu \\ y &= Cx\end{aligned}$$

donde $x(t)$ es un vector de variables internas o estados del sistema, $u(t)$ es un vector de entradas del controlador y $y(t)$ es un vector de salidas medibles.

Es posible adicionar términos que representen ruidos de proceso o de medición. La planta se describe en el dominio del tiempo.

El poder del control moderno radica en que el modelo en el espacio de los estados puede representar un sistema SISO o MIMO. Es decir, $u(t)$ y $y(t)$ son generalmente vectores cuyas entradas son entradas y salidas individuales escalares. Por lo tanto, A , B y C son matrices cuyos elementos describen las interconexiones dinámicas del sistema.

En el control moderno estándar, se asume que el sistema está perfectamente descrito por el modelo matemático. En la actualidad, este modelo puede ser solamente una descripción aproximada de la planta real. Sin embargo, en la práctica puede haber perturbaciones sobre la planta, así como ruidos de medición para determinar $y(t)$. Con el trabajo en el diseño robusto moderno, la mayor parte de la intuición de las técnicas de controladores clásicos, pueden ahora, incorporarse en el diseño multivariable moderno.

CONTROLADOR

El trabajo del controlador es comparar la señal del proceso del transmisor con la señal del punto de operación (*set point*) y mandar una señal apropiada a la válvula de control.

La configuración de control más común es el llamado controlador de retroalimentación (*feedback*); este controlador se usa en el planteamiento del sistema de control que se usó en este trabajo, por ello, se describe a continuación.

CONTROL DE RETROALIMENTACIÓN

El control de retroalimentación es el mecanismo básico mediante el cual los sistemas, ya sea mecánicos, eléctricos o biológicos mantienen su equilibrio.

El control de retroalimentación se define como el uso de señales de diferencia determinadas mediante la comparación de valores actuales de las variables de un sistema con sus valores deseados, como medio de control del sistema. Cuando la salida de un sistema es usado para regular su entrada, tal dispositivo se dice que es un sistema de control de lazo cerrado.

Lo anterior se ilustra en las figuras 4.1 y 4.2.

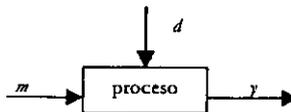


Figura 4.1. proceso de circuito abierto

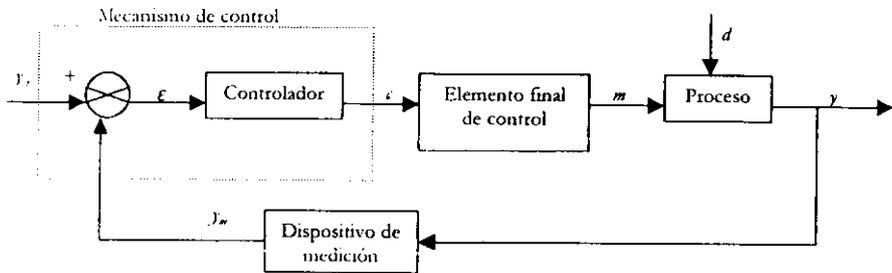


Figura 4.2. Acción de control de retroalimentación

La figura 4.1. tiene una salida y , una perturbación d y una variable manipulada disponible m . La perturbación d cambia de una manera impredecible y nuestro objetivo de control es mantener el valor de la salida y , a los niveles deseados. Una acción de control de retroalimentación sigue los siguientes pasos (ver figura 4.2.):

1. Mide el valor de la salida (flujo, presión, nivel del líquido, temperatura, composición) usando el dispositivo de medición apropiado; y_m es el valor indicado por el sensor de medición.
2. Compara el valor indicado y_m con el valor deseado y_p (*set point*) de la salida. Sea la desviación (error) $\varepsilon = y_p - y_m$.
3. El valor de la desviación ε se proporciona al controlador principal. El controlador en turno cambia el valor de la variable manipulada m de tal manera que reduce la magnitud de la desviación ε . Generalmente, el controlador no afecta la variable manipulada directamente si no a través de otro dispositivo (generalmente una válvula de control) conocido como elemento final de control.

El esquema de la figura 4.1. es conocido como circuito de lazo abierto y el de la figura 4.2. es conocido como un circuito de lazo cerrado.

El trabajo de la mayoría de lazos de control en un proceso químico es el de regulación o rechazo de perturbaciones, es decir, de contener la variable controlada en su punto de operación cuando hay perturbaciones.

Hay tres tipos de controladores básicos que son usados en la configuración de control de retroalimentación (*feedback*). Estos controladores pueden tener diferentes tipos de acciones⁽²²⁾:

Acción Proporcional: Un controlador de retroalimentación proporcional cambia su señal de salida, CO en proporción directa con la señal del error, E, que es la diferencia entre el punto de operación SP (*set point*) y la señal de medición del proceso PM, que viene del transmisor

$$CO = \text{bias} \pm K_c(SP - PM)$$

La señal bias es una constante y es el valor de la salida del controlador cuando no hay error. La K_c se conoce como "ganancia del controlador". Entre más grande es la ganancia más cambiará la salida del error para un error dado. Muchos fabricantes de instrumentos usan el término alternativo "banda proporcional" (PB) en vez de ganancia y están relacionadas por $PB = 100/K_c$.

El término de PB se refiere al rango sobre el cual el error debe cambiar para llevar a la salida del controlador sobre su rango total. Por lo tanto, una amplia PB es una K_c baja y viceversa.

La ganancia en el controlador se puede hacer positiva o negativa poniendo un interruptor en un controlador analógico o especificando la señal deseada en un controlador digital. Una ganancia positiva resulta en el decremento de la salida del controlador cuando la medición del proceso incrementa. Esta acción de "incremento-decremento" es llamada un controlador de acción inversa. Para una ganancia negativa la salida del controlador incrementa cuando la medición del proceso incrementa, y esto es llamado un controlador de acción directa.

En la figura 4.3. se ilustra la acción de un controlador P. Entre más grande es la ganancia el corrimiento (desfasamiento) tiende a cero, pero a medida que la ganancia se hace mayor, el proceso se va quedando sin amortiguamiento y se vuelve inestable.

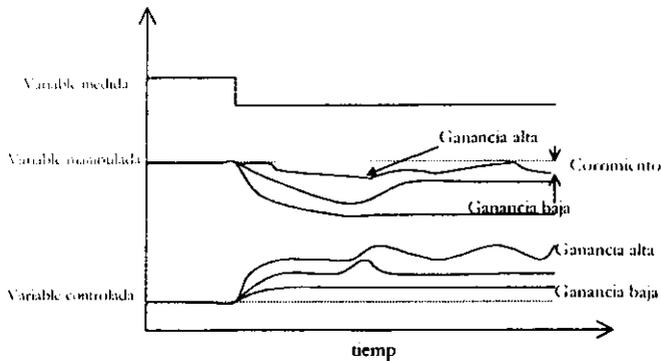


Figura 4.3. Acción de un controlador Proporcional

Acción Integral: La acción proporcional mueve la válvula de control en proporción directa a la magnitud del error. La acción integral mueve la válvula de control basada en el tiempo integral del error

$$CO = \text{bias} + \frac{1}{\tau_i} \int E(t) dt$$

Donde τ_i es el tiempo integral o el *reset time* con unidades de minutos.

Si no hay error, la salida del controlador no se mueve. A medida que el error se vuelve positivo o negativo, la integral del error lleva a la salida del controlador hacia arriba o hacia abajo, dependiendo de la acción (inversa o directa) del controlador. Un controlador proporcional no llevará la variable controlada a su *set point* cuando sucede una perturbación al mismo. Este error permanente (SP-PM) es llamado error en estado estacionario o corrimiento (*offset*). La acción integral reduce el corrimiento a cero.

En la figura 4.3. se presenta el efecto de la acción proporcional-integral. Entre menor es el tiempo de integración, τ_i , el error se reduce más rápido pero el sistema se queda sin amortiguamiento a medida que τ_i es reducido y, si es demasiado pequeño, el sistema se vuelve inestable.

Acción Derivativa: El propósito de la acción derivativa es anticipar hacia donde se dirige el proceso, analizando la rapidez del tiempo de cambio de la variable controlada (su derivada). Si fuera posible tomar la derivada de la señal de error (que no se puede hacer de manera precisa) tendríamos una acción derivativa ideal

$$CO = \text{bias} + \tau_d \frac{dE}{dt}$$

Donde τ_i , es el tiempo derivativo en minutos.

En teoría, la acción derivativa debe de mejorar siempre la respuesta dinámica y sucede en muchos circuitos. En otros, sin embargo, el problema de señales ruidosas (señales fluctuantes de las mediciones del proceso) hace el uso de la acción derivativa indeseable.

La figura 4.5. muestra como el controlador proporcional-integral-derivativo detecta la rapidez del alejamiento del *set point* y comienza a mover la válvula de control antes que la acción de un controlador PI. Por lo tanto, los PID se usan cuando la señal no presenta demasiado ruido, de no ser así, el controlador estaría oscilando.

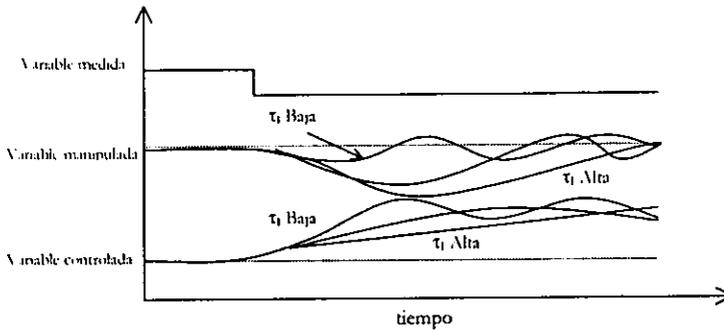


Figura 4.4. Acción de un controlador Proporcional-Integral

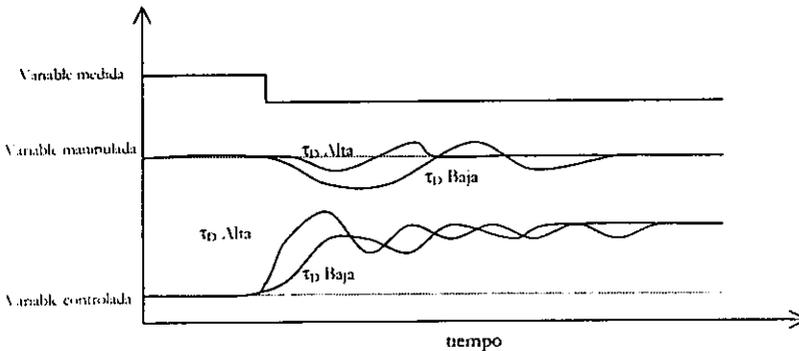


Figura 4.5. Acción de un Controlador Proporcional-Integral-Derivativo

Tipo estándar de controladores: Se clasifican según la acción que lleven a cabo como se explicó anteriormente.

Controlador Proporcional (P): La salida de un controlador proporcional cambia solo si la señal de error cambia. Debido a que un cambio de perturbación requiere una nueva posición

de la válvula de control, el controlador debe finalizar con una nueva señal de error. Esto significa que un controlador proporcional generalmente da un error en estado estacionario o corrimiento. Esta es una limitación propia de los controladores P y el por qué siempre se agrega la acción integral.

Controlador Proporcional-Integral (PI): La acción integral elimina el error en estado estacionario. Entre menor es el tiempo de integración τ_i , el error es reducido más rápido.

Controlador Proporcional-Integral-Derivativo (PID): Se usan en lazos donde las señales no son ruidosas y donde se requiere una respuesta dinámica precisa. La acción derivativa ayuda a compensar los retardos en el lazo. El controlador detecta la rapidez del movimiento del *set point* y comienza a mover la válvula de control antes de lo que lo haría un controlador PI.

La expresión matemática de estos controladores se engloba en la ley de control de un PID, obteniendo las de un controlador P y un PI haciendo cero los términos correspondientes ($\tau_i = \tau_p = 0$ y $\tau_d = 0$ respectivamente).

$$c(t) = K_c \varepsilon(t) + \frac{K_c}{\tau_i} \int_0^t \varepsilon(t) dt + K_c \tau_d \frac{d\varepsilon}{dt} + c_s$$

Donde $c(t)$ es la salida del controlador, K_c es la ganancia del controlador, $\varepsilon(t)$ es la diferencia entre el *set point* y la señal medida, τ_i es el tiempo de integración y τ_d es el tiempo derivativo.

SINTONIZACIÓN DE UN CONTROLADOR

Hay una gran variedad de métodos de sintonización de controladores, por ejemplo el método de Ziegler y Nichols. Probablemente el 80% de todos los lazos son sintonizados experimentalmente mediante un instrumento mecánico, y 75% del tiempo el mecánico puede inferir aproximadamente cuáles son los valores iniciales con lazos similares. Aquí solo se describe el método usado en este trabajo.

Método de Prueba y Error en Línea.

Para sintonizar un controlador en línea se aplican los pasos siguientes:

1. Con el controlador en manual, lleve la acción integral fuera del controlador, es decir, el valor de la constante debe ser nulo.
2. Ponga la PB en un valor alto (ganancia baja).
3. Ponga el controlador en automático.
4. Ponga un *set point* pequeño o una perturbación y observe la respuesta de la variable de control.

5. Reduzca la PB (mayor ganancia) y haga un pequeño cambio en el *set point* o en la perturbación.
6. Siga reduciendo la PB hasta que el lazo se haga oscilatorio o sin amortiguamiento. La ganancia a la cual ocurre esto se le llama la ganancia última.
7. Regrese la PB a 2 veces la ganancia última.
8. Ahora actualice la acción integral reduciendo τ_i por factores de 2 agregando pequeñas perturbaciones en cada valor de τ_i para ver el efecto.

CONTROLADORES AVANZADOS

CONTROL PREDICTIVO BASADO EN MODELO

El Control Predictivo Basado en Modelo (Model Predictive Control, MPC) es la familia de controladores en donde hay un uso directo de un modelo explícito e identificable separadamente.

Los métodos de diseño de control basados en el concepto de MPC han encontrado una gran aceptación en aplicaciones industriales. La razón para tal popularidad es la gran habilidad de los diseños MPC para arrojar sistemas de control de alto desempeño capaces de operar sin la intervención de personal por largos periodos de tiempo. Hay un gran número de técnicas de diseño que se derivan de MPC, como Control de la Matriz Dinámica (Dynamic Matrix Control, DMC), Control Algorítmico basado en Modelo (Model Algorithmic Control, MAC), Control Inferencial y Control Interno basado en Modelo. La diferencia entre estas metodologías radica en las suposiciones particulares y en los compromisos adquiridos en la formulación matemática de los criterios de desempeño y en la selección de una representación del proceso. Esto se hace principalmente para simplificar el problema matemático de tal manera que su solución se adapte a las capacidades de hardware existentes⁽⁶⁾.

La representación natural matemática de muchos de estos criterios están en la forma de funciones objetivo dinámicas a ser minimizadas y de restricciones de desigualdad dinámicas. La representación matemática usual para el proceso es un modelo dinámico con sus incertidumbres asociadas, incluidas de manera explícita en la formulación de los controladores.

JUSTIFICACIÓN DE MPC

En la práctica, el punto de operación de una planta que satisface los objetivos económicos generales del proceso se encuentra en la intersección de las restricciones. Por lo tanto,

Cualquier sistema de control debe anticipar las violaciones de las restricciones y corregirlas en una manera sistemática: las violaciones no deben permitirse mientras se mantiene a la operación cerca de estas restricciones.

La práctica usual en control de procesos es ignorar las restricciones en la etapa de diseño y después “manejarlas” sobre la marcha durante la implementación. La desventaja es que todos los procesos químicos son diferentes, por lo tanto, el manejo sobre la marcha de las restricciones hace que el modelo se debilite particularizándose y haciendo muy difícil su uso bajo otras condiciones diferentes.

Las restricciones económicas demandan que los sistemas de control deban diseñarse sin arreglos sobre la marcha, es decir, especificando de manera transparente los criterios de desempeño (las restricciones). La experiencia ha demostrado que las técnicas de MPC proporcionan la *única* metodología para manejar restricciones de una manera sistemática durante el diseño y la implementación del controlador. Además, en su forma más general, MPC no está restringido en términos del modelo, de la función objetivo y/o de la funcionalidad de las restricciones. Por estas razones, es la única metodología que actualmente puede reflejar de forma más directa los muchos criterios de desempeño relevantes para las industrias del proceso y es capaz de utilizar cualquier modelo del proceso disponible. Esta es la principal razón del éxito de estas técnicas en numerosas aplicaciones en las industrias de procesos químicos.

CARACTERÍSTICAS

El nombre de Control Predictivo basado en Modelo proviene de la característica de que se usa un modelo dinámico explícito de la planta para predecir el efecto de acciones futuras de las variables manipuladas sobre la salida. Los movimientos futuros de las variables manipuladas se determinan mediante la optimización con el objetivo de minimizar el error predicho sujeto a las restricciones de operación. La optimización se repite a cada momento basándose en la información actualizada (mediciones) de la planta⁽⁹⁾.

Por lo tanto, en el contexto de MPC el problema de control incluyendo la importancia relativa de los diferentes objetivos de las restricciones, etc., es formulado como un problema de optimización dinámica a gran escala aplicado rutinariamente en tiempo real en la industria del proceso.

Desde 1978 su popularidad en las industrias de los procesos químicos ha ido incrementado. La mayoría de las aplicaciones que ha tenido MPC son multivariables e involucran restricciones, por ejemplo se han reportado aplicaciones a un generador de vapor, un horno de vidrio; Shell lo ha aplicado a una unidad de desintegración catalítica, y un reactor batch, por ejemplo.

Los esquemas de MPC usan datos discretos de respuesta al escalón en vez de un modelo paramétrico. Predicen la trayectoria futura de la salida del proceso, entonces el controlador calcula la acción de control requerida de manera que la diferencia entre la trayectoria predicha y la trayectoria especificada por el usuario (*set point*) sea mínima⁽¹⁰⁾.

MPC es popular en la industria y en la investigación porque:

- ◆ Usa datos de respuesta al escalón que es relativamente fácil de obtener
- ◆ Es multivariable

- ◆ Maneja retardos de tiempo y no linealidades suaves
- ◆ Optimiza sobre la trayectoria
- ◆ Puede manejar restricciones estrictas
- ◆ Ha demostrado su efectividad en las aplicaciones industriales en los pasados 10 años.

MPC es referido por muchos como un desarrollo importante en el control de procesos, ha progresado rápidamente principalmente en las industrias petroquímicas. Resulta atractivo por su formulación flexible y la habilidad de manejar restricciones en un arreglo de control óptimo. No solo se han analizado y mejorado los algoritmos industriales sino también se han resuelto problemas teóricos importantes de MPC que no podían resolverse con técnicas lineales.

PERSPECTIVA GENERAL⁽¹⁵⁾

El concepto básico de MPC se representa en la figura 4.6.

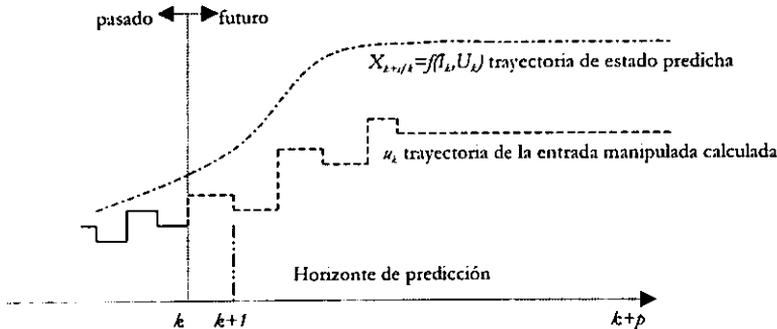


Figura 4.6. Idea básica del Control Predictivo basado en Modelo

En el tiempo k -ésimo de muestreo, se recibe información acerca del estado actual del sistema. Basado en la información y en el modelo del sistema, se puede predecir la dependencia de los estados futuros sobre las entradas manipuladas futuras. La trayectoria de las entradas futuras es entonces determinada de acuerdo a criterios de optimalidad y se implementa en el siguiente tiempo de muestreo, cuando el proceso entero se repite basándose en la nueva información.

Más específicamente, sea I_k la representación del vector de información que resume la información disponible en el k -ésimo tiempo de muestreo. Además sea U_k un vector de dimensiones finitas que parametriza la trayectoria futura de las entradas manipuladas. Por lo tanto, la relación entre la trayectoria de estados futuros $x(t)$ y U_k e I_k dentro del horizonte de predicción elegido, $(k * t < t < (k+p) * t$, donde t es el tiempo de muestreo) se puede establecer.

Se lleva a cabo la siguiente optimización con el fin de determinar U_k :

$$\begin{aligned} \min_{U_k} & \phi(I_k, U_k) \\ \psi(I_k, U_k) & \leq 0 \end{aligned}$$

Donde ϕ se escoge de manera que la trayectoria futura predicha de los estados (o su distribución de probabilidad) sea moldeada de una manera deseada minimizándola y el vector ψ se escoge de manera que la desigualdad represente las restricciones del sistema. Las restricciones pueden surgir debido a las limitaciones de los dispositivos físicos así como también de las consideraciones económicas y de seguridad.

Aunque se calcula la trayectoria de entrada para el horizonte entero de predicción, se implementa solo para un intervalo de muestreo y el procedimiento se repite en el siguiente tiempo de muestreo. A esto se le llama control con horizonte móvil (*receding horizon control*). Lo que resulta es una ley de control de retroalimentación discreta, pero esta ley no se da explícitamente a través del problema de optimización, que debe ser resuelto a cada paso del tiempo. Un punto notorio es que la trayectoria de entrada futura calculada es una trayectoria calculada aisladamente tomando como base la información actual. Por lo tanto, existe una discrepancia porque se asume un control de lazo abierto en el cálculo de control de retroalimentación. Esta es una característica clave que distingue MPC del control óptimo de retroalimentación. La aproximación del control óptimo de retroalimentación asume una relación óptima entre las acciones de entrada futuras y la información futura pero conduce a un problema de programación dinámica nada atractivo.

MPC proporciona una manera computacionalmente atractiva para resolver un problema de control óptimo.

Definiendo el siguiente sistema lineal discreto:

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= Ax_k + Bu_k + w_k \\ y_k &= Cx_k + v_k \end{aligned}$$

x es el vector de estados incluyendo en los estados las perturbaciones, y es el vector de las salidas medidas, u es el vector de las variables manipuladas. $\begin{bmatrix} w \\ v \end{bmatrix}_k$ es una secuencia de vectores independientes que representan las entradas desconocidas del sistema, el subíndice k representa el k -ésimo tiempo de muestreo. Sin perder generalidad, se asumirá que el tiempo de muestreo es 1; por lo tanto, $t=k$ representa el k -ésimo tiempo de muestreo. (A, B) y (C, A) se asume que son pares detectables y estabilizables. El problema es regular la secuencia del vector de estados x_k (o ciertas combinaciones lineales de x_k) al origen, mientras se satisfacen las restricciones

$$\begin{aligned} u_{\min} &\leq u \leq u_{\max} \\ h_{\min} &\leq Hx \leq h_{\max} \end{aligned}$$

Se asume que $u_{\min} < 0$, $u_{\max} > 0$, $b_{\min} < 0$, y $b_{\max} > 0$ y por lo tanto $u=0$ y $Hx < 0$ son soluciones factibles. Dependiendo del sistema, se pueden imponer restricciones de entrada adicionales para limitar la rapidez de cambio.

Para el desarrollo de la siguiente sección se asume que A , B , C son matrices de constantes conocidas del sistema.

Sea el vector de información I_k compuesto por $x_{k|k}$, un estimado de x_k disponible de algún observador de estado. Entonces, basándose en el modelo del sistema, se puede desarrollar la siguiente predicción

$$\begin{bmatrix} x_{k+1|k} \\ \vdots \\ x_{k+p|k} \end{bmatrix} = S^* x_{k|k} + S^u \begin{bmatrix} u_k \\ \vdots \\ u_{k+p-1} \end{bmatrix}$$

donde S^* y S^u son matrices de constantes que pueden ser calculadas a través de las matrices del sistema. $x_{k+i|k}$ funciona para la predicción de x_{k+i} , basándose en I_k . Sea la trayectoria de entrada de lazo abierto a ser calculada representada por

$$U_k \triangleq [u_{k|k}^T, \dots, u_{k+m-1|k}^T]^T$$

que requiere que la trayectoria de entrada regrese a cero después de m pasos de tiempo, es decir, $u_{k+i|k} = 0$ para $i \geq m$.

Se resuelve la siguiente optimización en el tiempo k :

$$\begin{aligned} \min_{U_k} & \sum_{i=1}^p x_{k+i|k}^T Q x_{k+i|k} + \sum_{i=0}^{m-1} u_{k+i|k}^T R u_{k+i|k} \\ x_{k+i|k} & \in X, i = 1, \dots, p \\ u_{k+i|k} & \in V, i = 0, \dots, m-1 \end{aligned}$$

Q y R son matrices positivas definidas. $x_{k+i|k} \in X$ y $u_{k+i|k} \in V$ representan las restricciones principales en los estados futuros y en las entradas manipuladas. Haciendo

$$u_k = u_{k|k}$$

entonces el procedimiento completo (con k remplazada por $k+1$) se repite en el siguiente tiempo de muestreo. Esto proporciona una ley de control de retroalimentación implícita $u_i = f(x_{i|j})$ definida arriba mediante el procedimiento QP anterior.

Aproximaciones que resultan en un problema con tamaño reducido

MPC de horizonte infinito con número finito de movimientos en las entradas

Rawlings y Muske propusieron una aproximación para MPC de horizonte infinito donde

$$\begin{aligned} \min_{U_i} & \sum_{i=1}^{\infty} x_{k+i|k}^T Q x_{k+i|k} + \sum_{i=0}^{m-1} u_{k+i|k}^T R u_{k+i|k} \\ x_{k+i|k} & \in X, i = 1, \dots, \infty \\ u_{k+i|k} & \in V, i = 0, \dots, m-1 \end{aligned}$$

Defínase a φ_i como el costo óptimo para el problema de la ecuación anterior.

Solución del problema de horizonte infinito

Se ignoran las restricciones de estado por un momento. La restricción $u_{k+i|k}=0, i \geq m$ significa que se asume que el sistema opera en lazo abierto iniciando al tiempo $k+m$. Por lo tanto, el costo de ahí en adelante puede ser expresado como el peso cuadrático en el vector de estados en el tiempo $k+m$, es decir, $\sum_{i=m}^{\infty} x_{k+i|k}^T Q x_{k+i|k} = x_{k+m|k}^T \bar{Q} x_{k+m|k}$ donde \bar{Q} es la solución positiva definida de la ecuación de Lyapunov $A^T \bar{Q} A - \bar{Q} + Q = 0$. Sin embargo, con el fin de que la ecuación de Lyapunov tenga una solución positiva definida, A debe ser estable. Esto significa que se deben restringir todos los modos inestables a cero en el tiempo $k+m$ con el fin de que el costo con horizonte infinito de lazo abierto tenga una frontera.

Sea Γ_s y Γ_u las proyecciones de x sobre los eigenspacios estable e inestable de A respectivamente. Entonces el problema de horizonte infinito se puede escribir como el siguiente problema de QP:

$$\begin{aligned} \min_{U_i} & \sum_{i=1}^{m-1} x_{k+i|k}^T Q x_{k+i|k} + \sum_{i=0}^{m-1} u_{k+i|k}^T R u_{k+i|k} + x_{k+m|k}^T (\Gamma_s)^T \bar{Q}_s \Gamma_s x_{k+m|k} \\ \Gamma_u x_{k+m|k} & = 0 \\ x_{k+i|k} & \in X, i = 1, \dots, m+N \\ u_{k+i|k} & \in V, i = 0, \dots, m-1 \end{aligned}$$

donde \bar{Q}_s es la solución positiva definida de la ecuación de Lyapunov

$$(\Gamma_s^T)^T A^T \Gamma_s^T \bar{Q}_s \Gamma_s A \Gamma_s^T - \bar{Q}_s + (\Gamma_s^T)^T Q \Gamma_s^T = 0$$

con $\Gamma_s^T \Delta \Gamma_s^T (\Gamma_s \Gamma_s^T)^{-1}$.

Existen más tipos de aproximaciones como MPC con horizonte infinito con relación de retroalimentación lineal rearmada, MPC con horizonte infinito con restricciones terminales, etc., sin embargo tales temas, al igual que los mencionados, son material de estudios más completos y no se incluyen aquí.

La implementación industrial de MPC se inició con MAC (1978) y DMC (1980). Más tarde surge LDMC (DMC Lineal) que usa una función objetivo lineal e incorpora las restricciones de manera explícita, y después surge QDMC (solución cuadrática de DMC) que es una extensión

de DMC que incorpora una función de desempeño cuadrática y también incorpora las restricciones explícitamente.

Durante la investigación realizada, se profundizó en QDMC (*Quadratic Dynamic Matrix Control*, Control Cuadrático de la Matriz dinámica), una metodología de solución de la familia de los controladores MPC, y en MPC con modelos lineales.

MPC CON MODELOS LINEALES⁽²³⁾

MPC con modelos lineales se refiere a una clase de algoritmos de control que calculan un perfil de la variable manipulada usando un modelo *lineal* del proceso para optimizar un objetivo de desempeño de lazo abierto lineal o cuadrático sujeto a restricciones lineales sobre un horizonte de tiempo futuro. Se implementa el primer movimiento del perfil de la variable manipulada óptima de lazo abierto

Formulación del Regulador del Horizonte Móvil (*Receding Horizon*)

El modelo discreto dinámico del sistema usado por el controlador es una formulación en el espacio de los estados donde y es el vector de salidas, u es el vector de las entradas y x es el vector de los estados

$$\begin{aligned}x_{k+1} &= Ax_k + Bu_k \\ y_k &= Cx_k\end{aligned} \quad k=0, 1, 2, \dots$$

el regulador del horizonte en móvil se basa en la minimización de la siguiente función objetivo cuadrática de lazo abierto de horizonte infinito en el tiempo k

$$\min_{u^N} \sum_{j=0}^{\infty} (y_{k+j}^T Q y_{k+j} + u_{k+j}^T R u_{k+j} + \Delta u_{k+j}^T S \Delta u_{k+j})$$

Q es una matriz de penalización positiva semidefinida simétrica sobre las salidas con y_{k+j} calculada con el modelo dinámico en el espacio de los estados. R es una matriz de penalización positiva definida simétrica sobre las entradas donde u_{k+j} es el vector de entradas en el tiempo j en la función objetivo de lazo abierto. S es una matriz de penalización positiva semidefinida simétrica sobre la rapidez del cambio de las entradas donde $\Delta u_{k+j} = u_{k+j} - u_{k+j-1}$ es el cambio en el vector de entradas en el tiempo j . El vector u^N contiene los N futuros movimientos del control del lazo abierto como se muestra

$$u^N = \begin{bmatrix} u_k \\ u_{k+1} \\ \vdots \\ u_{k+N-1} \end{bmatrix}$$

en el tiempo $k+N$, el vector de entrada u_{k+j} , se establece en cero y se mantiene en este valor para toda $j \geq N$ en el cálculo del valor de la función objetivo de lazo abierto. El regulador del horizonte móvil calcula el vector u^N que optimiza la función objetivo de lazo abierto. El primer valor de entrada en u^N , u_k es inyectado a la planta. Este procedimiento se repite en cada intervalo de control sucesivo con la retroalimentación incorporada usando las mediciones de la planta para actualizar el vector de estados en el tiempo k .

La función objetivo con horizonte infinito de lazo abierto puede expresarse como la siguiente función objetivo de lazo abierto de horizonte finito

$$\min_{u^N} \Phi_k = x_{k+N}^T \bar{Q} x_{k+N} + \Delta u_{k+N}^T S \Delta u_{k+N} + \sum_{j=0}^{N-1} (x_{k+j}^T C^T Q C x_{k+j} + u_{k+j}^T R u_{k+j} + \Delta u_{k+j}^T S \Delta u_{k+j})$$

El término de penalización de la salida ha sido reemplazado con el correspondiente término de penalización de los estados. La determinación de la matriz de penalización de los estados terminal, depende de la estabilidad del modelo de la planta.

Sistemas Estables

Para sistemas estables, \bar{Q} se define como

$$\bar{Q} = \sum_{i=0}^{\infty} A^{Ti} C^T Q C A^i$$

esta suma infinita se determina por medio de la solución de la siguiente ecuación discreta de Lyapunov:

$$\bar{Q} = C^T Q C + A^T \bar{Q} A$$

Existen métodos estándar disponibles para la solución de esta ecuación.

Una manipulación algebraica de la última ecuación de la función objetivo cuadrática resulta en el siguiente programa cuadrático para u^N

$$\min_{u^N} \Phi_k = (u^N)^T H u^N + 2(u^N)^T (G x_k - F u_{k-1})$$

Las matrices H , G y F se calculan como sigue después de determinar \bar{Q}

$$H = \begin{bmatrix} B^T \bar{Q} B + R + 2S & B^T A^T \bar{Q} B - S & \dots & B^T A^{T^{N-1}} \bar{Q} B \\ B^T \bar{Q} A B - S & B^T \bar{Q} B + R + 2S & \dots & B^T A^{T^{N-2}} \bar{Q} B \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ B^T \bar{Q} A^{N-1} B & B^T \bar{Q} A^{N-2} B & \dots & B^T \bar{Q} B + R + 2S \end{bmatrix}$$

$$G = \begin{bmatrix} B^T \bar{Q} A \\ B^T \bar{Q} A^2 \\ \vdots \\ B^T \bar{Q} A^N \end{bmatrix}, F = \begin{bmatrix} S \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

Restricciones

Se consideran restricciones de entrada y salida de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} u_{min} &\leq u_{k+j} \leq u_{max}, & j=0, 1, \dots, N-1 \\ y_{min} &\leq y_{k+j} \leq y_{max}, & j=j_1, j_1+1, \dots, j_2 \\ \Delta u_{min} &\leq \Delta u_{k+j} \leq \Delta u_{max}, & j=0, 1, \dots, N \end{aligned}$$

Las restricciones de salida son aplicadas desde el tiempo $k+j_1, j_1 \geq 1$, hasta el tiempo $k+j_2, j_2 \geq j_1$. El valor de j_2 es escogido tal que la factibilidad de las restricciones de salida hasta el tiempo $k+j_2$, implique la factibilidad de estas restricciones en el horizonte infinito. El valor de j_1 es escogido tal que las restricciones de salida sean factibles en el tiempo k . El regulador restringido llevará a las restricciones de salida hasta el inicio del horizonte hasta el tiempo $k+j_1$, con el fin de obtener restricciones factibles y una solución al programa cuadrático. Las ecuaciones anteriores pueden ser expresadas como la siguiente restricción sobre u^N .

$$\begin{bmatrix} I \\ -I \\ D \\ -D \\ W \\ -W \end{bmatrix} u^N \leq \begin{bmatrix} i_1 \\ i_2 \\ d_1 \\ d_2 \\ w_1 \\ w_2 \end{bmatrix}$$

Las matrices D y W se calculan como se muestra a continuación con A_j definidas como cero o para toda $j < 1$.

$$D = \begin{bmatrix} A^{h-1} B & \dots & A^{h-N} B \\ \vdots & & \vdots \\ A^{h-1} B & \dots & A^{h-N} B \end{bmatrix}, W = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & -1 & 1 \\ 0 & \dots & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Y los valores del vector del lado derecho de la desigualdad son los siguientes:

$$i_1 = \begin{bmatrix} u_{max} \\ \vdots \\ u_{max} \end{bmatrix}, i_2 = \begin{bmatrix} -u_{min} \\ \vdots \\ -u_{min} \end{bmatrix}, d_1 = \begin{bmatrix} y_{max} - CA^h x_k \\ \vdots \\ y_{max} - CA^{h_2} x_k \end{bmatrix}, d_2 = \begin{bmatrix} -y_{min} + CA^h x_k \\ \vdots \\ -y_{min} + CA^{h_2} x_k \end{bmatrix}$$

$$w_1 = \begin{bmatrix} \Delta u_{max} + u_{k-1} \\ \Delta u_{max} \\ \vdots \\ \Delta u_{max} \end{bmatrix}, w_2 = \begin{bmatrix} \Delta u_{min} - u_{k-1} \\ \Delta u_{min} \\ \vdots \\ \Delta u_{min} \end{bmatrix}$$

Con el fin de asegurar que se ha especificado un arreglo consistente de restricciones, se imponen las siguientes restricciones sobre las restricciones. Estas restricciones garantizan la factibilidad de las originales.

$$\begin{bmatrix} u_{max} \\ -u_{min} \\ y_{max} \\ -y_{min} \\ \Delta u_{max} \\ \Delta u_{min} \end{bmatrix} > \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

DMC⁽⁷⁾

Es un controlador predictivo basado en modelo que muestra propiedades excelentes debido a su estructura particular. La técnica fue desarrollada por Shell. El método es rigurosamente derivado para sistemas lineales (como en cualquier otro controlador convencional) y por lo tanto, cualquier análisis en DMC y sus características se debe hacer dentro de un marco de teoría lineal.

Sin perder generalidad, considérese un sistema dinámico lineal con una salida O y una entrada I . En aplicaciones computacionales, solo interesa el comportamiento del sistema en los intervalos del muestreo. Por lo tanto se usa una representación dinámica del sistema, tal representación está dada por

$$O(k+1) = \sum_{i=1}^M a_i \Delta I(k-i+1) + O_0 + d(k+1)$$

donde k denota tiempo discreto; O_0 es la condición inicial de la salida; $\Delta I(k)$ es un cambio en la entrada (o en la variable manipulada) en diferentes intervalos de tiempo k ; $O(k)$ es el valor de la variable controlada en el tiempo k ; $d(k)$ toma en cuenta los factores no modelados que afectan $O(k)$; a_i son los coeficientes de respuesta del sistema al escalón unitario; y M es el número de

intervalos de tiempo requeridos para que el sistema alcance el estado estacionario. Por lo tanto, $a_i = a_M$ para $i \geq M$.

Nótese que el término $d(k+1)$ ha sido agregado a la descripción de entrada salida para tomar en cuenta los efectos no modelados en la salida medida, que consiste de perturbaciones no medidas y/o errores del modelaje. La inclusión de este factor es crucial en la derivación de DMC.

Diseño del Controlador

El objetivo de cualquier controlador es encontrar los movimientos de las variables manipuladas, $\Delta I(k)$, que haría que la salida $O(k)$ tenga la mejor correspondencia con el valor establecido (*set point*) O , enfrentando a las perturbaciones. Asumiendo que el presente intervalo de tiempo es, en DMC una proyección de la salida $O(k)$ sobre P futuros intervalos de tiempo ($\bar{k} + 1$ a $\bar{k} + P$) se hace corresponder al *set point* O s prescribiendo una secuencia de futuros movimientos.

Derivación de las ecuaciones DMC

De la ecuación presentada anteriormente, la salida proyectada para cualquier tiempo futuro $\bar{k} + l, l > 0$ es:

$$\begin{aligned}
 O(\bar{k} + l) &= \sum_{i=1}^l a_i \Delta I(\bar{k} + l - i) && \text{(efecto de futuros movimientos)} \\
 &+ O_0 + \sum_{i=l+1}^M a_i \Delta I(\bar{k} + l - i) && \text{(efecto de movimientos pasados)} \\
 &+ d(\bar{k} + l) && \text{(perturbaciones predichas)}
 \end{aligned}$$

Por simplicidad defínase

$$O^*(\bar{k} + l) = O_0 + \sum_{i=l+1}^M a_i \Delta I(\bar{k} + l - i)$$

como la contribución a $O(\bar{k} + l)$ debido a los movimientos de las entradas pasadas hasta el tiempo presente \bar{k} . Este término puede ser siempre calculado a partir de la historia pasada de los movimientos.

Usando esta definición, se puede escribir la ecuación para todos los tiempos desde $\bar{k} + 1$ hasta $\bar{k} + P$ para producir un arreglo de ecuaciones para las proyecciones de las salidas como sigue:

$$\begin{bmatrix} O(\bar{k} + 1) \\ \vdots \\ O(\bar{k} + P) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} O^*(\bar{k} + 1) \\ \vdots \\ O^*(\bar{k} + P) \end{bmatrix} + \underline{A} \begin{bmatrix} \Delta I(\bar{k}) \\ \vdots \\ \Delta I(\bar{k} + N - 1) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} d(\bar{k} + 1) \\ \vdots \\ d(\bar{k} + P) \end{bmatrix}$$

donde

$$\underline{A} = \begin{bmatrix} a_1 & 0 & \dots & 0 \\ a_2 & a_1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ a_N & a_{N-1} & \dots & a_1 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_M & a_{M-1} & & a_{M-N+1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_M & a_M & \dots & a_M \end{bmatrix}$$

es llamada la “matriz dinámica” del sistema. Nótese que en la formulación de DMC sólo N movimientos son calculados, es decir,

$$\Delta I(k) = 0 \text{ para } k > \bar{k} + N$$

Posicionando estos movimientos en cero imparte propiedades importantes de estabilidad al controlador resultante. En particular, como resultado de la experiencia, seleccionando $P=N+M$ generalmente resulta un controlador estable.

Estimación de los efectos no modelados $d(k)$ en DMC

Este conjunto de ecuaciones requiere de una predicción de los efectos no modelados $d(k)$. Ya que los valores futuros de las “perturbaciones” $d(k)$ no están disponibles, lo mejor que se puede hacer es un estimado.

Tomando la ecuación principal, para $k = \bar{k} - 1$, y la ecuación de $O^*(\bar{k} + l)$ para $l=0$, se obtiene

$$O(\bar{k}) = O^*(\bar{k}) + d(\bar{k})$$

Por lo tanto, $d(\bar{k})$ puede estimarse usando la medición de retroalimentación actual $O_m(\bar{k})$ de O junto con la información de los movimientos de las entradas pasadas. En la ausencia de cualquier conocimiento adicional de $d(k)$ sobre los intervalos futuros (así como sucede en la mayoría de los casos), la perturbación predicha se asume igual a la presente $d(\bar{k})$ “medida”:

$$\begin{aligned} d(\bar{k} + l) &= d(\bar{k}) \\ &= O_m(\bar{k}) - O^*(\bar{k}); \quad l=1, \dots, P \end{aligned}$$

Solución de las ecuaciones de DMC

Dado este conjunto de ecuaciones, el problema de control de DMC queda definido como encontrar los movimientos de las N entradas futuras $\Delta I(\bar{k}) \dots \Delta I(\bar{k} + N - 1)$ tal que la suma del cuadrado de las desviaciones entre las proyecciones $O(\bar{k} + l)$ y el *set point* O , sea minimizada. Esto es equivalente a la solución de mínimos cuadrados de las ecuaciones de DMC.

$$\begin{bmatrix} O_i - O^*(\bar{k} + 1) - d(\bar{k}) \\ \vdots \\ O_i - O^*(\bar{k} + P) - d(\bar{k}) \end{bmatrix} = e(\bar{k} + 1) = \underline{\underline{A}}x(\bar{k})$$

donde $e(\bar{k} + 1)$ es un vector de dimensión P de desviaciones del *set point* proyectadas y

$$x(\bar{k}) = [\Delta I(\bar{k}) \dots \Delta I(\bar{k} + N - 1)]^T$$

es el vector de los movimientos futuros. Tal solución de mínimos cuadrados está dada por

$$x(\bar{k}) = (\underline{\underline{A}}^T \underline{\underline{A}})^{-1} \underline{\underline{A}}^T e(\bar{k} + 1)$$

En DMC sólo se implementa el movimiento calculado para el intervalo de tiempo actual \bar{k} . El cálculo es repetido en cada intervalo de tiempo k cuando una nueva medición de retroalimentación se obtiene y es usada para actualizar $e(\bar{k} + 1)$.

Para la formulación de sistemas multivariables, las ecuaciones pueden derivarse del caso SISO expuesto considerando r salidas y s entradas al sistema, una representación lineal está dada por

$$O(k + 1) = \sum_{i=1}^M \underline{\underline{a}}_i \Delta I(k - i + 1) + O_0 + d(k + 1)$$

donde $O(k)$ es un vector de salidas de dimensión r , $\underline{\underline{a}}_i$ es una matriz de dimensiones $r \times s$ de coeficientes de respuesta al escalón para el i -ésimo intervalo de tiempo, $\Delta I(k)$ es un vector de movimientos de dimensión s para todas las variables manipuladas en un intervalo de tiempo dado, O_0 es el vector de condiciones iniciales, y $d(k)$ es un vector de factores no modelados.

Se puede definir una matriz dinámica del sistema multivariable $\underline{\underline{A}}$ compuesta de bloques de dimensiones $P \times N$ de matrices de coeficientes de respuesta al escalón como en el caso SISO relacionando la i -ésima salida con la j -ésima entrada como sigue:

$$\underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} \underline{\underline{A}}_{11} & \underline{\underline{A}}_{12} & \dots & \underline{\underline{A}}_{1r} \\ \underline{\underline{A}}_{21} & \underline{\underline{A}}_{22} & \dots & \underline{\underline{A}}_{2r} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \underline{\underline{A}}_{r1} & \underline{\underline{A}}_{r2} & \dots & \underline{\underline{A}}_{rr} \end{bmatrix}$$

Donde los elementos de las matrices $\underline{\underline{a}}_i$ han sido reagrupados. Es decir la matriz $\underline{\underline{A}}_{ij}$ contiene todos los elementos j en la matriz $\underline{\underline{a}}_i$, $i = 1$ a M arregladas como en el caso SISO.

El vector correspondiente de movimientos es

$$x(\bar{k}) = [x_1(\bar{k})^t \ x_2(\bar{k})^t \ \dots \ x_i(\bar{k})^t]^t$$

y el vector de proyección de las salidas se convierte en:

$$e(\bar{k}+1) = [e_1(\bar{k}+1)^t \ e_2(\bar{k}+1)^t \ \dots \ e_i(\bar{k}+1)^t]^t$$

Por lo tanto la ecuación de solución de mínimos cuadrados para DMC SISO aplica también para el caso MIMO.

Sintonización de los parámetros en DMC

Número de movimientos (N) vs horizonte (P). Debe quedar claro a partir de la formulación de DMC que a medida que el número de movimientos de las variables manipuladas (N) incrementa, DMC tiene más libertad para hacer corresponder las proyecciones de las salidas con el *set point*. Es decir, DMC produce un control más estricto a expensas de grandes movimientos o, como es bien sabido, para procesos con características de fase no mínima el controlador resultante podría ser hasta inestable. De la experiencia, la estabilidad (en el caso de un modelo perfecto) se asegura en DMC seleccionando P tal que el efecto del estado estacionario de la mayoría de los futuros movimientos se muestre en las proyecciones; es decir, $P = N + M$. Por lo tanto, DMC es capaz de manejar características dinámicas de fase no mínima, tales como respuesta inversa y tiempo muerto.

Supresión de los movimientos (λ). En DMC por lo regular es necesario restringir o suprimir la amplitud de los movimientos de las entradas. Por lo tanto, las ecuaciones de DMC son generalmente formuladas como

$$\begin{bmatrix} e(\bar{k}+1) \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \underline{A} \\ \underline{\Lambda} \end{bmatrix} x(\bar{k})$$

donde (para sistemas multivariables);

$$\underline{\Lambda} = \text{diag}(\lambda_1 \lambda_1 \dots \lambda_1 \lambda_2 \lambda_2 \dots \lambda_2 \dots \lambda_i \lambda_i \dots \lambda_i)$$

| ← N → |

y $\lambda_i > 0$ es el coeficiente de supresión del movimiento de la i -ésima entrada. Como en cualquier otra formulación de control, un incremento en las penalizaciones de las entradas es equivalente a reducir la ganancia del controlador y por lo tanto, mejora las propiedades de estabilidad de DMC, particularmente frente a las inexactitudes del modelo.

Peso selectivo de las variables controladas (γ). Es posible en DMC dar un control más cercano a una (varias) variable (s) incrementando el peso relativo del correspondiente residual de los mínimos cuadrados. Esto se logra premultiplicando las ecuaciones de DMC con la matriz de pesos $\gamma > 0$;

$$\underline{\Gamma} = \text{diag}(\gamma_1 \gamma_1 \dots \gamma_1 \gamma_2 \gamma_2 \dots \gamma_2 \dots \gamma_i \gamma_i \dots \gamma_i)$$

$$|\leftarrow P \rightarrow|$$

Incluyendo esta matriz de peso, la solución de las ecuaciones de DMC se convierte en,

$$x(\bar{k}) = (\underline{A}^T \underline{\Gamma}^T \underline{\Gamma} \underline{A} + \underline{\Lambda}^T \underline{\Lambda})^{-1} \underline{A}^T \underline{\Gamma}^T \underline{\Gamma} e(\bar{k} + 1)$$

QDMC⁽⁷⁾

Es una versión mejorada del algoritmo multivariable de DMC de Shell que proporciona un método directo y eficiente para manejar las restricciones de los procesos. El algoritmo usa un programa cuadrático para calcular los movimientos sobre las variables manipuladas que mantienen a las variables controladas cerca de sus puntos de operación mientras previenen las violaciones a las restricciones del proceso.

Solución QP de las ecuaciones de DMC

En las aplicaciones en tiempo real, los movimientos calculados pueden no ser aplicables debido a las violaciones de los límites de operación del proceso. Tres tipos de restricciones de proceso se encuentran frecuentemente:

- ◆ Restricciones de la variable manipulada: es decir, saturación de la válvula
- ◆ Restricciones de la variable controlada: disparos de las variables controladas sobrepasando los límites permisibles deben evitarse.
- ◆ Variables asociadas: variables clave del proceso que no son directamente controladas pero deben mantenerse dentro de ciertos límites.

El controlador debe ser capaz de predecir las violaciones futuras y prescribir los movimientos que podrían mantener a estas variables dentro de sus límites.

Las restricciones sobre las proyecciones de estas variables pueden expresarse matemáticamente como un sistema de desigualdades lineales

$$\underline{C}x(\bar{k}) \geq c(\bar{k} + 1)$$

La matriz \underline{C} contiene la información dinámica sobre las restricciones y el vector $c(\bar{k} + 1)$ contiene las desviaciones proyectadas en las variables restringidas de sus límites. También, en la práctica, los límites sobre los movimientos individuales son frecuentemente necesarios

$$x_{min} \leq x(\bar{k}) \leq x_{max}$$

Se puede expresar la solución de mínimos cuadrados de las ecuaciones de DMC como el siguiente problema de minimización cuadrática:

$$\min_{x(k)} S = \frac{1}{2} [\underline{A}x(\bar{k}) - e(\bar{k} + 1)]^T \underline{\Gamma}^T \underline{\Gamma} [\underline{A}x(\bar{k}) - e(\bar{k} + 1)] + \frac{1}{2} x(\bar{k})^T \underline{\Lambda}^T \underline{\Lambda} x(\bar{k})$$

dando la ecuación planteada para SISO como solución. Sujutando este problema a las restricciones de desigualdad lineales, resulta el siguiente problema cuadrático (QP):

$$\min_{x(\bar{k})} F = \frac{1}{2} x(\bar{k})^T \underline{H} x(\bar{k}) - g(\bar{k} + 1)^T x(\bar{k})$$

sujeta a

$$\underline{C}x(\bar{k}) \geq c(\bar{k} + 1)$$

$$x_{\min} \leq x(\bar{k}) \leq x_{\max}$$

donde

$$\underline{H} = \underline{A}^T \underline{\Gamma}^T \underline{\Gamma} \underline{A} + \underline{\Lambda}^T \underline{\Lambda} \quad (\text{La matriz hessiana de QP})$$

$$g(\bar{k} + 1) = \underline{A}^T \underline{\Gamma}^T \underline{\Gamma} e(\bar{k} + 1) \quad (\text{el vector gradiente de QP})$$

La solución del problema planteado anteriormente, mediante un algoritmo QP en cada intervalo de muestreo \bar{k} produce un arreglo de movimientos óptimos $x(\bar{k})$ los cuales satisfacen las restricciones. Cualquier algoritmo comercialmente disponible para QP podría ser usado para resolver el problema. Ya que en QDMC \underline{H} debe probablemente ajustarse a todos los intervalos de muestreo, un algoritmo QP paramétrico es recomendado para reducir el tiempo de cálculo computacional en línea.

Ecuaciones de restricción en QDMC

El excelente desempeño de DMC radica en su formulación particular. Debido a que el manejo de restricciones no es otra cosa que el cambio de las prioridades de control a las variables restringidas, es crucial que la formulación de la matriz dinámica y su estructura se preserven en la formulación de las ecuaciones de restricción.

Variables manipuladas. El vector $x(\bar{k})$ contiene no solo los movimientos presentes a ser implementados sino también las predicciones de los movimientos futuros. Esto da una indicación de donde las variables manipuladas estarán en el futuro.

Se puede limitar el nivel predicho de la i -ésima entrada como sigue

$$I_{i,\min} \leq I_i(\bar{k}) + \sum_{l=1}^n \Delta I_i(\bar{k} + l - 1) \leq I_{i,\max}$$

donde $n=1, \dots, N$, es decir, el número total de movimientos; $I_i(\bar{k})$ es el valor presente de la i -ésima variable manipulada; e $I_{i,\min}$, $I_{i,\max}$ son los límites inferior y superior respectivamente. En forma matricial, estas restricciones están representadas como

factibilidad de aplicación de alguna de las tan variadas técnicas que se han desarrollado. En un reporte de la industria en Japón⁽⁴⁰⁾, por ejemplo, se hace un estudio de la aplicación de controladores y se descubrieron datos y tendencias importantes.

El Control Predictivo basado en Modelo y el Control Difuso están siendo ampliamente implementados en las industrias de la refinería y la petroquímica. El Control Proporcional-Integral-Derivativo Avanzado tal como el de compensación de tiempo muerto y control de prealimentación son aplicados ampliamente en otras industrias donde el control PID convencional es usado.

En cuanto a la tecnología de control aplicada, el control tipo PID avanzado se usa ampliamente y cerca del 30% de las empresas encuestadas ya han usado este tipo de controlador en sus fábricas. MPC y Control Difuso son más ampliamente usados entre las técnicas de control moderno. Ligeramente menos del 40% de las fábricas han aplicado estas técnicas.

Aunque la teoría de control moderno no se aplica mucho, excepto MPC, entre el 60 y 70% de los encuestados que la han aplicado, están satisfechos con los resultados.

APLICACIÓN DE LAS METODOLOGÍAS

Para alcanzar los objetivos planteados en esta tesis, se planteó la solución del modelo dinámico del separador presentado en el capítulo III, con técnicas de control avanzado, particularmente MPC con modelos lineales y QDMC.

Sin embargo, una vez estructurados los programas, se encontraron diversas complicaciones relacionadas con la convergencia y el tipo de proceso de que se trataba, es decir, no se podían aplicar los casos más simples de las metodologías que plantean resolución para modelos estables; el modelo matemático de la batería de separación requiere de métodos para sistemas inestables y además la aplicación de técnicas de cálculo más sofisticadas que no se encuentran dentro del alcance de este trabajo.

ELECCIÓN Y JUSTIFICACIÓN DE LA METODOLOGÍA USADA

La metodología aplicada a la optimización del modelo de una batería de separación de hidrocarburos propuesto en este trabajo de tesis fue el de **búsqueda directa** que está dentro de los algoritmos no lineales irrestrictos. Los beneficios de esta metodología se pueden aprovechar debido al tipo de planteamiento que se hizo del problema:

Aplicar el criterio de optimización para máxima recuperación de hidrocarburos líquidos monitorando los valores de los grados API de tal manera que se logre establecer la presión de la segunda etapa de separación en el punto en el cual la corriente resultante de la batería tenga los grados API máximos aprovechando el tipo de función que resulta de la dependencia de los grados API con la presión (figura 3.3).

Con ello, se puede realizar una "búsqueda directa" restringida al comportamiento de los grados API de salida de la batería de separación dentro del rango de presiones siendo la presión menor la de la última etapa y la presión mayor la de la primera etapa. Se evalúa la función que tiene como variable independiente a la presión y como la dependiente a los "API en cada cierto intervalo de presión definido como "paso", en la primera búsqueda el paso es grande y se va haciendo más pequeño en la medida de grado de precisión que se requiera

Una vez establecido el valor óptimo de la presión en la que los "API son máximos, se mantienen estos valores óptimos con **controladores PI**.

ESTA TESIS NO DEBE
SALIR DE LA BIBLIOTECA

CAPÍTULO V

ALGORITMOS DE OPTIMIZACIÓN Y CONTROL PARA UNA BATERÍA DE SEPARACIÓN DE HIDROCARBUROS

Los algoritmos y procedimientos planteados en este capítulo tienen su base en los dos capítulos anteriores, ya que se aplica la idea de optimización en tiempo real a un modelo riguroso del proceso de separación de hidrocarburos. Cabe mencionar, que algunos de los algoritmos que se usaron eran subrutinas definidas con anterioridad, sólo se integraron de manera conveniente para obtener los resultados esperados.

ANTECEDENTES

Como se mencionó en el capítulo III, uno de los principales criterios de optimización para la recuperación de hidrocarburos líquidos es obtener un aceite con una densidad en grados API máxima (la menor densidad relativa). La gráfica 3.3. muestra la relación de los grados API con la presión y es el criterio en el algoritmo desarrollado.

En un sistema de separación de tres etapas (Figura 3.4.) la presión de la primera etapa está determinada por la presión del cabezal que viene directamente del pozo, a esta etapa se le denomina generalmente separación de alta presión. La tercera etapa (generalmente la última) corresponde a los tanques de almacenamiento cuya presión debe ser la presión atmosférica. Por lo tanto, el único grado de libertad corresponde a la presión de la segunda etapa, comúnmente denominada separación de media presión.

El presente modelo no toma en cuenta los efectos provocados por los internos de los separadores y se considera que el contenido de agua de la mezcla es retirada del sistema de manera que no afecta la termodinámica del mismo. Además, se omiten los efectos de las válvulas y de la distancia entre las etapas que seguramente deben influir en los valores numéricos de los flujos y de la presión del segundo separador además de implicar el uso de equipo adicional como bombas o compresores. Por lo tanto, no se espera la reproducción fiel de los puntos de operación, más bien, se espera la reproducción de la tendencia que siguen los datos.

HERRAMIENTAS DE SOFTWARE

MATLAB

La programación se llevó a cabo en el paquete de simulación MATLAB. Este es un ambiente de simulación matemática sofisticado que puede ser usado para modelar y analizar sistemas dinámicos. Puede manejar sistemas continuos, discretos, lineales o no lineales. Tiene muchas características para la manipulación matricial, es un ambiente abierto

para el cual se han desarrollado “*toolboxes*” (cajas de herramientas) especializadas, por ejemplo: Sistemas de Control (*Control Systems*), Procesamiento de Señales (*Signal Processing*), Optimización (*Optimization*), Control Robusto (*Robust Control*), Análisis- μ (μ -*analysis*) y Redes Neuronales (*Neural Networks*) entre otros^(24, 46).

Matlab soporta estructuras básicas de programación que permiten comandos de ciclos y condicionales además de operadores relacionales y lógicos.

En su modo normal MATLAB es manejado a partir de comandos, es capaz de ejecutar programas almacenados en archivos con extensión “.m”. Hay dos tipos de archivos M: archivos de texto (*script files*) y archivos de funciones (*function files*).

SIMULINK

Simulink es una extensión de MATLAB que se usa para simular sistemas dinámicos en un ambiente gráfico. La interfase gráfica se basa en el uso de ventanas (usando diagramas de bloques). Simulink cuenta con una librería de bloques que hace a esta herramienta realmente útil para simulaciones de sistemas realmente complicados.

OBJETIVO DEL ALGORITMO

El principal objetivo del algoritmo es realizar la optimización en tiempo real de la segunda etapa de separación para un modelo de una batería de separación de tres etapas con el criterio de máxima recuperación de hidrocarburos (valor máximo de grados API) y reproducir apropiadamente las condiciones de operación de una batería de separación real manteniendo una operación estable para poder ser usado en la evaluación de controladores avanzados.

REQUERIMIENTOS

Información

Inicialmente se requieren los datos del análisis PVT que se practican para el fluido proveniente del pozo al que corresponde la batería de separación.

- ◆ Presión del pozo
- ◆ Flujo del pozo
- ◆ Composición del fluido
- ◆ Densidad de la fracción pesada

Programas

En el Grupo de Ingeniería en Sistemas Electrónicos han desarrollado una serie de funciones y programas que realizan cálculos rigurosos del equilibrio líquido-vapor de una mezcla multicomponente. Usando la ecuación de Peng-Robinson.

ALGORITMO PARA ESTADO ESTACIONARIO

Este programa lleva el nombre de PV.m y se encuentra en el Apéndice I, sigue la lógica mostrada en la figura 5.1.

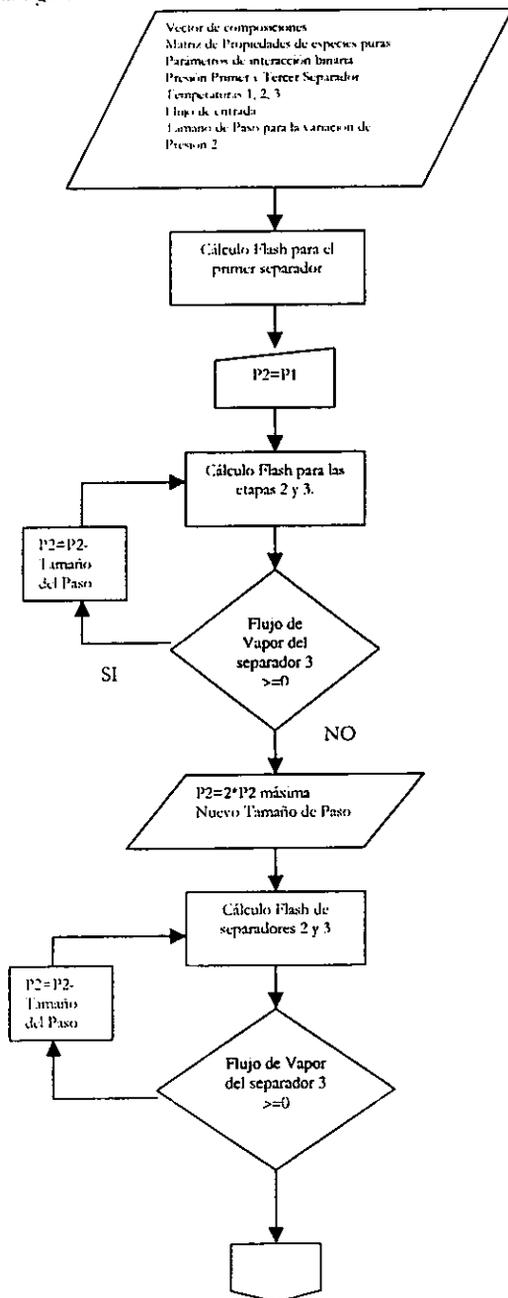


Figura 5.1. Diagrama de Flujo para Programa en Estado Estacionario

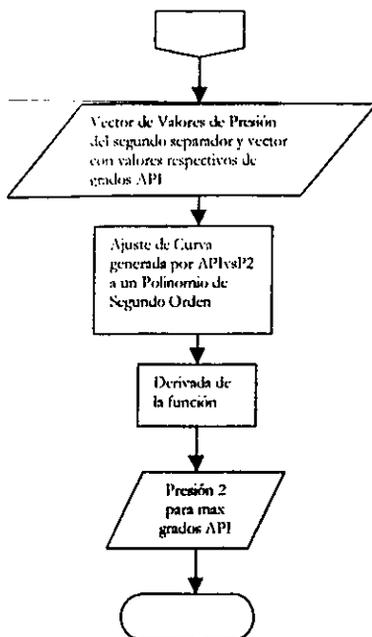


Figura 5.2. Continuación de la figura 5.1

FUNDAMENTO

El proceso que se eligió para el trabajo, puede optimizarse usando el método de *BUSQUEDA DIRECTA*, clasificado como algoritmo no lineal irrestricto. Como se indicó en el capítulo III, las características de la dependencia de los grados API con la presión, se ajustan perfectamente a las exigencias de éste método:

- ◆ Se trata de una función de una sola variable
- ◆ Función unimodal dentro del intervalo de búsqueda
- ◆ No se requiere un óptimo con valor numérico exacto

El proceso está restringido a un intervalo de presiones, sin embargo, una vez encontrando la zona del punto óptimo, estas restricciones no afectan el resultado en el futuro. Con respecto al óptimo, debido a que la función que describe el comportamiento del sistema resulta en una expresión matemática sencilla, se puede ubicar el punto óptimo en un intervalo no tan pequeño pero si que asegura valores lo suficientemente mejores que en una zona fuera de éste.

DESCRIPCIÓN DEL PROGRAMA

El programa requiere valores de propiedades de los componentes de la mezcla inicial, estas propiedades son: Peso molecular, Factor acéntrico, Temperatura crítica, Presión crítica.

Se incluyen también el factor acéntrico crítico, el volumen crítico, y la temperatura de ebullición normal. Se forma una matriz donde los renglones corresponden a los componentes de la mezcla y cada columna corresponde a una propiedad.

Los componentes que se tomaron en cuenta son:

Nitrógeno (N_2)	Dióxido de Carbono (CO_2)	Sulfuro de Hidrógeno (H_2S)
metano (CH_4)	etano (C_2H_6)	propano (C_3H_8)
iso-butano (iC_4H_{10})	n-butano (nC_4H_{10})	iso-pentano (iC_5H_{12})
n-pentano (nC_5H_{12})	n-hexano (nC_6H_{14})	heptano plus ($C_7H_{16}+$)

Se requiere la composición de la mezcla de alimentación, se introduce al programa en un vector que contiene las fracciones parciales de los componentes mencionados. Las composiciones incluidas en el vector se presentan en el Apéndice I.

Los parámetros de interacción binaria se calculan mediante una función que identifica los componentes y busca los valores que corresponden generando una matriz cuadrada de tamaño igual al número de componentes.

Se declaran variables que contienen la presión de la primera etapa y de la tercera etapa, las temperaturas de cada etapa (prácticamente iguales), el flujo de la mezcla inicial y el "tamaño del paso" es decir, el valor que define en cuanto disminuye la presión 2 hasta alcanzar el criterio establecido.

Se hace un cálculo para el primer separador usando la función correspondiente (`sep_fsh.m`), es decir, la función que realiza el cálculo "flash".

Con los resultados se inicia un cálculo sucesivo para las siguientes dos etapas. El objetivo es obtener los grados API del sistema para diferentes valores de presión en el segundo separador. La variación de la presión del segundo separador se hace restando al valor actual el valor del tamaño del paso.

El criterio para detener los cálculos es que todos los valores sigan siendo consistentes. Se observó que a medida que el valor de la presión 2 se acercaba al valor de la presión de la tercera etapa, el valor del flujo de vapor de la tercera etapa tenía valores inconsistentes, es decir, negativos. Por tratarse de la última etapa se busca que el flujo de vapor sea mínimo. La presión 2 deja de disminuir y termina el ciclo de cálculo cuando se identifica el flujo de vapor de la tercera etapa es menor o igual a cero.

El rango de presión inicial considerado es demasiado grande y arroja resultados inciertos (ver capítulo VI), sin embargo, es útil para identificar la zona de incertidumbre donde los grados API son máximos. Siguiendo con la metodología, se realiza un segundo cálculo con la misma secuencia, esta vez con un rango menor que se restringe a dos veces el primer valor de presión máxima (criterio establecido arbitrariamente) encontrado en el paso anterior, por ejemplo, si en la primera aproximación el valor de presión encontrado es 5 para la segunda aproximación el rango a considerar es desde 0 hasta 10. Así, también se hace un ajuste en el tamaño de paso haciéndolo más pequeño para mayor precisión.

El tamaño del paso se determina después de varias pruebas hasta que el comportamiento de los datos es más representativo. Para los datos usados los pasos determinados se presentan en Apéndice I.

Así, se logra una curva más suavizada y se ajusta un polinomio de segundo orden para el cual se determina la primera derivada y tener el máximo valor de los grados API y la presión en donde se presenta.

Los resultados se presentan en el capítulo VI.

FUNCIONES PRINCIPALES

S-Function: tesis_sf.m

La función requiere de parámetros que son tomados directamente desde otro programa. Se declaran dentro del ambiente de simulación y son la matriz de propiedades, la matriz de parámetros de interacción binaria, y la matriz con los valores iniciales de composición y presión declarados en el programa mencionado como Prop, Kb, Z0 y P0 respectivamente.

En la primera parte, se declaran los parámetros de simulación (como tiempo de muestreo para las variables discretas, número máximo de periodos de muestreo, tolerancia de variación de propiedades para actualizar valores, y otros). Además se declaran variables auxiliares para cálculos, como capacidades caloríficas, dimensiones del separador, coeficiente térmico. Los valores se pueden ver en la función tesis_sf.m (Apéndice I).

Se declaran:

Estados continuos: Número de componentes, Flujo de entrada, de salida y Presión

Estados discretos: Flujo de vapor, Densidad del líquido, del vapor, Factor de compresibilidad y Constantes de equilibrio

Número de salidas: Composiciones de líquido y de vapor, Flujo de líquido, Flujo de vapor, Altura del separador, Presión del separador y Grados API

Número de entradas: Vector de composiciones, Flujo de entrada, Puntos de operación de altura y presión del separador

El vector de estados se conforma por el vector de composiciones del líquido, la altura inicial, la temperatura inicial, la presión inicial, el flujo de vapor, las constantes de equilibrio, la densidad del líquido, la densidad del vapor, y el factor de compresibilidad (representado por $x0=[N; h_0; T_0; P_0; V; K_i; dens; rhoV; Zv]$ en el programa).

Para el cálculo de las derivadas de las variables de estado, se introduce el modelo dinámico del separador bifásico descrito en el capítulo III.

La actualización de los estados discretos, se hace en cada punto de muestreo que se establece en los parámetros de simulación.

Para cada punto de muestreo y debido a la naturaleza de las variables discretas, se hace el cálculo *flash*.

Las salidas totales del sistema son la altura del separador, un vector con las composiciones de la fase líquida y su flujo, un vector con las composiciones de la fase vapor y su flujo y la presión del separador además de los grados API.

S-Function: tesis_p2.m

Esta S-Function es mucho más sencilla pues solo tiene una salida que es la presión óptima para el segundo separador. Aquí es importante recalcar que el valor del punto de operación de la presión del segundo separador se consideró discreto, ya que se deben evaluar una serie de funciones que de llevarse a cabo de manera continua, consumiría mucho tiempo y dejaría de ser útil como evaluación dinámica.

Se requieren los parámetros Prop, Kb, Z0, P0, T0 y Ff0 definidos en tesis_pr.m. Los parámetros de simulación son los mismos que para tesis_sf.m. El tiempo de muestreo es de 2 segundos pues se considera suficiente para poder estar monitoreando las condiciones de entrada y localizar algún cambio.

Se especifica sólo un estado discreto, una salida (la presión), Nc+2 entradas (las composiciones de entrada, el flujo de entrada y la presión todos estos datos correspondientes al primer separador).

El diagrama de flujo de esta función se presenta en la figura 5.3.

APLICACIÓN DEL CONCEPTO DE OPTIMIZACIÓN EN TIEMPO REAL

Es en la función tesis_p2.m donde se aplica el carácter de optimización en línea, tiene el mismo concepto que el algoritmo en estado estacionario sólo que se aplica de forma dinámica.

Como se vio en el capítulo IV, los algoritmos de control avanzado, primero hacen una optimización usando el modelo multivariable del proceso y después aplican el control. Esto se hace en cada periodo de muestreo. Sin embargo, en este caso no se requiere un modelo del comportamiento total del separador, ya que la optimización se hace sobre una variable y la estrategia elegida (Búsqueda Directa) sólo requiere de una función que describa adecuadamente la dependencia de los grados API con la presión. La optimización, no se hace en cada intervalo de muestreo, solo cuando el sistema detecta algún cambio en las variables que pueden alterar el comportamiento del sistema (cambios en la presión o en el flujo del primer separador) y los controladores vuelven a ajustar el sistema.

FUNCIONES AUXILIARES

Los programas anteriores, que se han denominado principales, requieren de una serie de funciones, se describen a continuación.

Base de Datos: PROPIED:TXT

Inicialmente se cuenta con una base de datos extensa donde se presentan las propiedades termodinámicas de varios compuestos, entre estos se encuentran los componentes más comunes de las mezclas de hidrocarburos que se obtienen de los pozos. Las propiedades de

la fracción pesada se calculan por medio de otro programa también descrito en este capítulo.

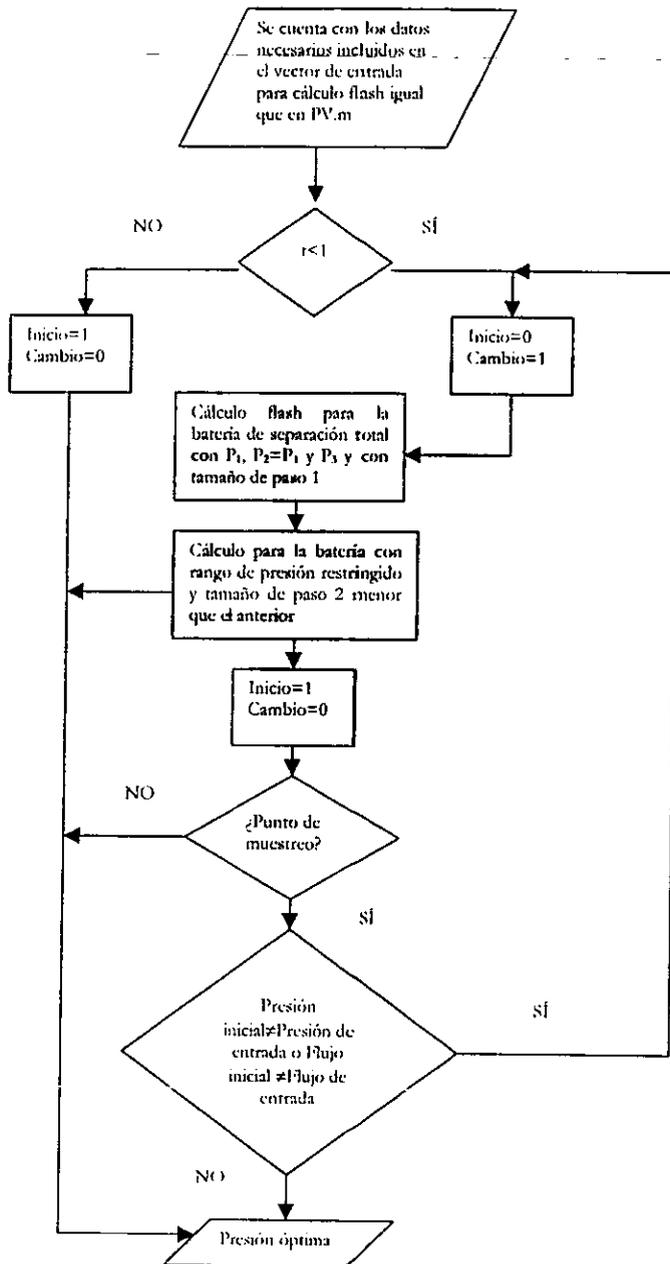


Figura 5.3. Diagrama de Flujo del Programa para Actualizar la Presión del Segundo Separador ante Alguna Perturbación (en flujo y presión 1)

Función: tablas.m

Este programa es de lectura de la base de datos PROPIED.txt. Localiza los componentes de la mezcla y almacena la información en dos vectores diferentes, uno de propiedades y uno de nombres.

Función: int_bin.m

Esta función arroja como resultado la matriz de parámetros de interacción binaria. Identifica el nombre de los componentes, sus propiedades y los enumera usando las funciones previas. Cuando los componentes son iguales, los parámetros de interacción son cero, cuando son diferentes, se busca el valor correspondiente y si no se encuentra en la base de datos, se asigna un valor de cero. A medida que se asigna un valor se acomodan en una matriz cuadrada de tamaño igual al número de componentes y donde la diagonal es necesariamente cero al representar la intersección de componentes iguales.

Función: EOS_PR.m

Esta función determina el valor de los vectores de fugacidad de líquido y vapor para una mezcla multicomponente usando la ecuación de estado de Peng-Robinson. Realiza internamente el cálculo de los parámetros de la ecuación que dependen de las propiedades críticas de los componentes de la mezcla. Se pone la ecuación en su forma polinomial y se buscan las raíces correspondientes, donde la raíz más pequeña corresponde al factor de compresibilidad del líquido y la raíz mayor es el factor de compresibilidad del vapor y se procede al cálculo de las fugacidades. El procedimiento seguido es como se explicó en el capítulo III.

Función: sep_flash.m

El programa realiza el cálculo flash riguroso con ayuda de la función anterior y proporciona como resultado las composiciones y flujos de las fases líquida y vapor, los factores de compresibilidad y las densidades también de ambas fases. Requiere los valores de presión, temperatura y composiciones de entrada, la matriz de propiedades, la de los parámetros de interacción binaria y las constantes de equilibrio iniciales.

Primero calcula las relaciones de equilibrio con la correlación de Wilson. Después se evalúa la región en donde se encuentra la mezcla, si no se encuentra en la región de dos fases, el cálculo termina. Se hace uso de la función EOS_PR.m para evaluar los factores de compresibilidad, con estos se calcula la densidad del vapor y, para la densidad del líquido se requiere de un vector con los valores de densidades de los componentes de la mezcla. El procedimiento sigue la lógica de cálculo explicada en el capítulo III.

Función: optim.m

Busca la presión óptima de un sistema de tres etapas y se requieren los datos de la primera etapa de separación y los de la última etapa. Proporciona el valor de presión al que corresponde el valor mayor de grados API.

Su Diagrama de Flujo simplificado es prácticamente igual al de PV.m y se muestra en la figura 5.4.

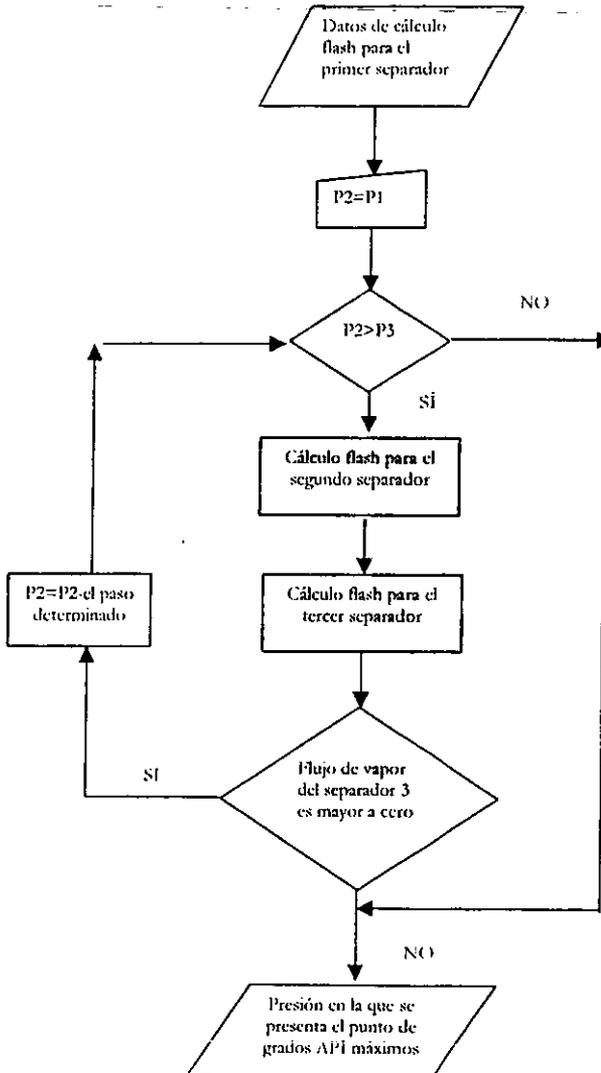


Figura 5.4. Diagrama de Flujo de la Función que aplica el Algoritmo de Optimización

Función: propC7.m

Calcula las propiedades críticas y la temperatura de ebullición normal de la fracción pesada usando la correlación de Rowe (ver capítulo III), requiere del peso molecular de la misma.

Programa: tesis_pr.m

Este programa habilita dentro del ambiente de la simulación, los valores de las propiedades de los componentes de la mezcla y los valores iniciales de composiciones para las etapas de separación estimadas con el programa en estado estacionario. También se declaran valores iniciales de presión, temperatura, y flujo.

El algoritmo desarrollado en este trabajo logra la integración de estas funciones descritas y más auxiliares que no se mencionan. La figura 5.5 muestra su relación.

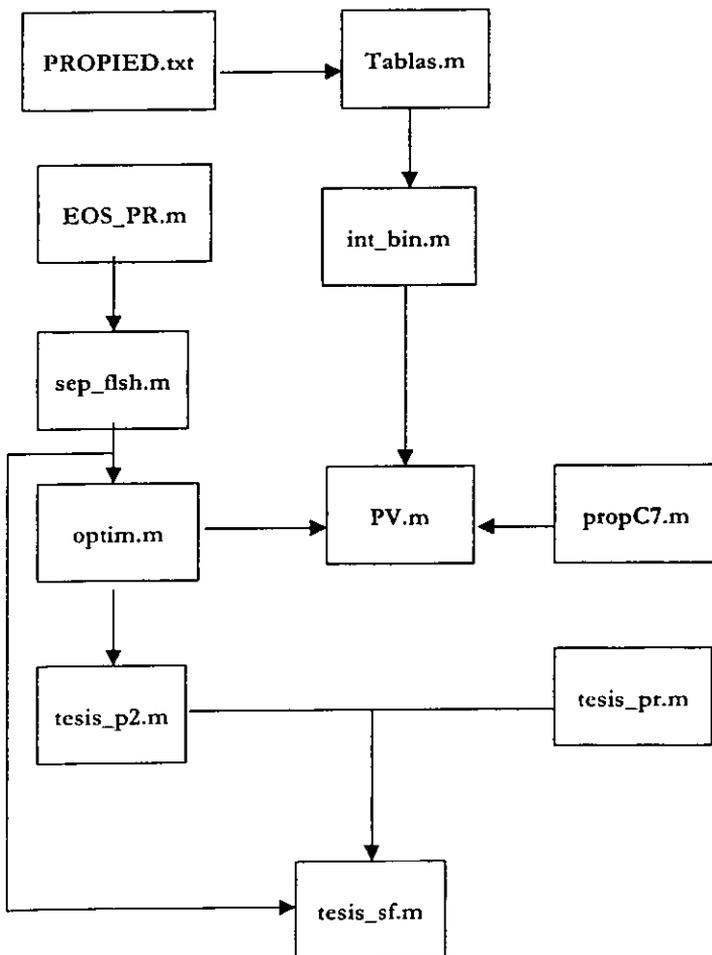


Figura 5.5. Diagrama de interacción entre los programas realizados

Capítulo VI

SIMULACIÓN

En este capítulo, se aplican las funciones descritas en el capítulo anterior y se presentan el procedimiento de la simulación. Aquí, se implantan las ideas de optimización y control en tiempo real monitoreando sólo las variables claves del proceso.

INTRODUCCIÓN

A estas alturas es posible llevar a cabo la simulación en estado estacionario y dinámica para la batería de separación con ayuda del modelo dinámico del separador⁽²⁹⁾. Con ello, se observa el comportamiento del sistema ante cambios en las condiciones del sistema (en los puntos de operación de la presión y del nivel y en el flujo de entrada) y se evalúa si el sistema es capaz de ajustarse a dichas perturbaciones.

La simulación se llevó a cabo en MATLAB con la herramienta SIMULINK para la cual se escribieron las funciones necesarias (Ver capítulo V y Apéndice I).

La representación gráfica se hace mediante bloques que emulan las etapas del sistema.

SIMULACIÓN EN ESTADO ESTACIONARIO

Para la simulación en estado estacionario, primero se identifica la zona en la cual se presenta el máximo valor de grados API en el rango de presiones (para encontrar la presión de operación del segundo separador, P2) que va desde la presión del primer separador (P1) hasta la presión de la tercera etapa (P3), es decir, hasta la presión atmosférica.

Se usaron los datos del activo del Litoral de Tabasco que se encuentran en el Apéndice I.

El resultado es la gráfica de la figura 6.1 donde se traza la gráfica de °API del sistema contra la presión en el segundo separador (P2).

El programa hace los cálculos para 3 separadores en serie con un solo grado de libertad, la presión del segundo separador. Se hacen cálculos para variaciones en la presión de este separador desde la P1 hasta la P3 con un $\Delta P = 1e5$ Pa, para identificar la zona de interés.

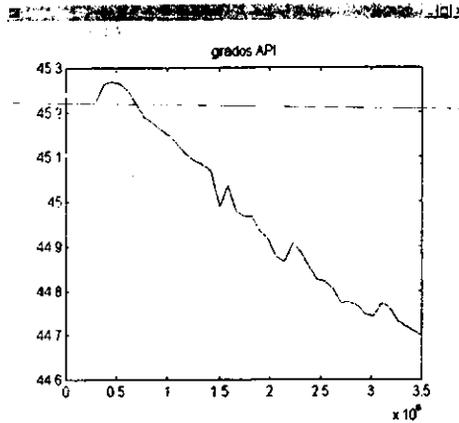


Figura 6.1 Resultado del cálculo en estado estacionario desde $P_1=35e5$ Pa a $P_3=1.013e5$ Pa

Como ya se había estudiado, la forma típica del comportamiento de los grados API frente a la presión es como se muestra en la figura 3.3. En el cálculo realizado se presenta esta forma en la figura 6.1 resaltada por el círculo dibujado. Se observa que a partir de la presión de $15e5$ Pa los grados API disminuyen. Para realizar cálculos es conveniente contar con una ecuación que genere una curva ajustada a los datos, además para este caso en particular se sabe que es posible y así hacer más fácil el cálculo de la derivada de la función. Sin embargo, si se trata de ajustar un polinomio a la curva de los datos en la figura 6.1 se obtiene el siguiente resultado:

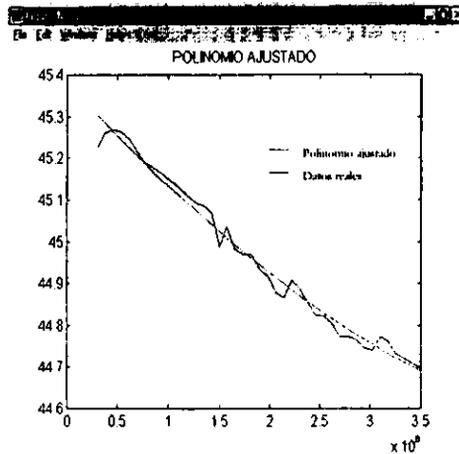


Figura 6.2 Ajuste de un polinomio a los datos reales

Se observa que el polinomio en realidad no es representativo para la zona de interés y además no tiene algún punto en el que la primera derivada sea cero. Por lo tanto, se

restringe la zona de presiones según lo observado en esta primera aproximación. Para este caso, el rango está entre $1.013e5$ Pa y $10e5$ Pa. En la figura 6.3 se presenta el resultado.

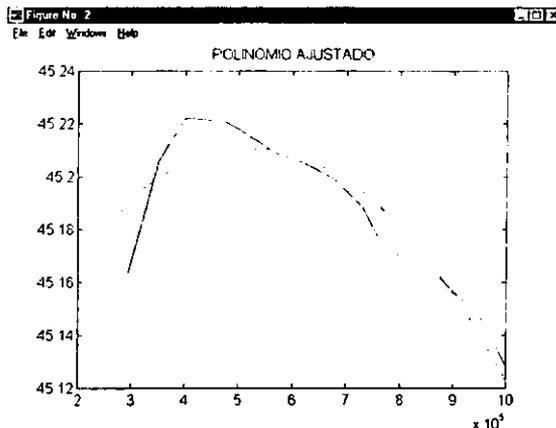


Figura 6.3. Diagrama del polinomio ajustado

Después de varias pruebas se observó que un polinomio de segundo orden se ajustaba mucho mejor a los datos que uno de tercero o cuarto orden.

Se observa que el máximo valor de grados API y el máximo obtenido por el polinomio (resultado del programa para presión óptima: $5.2156e5$ Pa) no son idénticos, sin embargo la diferencia de los grados API es poca y los beneficios que acarrea una ecuación ajustada para los cálculos dinámicos hacen justificable que se acepte esta ligera diferencia.

Los resultados anteriores indican la presión óptima de operación del segundo separador en la batería y son la base para el cálculo en la simulación dinámica de la batería.

Se hizo una prueba del sistema de ajuste de la curva haciendo un cambio en la presión del primer separador y provocando que el programa realice sobre la marcha el cálculo de la presión óptima del segundo separador.

En la figura 6.4 se muestran los resultados. El programa inicia con una presión en el primer separador de $35e5$ Pa y después se hace el cambio en el tiempo 10 a una presión de $33e5$ Pa.

En la primera parte de la figura del lado izquierdo se muestran los valores de la presión 2 para la cual se obtiene el grado máximo de API obtenidos a partir del polinomio ajustado, en la parte central, se muestran la curva de los datos y la curva ajustada de los grados API contra la presión en el segundo separador que corresponden al nuevo valor de P_1 y del lado derecho se muestra el cambio de presión óptima calculada en el segundo separador en el tiempo.

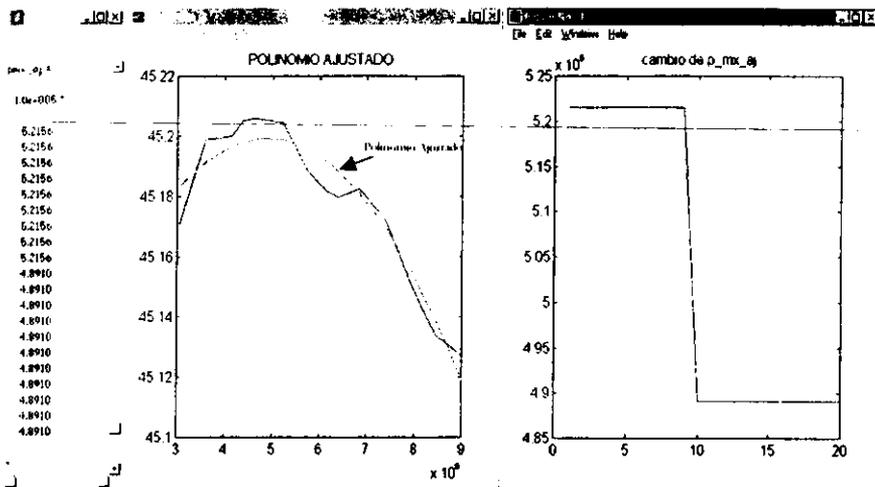


Figura 6.4. Prueba del ajuste del programa para una disminución de la presión de 2 Pa en el primer separador en el tiempo $t=10$, cambio resultante del ajuste de la presión óptima en el segundo separador. La figura 6.5 muestra el cambio de presión del segundo separador de 35e5 a 36e5Pa.

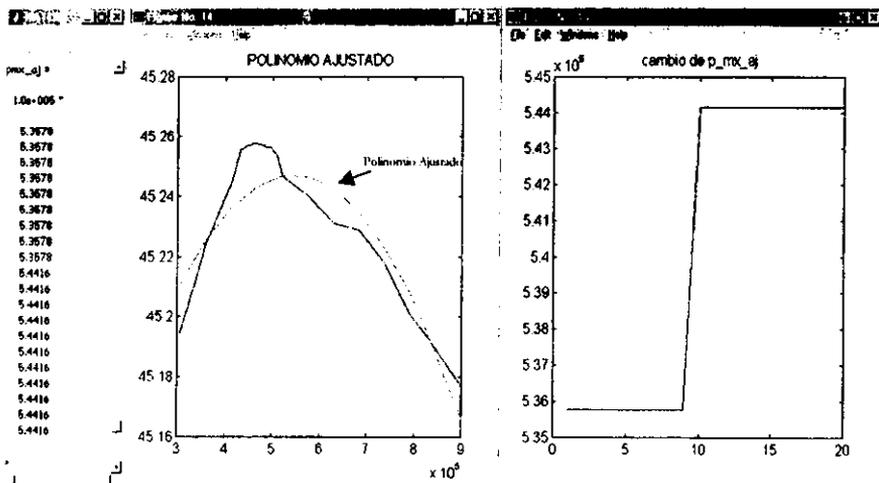


Figura 6.5 Prueba del ajuste del programa para un aumento de la presión en el primer separador en el tiempo $t=10s$, cambio resultante del ajuste de la presión óptima en el segundo separador

SIMULACIÓN EN TIEMPO REAL

Para la simulación en tiempo real, se usó el diagrama de bloques realizado en simulink que se presenta en la figura 6.6.

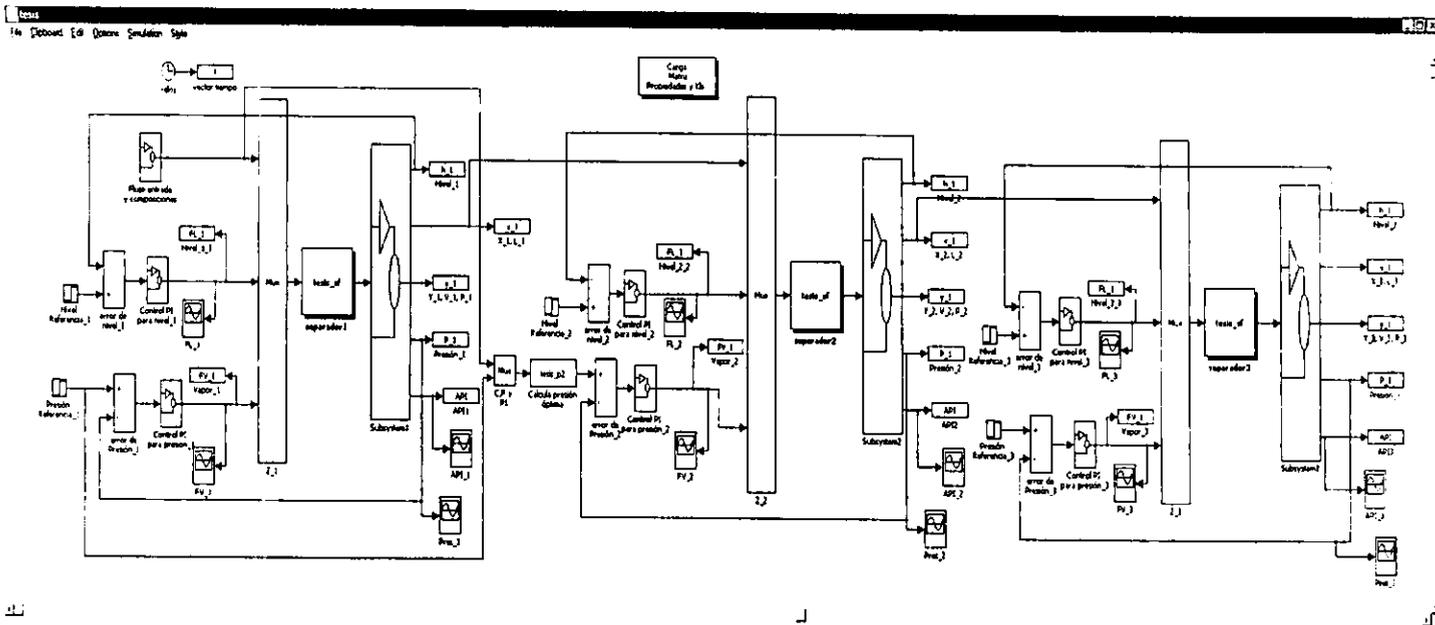


Figura 6.6 Diagrama de bloques elaborado en simulink para la simulación en tiempo real de una batería de tres separadores horizontales para la separación de hidrocarburos

DESCRIPCIÓN

La figura 6.6 representa una batería de separación de hidrocarburos compuesta por tres separadores.

Se alimentan la composición y el flujo de la corriente de entrada.

También se alimentan los puntos de operación (*set points*) de cada separador para la presión y el nivel

En el cuadro de diálogo se insertan el valor inicial de la variable, es decir el punto de operación deseado. Este cuadro es útil cuando se simulan variaciones, porque da opción a cambiar el valor inicialmente especificado a otro valor en un tiempo especificado.

El bloque con nombre "Carga Matriz/Propiedades y Kb habilitan dentro del ambiente de simulación los valores de las constantes que las *S-Functions* requieren.

Este programa contiene principalmente dos *S-Functions*. Una de ellas es la que se usa para el cálculo "flash" de cada separador y está especificada como *tesis_sf.m* y para cada separador cambian los parámetros que se le asignan.

Los parámetros para el separador uno son Prop, Kb, Z01, P01 y para los separadores dos y tres sólo cambian en Z02, P02 y Z03, P03. Estos parámetros son nombres de variables definidos en *tesis_pr.m* y corresponden a las propiedades y parámetros de interacción binaria para los componentes de la mezcla de alimentación y valores iniciales de composición y presión para los separadores respectivamente.

La otra *S-Function* usada es para calcular la presión óptima del segundo separador y se identifica con el nombre de *tesis_p2.m*.

CONTROLADOR

Las variables sobre las cuales se aplican los controladores son la presión y el nivel. A cada una de ellas se aplicó un controlador PI y se hizo la sintonización de los mismos sobre la marcha, es decir mediante la observación de la respuesta del sistema (ver capítulo IV). Así, primero se establecen los valores de las constantes tanto proporcional (K_p) como integral (K_i) en cero y se empieza a aumentar el valor de la constante proporcional, cuando se logra que la curva se acerque al punto deseado, se aumenta entonces el valor de la constante integral para hacer que llegue al valor deseado.

Cabe recordar que, como se mencionó en el capítulo V, debido al comportamiento del separador el controlador realiza una acción proporcional inversa. Por lo tanto, se debe establecer una acción directa en la cual al existir un aumento en la variable controlada se incrementa también la salida del controlador. Esto se logra haciendo las constantes K_p y K_i negativas, en la práctica en los controladores industriales este problema se resuelve usando un selector inverso/directo.

En la figura 6.7 se presenta la imagen del controlador para la presión del primer separador. Muestra la lógica de la figura 4.2.

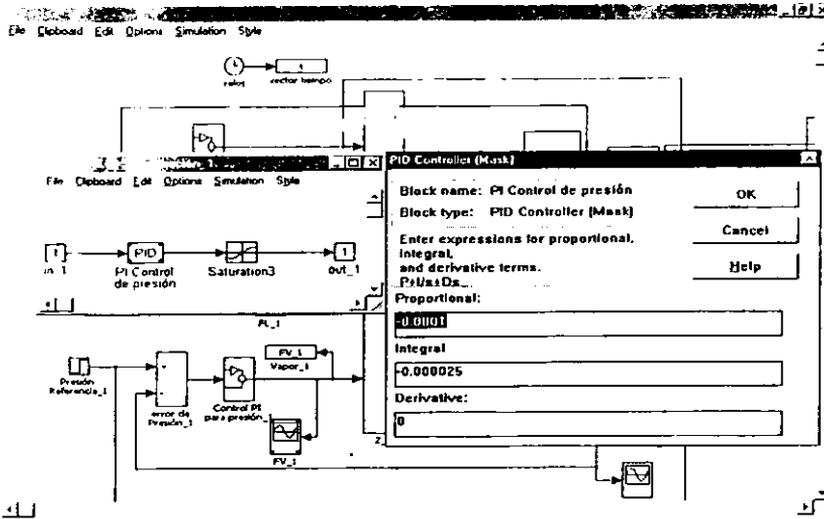


Figura 6.7. Controlador PI para el primer separador

En la figura se introduce el punto de operación o *set point* con el bloque Presión Referencia_1, entra a un sumador que resta al *set point* el valor que sale del proceso y produce la señal de error para después entrar al subsistema llamado Control PI para presión_1, este subsistema está representado en el primer cuadro después de la flecha vertical. Se tiene el bloque con nombre PID, este bloque despliega el cuadro de diálogo que aparece a la derecha donde se especifican los valores de las constantes, en este caso el valor de la constante derivativa es cero. En la Tabla 6.1 se presentan los valores de las constantes de cada uno de los controladores PI utilizados en el sistema.

De igual forma, se aplican los PI a los niveles de los separadores y a las presiones de las otras dos etapas.

Tabla 6.1. Valores de las constantes proporcional e integral para los controladores

Controlador para	K_p	K_i
Presión_1	-0.0001	-0.000025
Presión_2	-0.0001	-0.0000005
Presión_3	-0.0001	-0.000074
Nivel_1	-180	-30
Nivel_2	-200	-30
Nivel_3	-220	-30

Los resultados de la simulación se pueden observar mientras se lleva a cabo, mediante gráficas que se despliegan y que muestran el comportamiento del valor de la variable que se alimenta.

La simulación requiere de ciertos parámetros para que se lleve a cabo, tales como el método de integración, el tiempo de simulación, los tamaños del paso de integración (mínimo y máximo) y la tolerancia.

Los parámetros usados para la simulación son los siguientes:

Método de Integración:	Runge-Kutta 5
Tiempo de simulación:	1000 segundos
Tamaño de paso mínimo:	0.001
Tamaño de paso máximo:	1.0
Tolerancia:	1e-3

El diagrama de la figura 6.6. tiene la lógica mostrada en la figura 3.2.

Se introducen al sistema los valores de flujo y de composición para el cálculo *flash*, al igual que los valores de nivel y de presión (puntos de operación). Se lleva a cabo el cálculo *flash* y se arrojan como resultado un vector de flujo y composiciones de las fases líquida y vapor, además el valor de nivel y de presión resultantes que son comparados con el punto de operación para que, si son diferentes, el controlador realice una acción de ajuste en las variables.

El vector de composiciones y flujo de la fase líquida son valores de entrada al segundo separador para el cálculo *flash*. El punto de operación del nivel se introduce de igual forma que en caso anterior, el valor de presión para el separador se determina de manera automática con la *S-Function* tesis_p2.m. Este cálculo se realiza cuando inicia la simulación y cuando se detecta un cambio en las variables de flujo de entrada o de presión del primer separador. Después del cálculo *flash* se obtienen el flujo de fase líquida y su composición y se convierte en la corriente de entrada al tercer separador al cual se le asignan valores de nivel y presión deseados.

PROCEDIMIENTO

Para la simulación en tiempo real se realizaron varias pruebas en el sistema de la figura 6.6 haciendo variaciones en los parámetros donde se encuentran los controladores y en las variables que pudieran provocar una perturbación en el sistema.

Primero, se realizó la simulación del sistema sin perturbaciones. De esta manera, se llevó a cabo la sintonización de los controladores.

Posteriormente, se consideraron perturbaciones al sistema. En la Tabla 6.2 se listan las variables a las que se aplicó la perturbación y sus valores iniciales y finales.

RESULTADOS

Se presentan gráficos en donde se muestra el comportamiento de las variables a medida que transcurre el tiempo y cuando se les somete a una variación. Los resultados que se especifiquen, se presentan en el Apéndice III.

Tabla 6.2. Perturbaciones aplicadas al sistema

Variable	Valor Inicial	Valor Final
Presión del primer separador	35e5 Pa	33e5 Pa
Presión del primer separador	35e5 Pa	36e5 Pa
Flujo del primer separador	9.00615 kmol/s	7.00615 kmol/s
Flujo del primer separador	9.00615 kmol/s	7.00615 kmol/s
Nivel del primer separador	1.00 m	0.90 m
Nivel del primer separador	1.00 m	1.10 m
Nivel del segundo separador	1.00 m	0.90 m
Nivel del segundo separador	1.00 m	1.10 m
Nivel del tercer separador	1.00 m	0.90 m
Nivel del tercer separador	1.00 m	1.10 m

ANÁLISIS

En el Apéndice III se presenta la figura correspondiente al comportamiento del sistema en estado permanente. Se observa como los controladores logran estabilizar el proceso y se lleva a cabo de manera permanente.

CAMBIOS EN PRESIÓN DEL PRIMER SEPARADOR

El cambio de presión se manifiesta a los 600 segundos de iniciada la simulación. La figura 6.8. muestra el cambio en la presión uno de 35e5 Pa a 33e5 Pa y el respectivo ajuste del sistema para la presión dos se muestra en la figura 6.9.

Se observa como en el momento en el que el *set point* para la presión del primer separador cambia, el programa hace un ajuste de la presión del segundo separador, esto para que la corriente del tercer separador conserve el máximo valor de grados API. El sistema responde a las variaciones y se manifiesta en cambios bruscos en los flujos de vapor de que salen de cada uno de los separadores como se observa en las gráficas de la figura 6.10., las demás variables permanecieron sin cambios. Sin embargo, la acción de los controladores logra que el sistema se estabilice casi de inmediato.

Para el aumento en la presión del primer separador de 35e5 Pa a 36e5Pa se hacen las mismas observaciones y, de igual manera, el sistema vuelve a ser estable. En las figuras 6.11. y 6.12. se muestran el cambio del *set point* en el primer separador y el ajuste del segundo separador respectivamente. Los cambios en los flujos de vapor se presentan en la figura 6.13.

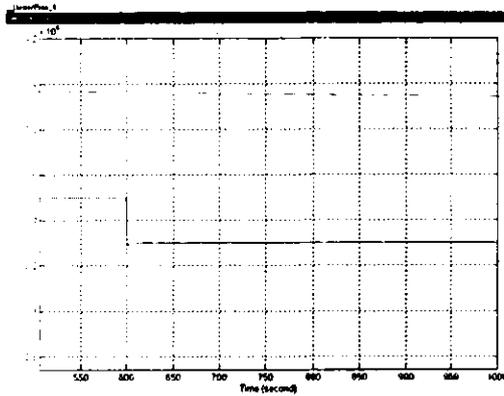


Figura 6.8. Cambio del set point del primer separador de 35e5 Pa a 33e5 Pa

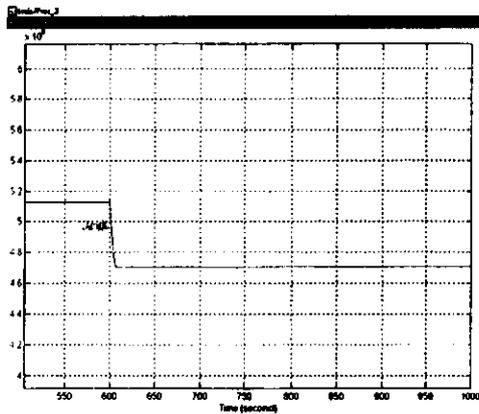


Figura 6.9. Ajuste de la presión en el segundo separador

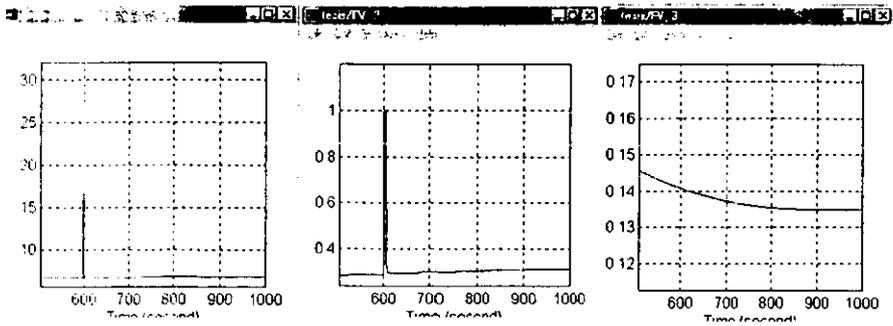


Figura 6.10. Cambios del Flujo de Vapor en el Primer, en el Segundo y en el Tercer separador respectivamente

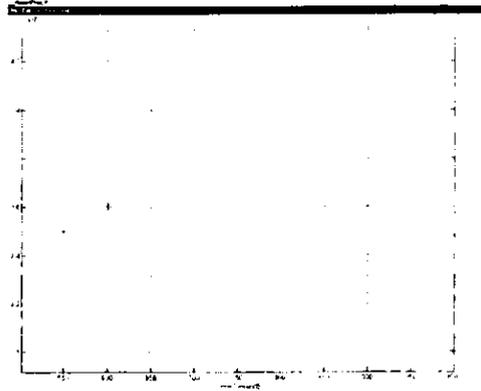


Figura 6.11. Cambio de presión del primer separador de 35e5 Pa a 33e5 Pa

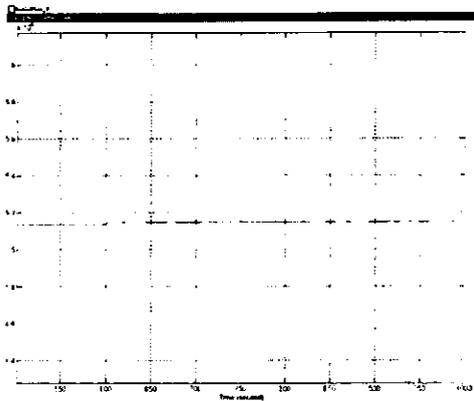


Figura 6.12. Ajuste de la presión del segundo separador

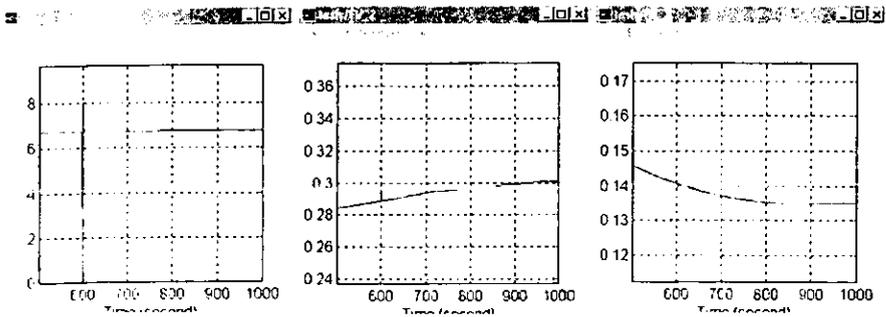


Figura 6.13. Cambios en el Flujo de Vapor del Primer, Segundo y Tercer Separador respectivamente

CAMBIOS EN EL FLUJO DEL PRIMER SEPARADOR

Para los cambios en el flujo, se observa que el sistema se afecta principalmente en los flujos de salida de las corrientes líquida y vapor identificados en la figura 6.13 y 6.14, respectivamente, aquí se aplicó un aumento en el flujo inicial lo que provoca el aumento los flujos de salida de cada separador; los controladores se encargan de restablecer el sistema.

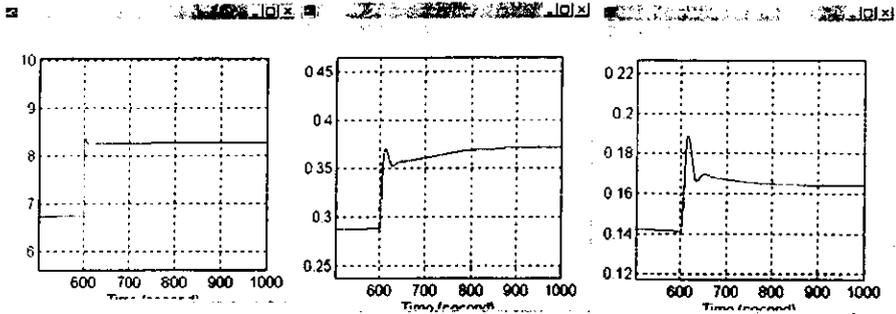


Figura 6.13. Cambios en los Flujos de Vapor del Primer, Segundo y Tercer Separador debidos a un Aumento en el Flujo de Entrada del Primer Separador de 9.00615 Kmol/s a 11.00615 Kmol/s

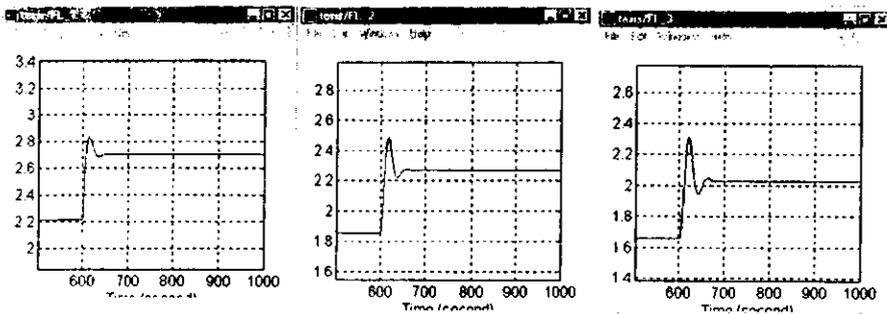


Figura 6.14. Cambios en los Flujos de Líquido del Primer, Segundo y Tercer Separador debidos a un Aumento en el Flujo de Entrada en el Primer Separador de 9.00615 Kmol/s a 11.00615 Kmol/s

Para la disminución del flujo de entrada del primer separador se presentan los mismos cambios en las mismas variables, sólo que de con el efecto inverso. Las figuras 6.15 y 6.16 ilustran este efecto.

CAMBIOS EN LOS NIVELES DE CADA SEPARADOR

Para las perturbaciones en el nivel los cambios son más bruscos y el sistema tarda un poco más en estabilizarse.

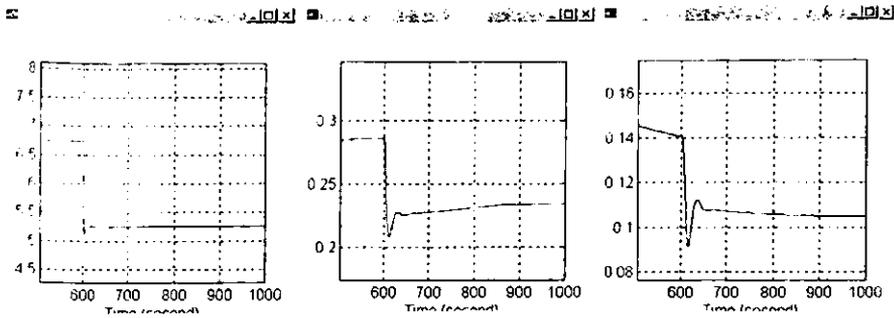


Figura 6.15. Cambios en los Flujos de Vapor del Primer, Segundo y Tercer Separador debidos a una Disminución en el Flujo de Entrada del Primer Separador de 9.00615 Kmol/s a 7.00615 Kmol/s

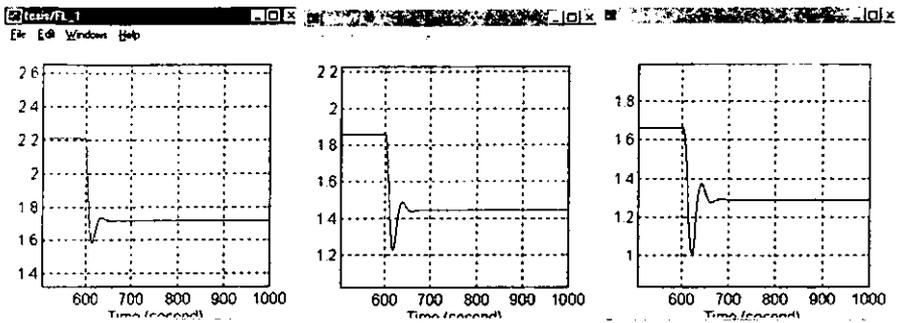


Figura 6.16. Cambios en los Flujos de Líquido del Primer, Segundo y Tercer Separador debidos a una Disminución en el Flujo de Entrada del Primer Separador de 9.00615 Kmol/s a 7.00615 Kmol/s

En la figura 6.17, se presentan el cambio en el nivel del primer separador de un punto de operación de 1 m a 1.1 m. Se observa que todo el sistema se altera. En la figura, la primera fila representa la presión, el flujo de vapor y el flujo de líquido del primer separador respectivamente, la segunda hilera representa las mismas variables pero del segundo separador y la tercera, corresponde a las variables del tercer separador. Las presiones de todos los separadores al igual que sus flujos de salida (de vapor y de líquido) se alteran pero el controlador estabiliza nuevamente el sistema.

La figura 6.18, presenta las alteraciones del sistema para el cambio de 1 m a 0.9 m en el primer separador, estabilizándose después por la acción del controlador. El orden de las gráficas es igual que en la figura 6.18.

En la figura 6.19, se presentan los cambios provocados por la alteración del punto de operación del nivel del segundo separador de 1 m a 1.1 m. Se observa que solo se alteran los valores de las variables del segundo y tercer separador (gráficas de la primera y segunda hilera de la figura respectivamente, el orden de las variables representadas en las gráficas son presión, flujo de vapor y flujo de líquido). Las variables del primer separador no sufren cambios. El sistema vuelve a estabilizarse.

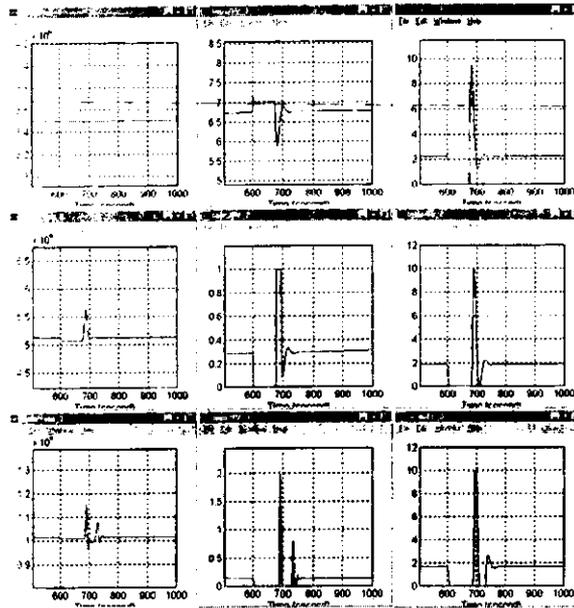


Figura 6.17. Alteraciones en el Sistema para el Cambio de 1 m a 1.1 m en el Punto de Operación del Primer Separador

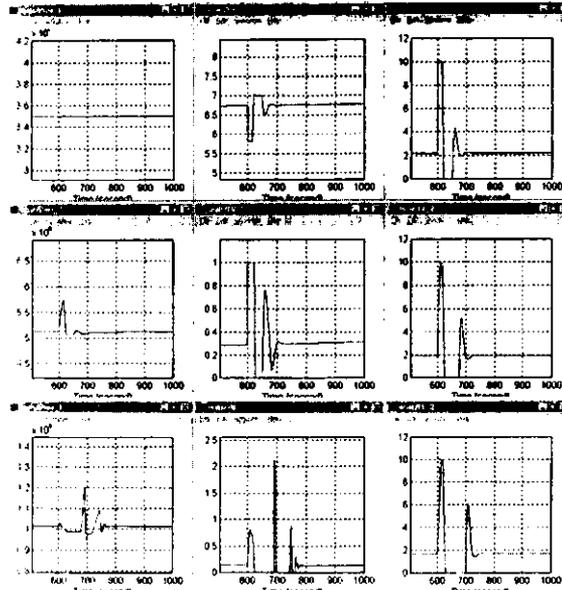


Figura 6.18. Alteraciones en el Sistema para el Cambio de 1 m a 0.9 m en el Punto de Operación del Primer Separador

La figura 6.20, presenta las alteraciones del sistema para el cambio de 1 m a 0.9 m en el segundo separador, estabilizándose después por la acción del controlador.

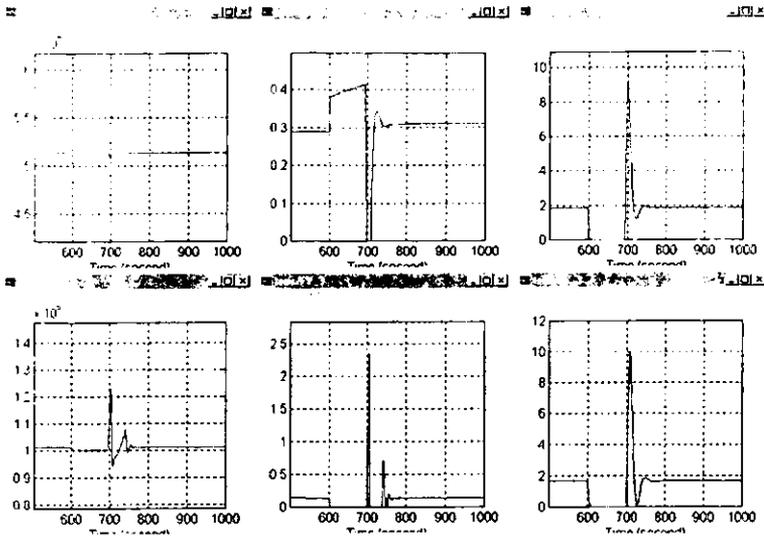


Figura 6.19. Alteraciones en el Sistema para el Cambio de 1 m a 1.1 m en el Punto de Operación del Segundo Separador

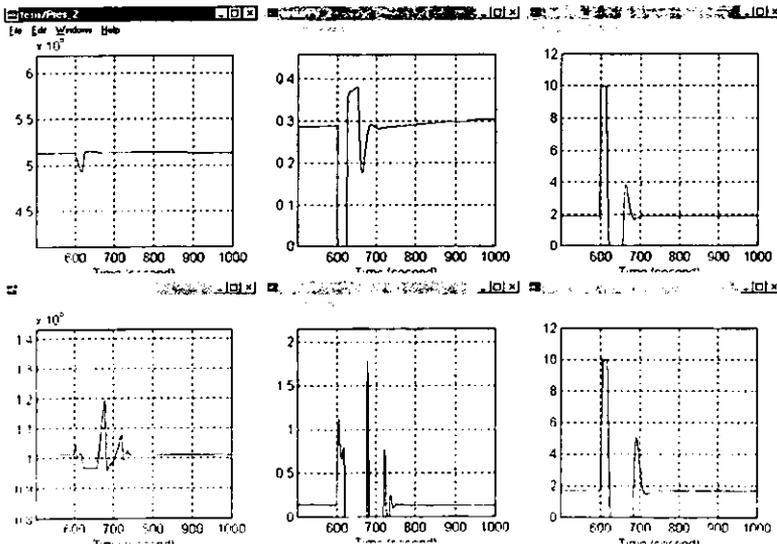


Figura 6.20. Alteraciones en el Sistema para el Cambio de 1 m a 0.9 m en el Punto de Operación del Segundo Separador

En las figuras 6.21. y 6.22. se presentan los cambios en el nivel del tercer separador de 1 m a 1.1 m y de 1 m a 0.9 m respectivamente. Sólo se alteran las variables de éste separador (presión, flujo de vapor y flujo de líquido). El sistema regresa a la estabilidad después del cambio.

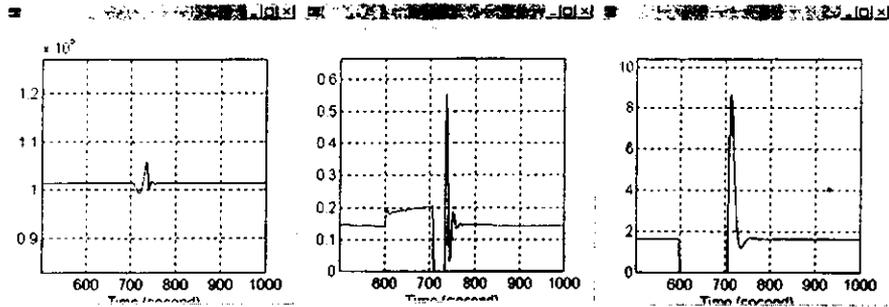


Figura 6.21. Alteraciones en el Sistema para el Cambio de 1 m a 1.1 m en el Punto de Operación del Tercer Separador

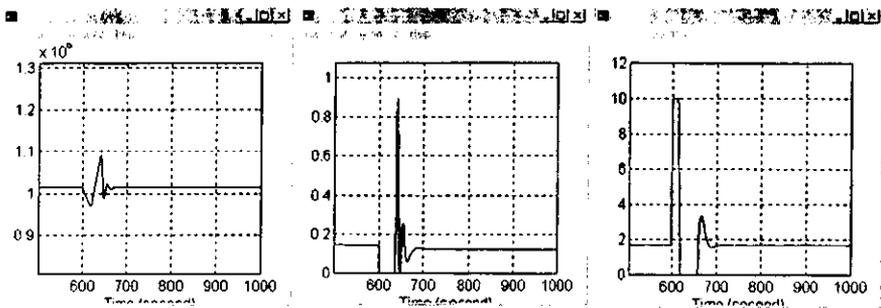


Figura 6.22. Alteraciones en el Sistema para el Cambio de 1 m a 0.9 m en el Punto de Operación del Tercer Separador

Para todos los casos considerados, el sistema de control empleado realiza su función, y el sistema se mantiene en sus puntos de operación. El punto de operación de la presión en el segundo separador logra actualizarse sobre la marcha, es decir de manera dinámica, cada que se detecta un cambio en las variables que pudieran afectar su valor óptimo como son cambios en la presión del primer separador y cambios en el flujo de alimentación proveniente del cabezal.

Adicionalmente se hizo una prueba para un cambio brusco de presión del primer separador, el cambio fue de 35e5 Pa a 38e5Pa y el sistema respondió de manera adecuada. El resultado se presenta en el Apéndice III.

Se contó con los datos de una simulación proporcionados por el departamento de Ingeniería de la misma adscripción y se procedió a elaborar los cambios en los programas necesarios para que se pudiera realizar la simulación con estos datos. Los resultados se

presentan en el Apéndice III. La simulación tuvo resultados favorables, se tuvieron que hacer nuevos ajustes a los parámetros de los controladores y el comportamiento del sistema es como se esperaba.

Para este caso se presenta solo una figura en el Apéndice III que muestra la respuesta a un cambio en el *set point* de la presión del primer separador de 35e5Pa a 38e5Pa.

En el proceso desarrollado se puede observar que el punto de operación obtenido (aplicando las condiciones de presión inicial, flujo de entrada a la batería y composición de la corriente de entrada) para la presión del segundo separador tiene un valor similar al del proceso que se tomó como base. Así, el proceso del cual se obtuvieron los datos reporta una presión de operación de 6e5 Pa, y el punto de operación óptimo para la presión en el segundo separador encontrado en este trabajo es de 5.22e5 Pa para la simulación en estado estacionario y 5.17e5 Pa para la simulación dinámica. Estos valores no son exactamente iguales, lo que es lógico puesto que no se toman en cuenta condiciones que pueden afectar al proceso y que probablemente provocarían que la presión de operación del segundo separador aumentara. Sin embargo, se consideró la aproximación obtenida como válida para los fines que esta tesis persigue.

Por último, el valor de grados API alcanzados en el sistema propuesto es de 45.2 para la simulación en estado estacionario y 45.1 para la simulación dinámica, los cuales garantizan la mayor recuperación de hidrocarburos líquidos. En el proceso del cual se tomaron los datos, la densidad en grados API de la corriente que abandona la sección de separación es de 49.

Capítulo VII

CONCLUSIONES

Se realizó la optimización en línea de un modelo dinámico de una batería de separación de hidrocarburos consistente de tres separadores bifásicos; dicho modelo incluye el cálculo riguroso del proceso termodinámico implicado en la separación usando la ecuación de estado de Peng-Robinson.

La optimización se realizó con el método de búsqueda directa clasificado como un algoritmo no lineal sin restricciones. El control de nivel y de presión de cada etapa de separación se realizó con controladores del tipo PI (Proporcional-Integral) que mantienen operando al sistema en sus puntos de operación indicados en la etapa de optimización.

No se evaluaron los beneficios económicos que se obtienen a partir del ajuste de los puntos de operación ya que se requeriría mayor información para una reproducción fiel del sistema total además de las variables económicas correspondientes.

Sin embargo, el trabajo deja ver que la optimización en línea bajo condiciones cambiantes provoca que el sistema se ajuste a nuevos puntos de operación. Esto es una de las justificaciones que apoyan la implantación de un sistema de optimización en línea cuyo desempeño puede implicar mejoras al sistema.

No cabe duda que las evaluaciones con este tipo de plataformas de simulación para evaluar la factibilidad técnico-económica de la aplicación de metodologías de optimización en línea sobre sistemas como el presentado no serían del todo infructuosas.

Por último, cabe mencionar que el estudio de las técnicas de control avanzado y su aplicación implican un amplio conocimiento del área de control y del área de proceso, esto da pie a un encuentro multidisciplinario y también deja ver que un ingeniero químico tiene en este campo un amplio espacio para desarrollarse y aportar conocimientos, y en caso de especializarse, participar en el diseño de estos sistemas de control muy prometedores en la industria del proceso y que cuentan ya con un número importante de aplicaciones implantadas y funcionando exitosamente.

Capítulo VIII

BIBLIOGRAFÍA

1. "Proceso de Tratamiento y Acondicionamiento de Gas y Aceite en la Industria del Petróleo". 1ª Reunión de la Red de Especialistas de automatización, Villa Hermosa, Tabasco, 1º de Septiembre, 1998.
2. *Simulink User's Guide*. The Mathworks, Inc. Marzo 1992.
3. Ahmed, Tarek H. "Comparative Study of Eight Equations of State for Predicting Hydrocarbon Volumetric Phase Behavior". SPE Reservoir Engineering, Febrero, 1988.
4. Arnold, Ken; Stewart Maurice. *Surface Production Operations*. Vol. 1, Gulf Publishing Company, Estados Unidos, 1986.
5. Chang, Shi-Chung; Chang, Tsu-Shuan; Luh, Peter B. "A Hierarchical Decomposition for Large Scale Optimal Control Problems with Parallel Processing Structure". Automatica, Vol. 25, No. 1, 1989, pp. 77-86.
6. Edgar, T. F.; Himmelblau, D. M. *Optimization of Chemical Processes*. McGraw-Hill, Singapur, 1988.
7. García, Carlos E.; Morshedi, A. M. "Quadratic Programming Solution of Dynamic Matrix Control". Chemical Engineering Communications, Vol. 46, pp. 73-87.
8. García, Carlos E.; Prett, David M.; Morari, Manfred. "Model Predictive Control: Theory and Practice - A Survey". Automatica, Vol 25, No3, Gran Bretaña, 1989, pp 335-348.
9. Godoy A, J. Martín. "Optimización Dinámica: ¿Qué es?, ¿Cuál es su función?". Cápsula Técnica. Plan Rector de Automatización del Activo Litoral de Tabasco, Vol. 2, No. 18, Mayo, 1998.
10. Gopal, Vipin; Biegler, Lorenz T. "Large Scale Inequality Constrained Optimization and Control". IEEE Control Systems. Diciembre, 1998, pp. 59-68.
11. Guehria, M; Fawzi, Thompson, Leslie G.; Reynolds, Albert C. "A Robust Algorithm for Determining Hydrocarbon PVT Properties Using Generalized EOS". Petroleum Society of CIM/Society of Petroleum Engineers, paper No. CIM/SPE 90-100, pp. 100-1 - 100-16.

12. Henley, Ernest J.; Seader, J.D. *Operaciones de Separación por Etapas de Equilibrio en Ingeniería Química*. Reverté, México, 1998.
13. Hernández Rojas, José Gerardo; Cabello Martínez, Luis Benito. "Comparación de Métodos de Estabilización de Aceite Crudo mediante la Simulación Composicional". Tesis de Licenciatura, Facultad de Ingeniería, UNAM, México, D. F., 1995.
14. Lajous, Adrian. "La industria Petrolera Mexicana en el Umbral del Siglo XXI". Discurso pronunciado por el director general de Petróleos Mexicanos, 18 de marzo, 1999.
15. Lee, Jay H.; Cooley, Brian. "Recent Advances in Model Predictive Control and Other Related Areas".
16. Lee, Wooyoung; Weekman, Vern W. Jr. "Advanced Control Practice in the Chemical Process Industry: A View from Industry". *AIChE Journal*, Vol. 22, No. 1, Enero, 1976, pp. 27-38.
17. Lewis, Frank L. *Applied Optimal Control and Estimation*. Prentice-Hall, Estados Unidos, 1992.
18. Li, Sifu; Lim, Kian Y.; Fisher, Grant D. "A State Space Formulation for Model Predictive Control". *AIChE Journal*, Vol. 35, No. 2, Febrero, 1989, pp. 241-249.
19. Lopezlena E., Ricardo. "Optimización en Tiempo Real de Procesos". *Cápsula Técnica*. Plan de Implantación del Plan Rector de Automatización Ku-Maloob-Zaap, Vol. 1, No. 7, Mayo, 1998.
20. Lopezlena E., Ricardo; Godoy A., J. Martín. "Modelo Dinámico de un Separador de Hidrocarburos Bifásico basado en EOS para Evaluación de Controladores Avanzados". Reporte Interno IMP-GISE-01-99.
21. Luyben, Michael L.; Tyreus, Bjorn D., Luyben, William L. "Plantwide Control Design Procedure". *AIChE Journal*, Vol. 43, No. 12, Diciembre, 1997, pp. 3161-3174.
22. Luyben, William L. *Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers*. 2ª Edición. McGraw-Hill, Singapur, 1990.
23. Muske, Kenneth R.; Rawlings, James B. "Model Predictive Control with Linear Models". *AIChE Journal*, Vol. 39, No. 2, Febrero, 1993, pp. 262-287.
24. Nakamura, Shoichiro. *Análisis Numérico y Visualización Gráfica con MATLAB*. Prentice-Hall, México, 1997.
25. Ogata, Katsuhiko. *Dinámica de Sistemas*. Prentice-Hall, México, 1987.
26. Ogata, Katsuhiko. *Ingeniería de Control Moderna*. Prentice-Hall, México, 1980.

27. Peng, Ding-Yu; Robinson, Donald B. "A New Two Constant Equation of State". *Ind. Eng. Chem., Fundam.*, Vol. 15, No. 1, 1976.
28. Petróleos Mexicanos. *Memoria de Labores 1998*, PEMEX. Marzo, 1989.
29. Ramírez Rivera, Marcos. "Modelo Matemático para Optimizar las Condiciones de Operación en Sistemas de Separación Convencionales de Hidrocarburos". Tesis de Maestría en Ingeniería, Facultad de Ingeniería, UNAM, México, D. F., 1995.
30. Rao, Singiresu. "Engineering Optimization. Theory & Practice". 3ª Edición, John Wiley & Sons, Estados Unidos, 1996.
31. Rawlings, James B.; Muske, Kenneth R. "The Stability of Constrained Receding Horizon Control". *IEEE Transactions on Automatic Control*, Vol. 38, No. 10, Octubre, 1993.
32. Reid, Robert C.; Prausnitz, John M.; Poling, Bruce E. *The Properties of Gases and Liquids*. 4ª Edición, McGraw-Hill, Singapur, 1987.
33. Richalet, J.; Rault, A.; Testud, J.L.; Papon, J. "Model Predictive Heuristic Control: Applications to Industrial Processes". *Automatica*, Vol. 14, Gran Bretaña, 1978, pp. 413-428.
34. Rouhani, Ramine; Mehra, Raman K. "Model Algorithmic Control (MAC): Basic Theoretical Properties". *Automatica*, Vol. 18, No. 4, 1982, Gran Bretaña, pp. 401-414.
35. Sánchez Olea, Eva. "Análisis y Automatización de Técnicas de Optimización Aplicadas a las Condiciones de Separación Aceite-Gas". Tesis, Facultad de Ingeniería, UNAM, México, D.F., 1997.
36. Shahian, Bahram; Hassul, Michael. *Control System Design Using Matlab*. Prentice-Hall, Estados Unidos, 1993.
37. Smith Industries, Inc. *Equipment Manual*, Oil & Gas Division. Houston, Texas.
38. Smith, J.M.; Van Ness, H. C.; Abbott, M. M. *Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química*. 5ª Edición, McGraw-Hill, México, 1997.
39. Stephanopoulos, George. *Chemical Process Control. An Introduction to Theory and Practice*. Prentice-Hall, Estados Unidos, 1984.
40. Taha, Hamdy A. "Investigación de Operaciones". 2ª Edición, Alfa-Omega, México, 1991.
41. Takatsu, Haruo; Itoh, Toshiaki. "Future Needs for Control Theory in Industry - Report of the Control Technology Survey in Japanese Industry". *IEEE Transactions on Control Systems Technology*, Vol. 7, No. 3, Mayo, 1999.
42. VanDoren, Vance J. "Optimization Means Higher Profits", *Control Engineering*, Enero, 1999.

43. White, D. C. "On-Line Optimization: What Have We Learned?". *Hydrocarbon Processing*, Vol. 77, No. 6, Junio, 1998.
-

ÍNDICE DE APÉNDICES

APÉNDICE I

INFORMACIÓN	A1
PROGRAMAS	A2

APÉNDICE II

DESCRIPCIÓN DEL DIAGRAMA DE BLOQUES USANDO EN EL AMBIENTE GRÁFICO	A19
--	-----

APÉNDICE III

SIMULACIONES	A23
--------------	-----

APÉNDICE I

INFORMACIÓN

Para el programa principal se utilizó la información de la plataforma de producción del activo Litoral de Tabasco, Cd. del Carmen, Campeche. La mezcla de alimentación proviene del litoral de Tabasco y de Och-Uech-Kax.

Componente	% mol
Nitrógeno	0.00720
Dióxido de Carbono	0.01960
Sulfuro de Hidrógeno	0.01135
Metano	0.59960
Etano	0.08980
Propano	0.04540
Iso-Butano	0.00720
n-Butano	0.02064
Iso-Pentano	0.00826
n-Pentano	0.01238
n-Hexano	0.01815
Heptano plus	0.01600

Flujo total de la mezcla: 9.00615 Kgmol/s
Peso Molecular de la fracción pesada: 198.116129
Densidad de la fracción pesada: 0.814 g/cm³
Presión de la primera etapa: 35e5 Pa
Presión de la segunda etapa: 6e5 Pa

Para el programa de validación se usaron datos de una simulación realizada en el programa Aspen Plus.

Componente	% mol
Nitrógeno	0.00435
Dióxido de Carbono	0.03297
Sulfuro de Hidrógeno	0.01960
Metano	0.63559
Etano	0.08006
Propano	0.02793
Iso-Butano	0.00236
n-Butano	0.00430
Iso-Pentano	0.00202
n-Pentano	0.00405
n-Hexano	0.01877
Heptano plus	0.16798

Flujo total de la mezcla: 154.6176 Kgmol/s
 Peso Molecular de la fracción pesada: 245.82577
 Densidad de la fracción pesada: 0.851852 g/cm³
 Presión de la primera etapa: 35e5 Pa
 Presión de la segunda etapa: 6.5e5 Pa

PROGRAMAS

Se presentan los programas que se utilizaron para los datos del litoral Tabasco, para el programa de validación, son los mismos programas excepto que cambian los valores de las propiedades de la fracción pesada y el peso molecular de la mezcla así como su flujo. En este caso, las presiones de la primera etapa de separación son iguales (35e5 Pa), de no ser así, la presión también debe modificarse.

PROGRAMAS PRINCIPALES

ESTADO ESTACIONARIO

PROGRAMA: PV.m

```

% PV.m
%Datos de la plataforma de producción del litoral tabasco Cd del Carmen, Campeche
%densidad de la tracción pesada=0.814 (para el vector de densidades en sep_flash.m)
% búsqueda desde el principio y restricción del rango de prestaciones

clear all

% Vector de entrada
%N2 CO2 H2S C1H4 C2H6 C3H8 nC4 nC4 iC5 nC5 nC6 nC7
Z=[0.072 0.0196 0.01135 5.996 0.898 0.454 0.072 0.2064 0.0826 0.1238 0.1857 16]; % [frac.mol]
Nc=length(Z);
unos=ones(1,Nc);

% Matriz de Propiedades de especies puras: (Ver. Van Ness, p726)
% n (Almol) (W) (Tc[K]) (Pc[Pa]) (Zc) (Vc) (Tn[K]) |
H2O=[18.015 0.345 647.1 220.55e5 229 55.9 373.2]; % Agua
N2=[28.014 0.038 126.2 34.00e5 0.289 89.2 77.3]; % N2
CO2=[44.010 0.224 304.2 73.83e5 0.274 94.0 0]; % CO2
H2S=[34.082 0.094 373.5 89.63e5 0.284 98.5 212.8]; % H2S
C1H4=[16.043 0.012 190.6 45.99e5 0.286 98.6 111.4]; % C1H4
C2H6=[30.070 0.100 305.3 48.72e5 0.279 145.5 184.6]; % C2H6
C3H8=[44.097 0.152 369.8 42.48e5 0.276 200.0 231.1]; % C3H8
nC4=[58.123 0.181 408.1 36.48e5 0.282 262.7 261.4]; % nC4
iC4=[58.123 0.200 425.1 37.96e5 0.274 255.0 272.7]; % iC4
nC5=[70.134 0.196 511.8 45.02e5 0.273 258.0 322.4]; % nC5
nC5=[72.150 0.252 469.7 33.70e5 0.270 333.0 309.2]; % nC5
nC6=[86.177 0.301 507.6 30.25e5 0.266 371.0 341.9]; % nC6
nC7=[118.11 0.6109 692.1540 1.7e6 0.261 428.0 418.92]; % nC7+

Prop=[N2;CO2;H2S;C1H4;C2H6;C3H8;iC4;nC4;iC5;nC5;nC6;nC7];

% Vector de componentes
Comp1=str2mat('nitrogeno','dioxido de carbono','sulfuro hidrogeno','metano','etano','propano');
Comp2=str2mat('isobutano','n-butano','isopentano','n-pentano','n-hexano','n-heptano');
[NomCom1,Prop1]=TABLAS(Comp1,'PROPIED.txt');
[NomCom2,Prop2]=TABLAS(Comp2,'PROPIED.txt');
NomCom=str2mat(NomCom1,NomCom2);

% Parámetros de Interacción Binaria (Walas, Table 1.13):
Kb=ini_bin(NomCom); % Subrutina para determinar los parámetros de interacción binaria

k=20;
for y = 1:k
CALCULOS PARA SEPARACIÓN FLASH
    P1=35e5; %Pa
    P2=P1; %Pa
    P3=1.01353e5; %Pa
    T1=85+273.15; %Kelvin
    T2=83.2+273.15; %Kelvin
    T3=80+273.15; %Kelvin
    Z1=[0.072 0.0196 0.01135 5.996 0.898 0.454 0.072 0.2064 0.0826 0.1238 0.1857 16]; % [frac.mol]
    Fcentral=9.00615; %Kgmol/s
    mu=0;
    delhp=1.5e5;
    delh=1;

```

```

V3=1;
if y >= 10
P1=36e5;
P2=P1;
end

[V1,V1,Vv1,X1,Y1,Kt,rho1,1,rhoV1,Zv1,Z1,1] = sep_flash(P1,T1,Z1,Prop,Kb);
V1=V1*Femra1;
L1=1-central-V1;

lp_mx1,Pdos,densapi,ai]=optim(L1,X1,P2,P3,delp,T2,T3,delt,Prop,Kb);

P2=2*lp_mx1;
u=0;
delp=.54e5;

lp_mx2,Pdos1,densapi,ai]=optim(L1,X1,P2,P3,delp,T2,T3,delt,Prop,Kb);

%AJUSTE DE LOS GRADOS API A UN POLINOMIO DE ORDEN N
[pp,S]=POLYFIT(Pdos1(1:ii-1),densapi(1:ii-1),2); % (x,y,N)
A]US=POLYVAL(pp,Pdos1(1:ii-1));
ppd=polyder(pp);
raices=ROOTS(ppd);
pms_ai(y,)=miu(raices);
tiempo(y,)=y;
pms_ai=miu(raices)

end

figure(1)
plot(Pdos1(1:ii-1),densapi(1:ii-1));
title('grados API')
figure(2);
plot(Pdos1(1:ii-1),densapi(1:ii-1),Pdos1(1:ii-1),A]US);
title('POLINOMIO AJUSTADO')
figure(3);
plot(tiempo,pms_ai);
title('cambio de p_mx_ai');
%-----FIN DE PROGRAMA-----

```

SIMULACIÓN DINÁMICA

FUNCIONES PRINCIPALES

FUNCIÓN: tesis_sf.m

```

función [sys,x0]=tesis_sf(t,x,u,flag,Prop,Kb,Z0,P0)
% TESIS_SF.M
% Bloque de simulink para la simulación dinámica del proceso de separación bifásica con el
% cálculo de propiedades termodinámicas basado en una Ecuación de Estado.
% Por R Lopezlena E y J.M. Godoy A.
% LABORATORIO DE INVESTIGACION APLICADA
% EN CONTROL Y AUTOMATIZACIÓN
% (c) 1999 Instituto Mexicano del Petróleo
%-----
%Parámetros de simulación
r;
U=0.15; %Coeficiente térmico
AS= 10; %Área del separador
Text=360; %Temperatura externa en grados Kelvin
A=1.1765; %Área interna del separador donde ocurre el flash en m^2

```

```

Is=2; % Altura máxima del separador en [m]
Cpl1=31; % [Btu/lb-mole-1] Capacidad calorífica del propano líquido
Cpl2=41; % [Btu/lb-mole-1] Capacidad calorífica del n-butano líquido
Cpl3=51.6; % [Btu/lb-mole-1] Capacidad calorífica del n-hexano líquido
Cpl4=0; Cpl5=0; Cpl6=0; Cpl7=0; Cpl8=0; Cpl9=0; Cpl10=0; Cpl11=0; Cpl12=0;
Cpv1=22; % [Btu/lb-mole-1] Capacidad calorífica del propano en vapor
Cpv2=29; % [Btu/lb-mole-1] Capacidad calorífica del n-butano en vapor
Cpv3=43; % [Btu/lb-mole-1] Capacidad calorífica del n-hexano en vapor
Cpv4=0; Cpv5=0; Cpv6=0; Cpv7=0; Cpv8=0; Cpv9=0; Cpv10=0; Cpv11=0; Cpv12=0;
Cpl1=Cpl1; Cpl2=Cpl2; Cpl3=Cpl3; Cpl4=Cpl4; Cpl5=Cpl5; Cpl6=Cpl6; Cpl7=Cpl7; Cpl8=Cpl8; Cpl9=Cpl9; Cpl10=Cpl10; Cpl11=Cpl11; Cpl12=Cpl12;
Cpv1=Cpv1; Cpv2=Cpv2; Cpv3=Cpv3; Cpv4=Cpv4; Cpv5=Cpv5; Cpv6=Cpv6; Cpv7=Cpv7; Cpv8=Cpv8; Cpv9=Cpv9; Cpv10=Cpv10; Cpv11=Cpv11; Cpv12=Cpv12;
T1=353.15; % Temperatura del fluido de alimentación
Mmol=Prop(,IV); % Masa molar
Tsamp=2; % Tiempo de muestreo para FLAG=2
Tsmax=40; % Numero máximo de periodos de muestreo
Ttol=0.001; % Tolerancia de variación de propiedades para actualizar valores
offset=0; % Corrimiento Ver manual, p 3-15
-----
if abs(flag)~=1
% Definición de variables de estado: x0=[X', h0, T0, P0, V, Kf, dens, rhoV, Zv];
Nc=length(Prop(,I));
Z=u(1:Nc); % composiciones de entrada
Ff=u(Nc+1); % Gasto de alimentación de entrada
Fv=u(Nc+2); % Gasto de salida de liquido
Fg=u(Nc+3); % Gasto de salida de gas
% Estados Continuos
X=x(1:Nc); % Vector de fracciones
h=x(Nc+1); % altura dentro del separador
Tmp=x(Nc+2); % temperatura dentro del separador
P=x(Nc+3); % Presión en el interior del separador [Pa]
% Estados discretos (V,Kf,rhoL,rhoV,Zv)
V=x(Nc+4); % fracción en fase vapor
Kf=x(Nc+5); % Vector de relaciones de equilibrio
dens=x(Nc+5); % densidad de fase líquida [Kg/m^3]
rhoV=x(Nc+6); % densidad de fase vapor [Kg/m^3]
Zv=x(Nc+7); % factor de compresibilidad
Tflash=Tmp;
I=1-V;
Y=Kf*X;
R=8314.34; % [m^3*Pa/(Kg-mol*K)]
MWav=Mmol*Y; % Masa molecular promedio ponderada fase vapor
% Ecuaciones dinámicas con ecuaciones de estado
dX_dt=(Z-X)*I.*Ff/A/dens/h; % Vector de derivadas de las fracciones Xi
dMWav_dt=Mmol*(Kf.*dX_dt);
dTmp_dt=((Cpl.*Ff-Cpl.*dX_dt)*Tf+(Cpl-Cpv)*Tmp.*V+U.*AS*(Text-Tmp))/A/dens/Cpl/h; % Temp.
dh_dt=(I.*Ff-Fv)/A/dens; % Altura dentro del separador
dP_dt=Tmp/(I.s-h)*(P/Tmp.*dh_dt+P*(I.s-h)/Tmp^2.*dTmp_dt-I*(I.s-h)/MWav/Tmp.*dMWav_dt+Zv.*R/MWav/A*(V.*Ff-Fv)); % derivada de la presión
sys=[dX_dt; dh_dt; dTtmp_dt; dP_dt]; % FLAG=1 Retorna las derivadas del estado dx/dt
-----
elseif abs(flag) == 2
% FLAG=2 Retorna el estado discreto x(n+1)
% En esta parte se hace la evaluación de las propiedades termodinámicas basadas en las ecuaciones de estado
% Se requiere V,Kf,rhoL,rhoV,Zv
Nc=length(Prop(,I));
Z=u(1:Nc); % composiciones de entrada
% Estados Continuos
X=x(1:Nc); % Vector de fracciones
h=x(Nc+1); % altura dentro del separador
Ttmp=x(Nc+2); % temperatura dentro del separador
P=x(Nc+3); % Presión en el interior del separador [Pa]
% Estados discretos (V,Kf,rhoL,rhoV,Zv)
V=x(Nc+4); % fracción en fase vapor
Kf=x(Nc+5); % Vector de relaciones de equilibrio

```

```

dens=x(2*Nc+5); % densidad de fase líquida [Kg/m^3]
rhoV=x(2*Nc+6); % densidad de fase vapor [Kg/m^3]
Zv=x(2*Nc+7); % Factor de compresibilidad
% Se trata del punto de muestreo?
if abs(round((t-offset)/Tsamp)-(t-offset)/Tsamp) < 1e-8
    % Cálculo de propiedades:
    [V,Vv,N,Y,Ki,rhoL,rhoV,Zv]=sep_flash(P,Tmp,Z,Prop,Kb);
    sys=[V; Ki; rhoL; rhoV; Zv]; % FLAG=2 Retorna los estados discretos
else
    % Retorna las propiedades de estado sin realizar cálculo alguno
    sys=[V; Ki; dens; rhoV; Zv]; % FLAG=2 Retorna los estados discretos
end

%-----
elseif abs(flag) == 3

    % Definición de Salidas del sistema

    Nc=length(Prop(:,1));
    Z=u(1:Nc); % composiciones de entrada
    % Estados Continuos
    X=x(1:Nc); % Vector de fracciones
    h=x(Nc+1); % altura dentro del separador
    Tmp=x(Nc+2); % temperatura dentro del separador
    P=x(Nc+3); % Presión en el interior del separador [Pa]
    % Estados discretos (V,Ki,rhoL,rhoV,Zv)
    V=x(Nc+4); % fracción en fase vapor
    L=1-V;
    Ki=x(Nc+5:2*Nc+4); % Vector de relaciones de equilibrio
    dens=x(2*Nc+5); % densidad de fase líquida [Kg/m^3]
    rhoV=x(2*Nc+6); % densidad de fase líquida [Kg/m^3]
    Zv=x(2*Nc+7); % Factor de compresibilidad
    Y=Ki.*X;
    API=(141.5/(dens/1000))-131.5;
    if norm(Z)==0
        Z=Z0;
    end
    Ff=u(Nc+1); %Gasto de alimentación de entrada
    Fl=u(Nc+2); %Gasto de salida de liquido
    Fv=u(Nc+3); %Gasto de salida de gas

    Cpf=Z.*Cpl; %Capacidad calorífica del fluido de alimentación
    Cpl=Z.*Cpl; %Capacidad calorífica del torrente líquido
    Cpv=Z.*Cpw; %Capacidad calorífica del vapor de
    Tflash=Tmp;
    yl=[X;L;P];
    yv=[Y;V;P];
    sys=[h; yl; yv;P;API];
%-----
elseif flag == 4
    % Retorna el siguiente punto de muestreo
    % Nsamp almacena el número de muestras totales hasta el momento
    % Tsamp es el intervalo de muestreo, offset siempre es cero
    % Nótese que Ds se emplea para almacenar el último estado en que se actualizó sep_flash
    Nsamp=(t-offset)/Tsamp;
    sys=offset+(1+floor(Nsamp+1e-13*(1+Nsamp)))*Tsamp;
% FLAG=4 Retorna el siguiente intervalo de muestreo para una actualización discreta
%-----
elseif flag==0
    Nc=length(Prop(:,1));
    P=10; % [Pa]
    T=353.15; % [Kelvin]
    Z=Z0; % Composiciones de entrada [frac.mol]

```

```

[V, V1, Vv, N, Y, Ki, rhoL, rhoV, Zv] = sep_flash(P, T, Z, Prop, Kb);
" Dimension del sistema y condiciones iniciales
Ncst = Nc + 3; % SIZES(1) número de estados continuos N componentes + 3 cuando incluya presión
Ncstdis = Nc + 4; % SIZES(2) número de estados discretos (V, Ki, rhoL, rhoV, Zv)
Nsal = 2 * Nc + 7; % SIZES(3) número de salidas
Nent = Nc + 3; % SIZES(4) número de entradas
Nrai = 0; % SIZES(5) número de raíces (currently unsupported)
Ndtf = 0; % SIZES(6) direct feedthrough flag
sv = [Ncst, Ncstdis, Nsal, Nent, Nrai, Ndtf];
ho = 1; % Altura dentro del separador
To = 353.15; % Temperatura en el separador
Po = P;
dens = rhoL; % Densidad del liquido [kg/m3]
Dso = [Z, T, P];
x0 = [N, ho, To, Po, V, Ki, dens, rhoV, Zv];
end
"-----FIN DE PROGRAMA-----

```

FUNCIÓN: tesis_p2.m

```

function [sys,x0]=tesis_p2(t,x,u,flag,Prop,Kb,Z0,P0,T0,Pf0)
" a) TESIS_P2.M
" a) Bloque de simulink para la actualización
" a) de la presión del segundo separador en un
" a) arreglo de tres separadores
"-----
" a) UNA LA PRESIÓN COMO VARIABLE DISCRETA
"-----
" a) Parámetros de simulación
t;
Tsamp=2; % Tiempo de muestreo para FLAG=2
Tsmax=30; % Numero máximo de periodos de muestreo
Vartol=0.01; % Tolerancia de variación de propiedades para actualizar valores
offset=0; " a) Corrimiento Ver manual, p 3-15
"-----
if abs(flag) == 2
" a) FLAG=2 Retorna el estado discreto x(n+1) la presión como estado discreto
if t < 1
inicio=0;
cambio=1;
else
inicio=1;
cambio=0;
end
" a) Se trata del punto de muestreo?
if abs(round((t-offset)/Tsamp)-(t-offset)/Tsamp) < 1e-8
Nc=length(Prop(:,1));
Pi=I*f0;
Pco=P0(1);
P1=u(Nc+2);
Pf=u(Nc+1);
P3=P0(3);
I1=I0(1);
I2=I0(2);
I3=I0(3);
Z=u(1:Nc);
P2=P1;
if Pco <= P1 + Pf <= Pi
inicio=0;
cambio=1;
end
end

```

```

while inicio ~ 1 & cambio == 1
    delp=1.5e5;
    delr=1;
    P=x;
    [V1,V1T,V1T,N1,Y1,K1,rho1,T,rhoV1,Zv1,Z1,I1]=sep_fish(P1,T1,Z1,Prop,Kb);
        V1=V1*P1;
        I1=I1-V1;
    [p_mx1,Pdos1,densapi1]=optim(I1,N1,P2,P3,delp,T2,T3,delt,Prop,Kb);
    P2=1.5*p_mx1;
    delp=.54e5;
    [p_mx2,Pdos1,densapi1]=optim(I1,N1,P2,P3,delp,T2,T3,delt,Prop,Kb);

    % AJUSTE DE LOS GRADOS API A UN POLINOMIO DE ORDEN N
    [pp,S]=POLYFIT(Pdos1-(i-i-1),densapi1-(i-i-1),2); % (x,y,N)
    ppd=polyder(pp);
    raices=ROOTS(ppd);
    p_mx_aj=min(raices)

    inicio=1;
    cambio=0;
end
P=p_mx_aj;
x=p_mx_aj;
sys=|P|;
else
P=x;
sys=|P|;
end
%-----
elseif abs(flag)==3
    % Definición de Salida del sistema
    P=x;
    sys=|P|
    %-----
elseif flag == 4
    % Retorna el siguiente punto de muestreo
    % Nsamp almacena el número de muestras totales hasta el momento
    % Tsamp es el intervalo de muestreo, offset siempre es cero
    Nsamp=(t-offset)/Tsamp;
    sys=offset+(1+floor(Nsamp+1e-13*(1+Nsamp)))*Tsamp;
    %-----
elseif flag==0
    % Dimensión del sistema y condiciones iniciales
    Nc=length(Prop(:,1));
    P=P0(2); % [Pa]
    T=T0(2); % [Kelvin]
    Z=Z0(2,:); % Composiciones de entrada [frac.mol]
    Ncst=0; % SIZE(1) número de estados continuos
    Ncstdis=1; % SIZE(2) número de estados discretos (Presión)
    Nsal=1; % SIZE(3) número de salidas presión del segundo separador
    Ncnt=Nc+2; % SIZE(4) número de entradas composición de salida del 1er separador, flujo y P1
    Nrai=0; % SIZE(5) número de raíces (currently unsupported)
    Ndff=0; % SIZE(6) direct feedthrough flag
    sys=[Ncst,Ncstdis,Nsal,Ncnt,Nrai,Ndff];
    s0=|P|;
else
    sys=[];
end
%-----FIN DE PROGRAMA-----

```

FUNCIONES AUXILIARES

FUNCIÓN: int_bin.m

```

funcion [Kb] int_bin(Comp,
%o INT_BIN.m
%o [Kb] int_bin(Comp)
%o Programa para determinar
%o la matriz de parametros
%o de interacción binaria
%o
%o Por Ricardo Lopezlena E.
%o Laboratorio de Investigación Aplicada en Control y Automatización
%o (c) Instituto Mexicano del Petróleo 11-Ago-99

%o Viernes 17 de septiembre de 1999 10:59 hr
%o Lunes 20 de septiembre de 1999 10:45 hr.
%o Referencia
%o Table 1.13 m
%o Walas, Stanley M.,
%o Phase Equilibria in Chemical Engineering
%o Butterworth-Heinemann, U.S.A., 1985
%o (Sgr. Katz & Firoozabadi 1978)
%o-----
[Nc,caract]=size(Comp);
Kb=zeros(Nc,Nc);
[NomCom,Prop,NumLas]=TABLAS(Comp,'PROPIED.txt');
for j=1:Nc
    CompB=NomCom(j,:);
    for i=1:Nc
        CompA=NomCom(i,:);
        if i ~= j
%o.....METANO*****
            if cmpstr(CompA,'metano') == 1 % Si CompA='metano'
                if cmpstr(CompB,'etano') == 1
                    Kb(i,j)=0.0;
                elseif cmpstr(CompB,'propano') == 1
                    Kb(i,j)=0.0;
                elseif cmpstr(CompB,'n-butano') == 1
                    Kb(i,j)=0.02;
                elseif cmpstr(CompB,'n-pentano') == 1
                    Kb(i,j)=0.02;
                elseif cmpstr(CompB,'n-hexano') == 1
                    Kb(i,j)=0.025;
                elseif cmpstr(CompB,'n-heptano') == 1
                    Kb(i,j)=0.025;
                elseif cmpstr(CompB,'n-octano') == 1
                    Kb(i,j)=0.035;
                elseif cmpstr(CompB,'n-nonano') == 1
                    Kb(i,j)=0.035;
                elseif cmpstr(CompB,'n-decano') == 1
                    Kb(i,j)=0.035;
                elseif cmpstr(CompB,'n-dodecano') == 1
                    Kb(i,j)=0.054;
                elseif cmpstr(CompB,'benceno') == 1
                    Kb(i,j)=0.06;
                elseif cmpstr(CompB,'ciclohexano') == 1
                    Kb(i,j)=0.03;
                else
                    Kb(i,j)=0.0;
            end
        end
    end
end

```

```

elseif cmpstr(CompB,'metano') == 1 % Si CompB='metano'
    if cmpstr(CompA,'etano') == 1
        Kb(i,j)=0.0;
    elseif cmpstr(CompA,'propano') == 1
        Kb(i,j)=0.0;
    elseif cmpstr(CompA,'n-butano') == 1
        Kb(i,j)=0.02;
    elseif cmpstr(CompA,'n-pentano') == 1
        Kb(i,j)=0.02;
    elseif cmpstr(CompA,'n-hexano') == 1
        Kb(i,j)=0.025;
    elseif cmpstr(CompA,'n-heptano') == 1
        Kb(i,j)=0.025;
    elseif cmpstr(CompA,'n-octano') == 1
        Kb(i,j)=0.035;
    elseif cmpstr(CompA,'n-nonano') == 1
        Kb(i,j)=0.035;
    elseif cmpstr(CompA,'n-decano') == 1
        Kb(i,j)=0.035;
    elseif cmpstr(CompA,'n-dodecano') == 1
        Kb(i,j)=0.054;
    elseif cmpstr(CompA,'benceno') == 1
        Kb(i,j)=0.06;
    elseif cmpstr(CompA,'ciclohexano') == 1
        Kb(i,j)=0.03;
    else
        Kb(i,j)=0.0;
    end
end
%*****NITROGENO*****
elseif cmpstr(CompA,'nitrogeno') == 1
    if NumLis(j) <= 36 % es decir, si CompB es un hidrocarburo
        Kb(i,j)=0.12;
    else
        Kb(i,j)=0.0;
    end
elseif cmpstr(CompB,'nitrogeno') == 1
    if NumLis(i) <= 36 % es decir, si CompA es un hidrocarburo
        Kb(i,j)=0.12;
    else
        Kb(i,j)=0.0;
    end
end
%*****DIOXIDO DE CARBONO*****
elseif cmpstr(CompA,'dioxido de carbono') == 1
    if NumLis(j) <= 36 % es decir, si CompB es un hidrocarburo
        Kb(i,j)=0.15;
    else
        Kb(i,j)=0.0;
    end
elseif cmpstr(CompB,'dioxido de carbono') == 1
    if NumLis(i) <= 36 % es decir, si CompA es un hidrocarburo
        Kb(i,j)=0.15;
    else
        Kb(i,j)=0.0;
    end
end
%*****ETANO*****
elseif cmpstr(CompA,'etano') == 1
    if NumLis(j) <= 36 % es decir, si CompB es un hidrocarburo
        Kb(i,j)=0.01;
    else
        Kb(i,j)=0.0;
    end
elseif cmpstr(CompB,'etano') == 1
    if NumLis(i) <= 36 % es decir, si CompA es un hidrocarburo
        Kb(i,j)=0.01;
    else
        Kb(i,j)=0.0;
    end
end

```

```

else
    Kb(i,j)=0.0;
end
%.....PROPANO.....
elseif empstr(CompA,'propano')==1
    if NumLas(i) <= 36 % es decir, si CompB es un hidrocarburo
        Kb(i,j)=0.01;
    else
        Kb(i,j)=0.0;
    end
elseif empstr(CompB,'propano')==1
    if NumLas(i) <= 36 % es decir, si CompA es un hidrocarburo
        Kb(i,j)=0.01;
    else
        Kb(i,j)=0.0;
    end
end
%.....CETROS.....
else
    Kb(i,j)=0;
end
else
    Kb(i,j)=0;
end
end
end
%-----FIN DE PROGRAMA-----

```

FUNCIÓN: EOS_PR.m

```

function [fugL,fugV,ZL,ZV,Vl,Vv] = EOS_PR(P,T,Z,X,Y,Ki,Kb,V,Prop)
% EOS_PR.m Empleando la ecuación de estado Peng-Robinson
% determina el valor de los vectores de fugacidad de
% líquido y vapor.

% Por: Ricardo Lopezlena Estrada
% LABORATORIO DE INVESTIGACIÓN APLICADA
% EN CONTROL Y AUTOMATIZACIÓN
% (c) Instituto Mexicano del Petróleo 1999

%-----
% Asignaciones a partir de la matriz de propiedades:
Mmol=Prop(:,1); % Masa molar
W=Prop(:,2); % Factor acéntrico
Tc=Prop(:,3); % Temperatura crítica
Pc=Prop(:,4); % Presión crítica [Pa]
Zc=Prop(:,5); % Compresibilidad crítica.
%Vc=Prop(:,6); % Volumen Crítico.
Nc=length(Z); % Tamaño del vector de composiciones Z
Tr=T/Tc; % Temperatura reducida
Pr=P/Pc; % Presión reducida
Unos=ones(1,Nc); % Vector de unos: Unos=[1 1...1]

% CÁLCULO DE LOS PARÁMETROS DE LA ECUACIÓN DE ESTADO P-R
% a=R*T/(V-b)-a0*alfa/(V0^2+2*b0*V0+w*bo^2);
% Parámetros de Peng-Robinson:
R=8314.34; % [m3*Pa/(Kg-mol*K)]
a0=(0.4572355289*(R*Tc)^2)/Pc;
bo=0.07779660739*R*Tc/Pc;
alfa=(Unos+(0.37464+1.54226*W-0.26992*W.^2)*(Unos-(Tr^(0.5))))^2;
V0=P*a0*alfa/(R*T)^2;
bo=bo*P/R/T;
if Nc > 1
    % Cálculo de los parámetros binarios de mezclado

```

```

bl=X*bo;
bv=Y*bo;
BoL=X*Bo;
BoV=Y*Bo;
aa=zc*cos(Nc/Nc);
for i=1:Nc
    for t=1:Nc
        aa(i,t)=(1-Kb(i,i))*sqrt(aa(i)*alfao(i)*ao(i)*alfao(i));
    end
end
aal=0;
aav=0;
aal=X*aa;
aav=Y*aa;
afl=X*aa;
av=Y*aa;
Al=P*aal/(R*T)^2;
Bl=bl*P/R/T;
AV=P*aav/(R*T)^2;
BV=bv*P/R/T;
elseif Nc==1
% En el caso de que sea un solo componente, solamente se emplea una
% ecuación cúbica:
% P=R*T/(V-bo)-ao*alfao/(Vo^2+2*bo*Vo+w*bo^2);
% Parametros de Peng-Robinson:
R=8.314.34; % [m3*Pa/(Kg-mol*K)]
a=(0.4572355289*(R*Tc)^2)/Pc;
b=0.0777960739*R*Tc/Pc;
alfao=(1+(0.37464+1.54226*W-0.26992*W^2)*(1-(1r^(0.5))))^2;
A=P*a*alfao/(R*T)^2;
B=b*P/R/T;
% Ecuación cúbica:
polin=11(B-1)*(A-3*B^2-2*B)-(A*B-B^2-B^3);
Raiz=roots(polin);
% La raíz más pequeña es el factor de comp. líquido:
ZL=Craiz(1);
% La raíz más grande es el factor de comp. vapor:
Zv=Craiz(3);
% CÁLCULO DE FUGACIDADES PARCIALES DEL LÍQUIDO Y DEL GAS FLÍVFI
LnPhiL=ZL-1-log(ZL-B)+A/B/2.82842712474619*log((ZL+2.4142*B)/(ZL-0.4142*B));
LnPhiV=Zv-1-log(Zv-B)+A/B/2.82842712474619*log((Zv+2.4142*B)/(Zv-0.4142*B));
% Por fin, las fugacidades: phi=fug/(xi*P)
fugL=P*X*exp(LnPhiL);
fugV=P*Y*exp(LnPhiV);
fi=fugL/fugV;
Verr=fi-Unos;
Ferr=sqrt(Verr*Verr);
Ki=Yi/X*fi;
else
    fprintf('Debe haber algún error!');
end
% Ecuaciones cúbicas:
polinL=11(BL-1)*(AL-3*BL^2-2*BL)-(AL*BL-BL^2-BL^3);
polinV=11(BV-1)*(AV-3*BV^2-2*BV)-(AV*BV-BV^2-BV^3);
% SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE ESTADO PARA OBTENER ZL & Zv
% SOLUCIÓN A ECUACIÓN CÚBICA(ZL & Zv)
Raiz=roots(polinL);
Craiz=sort(Raiz); %ordena forma ascendente
% La raíz más pequeña es el factor de comp. líquido:
n=length(Craiz)-1;
ZL=Craiz;
else
    Craiz=sort(Raiz); % ordena forma ascendente
if imag(Craiz(1)) ~= 0

```

```

        Z1 = O.raiz(3);
    else
        Z1 = O.raiz(1);
    end
end
% Aquí va se tiene el vector fact comp liq. Z1.
Raiz = roots(polnV);
% La raíz más grande es el factor de comp. vapor
if length(Raiz) == 1
    Zv = Raiz;
else
    O.raiz = sort(Raiz); % ordena forma ascendente
    if imag(O.raiz(3)) ~= 0
        Z1 = O.raiz(1);
    else
        Z1 = O.raiz(3);
    end
end
end
% Aquí va se tiene el vector fact comp vapor. Zv
% CÁLCULO DE FUGACIDADES PARCIALES DEL LÍQUIDO FLI
parPV = (Bo/BI - 2/aav*afv)*log((Z1 + 2.4142*BI)/(Z1 - 0.4142*BI));
LnPhiV = Bo*(Z1 - 1)/BI*log(Z1 - BI) + AV/BI./2.82842712474619*parPV;
% CÁLCULO DE FUGACIDADES PARCIALES DEL GAS FV1
parPV = (Bo/BV - 2/aav*afv)*log((Zv + 2.4142*BV)/(Zv - 0.4142*BV));
LnPhiV = Bo*(Zv - 1)/BV*log(Zv - BV) + AV/BV./2.82842712474619*parPV;
% Las fugacidades: phi = fug/(xi*P)
fugL = P*X.*exp(LnPhiL);
fugV = P*Y.*exp(LnPhiV);
% Cálculo de volúmenes
VL = ZL*R*T/P;
Vv = Zv*R*T/P;
return

```

%-----FIN DE PROGRAMA-----

CÁLCULO FLASH

FUNCIÓN: sep_flash.m

```

function [V,VL,Vv,X,Y,K,rbol,choV,Zv,ZL] = sep_flash(P,T,Zc,Prop,Kb,Kio)
% sep_flash.m
%
% PROGRAMA DE CÁLCULO FLASH BASADO
% EN LA ECUACIÓN DE ESTADO PENG-ROBINSON
% MULTICOMPONENTE Y MEDIANTE EL MÉTODO DE BÚSQUEDA
% DE MERRILL MODIFICADO CON NORMALIZACIÓN
% Si se tienen valores iniciales (cercaos) propuestos de las
% relaciones de equilibrio Kio, se puede inicializar
% el programa con éstas para acelerar las iteraciones.
%
% Por: Ricardo Lopezlela Estrada
% LABORATORIO DE INVESTIGACIÓN APLICADA
% EN CONTROL Y AUTOMATIZACIÓN
% (c) Instituto Mexicano del Petróleo 1999
%-----
% CONDICIONES INICIALES
tolerancia = 1e-6; % Tolerancia del error MERRILL
umbral = 1e-8; % Umbral de envolvente
Nc = length(Prop(:,1));
% Algunas asignaciones a partir de la matriz de propiedades:
Mmol = Prop(:,1); % Masa molar

```

```

W=Prop(.2); % Factor acéntrico
Tc=Prop(.3); % Temperatura crítica por temp actual
Pc=Prop(.4); % Presión crítica [Pa]
Zc=Prop(.5); % Compresibilidad crítica.
Vc=Prop(.6); % Volumen Crítico.
Nc=length(Z); % Tamaño del vector de composiciones Z
Unos=ones(1,Nc); % Vector de unos: Unos=[1 1 1]
Tr=T/Tc; % Temperatura reducida
Pr=P/Pr; % Presión reducida
if nargin < 6 % Si no se dan valores iniciales de Ki
    % CORRECCIÓN DE WILSON (estimación de Ki)
    Ki=exp(5.37*(Unos+W).*(Unos-Tc/1))./Pr; %([1,Nc])
else
    Ki=Kio;
end
Error=1;
GmVor=Unos;
ALFA=3*Unos;
V=0.5; % Suposición inicial método de Newton
% ECUACIÓN DE REGIÓN:
GmV0=(Ki-Unos)*Z;
GmV1=Z*(Unos-1./Ki);
repeticion=0;

while(repeticion < 2)

    if GmV0 > umbral & GmV1 < -umbral
        % Región de dos fases
        % Es decir, si  $Ki*Z > 1$  &  $Z*(1./Ki) > 1$ 
        % Método de Newton sobre Gama(V)=suma(yi-xi)=0
        GamaV=(Z.*(Ki-Unos))./(Unos+V*(Ki-Unos))*Unos;
        while(abs(GamaV) > tolerancia)
            % Cálculo de la derivada
            derGama=(-Z.*((Ki-Unos))./(Unos+V*(Ki-Unos)).^2)*Unos;
            % SOLUCIÓN POR NEWTON
            V=V-GamaV./derGama;
            GamaV=(Z.*(Ki-Unos))./(Unos+V*(Ki-Unos))*Unos;
        end
        % Hasta este momento se tiene un valor determinado para V
        % Cálculo de xi y yi de las ecuaciones sig:
        X=Z./((Unos+V*(Ki-Unos)));
        Y=Ki*X;
    elseif GmV0 <= -umbral
        % Si GmV0 <= 0 es líquido en una fase
        % Punto de burbuja: GmV0 == 0, es decir, si  $Ki*Z=1$ 
        V=0;
        X=Z;
        Y=Ki*Z;
    elseif GmV1 >= umbral
        % Si GmV1 >= 0 es vapor en una fase
        % Punto de rocío: GmV1 == 0, es decir, si  $Z*(1./Ki)=1$ 
        V=1;
        X=Z./Ki;
        Y=Z;
    end
    iteracion=0;
    N=X/(X*Unos);
    Y=Y/(Y*Unos);
    Ki=Y./X;
    while(Error > tolerancia & iteracion < 15)
        [fugL,fugV,Zv,Zl,Vl,Vv]=EOS_PR(P,T,Z,X,Y,Ki,Kb,V,Prop);
        Fi=fugV./fugL;
        Verr=Fi-Unos;
    end
end

```

```

    Verror=sqrt(Verr*Verr);
    PSI=fugL-fugV;
    NReerror=sqrt(PSI*PSI);
    Técnica de aceleración de Mehra(II):
    Gm=log(Ii);
    ddt=Gm.Ant-Gm;
    pdif=dt/dif;
    A.L.F.A=A.L.F.A*Gm.Ant*dt/pdif;
    Ki=Ki*exp(-A.L.F.A*Gm);
    Gm.Ant=Gm;
    X=X/(Unos+V*(Ki-Unos));
    Y=Ki*X;
    N=X/(X+Unos);
    Y=Y/(Y+Unos);
    Ki=Y/X;
    iteracion=iteracion+1;
end
repeticion=repeticion+1;
end

R=8314.34, % [m3*Pa/(Kg-mol*K)]
[fugL,fugV,Zv,Zl,Vl,Vv]=EOS_PR(P,T,Z,X,Y,Ki,Kb,V,Prop);
MWal=Mmol*X; % Masa molecular aparente fase líquida
MWav=Mmol*Y; % Masa molecular aparente fase vapor
rhoL=P*MWal./Zl./R/T; % E.c. de gases reales
rhoV=P*MWav./Zv./R/T; % E.c. de gases reales

% Agregar vector de densidades
v_dens=[0.8076 0.82557 0.85492 0.29955 0.356 0.5072 0.562563 0.583772 0.624033 0.63038 0.66333 0.814];
den_dc=sum((Mmol.*X)/v_dens);
rhoL=(MWal./den_dc)*1000;%en Kg/m3

% -----FIN DE PROGRAMA-----

```

BÚSQUEDA DE PRESIÓN ÓPTIMA DEL SEGUNDO SEPARADOR

FUNCIÓN: optim.m

```

function [p_mx, Pdos, densapi, ii]=optim(L1,X1,P2,P3,delp,T2,T3,delt,Prop,Kb);
%optim.m
%-----
%función para hacer la búsqueda de la presión 2 óptima con el criterio de
% máxima recuperación de hidrocarburos (grados API máximos)
% para una batería de separación de 3 etapas
%-----
ii=0;
V3=1;
while(I2>I3)

    Z2=X1;
    Fentra2=1.1;
    [V2,Vl2,Vv2,X2,Y2,Ki2,rhoL2,rhoV2,Zv2,Zl2]=sep_flash(P2,T2,Z2,Prop,Kb);
    V2=V2*Fentra2;
    I2=Fentra2*V2;

    Z3=X2;
    Fentra3=1.2;
    [V3,Vl3,Vv3,X3,Y3,Ki3,rhoL3,rhoV3,Zv3,Zl3]=sep_flash(P3,T3,Z3,Prop,Kb);
    V3=V3*Fentra3;
    I3=Fentra3*V3;
    ii=ii+1;
    V3=V2;
end

```

```

        I3=I2;
        N3=N2;
        Y3=Y2;
        Z3=Z2;
        Ki3=Ki2;
        rhoL3=rhoL2;
        rhoV3=rhoV2;
        P2=P3;
    end

    densrcla=rhoL3/1000;
    API=(141.5/densrcla)-131.5;
    Pdos(ii+1)=P2;
    densapi(ii+1)=API;
    P2=P2-dclp;
    T2=T2-dclt;
    ii=ii+1;
end

api_mx=max(densapi(1:ii-1));
resu=[densapi(1:ii-1) Pdos(1:ii-1)];
for q=1:length(resu)
    reng=resu(q,1);
    if reng==api_mx
        p_mx=resu(q,2);
    end
end

```

-----FIN DE PROGRAMA-----

PROPIEDADES DE LA FRACCIÓN PESADA

PROGRAMA: propC7.m

```

%Programa para calcular las
%Propiedades de la fracción pesada

% Propiedades de la fracción pesada:
MW_C7=198.116129;      %Peso molecular para Litoral Tabasco (PV.m)
%MW_C7=245.82577;      %Peso molecular para simulación de validación (valid)

n_m=(MW_C7-2)/14; % Número de átomos de carbono
Y=-0.0137726826*n_m + 0.6801481651;
a=2.95597-0.090597*n_m^(2/3);
Tc=1.8*(961-10*a);
Pc=(10^(5+Y))/Tc;
Tb=0.0004347*Tc^2+265;
W=3/7*log10(Pc/14.7)/(Tc/Tb-1)-1

% Conversión de unidades inglesas a unidades SI:
Tc=5/9*(Tc-459.67-32)+273.15
Tb=5/9*(Tb-459.67-32)+273.15
Pc=Pc/1.450e-4

-----FIN DE PROGRAMA-----

```

DECLARACIÓN DE MATRIZ DE PROPIEDADES Y VALORES INICIALES DE VARIABLES PARA LA SIMULACIÓN EN TIEMPO REAL

PROGRAMA: tesis_pr.m

```

% tesis_pr.m
% con datos de litoral Tabasco generados por PVfp21.
% peso molecular de fracción pesada C7+=198.116129

```

```

% Densidad de la fracción pesada C7+ = 0.814 g/cm3

% [Mmol, W, (F{K} - P{Pa}) / (C (Vc) (T{K}))]
N2=[28.014 0 0.038 126.2 34.00e5 0.289 89.2 77.3]; %N2
C C2=[44.010 0 224 304.2 73 83e5 0.274 94.0 0]; %C C2
H2S=[34.082 0 0.094 373 5 89 63e5 0.284 98.5 212.8]; %H2S
C C14=[16.043 0 0.012 190 6 45.99e5 0.286 98.6 111.4]; %C C14
C C216=[30 0 0 0.100 305 3 48 72e5 0.279 145.5 184 6]; %C C216
C C318=[44.09 0 0.152 369 8 42.48e5 0.276 200.0 231 1]; %C C318
nC3=[58 123 0 181 408 1 36 48e5 0.282 262.7 261 4]; %nC3
nC4=[58 123 0 200 425 1 37 96e5 0.274 255.0 272 7]; %nC4
nC5=[70 134 0 196 511 8 45 02e5 0.273 258.0 322 4]; %nC5
nC6=[72 150 0 252 469 7 33 70e5 0.270 333 0 309 2]; %nC6
nC7=[86 177 0 301 507 6 30 25e5 0.266 371 0 341 9]; %nC7
nC7+=[98.11 0 0.6109 692 1540 1.7e6 0.261 428.0 522 08]; %C7+

Prop=[N2;C C2;H2S;C C14;C C216;C C318;nC3;nC4;nC5;nC6;nC7];

% Son 12 componentes

PZ=[.0072 0.0196 0.01135 5996 .0898 .0454 .0072 .0206 .00826 0.1238 0.1857 .16];

% Vector de componentes
Comp1=str2mat('nitrogeno','dioxido de carbono','sulfuro hidrogeno','metano','etano','propano');
Comp2=str2mat('isobutano','n-butano','isopentano','n-pentano','n-hexano','n-heptano');

[NomCom1,Prop1]=TABLAS(Comp1,'PROPIED.txt');
[NomCom2,Prop2]=TABLAS(Comp2,'PROPIED.txt');

NomCom=str2mat(NomCom1,NomCom2);
% a Parámetros de Interacción Binaria (Walas, Table 1.13):
Kb=mat_bin(NomCom);

Nc=length(Prop{:,1});

Z01=[0.00720 0.01960 0.01135 0.59960 0.08980 0.04540 0.00720 0.02060 0.00826 0.1238 0.1857 0.16000];
Z02=[0.00062 0.00770 0.00546 0.09080 0.04579 0.03825 0.01066 0.03591 0.02420 0.03288 0.05598 0.64369];
Z03=[0.00005 0.00248 0.00300 0.01587 0.01681 0.02805 0.00847 0.03094 0.02593 0.03406 0.06261 0.77173];
P01=35e5;
P02=8e5;
P03=1.01353e5;
P0=[P01 P02 P03]; %Presiones iniciales
Z0=[Z01; Z02; Z03]; %fracciones iniciales
T0=[358.15 356.15 353.15]; %Kclvin
F0=9.00615;

%-----FIN DE PROGRAMA-----

```


APÉNDICE II

DESCRIPCIÓN DEL DIAGRAMA DE BLOQUES USADO EN EL AMBIENTE GRÁFICO

La figura 6.6 representa una batería de separación de hidrocarburos compuesta por tres separadores.

Se alimentan la composición y el flujo de la corriente de entrada por medio del bloque representado en la figura A2.1.

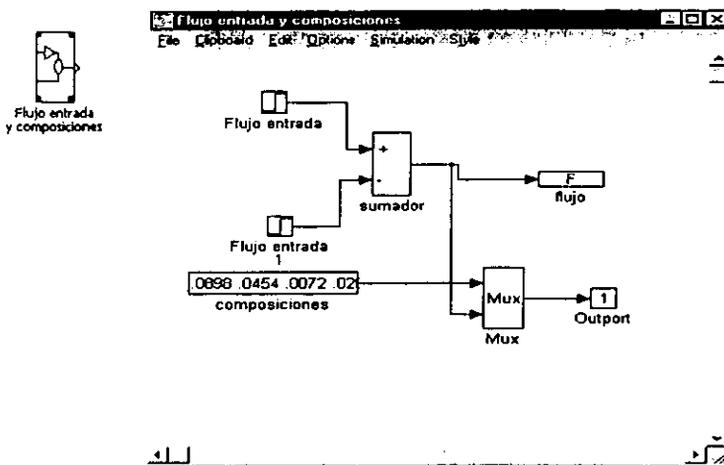


Figura A2.1. Bloque de alimentación de flujo y composiciones

Los puntos de operación (*set points*) de cada separador para la presión y el nivel se alimentan mediante los bloques de Step Fcn representado en la figura A2.2.

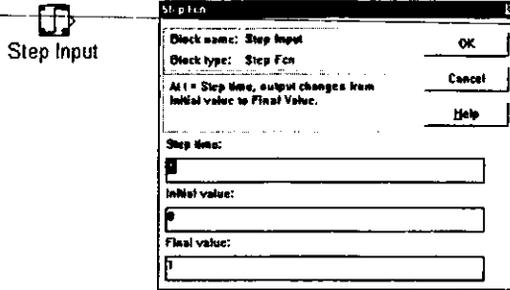


Figura A2.2. Bloque de Step Function y Cuadro de Diálogo

En el cuadro de diálogo se insertan el valor inicial (*Initial Value*) de la variable, es decir el *set point* deseado. Este cuadro es útil cuando se simulan variaciones, es decir, en el tiempo de paso (*Step time*) se especifica el tiempo en el cual se producirá un cambio del valor inicial al valor final (*Final Value*) previamente especificado.

Los valores de las constantes que las *S-Functions* requieren en cierto momento se habilitan dentro del programa mediante el bloque que se presenta en la figura A2.3.



Figura A2.3 bloque para habilitar valores de variables dentro del programa

Mediante este bloque se pueden usar los valores de variables que se especifican en un archivo m. El archivo tesis_pr.m contiene los valores que se habilitan con el bloque anterior. Estos son: la matriz de propiedades termodinámicas de cada uno de los componentes, la matriz de los parámetros de interacción binaria, y la inicialización de variables como temperatura, presiones y composiciones del flujo de entrada para cada separador.

Este programa contiene principalmente dos *S-Functions*. Una de ellas es la que se usa para el cálculo *flash* de cada separador y está especificada como tesis_sf.m y para cada separador cambian los parámetros que se le asignan en el cuadro de diálogo que se presenta en la figura A2.4.

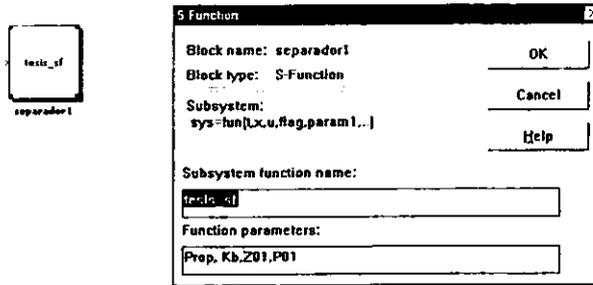


Figura A2.4. Figura y Cuadro de Diálogo de la S-Function tesis_sf

Los parámetros para el separador uno son Prop, Kb, Z01, P01 y para los separadores dos y tres sólo cambian en Z02, P02 y Z03, P03. Estos parámetros son nombres de variables definidos en tesis_pr.m y corresponden a las propiedades y parámetros de interacción binaria para los componentes de la mezcla de alimentación y valores iniciales de composición y presión para los separadores respectivamente.

La otra S-Function usada es para calcular la presión óptima del segundo separador y se identifica con el nombre de tesis_p2.m.

CONTROLADOR

En la figura A3.5. se presenta la imagen del controlador para la presión del primer separador.

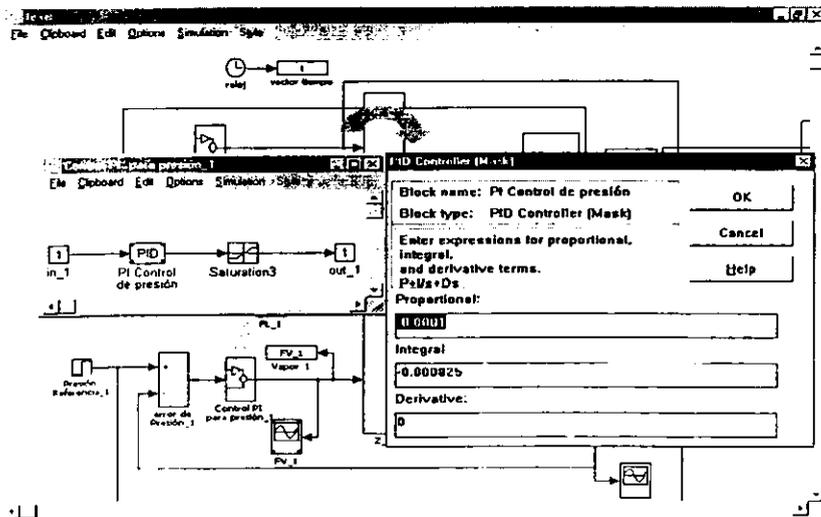


Figura A3.5 Controlador PI para el primer separador

En la figura se introduce el punto de operación o *set point* con el bloque Presión Referencia_1, entra a un sumador que resta al *set point* el valor que sale del proceso y produce la señal de error para después entrar al subsistema llamado Control PI para presión_1, este subsistema esta representado en el primer cuadro después de la flecha vertical. Se tiene el bloque con nombre PID, este bloque despliega el cuadro de diálogo que aparece a la derecha donde se especifican los valores de las constantes, en este caso el valor de la constante derivativa es cero. En la Tabla 6.1 se presentan los valores de las constantes de cada uno de los controladores PI utilizados en el sistema.

La simulación requiere de ciertos parámetros para que se lleve a cabo, tales como el método de integración, el tiempo de simulación, los tamaños del paso de integración (mínimo y máximo) y la tolerancia.

Los parámetros usados para la simulación se muestran en la figura A3.6.

The image shows a dialog box titled "SIMULACION" for configuring simulation parameters. At the top, there is a row of radio buttons for selecting the integration method: Euler, Runge-Kutta 3, Runge-Kutta 5 (which is selected), Adams, Gear, Adams/Gear, and Linsim. Below this, there are five input fields with labels: "Start Time:" (value: 0.0), "Stop Time:" (value: 1000), "Min Step Size:" (value: 0.001), "Max Step Size:" (value: 1.0), and "Tolerance:" (value: 1e-3). At the bottom left, there is a "Return Variables:" field. On the right side, there are two buttons: "OK" and "Cancel".

Figura A3.6. Parámetros para la simulación

APÉNDICE III

SIMULACIONES

Los resultados de la simulación se encuentran resumidos en 12 gráficas presentadas en una sola figura, la primera hilera corresponde a las gráficas para el primer separador y así sucesivamente. La primera columna representa la presión correspondiente y la gráfica tiene el título tesis/pres_1 (algunas veces ilegible), la siguiente columna representa el flujo de salida de vapor (tesis/FV_1), la tercera el flujo de salida de líquido (tesis/FL_1) y la última a los grados API de salida de cada separador (tesis/API_1). Los números representan las etapas a las que corresponde la gráfica.

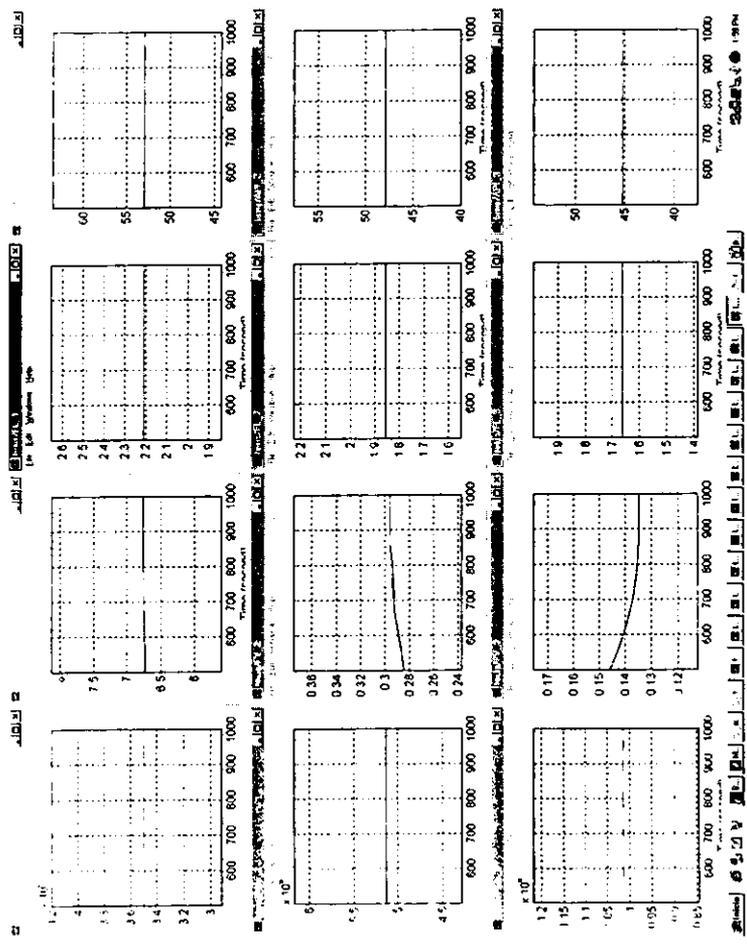


Figura A3.1. Resultados de la simulación en estado estacionario

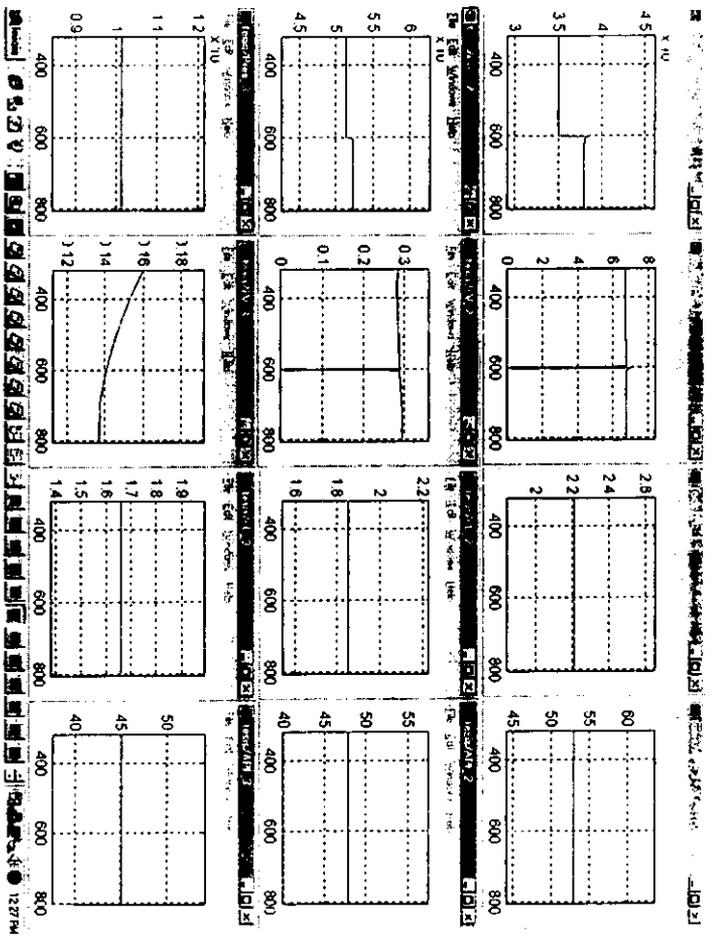


Figura A3.2. Resultados de la simulación para cambio de presión en el primer separador de P1=35e5 Pa a 38e5 Pa

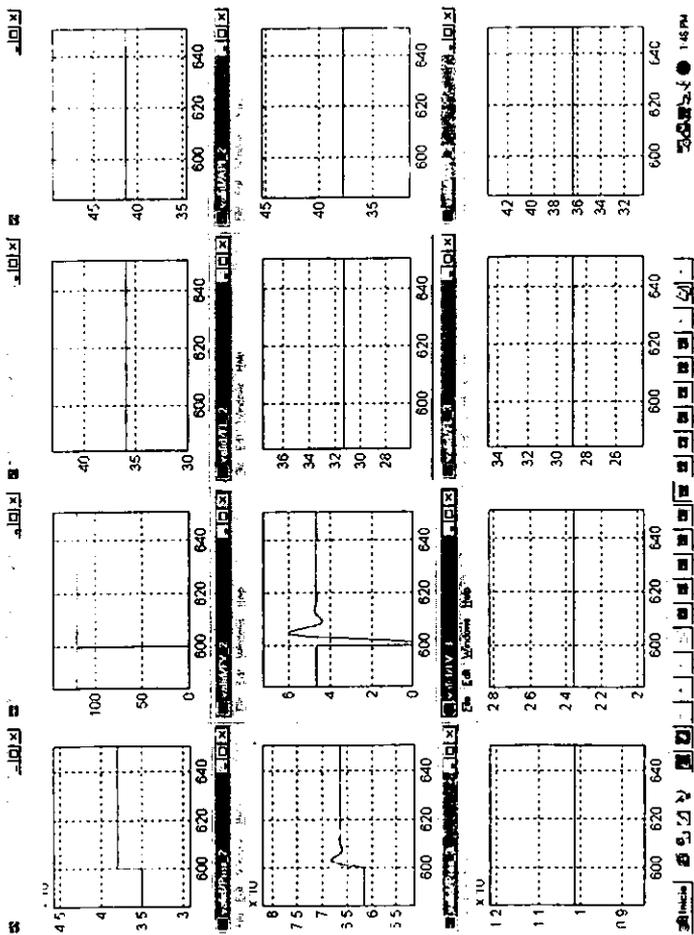


Figura A3.3. Resultados de la simulación para cambio de presión en el primer separador del programa de validación de $P1=35e5$ Pa a $38e5$ Pa

