

25
Zeje

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

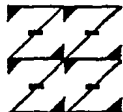
UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO

FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES "ZARAGOZA"

EMPLEO DE REDES NEURONALES EN LA
SIMULACION DINAMICA DE PROCESOS QUIMICOS
CON INSTRUMENTACION DE MEDICION, CONTROL
Y RESPUESTA GRAFICA EN TIEMPO REAL

TESIS PROFESIONAL
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE
INGENIERO QUIMICO
P R E S E N T A
ROBERTO RAMIREZ TORRES

U N A M
ZARAGOZA



LO HUMANO
ES
DE NUESTRA REFLEXION

MEXICO, D. F.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

JULIO, 1994



Universidad Nacional
Autónoma de México



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 está 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.

EMPLEO DE REDES NEURONALES EN LA SIMULACION DINAMICA DE
PROCESOS QUIMICOS CON INSTRUMENTACION DE MEDICION,
CONTROL Y RESPUESTA GRAFICA EN TIEMPO REAL



ING. EDUARDO VAZQUEZ ZAMORA

ASESOR DEL TEMA



ROBERTO RAMIREZ TORRES

SUSTENTANTE



UNIVERSIDAD NACIONAL
AVENIDA DE
MEXICO

FACULTAD DE ESTUDIOS
SUPERIORES *ZARAGOZA*

JEFATURA DE LA CARRERA
DE INGENIERIA QUIMICA

SR. ROBERTO RAMIREZ TORRES
P R E S E N T E.

En respuesta a su solicitud de asignación de jurado, para el Examen Profesional, le comunico que la Jefatura a mi cargo ha propuesto la siguiente designación:

PRESIDENTE: ING. EDUARDO VAZQUEZ ZAMORA
VOCAL: DR. FAUSTINO MIJANGOS SANTIAGO
SECRETARIO: ING. ROBERTO MENDOZA SERNA
SUPLENTE: ING. JOSE A. GONZALEZ HERNANDEZ
SUPLENTE: ING. ELIUD MORGADO LOPEZ

A T E N T A M E N T E
"POR MI RAZA HABLARA EL ESPIRITU"
México, D.F., 8 de noviembre de 1993

M. en C. ALEJANDRO RUIZ CANCINO
JEFE DE LA CARRERA DE
INGENIERIA QUIMICA

Irm

AGRADECIMIENTOS

El presente trabajo fué posible gracias al apoyo y colaboración de la Comisión Nacional de Petróleo, Gas y Petroquímica (antes Comisión Petroquímica Mexicana) órgano desconcentrado de la Secretaría de Energía, Minas e Industria Paraestatal (SEMIP) y a cada una de las personas que de una u otra forma me auxiliaron en la realización del mismo, en especial al Lic. Alfonso Marín Flores y al Ing. Eduardo Reyes Olivera.

También deseo agradecer a la Facultad de Esudios Superiores "Zaragoza" (antes ENEP) la formación profesional acumulada durante mi estancia en la Institución y al Ing. Eduardo Vázquez Zamora, asesor del tema, sus valiosas contribuciones y consejos que enriquecieron el contenido del tema.

DEDICATORIAS

Después de tantos años de labor y esfuerzo escolar, me es muy grato dedicar el presente trabajo a mi madre, la Sra. Flor Teresa Torres Avila, así como también agradecer infinitamente su ayuda, apoyo, comprensión y amor incondicional que me ha brindado por siempre, en todo momento.

A mi padre, el Sr. Roberto Ramírez Cortés, a mi tía, la Sra. Ma. Alma Torres de Epelbaum y a mi hermana Flor de María, con especial cariño.

A mis amigos y compañeros de toda la vida. Gracias.

10/10/2010 10:10:10 AM

10/10/2010 10:10:10 AM

CONTENIDO

10/10/2010 10:10:10 AM

10/10/2010 10:10:10 AM

I N D I C E

INTRODUCCION

CAPITULO I. GENERALIDADES

1.1 Introducción	1
1.2 Análisis de procesos	2
1.3 Principios generales del análisis de procesos	3
1.4 Modelos y su construcción	6
1.5 Valor del análisis y simulación de procesos	8
1.6 Antecedentes históricos de los sistemas de control	12
1.7 Perspectivas	14

CAPITULO II. SIMULACION DINAMICA DE PROCESOS QUIMICOS

2.1 Introducción	16
2.2 Lenguajes de simulación	17
2.3 Simulación de plantas químicas	23
2.4 PRODYC	26
2.4.1 Mezclador	28
2.4.2 Divisor	29
2.4.3 Reactor continuo de tanque agitado	30
2.4.4 Columna de destilación	32
2.4.5 Válvula	34
2.4.6 Tubería	35
2.5 DYN SYL	36
2.6 DPS	41
2.7 Procesos batch y semicontinuos	48
2.7.1 BOSS	50
2.8 Modelado y simulación dinámica de la destilación	51
2.8.1 Solución numérica	53

**CAPITULO III. ANALISIS DE RESPUESTA Y CONTROL DE LOS PARAMETROS INVOLUCRADOS
EN UN PROCESO QUIMICO**

3.1	Introducción	56
3.2	Control feedback	57
3.3	Controladores	65
3.3.1	Control proporcional	66
3.3.2	Control integral (reajuste)	68
3.3.3	Control derivativo	69
3.3.4	Control proporcional-integral (PI)	71
3.3.5	Control proporcional-derivativo (PD)	74
3.3.6	Control proporcional-integral-derivativo (PID)	74
3.3.7	Comparación de respuestas de las acciones de control continuo	76
3.4	Ciclos de control de variables	80
3.5	Sistemas operativos para control	82
3.5.1	Sistemas Operativos en tiempo real	83
3.5.2	Asignación de recursos	84
3.5.3	Interrupciones	85
3.5.4	Ambiente del usuario	86
3.5.5	Administración de memoria	86
3.5.6	Reloj del sistema	87
3.5.7	Cálculos	87
3.5.8	REAL/IX	88

**CAPITULO IV. REDES NEURONALES EN LA SIMULACION DINAMICA Y CONTROL DE
PROCESOS QUIMICOS**

4.1	Introducción	90
4.2	Redes neuronales	91
4.3	Proceso de aprendizaje	93
4.3.1	Resultados generados a partir de datos de entrada	95
4.3.2	Aprendizaje de la red por ajuste de los valores de peso para minimizar errores	97
4.4	Propagación hacia atrás	97
4.4.1	Algoritmo	99
4.5	Métodos dinámicos en el modelado de control de procesos	104

4.6 Modelado dinámico con propagación hacia atrás	109
4.6.1 Descripción del sistema	111
4.6.2 Modelado dinámico con propagación hacia atrás (BDM)	113
4.7 Modelo para el control con propagación hacia atrás (BDHC)	117

CAPITULO V. EJEMPLO DE APLICACION

5.1 Introducción	123
5.2 Simulación dinámica y control por medio del DYNMIM	124
5.3 Descripción del proceso químico ejemplificado	124
5.3.1 Mezclador	125
5.3.2 Divisor	126
5.3.3 Reactor de flujo tapón	127
5.3.4 Intercambiador de calor	130
5.3.5 Controlador proporcional-integral (PI)	131
5.4 Simulación dinámica y control de unidades distribuidas	132
5.5 Simulación dinámica y control por medio de redes neuronales (algoritmo de propagación hacia atrás)	150
5.6 Análisis de resultados	158

CONCLUSIONES

REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

I N D I C E D E F I G U R A S

Figura 2.1 Respuesta de la simulación	18
Figura 2.2 Estructura general de DYN SYL	37
Figura 2.3 Modo inacoplado de DYN SYL	39
Figura 2.4a Diagrama esquemático de un mezclador	46
Figura 2.4b Diagrama de bloques de DPS	47
Figura 3.1 (a) Proceso. (b) Ciclo de control correspondiente	58
Figura 3.2 Ejemplos de sistemas feedback	60
Figura 3.3 Representación simplificada de los ciclos de control feedback	62
Figura 3.4 Acción de un control feedback: (a) Proporcional. (b) Integral. (c) Derivativo Ideal	70
Figura 3.5 Respuesta de salida del control PI	72
Figura 3.6 Comparación de la respuesta para un cambio de carga en varias acciones de control continuo	78
Figura 4.1 Diagrama esquemático de una red neuronal común	94
Figura 4.2 Cómo trabaja una neurona	96
Figura 4.3 Red oculta de propagación hacia atrás	98
Figura 4.4 J-ésima neurona	100
Figura 4.5 Función sigma	102
Figura 4.6 Sistema con una entrada y una salida	105
Figura 4.7 Respuesta del sistema a una entrada PRBS	107
Figura 4.8 Modelo "ARMA" incorporado como una red de propagación hacia atrás de dos capas	110
Figura 4.9 Reactor continuo de tanque agitado	112
Figura 4.10 Respuesta del flujo de NaOH y del pH	115
Figura 4.11 Representación esquemática del movimiento de ventana	116
Figura 4.12 Diagrama esquemático del BDMC	118
Figura 4.13 Modelo inverso del proceso	120
Figura 4.14 Estructura de control interno que emplea modelos inverso y normal de redes neuronales	121

Figura 5.1 Diagrama de flujo del ejemplo de aplicación (unidades distribuidas)	133
Figura 5.2a Intercambiador de calor, tiempo = 0.00 hr	159
Figura 5.2b Reactor de flujo tapón, tiempo = 0.00 hr	160
Figura 5.2c Reactor de flujo tapón, tiempo = 0.00 hr	161
Figura 5.3a Intercambiador de calor, tiempo = 0.05 hr	162
Figura 5.3b Reactor de flujo tapón, tiempo = 0.05 hr	163
Figura 5.3c Reactor de flujo tapón, tiempo = 0.05 hr	164
Figura 5.4a Intercambiador de calor, tiempo = 1.00 hr	165
Figura 5.4b Reactor de flujo tapón, tiempo = 1.00 hr	166
Figura 5.4c Reactor de flujo tapón, tiempo = 1.00 hr	167
Figura 5.5a Intercambiador de calor, tiempo = 1.50 hr	168
Figura 5.5b Reactor de flujo tapón, tiempo = 1.50 hr	169
Figura 5.5c Reactor de flujo tapón, tiempo = 1.50 hr	170
Figura 5.6a Intercambiador de calor, tiempo = 2.00 hr	171
Figura 5.6b Reactor de flujo tapón, tiempo = 2.00 hr	172
Figura 5.6c Reactor de flujo tapón, tiempo = 2.00 hr	173
Figura 5.7a Intercambiador de calor, tiempo = 5.00 hr	174
Figura 5.7b Reactor de flujo tapón, tiempo = 5.00 hr	175
Figura 5.7c Reactor de flujo tapón, tiempo = 5.00 hr	176
Figura 5.8a Intercambiador de calor, tiempo = 10.00 hr	177
Figura 5.8b Reactor de flujo tapón, tiempo = 10.00 hr	178
Figura 5.8c Reactor de flujo tapón, tiempo = 10.00 hr	179

I N D I C E D E T A B L A S

Tabla 2.1 Lenguajes de simulación discreta	20
Tabla 2.2 Lenguajes de simulación continua	21
Tabla 2.3 Simuladores dinámicos de plantas químicas	25
Tabla 2.4 Lista parcial de elementos del DPS	43
Tabla 2.5 Modelos dinámicos y simulación de la destilación	52
Tabla 2.6 Comparación de las técnicas de solución	54
Tabla 4.1 Parámetros empleados en la simulación del CSRT	114
Tabla 5.1 Parámetros de inicialización de DYNMIM	136
Tabla 5.2 Resultados obtenidos de DYNMIM	142
Tabla 5.3 Resultados obtenidos de la Red Neuronal	151

Debido al perfeccionamiento matemático que se ha alcanzado para representar los modelos teóricos de unidades de proceso de manera individual y en conjunto, y a los altos costos y tiempo que representa el desarrollo, instalación, pruebas preoperatorias y arranque de plantas piloto, para el análisis y estudio de procesos químicos a gran escala, el presente trabajo nace con la finalidad de proponer una opción que permita agilizar la simulación dinámica y control de sistemas químicos.

En Ingeniería Química la simulación de sistemas dinámicos por computadora es una herramienta útil para determinar los efectos ocasionados por variaciones en los parámetros de los procesos químicos. La ventaja de la computación es que se puede emplear cualquier escala de tiempo conveniente.

Por otra parte, el control automático de los procesos químicos ha jugado un papel vital en el avance de la ingeniería y de la ciencia. Se ha convertido en parte importante e integral de los procesos industriales modernos. Así, se tiene que el control automático resulta esencial en operaciones tales como el control de presión, temperatura, flujo, entre otros.

Como los avances en la teoría y práctica del control automático brindan medios para lograr el funcionamiento óptimo de sistemas dinámicos, mejorar la calidad y abaratar los costos de producción, expandir el ritmo de producción, liberar de la complejidad de muchas rutinas, de las tareas manuales repetitivas, etc., la mayoría de los ingenieros deben de tener buenos conocimientos en este campo.

Una alternativa recientemente desarrollada, para llevar a cabo la simulación dinámica y el control de procesos químicos en tiempo real, son los programas conocidos como redes neuronales. Las redes neuronales son capaces de "generar un aprendizaje" de un proceso para posteriormente dar resultados sobre condiciones de operación similares o distintas a las manifestadas en el sistema para su estudio y análisis. Por otro lado, cabe señalar que el

desarrollo de una red neuronal se lleva un menor tiempo de programación y un menor tiempo de verificación que el que se toma para construir un modelo teórico para un proceso químico dado.

Tomando en consideración el planteamiento anterior, el objetivo de este trabajo es el análisis y estudio de las redes neuronales en el comportamiento dinámico y control de procesos químicos en tiempo real, reflejado en la respuesta de cada uno de los parámetros involucrados, mediante su visualización por computadora de los instrumentos de medición y control, así como su respuesta gráfica, para analizar los resultados obtenidos con los datos generados a partir de un programa de simulación dinámica.

Para llevar a cabo lo anterior, el trabajo se estructura de la siguiente forma:

En el Capítulo I se plantean algunos puntos generales acerca de lo que es el análisis y simulación de procesos, así como también sobre los sistemas de control.

En el Capítulo II se establece el estudio de la simulación dinámica de procesos químicos, presentando algunos ejemplos de simuladores empleados por medio de computadora.

En el Capítulo III se plantea el análisis de respuesta y control de los parámetros involucrados en un proceso químico, tratando principalmente el control "feedback" y los controladores comunmente utilizados para este tipo de sistema, así como también los sistemas operativos para el control en tiempo real.

El Capítulo IV describe los principios y fundamentos de las redes neuronales, enfocándose al paradigma conocido como "propagación hacia atrás" y su aplicación en la simulación dinámica y control de procesos.

Finalmente, en el Capítulo V se lleva a cabo la simulación dinámica de un proceso químico por medio de un simulador y de un programa de redes neuronales, para estudiar y analizar los resultados obtenidos en ambas simulaciones con el fin de alcanzar el objetivo citado previamente.

CAPITULO I

GENERALIDADES

1.1 INTRODUCCION

El empleo de métodos científicos en el análisis de procesos no es nuevo, pero la verdad es que se observa un creciente interés en los últimos años en este campo. Por métodos científicos se entiende la acumulación de información, el análisis de esta información por técnicas adecuadas, síntesis y toma de decisiones, todo ello utilizando una base matemática. Una gran parte de este crecimiento de las aplicaciones científicas se debe sin duda a la existencia y empleo de computadoras de gran capacidad (digitales, analógicas e híbridas) que en la actualidad permiten el estudio de problemas de gran complejidad, que, solamente hace unos años, no se podían abordar. Esta tendencia ha de continuar sin duda en el futuro a medida que se desarrollen nuevos métodos y se perfeccionen los actualmente disponibles.

Por otra parte, el control automático ha jugado un papel vital en el avance de la ingeniería y de la ciencia. Además de su extrema importancia en vehículos espaciales, en la dirección de proyectiles y sistemas de pilotaje de aviones, etc., el control automático se ha convertido en parte importante e integral de los procesos de manufactura e industriales modernos. Por ejemplo, el control automático resulta esencial en operaciones industriales como el control de presión, temperatura, humedad, viscosidad y flujo en las industrias de procesos; maquinado, manejo y armado de piezas mecánicas en las industrias de fabricación, etc.

1.2 ANALISIS DE PROCESOS

El rápido desarrollo de lo que se ha dado en llamar análisis de procesos, ingeniería de sistemas o investigación de operaciones, como un campo esencialmente interdisciplinario, ha puesto en uso una inevitable proliferación de términos y conceptos. Términos tales como "modelo", "sistema" y "variable", por mencionar solamente unos pocos, se han utilizado en notaciones muy diferentes. El análisis de procesos se refiere a la aplicación de métodos científicos al reconocimiento y definición de problemas, así como al desarrollo de procedimientos para su solución. En una forma más concreta, esto quiere decir: 1) especificación matemática del problema para la situación física dada, 2) análisis detallado para obtener modelos matemáticos, y 3) síntesis y presentación de resultados para asegurar la total comprensión. El proceso representa una serie real de operaciones o tratamiento de materiales, tal como es contrastado por el modelo, que representa una descripción matemática del proceso real. A continuación se hace referencia a otros términos que se encuentran con frecuencia.

1) SISTEMA

La disposición de elementos (divisiones arbitrarias y abstractas del proceso) que están unidos entre sí por flujos comunes de materiales y/o información. La salida del sistema es una función no solamente de las características de los elementos del sistema, que reciben también el nombre de subsistemas, sino también de sus interacciones e interrelaciones.

2) PARAMETRO

Una propiedad del proceso o de su entorno, a la que se puede asignar valores numéricos arbitrarios; también puede ser una constante o coeficiente de una ecuación.

3) SIMULACION

El estudio de un sistema o sus partes mediante manipulación de su representación matemática o de su modelo físico.

El análisis de procesos comprende un examen global del proceso, de otros procesos posibles, así como de sus aspectos económicos. Se hace resaltar el aspecto económico porque al efectuar una selección de distintos esquemas posibles, los costos constituyen un elemento tan importante que nunca se pueden ignorar. Si se ha de realizar una amplia selección, es preciso conocer los costos de cada proyecto y compararlo con los demás. De esta forma, se pueden estimar los beneficios de cada una de las alternativas con fines comparativos. La estimación de costos para distintos sistemas resulta vital, no solamente porque el ensayo de un nuevo sistema resulta muy costoso sino porque generalmente son numerosos los sistemas competitivos que es necesario tener en consideración.

El tratamiento de sistemas trata conjuntamente las técnicas utilizadas por ingenieros de muy distinta formación básica, con el fin de entrenar al personal que es, o será, el usuario del sistema. El punto de vista corresponde a un tratamiento global basado en los requerimientos funcionales que debe cumplir el sistema. Por otra parte, con frecuencia se incorpora un análisis dinámico, en contraste con los estudios más clásicos de régimen permanente. Por consiguiente, el ingeniero ha de conocer los criterios de estabilidad y los métodos de operación para tener éxito en el funcionamiento del sistema.

1.3 PRINCIPIOS GENERALES DEL ANALISIS DE PROCESOS

Para planificar, organizar, evaluar y controlar los complejos procesos de la moderna tecnología es preciso conocer los factores fundamentales que influyen en el funcionamiento del proceso. Una forma de conseguir esto consiste en construir una réplica real, a pequeña escala, del proceso y efectuar cambios en las variables de entrada mientras se observa el funcionamiento del proceso. Una técnica de este tipo no solamente lleva tiempo y resulta cara sino que además puede resultar imposible de llevar a cabo en la práctica. Con frecuencia resulta mucho más conveniente y económico emplear, hasta donde sea posible, un método de representaciones conceptuales del proceso. Este hecho recibe el nombre de "construcción del modelo".

Para un proceso y un problema determinados, el analista trata de establecer una serie de relaciones matemáticas, conjuntamente con las condiciones límite, que son isomórficas con las relaciones entre las variables del proceso. Debido a la complejidad de los procesos reales y las limitaciones matemáticas, el modelo desarrollado no deja de ser siempre altamente idealizado y generalmente sólo representa con exactitud algunas propiedades del proceso. El primer modelo es con frecuencia sencillo pero poco realista. Tomando como base este primer modelo, el analista intenta encontrar sus principales deficiencias y construir otro modelo que corrija las deficiencias seleccionadas y que al mismo tiempo siga siendo lo suficientemente sencillo para su tratamiento matemático. El ingeniero ensaya distintos modelos antes de encontrar uno que represente satisfactoriamente aquellos atributos particulares del proceso que tienen interés. El ensayo de los modelos es caro pero la construcción de procesos a pequeña o gran escala resulta todavía más costosa.

Es evidente que la representación conceptual de un proceso real no puede abarcar todos los detalles del proceso, a pesar de los avances de las modernas técnicas de cálculo y de los métodos del análisis matemático. Tal como se ha indicado, solamente se pueden determinar algunos atributos y relaciones del sistema, especialmente aquellos que son fáciles de medir y tienen importancia desde el punto de vista de su efecto sobre el proceso. Por consiguiente, el analista está interesado en el desarrollo de modelos de procesos que pueden ser fácilmente manipulados, que sirven para un elevado número de variables e interrelaciones y que tienen una cierta seguridad de representar el proceso físico real con un razonable grado de confianza.

La estrategia general del análisis de procesos complejos sigue un camino relativamente bien definido, que consta de las siguientes etapas:

- 1) Formulación del problema y establecimiento de objetivos y criterios; delineación de las necesidades de operación.
- 2) Inspección preliminar y clasificación del proceso con el fin de descomponerlo en subsistemas o elementos.

- 3) Determinación preliminar de las relaciones entre los subsistemas.
- 4) Análisis de las variables y relaciones para obtener un conjunto tan sencillo y consistente como sea posible.
- 5) Establecimiento de un modelo matemático, en los casos en los que sea aplicable, de las relaciones en función de las variables y parámetros; descripción de los elementos que solamente se pueden representar en forma incompleta mediante modelos matemáticos.
- 6) Evaluación de la forma en la que el modelo representa al proceso real, utilizando el juicio crítico personal para acoplar las representaciones matemáticas con las no matemáticas.
- 7) Aplicación del modelo; interpretación y comprensión de los resultados.

Estas etapas están concebidas para desarrollar un método de estructuración y análisis de procesos, siempre que sea posible, por medio de modelos matemáticos. Este modelo permite un análisis más riguroso y tiende a que los criterios subjetivos, cuando son precisos, sean más metódicos y completos.

Los problemas reales están generalmente mal definidos y no se prestan a una especificación precisa. En algunos casos la solución del problema es obvia, o sea, máximos beneficios, pero es en la forma de llegar a la solución donde se presentan las dificultades reales.

Una premisa fundamental que interviene en todo análisis de procesos es que el proceso global se puede descomponer en subsistemas diferentes, o elementos, y que existen relaciones entre los subsistemas que, cuando se integran en un todo, pueden simular el proceso. Por ejemplo, se puede desarrollar un modelo de reactor considerando sucesivos subreactores perfectamente agitados, aunque de hecho tales unidades no existan en el reactor real. En el desarrollo de un modelo los subsistemas hipotéticos pueden resultar igualmente útiles que los subsistemas reales.

La única razón para dividir el proceso en partes para el análisis se debe a que el proceso es tan complejo que no es posible conocerlo y describirlo con propiedad como un todo. Mediante una adecuada manipulación y ajuste de los subsistemas se intenta obtener una representación razonablemente correcta del proceso total basada en principios relativamente sencillos y bien conocidos para las partes. Aunque este tratamiento puede ser objetado desde un punto de vista filosófico, resulta válido para la simulación y predicción aunque algunas partes de la subestructura sean ficciones o estén incorrectamente descritas. Es natural que, puesto que la representación global del proceso real es una simplificación, sea de esperar una cierta diferencia entre la operación real y la prevista para el proceso, aunque, afortunadamente, esta diferencia se puede disminuir para los atributos importantes del proceso de forma que se mantenga la utilidad práctica del modelo. Aunque el criterio y la experiencia pueden compensar las simplificaciones a que se someten los modelos, el mejor método consiste en efectuar un tratamiento tan definitivo y objetivo como sea posible.

1.4 MODELOS Y SU CONSTRUCCION

Los modelos se utilizan en todos los campos: biología, fisiología, ingeniería, química, bioquímica, física y economía. Puesto que seguramente es imposible incluir dentro de una sola definición las diferentes acepciones de la palabra "modelo", se presentan a continuación algunas de las más frecuentes:

1) MODELOS Y CONSTRUCCION DE MODELOS

Modelos de barcos, plantas piloto y maquetas de edificios.

2) MODELOS ANALOGICOS

Electricos, electrónicos y mecánicos.

3) TEORIAS PROVISIONALES

Modelo de la gota de líquido para la nucleación.

4) GRAFICOS Y MAPAS

5) MODELOS ABSTRACTOS

Enunciados matemáticos y modelos en forma de símbolos.

Para este propósito resulta más conveniente la definición de un modelo sobre una base conceptual en vez de física.

Supóngase que el Ingeniero desea construir un modelo matemático de un proceso real. ¿Cómo deberá de proceder en este caso?. Se pueden preparar tres tipos de modelos y sus combinaciones:

1) MODELOS DE FENOMENOS DE TRANSPORTE

Utilización de principios fisicoquímicos, por ejemplo, las ecuaciones fenomenológicas de variación, es decir, las ecuaciones que describen la conservación de masa, cantidad de movimiento y energía.

2) MODELOS DE BALANCE DE POBLACION

Se utilizan balances de población, por ejemplo, en las distribuciones de tiempo de residencia y otras distribuciones temporales.

3) MODELOS EMPIRICOS

Ahora bien, ¿cómo se puede evaluar el modelo?. En primer lugar, el Ingeniero puede recopilar datos y ver la forma en que dichos datos se ajustan a las predicciones del modelo. Se han desarrollado métodos estadísticos muy precisos para comprobar la exactitud del ajuste, que resultan muy satisfactorios cuando se trata de modelos sencillos. Si el ingeniero dispone de dos series de datos (una correspondiente al proceso real y la otra al modelo) para un modelo relativamente poco complicado suele ser preciso introducir una cantidad considerable de subjetividad en el análisis a la hora de establecer la concordancia entre las dos series de datos. En cualquier caso, si la respuesta del modelo concuerda satisfactoriamente con los resultados experimentales, aumenta la confianza del ingeniero en la aptitud de las descripciones matemáticas. Si la concordancia es mala, tal vez convenga

revisar el modelo o bien intentar con otro. Otros criterios a considerar, además de la fidelidad, para evaluar un modelo son: exactitud, reproductibilidad, costo, tiempo, complejidad, capacidad y posibilidad de aplicación.

Cuando el proceso que se ha de evaluar no se puede ensayar en una forma totalmente operacional debido al costo, tiempo, riesgo, etc., la base de evaluación debe desplazarse hacia ensayos de algunas aproximaciones del sistema, estudios en planta piloto, o bien los ensayos se pueden llevar a cabo modificando las condiciones de operación del proceso real. Tales simulaciones dan lugar a nuevos problemas.

1.5 VALOR DEL ANALISIS Y SIMULACION DE PROCESOS

Existen ciertas características de los procesos industriales que las distinguen de otros tipos de industrias, debido esencialmente a que hay una completa estructura de muchas etapas, cada una de las cuales consta a su vez de numerosos subcomponentes. Las ecuaciones que describen las relaciones entre las variables importantes oscilan desde unas muy sencillas hasta otras muy complicadas. Teniendo en cuenta que interviene un elevado flujo de materiales con un valor económico relativamente alto, se comprende que pequeñas modificaciones en las características de diseño y operación pueden tener una importante repercusión económica. Finalmente, las características de los subcomponentes del proceso todavía no son, en general, lo suficientemente bien conocidas como para permitir al ingeniero basarse exclusivamente en la teoría para proceder al diseño y control.

En última instancia, los ingenieros de las industrias de proceso se ocupan en dos principales tipos de trabajo; la operación de plantas ya existentes y el diseño de plantas nuevas o modificadas. Por lo que se refiere a la operación de instalaciones, tanto el control como la optimización constituyen las dos funciones más importantes de los ingenieros. Para que el ingeniero pueda desarrollar con eficacia su trabajo en estos campos debe estar

en condiciones de poder realizar un análisis sofisticado del proceso en sí. Será preciso programar los sistemas de cálculo de forma que se puedan cambiar las relaciones que describen las partes individuales de la instalación; habrá que evaluar los parámetros básicos de estas relaciones, y, por último, será preciso dar un contenido más cuantitativo a los aspectos cualitativos de los criterios de que se dispone. Por éstas y muchas otras razones con ellas relacionadas, el control y optimización tienen su base fundamental en el análisis de procesos.

El segundo tipo de trabajo de los ingenieros, que es el diseño, resulta en cierto modo más difícil. Por supuesto que los datos de la planta real no son conocidos de antemano, y, por esta razón, el ingeniero tiene que utilizar una parte importante de su criterio intuitivo. Por otra parte, cuando se modifican plantas existentes o se diseñan plantas similares a otras ya construidas, el ingeniero puede disponer de una importante experiencia.

De lo expuesto hasta aquí se llega a la conclusión de que la construcción de modelos matemáticos teóricos o semiteóricos constituye frecuentemente una necesidad preliminar.

Tanto el diseño como la operación se puede facilitar mediante la simulación del proceso o de sus partes. En primer lugar, es muy difícil que la dirección de la empresa permita a los ingenieros introducir arbitrariamente cambios en una instalación que opera satisfactoriamente por el simple hecho de ver qué es lo que ocurre. Además, los modelos matemáticos de los procesos se pueden manipular mucho más fácilmente que las plantas reales. Por ejemplo, se puede simular la operación fuera de las condiciones o intervalos normales y también se puede hacer "reventar" la planta con el fin de encontrar las condiciones de operación prohibitivas.

Desde un punto de vista más general, el análisis y simulación de procesos presenta las ventajas que se señalan a continuación:

1) EXPERIMENTACION ECONOMICA

Es posible estudiar procesos existentes de una forma más rápida, económica y completa que en la planta real. La simulación puede aumentar o reducir el tiempo real de una forma análoga a como una cámara cinematográfica acelera o retarda las imágenes; de esta forma se puede observar más fácilmente la operación del sistema.

2) EXTRAPOLACION

Con un modelo matemático adecuado se pueden ensayar intervalos extremos de las condiciones de operación, que pueden ser impracticables o imposibles de realizar en una planta real. También es posible establecer características de funcionamiento.

3) ESTUDIO DE CONMUTABILIDAD Y EVALUACION DE OTROS PLANES DE ACTUACION

Se pueden introducir nuevos factores o elementos de un sistema y suprimir otros antiguos al examinar el sistema con el fin de ver si estas modificaciones son compatibles. La simulación permite comparar distintos diseños y procesos que todavía no están en operación y ensayar hipótesis sobre sistemas a procesos antes de llevarlos a la práctica.

4) REPETICION DE EXPERIMENTOS

La simulación permite estudiar el efecto de la modificación de las variables y parámetros con resultados reproducibles. En el modelo matemático se puede introducir o retirar a voluntad un error, lo cual no es posible en la planta real.

5) CONTROL DE CALCULO

La simulación constituye una importante ayuda material para el estudio de los sistemas de control con lazos abiertos y cerrados.

6) ENSAYO DE SENSIBILIDAD

Se puede ensayar la sensibilidad de los parámetros de costos y los parámetros básicos del sistema; por ejemplo, un aumento de un diez por ciento en la velocidad de alimentación podrá tener, según los casos, en efecto mínimo o un efecto muy importante sobre el funcionamiento de la instalación.

7) ESTUDIO DE LA ESTABILIDAD DEL SISTEMA

Se puede examinar la estabilidad de sistemas y subsistemas frente a diferentes perturbaciones.

Por estas razones se puede concluir que el análisis de procesos constituye un elemento muy importante para tomar una decisión más científica y responsable.

Un breve examen de la bibliografía revela numerosos ejemplos en los que se pone de manifiesto la utilidad práctica del análisis de procesos. En un artículo de Armstrong y Olson se estudian las mejoras obtenidas por simulación en la operación de una planta de 150 ton/día de amoníaco. Encontraron que era posible un aumento del diez por ciento de la producción, a partir de una mejor operación, sin ningún costo adicional correspondiente a un mayor número de controles. La razón real para el estudio fué el planteamiento de una ampliación de la fábrica. En el artículo se estimó que el aumento de producción utilizando simulación de procesos daba lugar a una capacidad de un cincuenta por ciento más elevada que la que sería posible utilizando técnicas convencionales de diseño. El costo total de la investigación, que ascendió a aproximadamente ocho hombres-año de esfuerzo técnico, era amortizado en seis meses con las mejoras introducidas en la operación de la planta.

Finalmente, se presenta un ejemplo descrito por Peiser y Grover. Los experimentos sobre las dificultades de operación se llevaron a cabo en una torre de fraccionamiento, originadas por un deficiente control del componente más ligero en el producto de fondos. También se producía perturbación procediendo a la inundación de la torre. Los cálculos habituales de régimen permanente no arrojaron ningún resultado sobre estos problemas, y, por esta

razón, se procedió a efectuar un análisis dinámico, incluyendo los aspectos hidrodinámicos de los platos. Mediante simulación de la torre con el modelo se encontraron y corrigieron las dificultades con modificaciones de diseño relativamente sencillas. Se observó que posteriormente la columna operaba satisfactoriamente⁷.

1.6 ANTECEDENTES HISTORICOS DE LOS SISTEMAS DE CONTROL

El primer trabajo significativo en control automático fué el regulador centrífugo de James Watt para el control de la velocidad de una máquina de vapor en el siglo dieciocho. Otros pasos relevantes en las primeras etapas del desarrollo de la teoría de control son debidos a Minorsky, Hazen y Nyquist, entre muchos otros. En 1922, Minorsky trabajó en controles automáticos de dirección en barcos y mostró como se podía determinar la estabilidad a partir de las ecuaciones diferenciales que describen el sistema. En 1932, Nyquist desarrolló un procedimiento relativamente simple para determinar la estabilidad de los sistemas de control "feedback" sobre la base de la respuesta "feedforward" con excitación sinusoidal a régimen permanente. En 1934, Hazen, que introdujo el término "servomecanismo" para los sistemas de control de posición, estudió el diseño de servomecanismos repetidores capaces de seguir estrechamente una entrada que cambiaba continuamente.

Muchas plantas de procesos químicos fueron operadas manualmente previo a la década de 1940. Fueron empleados únicamente controladores muy elementales, por lo que fué necesario utilizar a muchos hombres para custodiar una gran cantidad de variables en la planta de proceso. Grandes tanques fueron empleados para actuar como amortiguadores o compensadores, entre otras unidades de la planta. Estos tanques, a pesar de que en ocasiones tenían un costo elevado, filtraban algunos de los disturbios dinámicos al aislar parte del proceso químico.

Durante la década de los cuarentas, los métodos de respuesta de frecuencia permitieron a los ingenieros el diseño de sistemas de control lineal retroalimentado que satisfacían las necesidades de comportamiento. Desde el final de esta década hasta los primeros años de la siguiente, se desarrolló completamente el método del lugar de las raíces en el diseño de sistemas de control.

Con el aumento de los costos de la mano de obra y el equipo y con el desarrollo de equipos y procesos más simples y de mayor capacidad en la década de los cuarentas y principios de los cincuentas, llegó a ser incosteable y en ocasiones imposible arrancar una planta sin emplear instrumentos de control automático. En esta década, los controladores "feedback" fueron incluidos a las plantas para tomar en consideración la dinámica de los procesos. Las reglas empíricas y la experiencia fueron las únicas técnicas de diseño.

Los métodos de respuesta de frecuencia y del lugar de las raíces, que son el corazón de la teoría de control clásica, llevan a sistemas que son estables y que satisfacen un conjunto de requerimientos de funcionamiento más o menos arbitrarios. Estos sistemas, en general, no son óptimos en ningún sentido significativo.

Como las plantas modernas con muchas entradas y muchas salidas se van haciendo más y más complejas, la descripción de un sistema moderno de control requiere una gran cantidad de ecuaciones. La teoría de control clásica que trata de sistemas de entrada y salida única, se vuelve absolutamente impotente ante sistemas de múltiples entradas y salidas. A partir de 1960, se ha desarrollado la teoría de control moderna para afrontar la complejidad creciente de las plantas modernas y las necesidades rigurosas en exactitud, peso y costo en aplicaciones militares, espaciales e industriales.

Es sólo hasta los últimos años en que las técnicas de análisis dinámico y la teoría de control han sido totalmente desarrolladas, en primer lugar, en la industria aeroespacial y en la ingeniería eléctrica para posteriormente incursionar en la ingeniería química. Además, para diseñar mejor los sistemas

de control, los procesos y las plantas han sido desarrollados o modificados para facilitar su control. Examinar todas las partes de una planta compleja tomada como una unidad, con todas sus interacciones incluidas y buscar las maneras de controlarla óptimamente es lo que se denomina ingeniería de sistemas.

Dada la fácil disponibilidad de computadoras electrónicas analógicas, digitales e híbridas para su uso en cálculos complejos, el empleo de las mismas en el proyecto de sistemas de control y en el control de operación de los mismos se está convirtiendo ahora en una práctica habitual.

Se puede decir que los desarrollos más recientes en la teoría de control moderna están en la dirección del control óptimo de sistemas tanto determinísticos como estocásticos, así como en sistemas de control complejos con adaptación y aprendizaje¹

1.7) PERSPECTIVAS

Ciertamente, es esencial una fundamentación sólida en las áreas más tradicionales como lo son la termodinámica, la cinética química, las operaciones unitarias y los fenómenos de transporte. De hecho, tal fundamentación es la base para cualquier estudio de la dinámica de procesos, debido a que los modelos matemáticos que se derivan no son nada sin las extensiones de las ecuaciones típicas de las operaciones unitarias al incluir términos que dependen del tiempo. Los ingenieros de control, en ocasiones, tienen la tendencia de involucrarse en la dinámica olvidando los aspectos del régimen permanente. Debe de tenerse en mente que si no es posible conseguir que la planta trabaje en el régimen permanente, tampoco se conseguirá que trabaje dinámicamente.

En la actualidad, del 80 al 90% de los ciclos de control en una planta son generalmente diseñados, instalados, calibrados y operados, en muchas ocasiones, por reglas empíricas y por técnicas generadas de la experiencia. El otro 10 ó 20% de los ciclos son aquellos en los cuales el ingeniero de control hace dinero. Requieren de más conocimiento técnico. La prueba de plantas químicas, la simulación computarizada y el diseño de controladores o el rediseño de procesos puede ser necesario para llevar a cabo los objetivos deseados. Esto puede parecer un pequeño porcentaje del total, sin embargo, estos ciclos críticos a menudo hacen o destruyen una planta de proceso¹³.

En el siguiente capítulo se tratará lo referente a la simulación dinámica de procesos químicos, enfocándose principalmente a los lenguajes de simulación desarrollados y a los modelos matemáticos empleados en dichos lenguajes, con el fin de tener un panorama más detallado acerca de este tipo de análisis de procesos, esto es, cuantificar cada uno de los parámetros que intervienen en un proceso dentro de un contexto dinámico.

CAPITULO II

SIMULACION DINAMICA DE PROCESOS QUIMICOS

2.1 INTRODUCCION

La simulación dinámica de una planta química es muy importante por varias razones. En primer lugar, cada planta opera únicamente en un contexto dinámico, debido a que una verdadera operación en el régimen permanente, en la práctica, no puede llevarse a cabo como tal. Las operaciones de arranque y paro son operaciones inestables, cuyo entendimiento previo permitirá obtener la seguridad dentro de la planta.

El sistema de control automático es parte integral de cualquier industria química. Los modelos de los procesos dinámicos son muy necesarios en el diseño y prueba de estrategias de control y la simulación dinámica, por lo tanto, es requerida para la evaluación efectiva del sistema de control propuesto por el ingeniero.

Los modelos dinámicos también son muy útiles en el estudio de la interacción de procesos, en la detección de fallas, en la seguridad, en los estudios de confiabilidad y en la identificación de procesos empleando técnicas de respuesta dinámica.

2.2 LENGUAJES DE SIMULACION

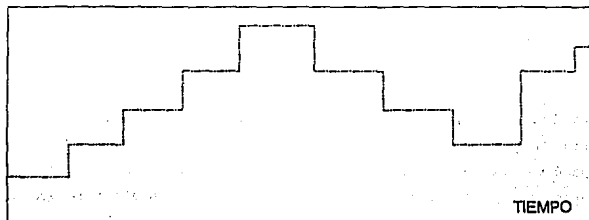
En la práctica, la simulación dinámica puede ser dividida en dos categorías, la primera denominada simulación con cambios discretos y la segunda conocida como simulación con cambios continuos. Debe de tomarse en cuenta que estos cambios se refieren al modelo desarrollado y no al sistema real. De hecho, es posible modelar el mismo sistema con ambos tipos de simulación, es decir, con cambios discretos y cambios continuos. Aquí, el tiempo es la variable independiente más importante y las otras variables, que están en función del tiempo, son las variables dependientes. Los términos discreto y continuo se refieren al comportamiento de las variables dependientes.

La simulación discreta se lleva a cabo cuando las variables dependientes del modelo sufren cambios muy pequeños en puntos específicos en relación con el tiempo. La variable tiempo puede ser continua o discreta dependiendo de si los cambios discretos en las variables dependientes se llevan a cabo en cualquier punto o únicamente en puntos muy específicos. El incremento en el tiempo se lleva a cabo hasta llegar a un tiempo continuo, en tanto que el incremento en un tiempo fijo da como resultado cambios discretos en el tiempo. La Figura 2.1a muestra el tipo de respuesta de la simulación discreta.

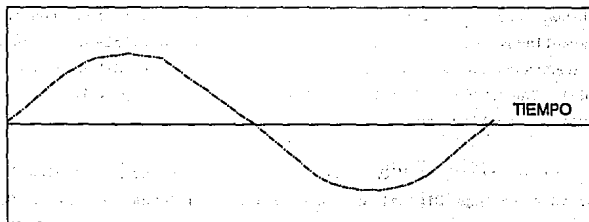
En la simulación continua, las variables dependientes sufren cambios constantes alrededor del tiempo simulado. También aquí, el tiempo puede ser continuo o discreto dependiendo de si los valores de las variables dependientes están presentes en cualquier punto en el tiempo o sólo en tiempos específicos. La Figura 2.1b y 2.1c ilustran, respectivamente, ambos casos.

El desarrollo evolutivo de los lenguajes de simulación especiales comenzó en los inicios de la década de los sesentas. Desde entonces, gradualmente se han desplazado hacia los lenguajes ensambladores, a través de lenguajes orientados a problemas específicos muy extendidos en ese entonces, hasta llegar, en la actualidad, ha desarrollarse lenguajes de simulación especiales muy sofisticados. Dos razones fundamentales para el empleo de

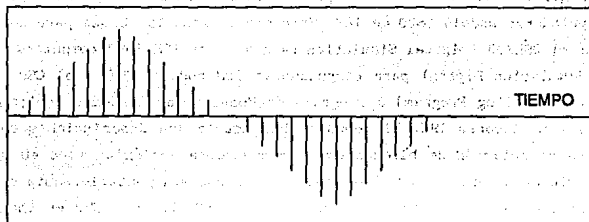
FIGURA 2.1 RESPUESTA DE LA SIMULACION



A) SIMULACION DISCRETA



B) SIMULACION CONTINUA



C) SIMULACION CONTINUA CON TIEMPO DISCRETO

dichos lenguajes específicos son:

- 1) facilitar la programación, y
- 2) el concepto de articulación;

éste último es particularmente importante en la fase de modelado.

Kiviat, en 1967, y Fishman, en 1973, presentaron excelentes trabajos sobre los lenguajes de simulación discreta. Los lenguajes de simulación de prueba discreta más comunes se contemplan en la Tabla 2.1. Fishman, en 1973, comparó el método de prueba, usado en GASP II y en SIMSCRIPT, con el método de búsqueda y con el método de interacción empleados en otros lenguajes.

Durante la década de los cincuentas y principios de los sesentas, las computadoras analógicas fueron usadas cada vez más para la simulación continua. Por lo tanto, los lenguajes de simulación continua fueron desarrollados específicamente para computadoras digitales. Algunos de ellos son mostrados en la Tabla 2.2. Por otro lado, textos tales como el de Buxton (1968), Chu (1969), Speckhart y Green (1976), Korn y Wait (1978) tratan la simulación continua con más detalle.

El desarrollo de MIDAS (Modified Integration Digital Analog Simulator) ó Simulador Análogo Digital de Integración Modificada, en 1963, fué un gran acontecimiento dentro de los lenguajes de simulación digital. MIDAS fué seguido, posteriormente, por PACTOLUS, en 1964, el cual fué desarrollado para corregir algunas deficiencias que presentaba MIDAS y que fué implementado en computadoras modelo 1620 de IBM. Esto proporcionó las bases para dos lenguajes más: el DSL-90 (Digital Simulation Lenguaje for IBM 7090 computers) ó Lenguaje de Simulación Digital para computadoras IBM modelo 7090 y el CSMP (Continuous System Modeling Program) ó Programa de Modelado de Sistemas Continuos también para computadoras IBM. El lenguaje DSL acepta las descripciones del problema tanto en notación de bloques de la computadora analógica como en sistemas de ecuaciones diferenciales. Los comandos del DSL son posteriormente convertidos, compilados y ejecutados en comandos de FORTRAN IV. EL CSMP es una adaptación

LENGUAJE	REFERENCIA
GASP II	Pritdker y Kiviat (1969)
SIMSCRIPT	Kiviat y colaboradores (1969)
GPSS	Gordon (1969)
SIMULA 67	Dahl y colaboradores (1971)

Tabla 2.1 Lenguajes de simulación discreta.

LENGUAJE	REFERENCIA
CSSL	Sci (1967)
CSMP (Para computadoras IBM)	IBM Corporation (1970, 1971)
MIMIC (Para computadoras CDC y UNIVAC)	Control Data (1970)
LEANS	Morris (1973)
BEDSOCS	Ord-Smith y Stephenson (1975)
ACSL	Anon (1976)
ISIS	Anon (1978)
DARE (P)	Korn y Wait (1978)
DSL/77	Anon (1980)

Tabla 2.2 Lenguajes de simulación continua.

de PACTOLUS y se presenta en dos versiones: una para máquinas IBM modelo 1130 y otra para máquinas modelo 360 también de IBM (las características del S/360 CSMP serán explicadas más adelante). Finalmente, otro sucesor de MIDAS fué MIMIC, el cual fué desarrollado en 1965.

El CSSL (Continuos System Simulation Lenguaje) ó Lenguaje de Simulación de Sistemas Continuos se asemeja estrechamente al CSMP. El CSSL es un lenguaje orientado a problemas específicos y todo lo referente al FORTRAN IV se encuentra disponible para el usuario de dicho lenguaje. También posee un macroprocesador que proporciona al usuario medios de expansión flexible del lenguaje.

En la simulación combinada, las variables dependientes pueden sufrir cambios discretos, cambios continuos o saltos discretos sobrepuestos. El tiempo también puede cambiar discreta o continuamente. El lenguaje denominado GASP IV, diseñado por Pritskar en 1974, fué desarrollado tanto para la simulación discreta y continua como para la simulación combinada. Empleando a GASP IV, las interacciones entre las variables que presentan cambios continuos y discretos pueden ser modeladas fácilmente.

El papel desempeñado por los lenguajes de simulación es el de liberar al usuario de buscar un método apropiado de solución o de esforzarse en elaborar y codificar un algoritmo. En lugar de ésto, el usuario puede dedicar más tiempo en desarrollar las ecuaciones que describen al sistema o en establecer valores numéricos apropiados a los parámetros del modelo desarrollado. Por consiguiente, los lenguajes de simulación presentan las siguientes ventajas:

- 1) Requieren de un menor tiempo de programación.
- 2) Proporcionan una corrección de error superior.
- 3) Actúan como vehículos directos para expresar los conceptos utilizados en un estudio de simulación.
- 4) Poseen la habilidad de controlar las subrutinas proporcionadas por el usuario como parte de una rutina de la simulación.
- 5) Generan automáticamente cierto tipo de datos necesarios en la

ejecución de la simulación.

- 6) Facilitan la presentación de los datos generados.
- 7) Controlan y asignan el almacenamiento de memoria de la computadora durante la ejecución de la simulación.

Por otra parte, sus desventajas son:

- 1) El usuario debe proporcionar el formato de salida requerido por el lenguaje.
- 2) Reducen la flexibilidad en los modelos.
- 3) Incrementan el tiempo de ejecución de la simulación.

2.3 SIMULACION DE PLANTAS QUIMICAS

Los dos conceptos básicos empleados en la simulación dinámica de las plantas químicas son los mismos que se aplican en la simulación en régimen permanente, es decir, el método de solución de sistemas de ecuaciones y el método modular.

Los simuladores dinámicos continuos emplean modelos de ecuaciones algebraicas y diferenciales de varios equipos que integran una planta. Dichos modelos interaccionan entre sí para representar la solución numérica del comportamiento analógico de la planta y se derivan así de los lenguajes de simulación, por ejemplo, el CSMP, el MIMIC y el LEANS resuelven un gran número de ecuaciones simultáneas dependientes entre sí. Generalmente, se necesita llevar a cabo el acoplamiento entre estas ecuaciones en cada paso de integración, por lo que el acoplamiento total asegurará una gran precisión particularmente en el caso de grandes pasos de integración. Sin embargo, también se requiere almacenar todos los valores de las derivadas y/o de las variables en todos los pasos de integración. Esta restricción impone un límite en el número de equipos que pueden ser simulados en una planta química.

Por otra parte, los métodos modulares emplean módulos o subrutinas que resuelven ecuaciones diferenciales de las variables de estado asociadas con las unidades individuales del proceso. A menudo, las ecuaciones que pertenecen a un módulo se resuelven independientemente de las ecuaciones de los módulos restantes durante cada período de tiempo. De esta manera, el acoplamiento entre los módulos se realiza únicamente al final del intervalo de tiempo y no durante el paso de integración. Esto puede llevarse a cabo con un almacenamiento de información relativamente pequeño, sin embargo, se puede perder precisión a menos que los intervalos de tiempo sean muy pequeños. Comúnmente, el diagrama de flujo se inicializa en alguna condición de régimen permanente, el usuario proporciona una función, la cual se ajusta a un tiempo de simulación establecido y se integra alrededor de un intervalo de tiempo empleando un método explícito de integración apropiado.

La tendencia actual es, sin embargo, hacia los sistemas de ecuaciones, que si bien muestran un aspecto modular en su apariencia, reúnen a dichas ecuaciones, relacionándolas entre sí, de los módulos seleccionados y son integradas simultáneamente. Este tipo de estrategia necesita de una matriz dispersa y en muchas ocasiones de métodos implícitos de integración.

La Tabla 2.3 presenta algunos simuladores dinámicos de plantas químicas. Entre ellos, el PRODYC, de carácter modular, interactúa a las unidades de simulación de proceso con el CSMP para resolver el sistema generado de ecuaciones diferenciales. El DYSCO, que en concepto es más modular que el PRODYC, permite la simulación en su totalidad del diagrama de flujo a través de la especificación de los datos de entrada que forman parte de una matriz de proceso y de corrientes de unidades de proceso.

El DYNYSYS es básicamente semejante al DYSCO, ya que también emplea una matriz de proceso así como también especificaciones de cada unidad de proceso y de cada corriente, sin embargo, su capacidad de acoplamiento entre las distintas unidades es superior que el presentado por DYSCO. Es un simulador tipo batch o semicontinuo sin características interactivas. El DYNYSYL se fundamenta en el DYNYSYS, posee muchas de sus características y fué diseñado

NOMBRE	REFERENCIA
PRODYC	Ingels y Motard (1970)
REMUS	Ham y colaboradores (1972)
DYFLO	Franks (1972)
DYSCO	Lopez (1974)
DYNYSYS	Barney y colaboradores (1975)
DYN SYL	Patterson y Rozsa (1980)
DPS	Thambynayagam y colaboradores (1981)
SPEED-UP	Perkins y colaboradores (1982)
FLOWSIM V4.0	Babcock (1982)

Tabla 2.3 Simuladores dinámicos de plantas químicas.

para trabajar de un modo interactivo. Otras de las ventajas que presenta DYNASYL es que permite la selección del tipo de integración a emplear, ya sea acoplada o no acoplada, para las ecuaciones diferenciales de cada uno de los módulos, además de que ofrece la opción de trabajar con o sin el integrador, con un integrador de ecuaciones rígidas y con una salida gráfica.

Como lo señaló Franks en 1972, la ecuación puede ser considerada dentro de un nivel intermedio entre un lenguaje de programación como el FORTRAN y el método modular, el cual no requiere formulaciones matemáticas. Por consiguiente, Franks desarrolló el programa INT, el cual consiste de un ajuste de subrutinas para resolver ecuaciones diferenciales simultáneas y ecuaciones algebraicas asociadas. El programa INT da las bases del ajuste de subrutinas de alto nivel y DYFLO permite la simulación del comportamiento dinámico de muchas de las unidades más comunes en una planta tales como columnas fraccionadoras, intercambiadores de calor, etc.

El DPS (Dynamic Process Simulator) ó Simulador Dinámico de Procesos se desarrolló específicamente para simular sistemas que contienen corrientes multicomponentes. La siguiente sección describe tres simuladores típicos con gran detalle.

De manera similar a la simulación en el régimen permanente, en las simulaciones dinámicas, en ocasiones, es más práctico hacer modelos detallados y desarrollar simuladores específicos en lugar de emplear simuladores de propósito general como los mostrados en la Tabla 2.3. En la sección 2.8 se describe brevemente un simulador específico.

2.4 PRODYC

En general, modelar un proceso en el régimen permanente únicamente requiere de un modelo macroscópico, en tanto que, la respuesta dinámica de un proceso puede requerir de un modelo microscópico. Un sistema simple o complejo puede ser definido como aquel que acepta una o más entradas y genera de ellas

una o más salidas. En otras palabras, lo anterior puede denominarse como una "caja negra" y en términos matemáticos es representada por el operador ϕ_t . La transformación entrada-salida está dada por:

$$y = \phi_t(x) \quad (2.1)$$

El elemento de entrada x es función del tiempo t , el cual siempre es un parámetro real:

$$x = x(t); t \in T \quad (2.2)$$

El parámetro de entrada $x(t)$ puede variar alrededor de un intervalo, por lo que este caso es conocido como entrada de "tiempo continuo", o puede variar alrededor de un ajuste de integradores consecutivos conocido como entrada de "tiempo discreto". Un programa general deberá aceptar ambos tipos de entradas continuas y discretas. Otros aspectos importantes son:

1) Tiempo constante, que en notación matemática significa que las funciones ϕ_t son todas idénticas entre sí.

2) Pérdida, que aplica a sistemas en los cuales la salida en cualquier tiempo depende sólo de las entradas en ese tiempo.

El segundo aspecto conocido como "reconocimiento", para sistemas de datos previamente comprobados, es muy importante debido a que es aceptado que los sistemas imaginarios pueden reaccionar a las entradas de otra manera. Matemáticamente está representado por:

$$y = \phi_t[x(\tau)]; \tau \in T; \tau \leq t; t \in T \quad (2.3)$$

La representación de procesos exclusivamente por funciones de transferencia, como generalmente se maneja en la teoría de control, está muy restringida y únicamente es aplicable a sistemas lineales. Sin embargo, los procesos químicos son, en la mayoría de los casos, sistemas no lineales, por lo tanto, el método expresado por la ecuación (2.1) es el más apropiado para

tales procesos.

El sistema modular PRODYC, desarrollado por Ingels y Motard en 1970, contiene una serie de subrutinas, acepta el diagrama de flujo del proceso, los parámetros del equipo, las condiciones iniciales, la descripción de las funciones y genera un programa CSPM como salida. Cada subrutina, que representa una unidad de proceso, genera las funciones equivalentes ϕ_t por medio de los comandos del CSPM. Posteriormente, el programa CSPM es compilado y ejecutado para dar la solución del problema. El PRODYC, al igual que el CSPM, se diseñó para resolver problemas con una variable independiente exclusivamente.

El PRODYC posee dos formas de introducir los datos. La primera forma, que depende del programa para régimen permanente conocido como CHESSE desarrollado por Motard y Lee en 1971, sólo requiere de la especificación de las corrientes de entrada y las condiciones iniciales de las corrientes restantes que serán calculadas. La segunda forma, que es un formato preestablecido, requiere que el usuario proporcione todas las condiciones iniciales de los balances de masa. Esto permite al usuario desarrollar y emplear unidades de proceso que no son parte del CHESSE. Ambas formas requieren de los parámetros de los equipos, las descripciones de las funciones y el control de las funciones. A continuación se presenta una descripción de algunas unidades de proceso desarrolladas por el CSMP.

2.4.1 MEZCLADOR

Este módulo puede ser la unión de tuberías o puede ser un recipiente de mezclado con múltiples entradas pero sólo una salida. El parámetro básico es el volumen del tanque. El modelo consiste de balances de masa global y por componentes y del balance de energía. Las principales suposiciones establecidas son: mezclado perfecto, volumen de masa residual constante, transmisión de presión instantánea y una fase, además de que las relaciones de densidad para pesos moleculares y calores específicos de todos los componentes

son idénticas.

Considerando n corrientes mezcladas en una corriente m , el balance de masa global da:

$$F_m = \sum_{j=1}^n F_j \quad (2.4)$$

donde:

F_j = Flujo volumétrico de la corriente j .

Balance de masa del componente i :

$$V \frac{dC_{im}}{dt} = \sum_{j=1}^n C_{ij} F_j - C_{im} F_m \quad (2.5)$$

donde:

V = Volumen del mezclador.

C = Concentración por unidad de volumen.

Balance de energía considerando únicamente el efecto del calor sensible:

$$\frac{dT_m}{dt} = \frac{1}{V} \left[\sum_{j=1}^n F_j T_j - F_m T_m \right] \quad (2.6)$$

2.4.2 DIVISOR

Este módulo es una tubería unida a un cabezal con múltiples corrientes de salida. Se supone que no tiene volumen y por lo tanto no hay retraso de tiempo. Se asume que todas las corrientes de salida presentan las mismas propiedades que la corriente de entrada, a excepción de los flujos que son diferentes. Por lo tanto, el modelo consiste de un simple balance de masa global para cada corriente de salida y el único parámetro que se requiere es el valor de la fracción de cada una de las corrientes de salida.

Balance de masa global para la corriente de salida j:

$$F_j = x_j F_m \quad (2.7)$$

donde:

x_j = Fracción de la corriente m que sale de la corriente j.

2.4.3 REACTOR CONTINUO DE TANQUE AGITADO

Este módulo es un tanque agitado enchaquetado con un medio de enfriamiento que entra y sale de la chaqueta. Sólo una corriente contiene a los reactivos que entran al tanque y sólo una corriente contiene los reactivos y productos que salen del tanque. La reacción está limitada a reacciones de primer orden expresadas por:



donde:

a, b, c = Coeficientes estequiométricos de las especies A, B, C, respectivamente.

El modelo está expresado por:

$$r_c = K C_A^a C_B^b \quad (2.9)$$

donde:

$$K = k_0 e^{-\Delta E/RT} \quad (2.10)$$

Los parámetros del equipo que se requieren especificar son:

- 1) Volumen del reactor, V.
- 2) Capacidad calorífica de la chaqueta de enfriamiento, UA.
- 3) Coeficiente constante de reacción, k_0 .

- 4) Energía de activación, ΔE .
- 5) Calor específico del contenido en el reactor, C_p .
- 6) Calor específico del fluido de enfriamiento, C_{p_c} .
- 7) Calor de reacción, ΔH_r .
- 8) Volumen de la chaqueta de enfriamiento, V_w .
- 9) Coeficientes estequiométricos, a, b, c .

Tales parámetros se suponen constantes e independientes de la temperatura; no hay variación en el nivel del tanque y se presenta mezclado perfecto.

Balance de masa global (sin incluir la chaqueta):

$$F_j = F_i \quad (2.11)$$

donde:

i y j = Subíndices de las corrientes de entrada y salida, respectivamente.

Balance de masa del componente k (reactivo):

$$\frac{dC_k}{dt} = \frac{1}{V} \left[F_j (C_{ki} - C_{kj}) - \frac{v_k}{c} r_c \right] \quad (2.12)$$

donde:

v_k = Coeficiente estequiométrico del reactivo k .

Balance de masa del componente k (producto):

$$\frac{dC_k}{dt} = \frac{1}{V} [F_j (C_{ki} - C_{kj}) + r_c] \quad (2.13)$$

Balance de masa del componente k (inerte):

$$\frac{dC_{kj}}{dt} = \frac{F_j}{V} [C_{ki} - C_{kj}] \quad (2.14)$$

Balance de masa de la chaqueta de enfriamiento:

$$F_n = F_m \quad (2.15)$$

donde:

n y m = Subíndices de las corrientes de entrada y salida, respectivamente.

Balance de energía (tomando en cuenta la chaqueta):

$$\frac{dT_j}{dt} = \frac{1}{V} \left[F_j (T_i - T_j) - \frac{\Delta H_r r_c}{C_p} + \frac{UA (T_n - T_j)}{C_p} \right] \quad (2.16)$$

Balance de energía (tomando en cuenta la chaqueta de enfriamiento del sistema):

$$\frac{dT_n}{dt} = \frac{1}{V_w} \left[F_n (T_m - T_n) - \frac{UA (T_n - T_j)}{\rho_n C_{pn}} \right] \quad (2.17)$$

donde:

C_{pn} = Calor específico de la chaqueta de la corriente de salida n.

2.4.4 COLUMNA DE DESTILACION

Un modelo simple de destilación para una columna, la cual separa una corriente de alimentación j en producto de destilado m y producto de fondos n, se basa en la función de transferencia:

$$FT = \frac{g e^{-as}}{(bs + 1)(cs + 1)} \quad (2.18)$$

Para un sistema de N componentes, el número de parámetros requeridos son N+8 y éstos son:

- 1) Valor de g en la sección de destilado para cada componente.
- 2) Retraso de tiempo, a, para las secciones de destilado y de fondos.
- 3) Constante de tiempo máximo, b, para las secciones de destilado y de fondos.
- 4) Constante de tiempo mínimo, c, para las secciones de destilado y de fondos.
- 5) Temperatura del destilado, Tr.
- 6) Temperaturas de fondos, T_B.

Los valores de g_i en los fondos se calcula de la siguiente manera:

$$g_i (\text{fondos}) = 1 - g_i (\text{destilado}) \quad (2.19)$$

Se supone que tanto la presión como el flujo total son transmitidos instantáneamente.

Balance de masa global:

$$\left. \begin{aligned} FM_{im} &= g_i FM_{iJ} \\ FM_{in} &= (1 - g_i) FM_{iJ} \end{aligned} \right\} \quad (2.20)$$

donde:

FM_i = Flujo molar del componente i.

Por lo tanto, los flujos volumétricos son:

$$\left. \begin{aligned} F_m &= \sum_{i=1}^N F_{Mim} \frac{M_{Wm}}{\rho_m} \\ F_n &= \sum_{i=1}^N F_{Min} \frac{M_{Wn}}{\rho_n} \end{aligned} \right\} \quad (2.21)$$

Composiciones de las salidas:

$$x_1 \text{ (destilado)} = \left[\frac{g e^{-as}}{(bs + 1)(cs + 1)} \right] x_1 \text{ (alimentación)} \quad (2.22)$$

$$x_1 \text{ (fondos)} = \left[\frac{(1 - g) e^{-da}}{(fs + 1)(hs + 1)} \right] x_1 \text{ (alimentación)} \quad (2.23)$$

donde:

d, f, h = Corresponden a a, b, c, respectivamente en los fondos.

Las temperaturas del destilado y de los fondos se suponen constantes, así como también las presiones de las corrientes de salida en comparación con las presiones de entrada.

2.4.5 VALVULA

Este módulo consta de una válvula y de su controlador. Un controlador PID es simulado con cualquiera de las siete combinaciones posibles de control. No está limitado a sistemas lineales pero sí a la representación de parámetros agrupados debido a las limitaciones propias del CSMP, además incluye el análisis de estabilidad. Aquí puede ser estudiado el control "feedback" mediante el empleo de un algoritmo análogo o digital. Se supone que la válvula tiene un comportamiento lineal y su dinámica está representada por:

$$F = \alpha \sqrt{P_i - P_o} \quad (2.24)$$

donde:

F = Flujo a través de la válvula.

α = Flujo turbulento constante proporcional al área de flujo y a la salida del controlador.

P_i, P_o = Presiones superior e inferior a través de la válvula.

Puesto que el controlador está asociado con la válvula, la mayoría de los parámetros siguientes pertenecen al controlador:

- 1) Número de equipos.
- 2) Flujo constante, α .
- 3) Constante de proporcionalidad, Kc.
- 4) Constante de tiempo, Tr.
- 5) Constante de tiempo derivativo, Td.
- 6) Retraso de línea controlador-válvula, Tl.
- 7) Detector de retraso, Sl.
- 8) Unidades de tiempo para el punto 4 y el punto 7.
- 9) Localización del detector (número de corriente).
- 10) Ganancia de la válvula, Kv.
- 11) Tipo de controlador, digital o analógico.
- 12) Variable a controlar (F, P, T, x, etc.).
- 13) Tipo de control a emplear (P, PI, PID, etc.).
- 14) Incremento en el tiempo para el controlador digital (si es utilizado).
- 15) Punto de ajuste.

2.4.6 TUBERIA

Por ser el módulo más sencillo, el retraso de tiempo DLT se lee como parte del dato de entrada o se calcula empleando la longitud y el diámetro de la tubería con el flujo de entrada. Se supone flujo tapón así como también el

flujo volumétrico y la presión por ser transmitidos instantáneamente. Si Z es una variable cualquiera entrando al módulo, entonces su salida está dada por:

$$Z_m(t) = Z_j(t - DLT) \quad (2.25)$$

Las salidas para $t < DLT$ se ajustan con los mismos valores de las condiciones iniciales.

Las propiedades físicas de cada componente individual son evaluadas en las condiciones individuales. Las propiedades de la corriente son entonces evaluadas por medio de la suma de las contribuciones molares de los componentes presentes. En problemas donde el cambio en las propiedades es más acentuado, se requiere del programa CHESS, el cual proporciona subrutinas termodinámicas de ecuaciones de estado.

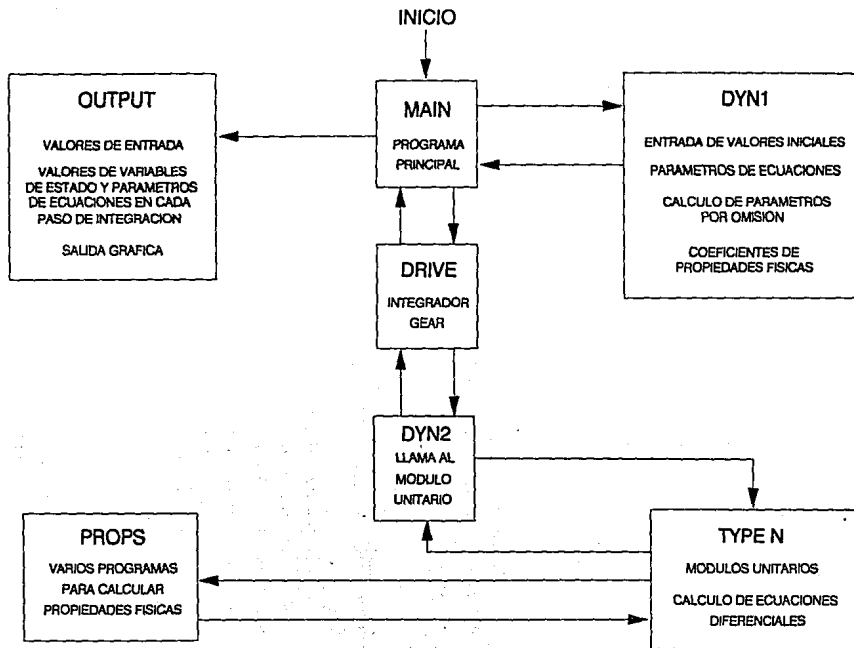
El sistema PRODYC está limitado a 20 unidades de equipo y 50 corrientes de proceso, además de 10 componentes, 10 funciones características y 10 ciclos de proceso.

2.5 DYN SYL

La estructura general de DYN SYL, desarrollado por Patterson y Rozsa en 1980, se muestra en la Figura 2.2. El programa principal llama a una subrutina denominada DYN1 para leer la información alfanumérica. Posteriormente, la subrutina integradora DRIVE es llamada para que éste a su vez llame en el momento adecuado a DYN2 para emplear los módulos de DYN SYL. La subrutina empleada para la integración es una versión del integrador de ecuaciones rígidas denominado GEAR y que fué desarrollado por Hindmarsh en 1974.

Para determinar los valores actualizados de las variables de estado después de cada incremento de tiempo, los módulos unitarios calculan los valores de las derivadas de las variables de estado que son empleados por el integrador. Las subrutinas que calculan las propiedades físicas son llamados

FIGURA 2.2 ESTRUCTURA GENERAL DE DYN SYL



cada vez que se requieren. Al final de cada intervalo, es decir, después de varios intervalos de tiempo de integración, el integrador regresa al programa principal para que los programas de salida puedan ser llamados y ejecutar sus funciones.

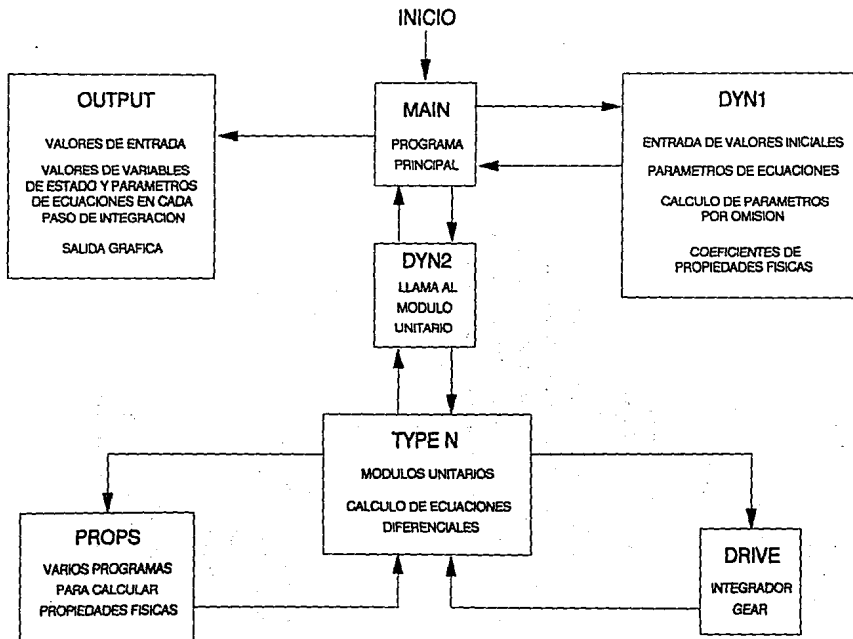
La estructura mostrada en la Figura 2.2 es para un acoplamiento completo de todas las ecuaciones para todas las unidades de proceso. Sin embargo, cuando se requiere almacenar una gran cantidad de información cuando se simula un proceso muy grande, puede ser empleado el modo desacoplado mostrado en la Figura 2.3. No obstante, este modo no es tan eficiente como el modo acoplado, por lo tanto, disminuye significativamente la precisión de los resultados.

La comunicación necesaria entre los módulos y el programa principal es proporcionada por los comandos COMMON, los cuales contienen los valores de las variables de estado, los parámetros del equipo, la matriz de proceso, así como también otros valores necesarios tal como el número de unidades de proceso. Es definida una matriz de proceso $MP(i,j)$ en donde los valores son los números de las corrientes que pertenecen a un módulo en particular, siendo i el número de unidad y j el número de corriente. Dicho arreglo tiene una gran flexibilidad.

Los valores de las variables de proceso son almacenados en la matriz $S(i,j,k)$. Cuando $i=1$, los valores son los de las variables de estado y cuando $i=2$, los valores son los de las derivadas calculadas en los módulos de proceso. El subíndice j se refiere al número de corriente. El valor de $k=3$ indica flujo, $k=4$ temperatura, $k=5$ presión y $k=6$ a $k=n$ las concentraciones de los componentes. Los valores $S(i,j,1)$ y $S(i,j,2)$ de la corriente j pueden ser positivos o negativos. Si es negativo, la corriente es de salida.

Los valores del equipo y de otros parámetros están contenidos en la matriz $EP(i,j)$ donde i es el número de la unidad y j es el número del parámetro. Cada unidad puede tener hasta 10 parámetros diferentes.

FIGURA 2.3 MODO INACOPLADO DE DYN SYL



Durante la ejecución, el usuario es informado del valor del comando TIME y se le pregunta el tiempo para el primer cambio en las variables de estado. Dichos cambios se pueden llevar a cabo al simular procesos inestables o al simular acciones de control. Además, también se realiza la ejecución de manera interactiva. Cada vez que el valor del comando TIME excede el tiempo de simulación establecido, la ejecución se completa.

El DYN SYL fué desarrollado, en primer lugar, para simular procesos en ciclos de combustible nuclear, sin embargo, Patterson y Rozsa lo modificaron para su uso general en procesos químicos. Es adecuado para la simulación dinámica de una serie de unidades, particularmente aquellas que se encuentran disponibles en el paquete. Los módulos con que cuenta DYN SYL son los siguientes:

- 1) Unidad de transporte para el cálculo del equilibrio físico con transferencia de calor (líquido-líquido ó líquido-vapor).
- 2) Reactor de tanque agitado.
- 3) Controlador.
- 4) Tubería.
- 5) Bomba.
- 6) Reactor tubular.
- 7) Columna de destilación con condensador y reboiler.
- 8) Intercambiador de calor.
- 9) Extractor para uranio y plutonio (coextracción ó separación).
- 10) Precipitador de plutonio.
- 11) Concentrador de plutonio.

La utilidad de este programa se engrandece por su representación gráfica y por sus partes interactivas, además de que permite desarrollar más módulos para su expansión.

2.6 DPS

El Simulador Dinámico de Procesos, desarrollado por Thambyayagam y colaboradores en 1981, emplea un método de tipo modular para el análisis del comportamiento del régimen dinámico de los procesos químicos. Muchos modelos, conocidos como elementos o unidades (combinaciones específicas de elementos), están presentes en la librería del DPS. El usuario puede crear nuevos elementos e incluirlos en la librería. Es posible resolver sistemas de ecuaciones diferenciales y algebraicas de la misma forma que lo hace un lenguaje de simulación digital tal como el CSMP. Las entradas y las salidas de muchos de los modelos son flujos de proceso; otros modelos, aunque no emplean flujos de masa, usan flujos de información. Una aplicación común, en donde sólo se involucran al flujo de información, es la simulación de sistemas de control empleando funciones de transferencia. La simulación de sistemas incluye controles y detectores, por consiguiente, involucra tanto a procesos como a flujos de información.

De la misma forma que el PRODYC, el DPS tiene la opción de obtener la solución en el régimen permanente de las ecuaciones propuestas en el modelo matemático. Otra característica importante es su habilidad de tomar una gran variedad de pruebas discretas que generalmente se presentan en las industrias de proceso tales como apertura/cierre de válvulas, arranque/paro de bombas, etc. El programa interactivo DPS se describirá en las siguientes cuatro secciones.

1) PROBLEMA

El usuario propone el título del problema a resolver, los datos y especifica el tipo de unidades que desee calcular, así como también el tipo de información de la salida.

2) COMPONENTE

En esta sección, el usuario tiene que dar nombres a los componentes que tomarán parte en la simulación, así como también los valores numéricos de sus propiedades tales como densidad, entalpía del líquido o del vapor, capacidad

calorífica, presión de vapor, constantes de equilibrio y pesos moleculares. También se permite introducir los datos por medio de polinomios.

3) TOPOLOGIA

El diagrama de flujo de proceso es representado por medio de un diagrama de bloques, con interconexiones entre sí, que emplea flujos de proceso así como también flujos de información de los modelos disponibles del programa principal. Cada corriente y cada parte del equipo es representada en el diagrama.

Los flujos de proceso son denominados monocorrientes o corrientes de proceso dependiendo si contienen un solo componente o más de un componente, respectivamente. Los flujos tales como el vapor de un rebollier, el agua de enfriamiento de un condensador o el combustible de un calentador son denominados monocorrientes.

Los modelos que presenta el DPS son de dos tipos. Los modelos básicos, denominados elementos, son usados conjuntamente con las corrientes de proceso o asociados solo con el flujo de información. En la Tabla 2.4 se presentan algunos elementos del simulador DPS. El otro tipo de modelos, conocidos como unidades, son mucho más complicados y están compuestos de elementos.

La Figura 2.4a muestra un diagrama esquemático de un mezclador y la Figura 2.4b el diagrama de bloques elaborado por el DPS. Las dos corrientes que son mezcladas se combinan en el diagrama de bloques por medio del elemento STAD antes de entrar a los elementos del tanque TANKQ. La corriente agua/metanol ST3 entra a STAD directamente en proporción previamente establecida en FDMW. Sin embargo, la corriente de entrada de agua ST1 viene de un cabezal que pudiera estar sujeta a fluctuaciones de presión. Por lo tanto, el elemento válvula VALVEPL se agrupa al elemento CVFLOWCO, el cual proporciona el coeficiente de descarga y la apertura de la válvula. La misma combinación de elementos es usada para la descarga de salida. El elemento LEVELC se agrupa con TANKQ para controlar el nivel del líquido en el tanque mientras es alcanzada la presión de la válvula. Lo anterior es indicado por la

DESCRIPCION	TIPO
Incorporación de corriente de proceso	STAD
Bomba	PUMP
Corriente con retraso de tiempo	PIPE
Válvula para líquido de proceso	VALVEL
Válvula para líquido exclusivamente	MVALVEL
Válvula para gas de proceso	VALVEPL
Válvula de control para líquido de proceso cuando el flujo varía con la caída de presión	VALVEPL
Válvula de control para gas de proceso cuando el flujo varía con la caída de presión	VALVEPG
Válvula de control para gas exclusivamente cuando el flujo varía con la caída de presión	MVALEPG
Función lineal para válvula de control	CVLINEAR
Función equivalente para válvula de control	CVEQPER
Coefficiente para válvula de flujo	CVFLOWCO
Interruptor de flujo de proceso	CHCOCK2

Tabla 2.4 Lista parcial de elementos del DPS.

DESCRIPCION	TIPO
Indicador de nivel	LEVEL C
Controlador	PID
Función de transferencia	LTRANS
Comparador	CMPSUM
Función de transferencia tipo pulso	STRANS
Almacenamiento de ceros	ZHOLD
Función de tamaño de paso	STEP
Función tipo rampa	RAMP
Función límite tipo rampa	PLATHB
Función tipo pulso	PULSE
Función seno	SINE
Punto de burbuja	BPT
Punto fijo	DPT
Flash isotérmico	TFLASH
Flash adiabático	QFLASH
Flash líquido-vapor	RFLASH
Valor de K para corriente de proceso	KVALUE

Tabla 2.4 Lista parcial de elementos del DPS (continuación).

DESCRIPCION	TIPO
Valor de K para corrientes múltiples de proceso	KVALUEM
Función para reacción química homogénea	ARRH
Divisor de corriente de proceso	SPLIT
Divisor en equilibrio	EQSEP
Flash en equilibrio	EQSEPK
Separador de componentes	CRSEP
Tanque de proceso	TANKQ
Reactor	REACTL
Compresor	COMPRESS
Tanque flash con acumulación	FLASHDRUM.
Columna de destilación con balances de masa total y por componentes	DISTMC
Condensador total	CONDSC
Acumulador	ACCUMUL
Reboiler	REBOILT
Intercambiador de calor de tubos y coraza para líquido de proceso	HEATEXMP

Tabla 2.4 Lista parcial de elementos del DPS (continuación).

FIGURA 2.4A DIAGRAMA ESQUEMATICO DE UN MEZCLADOR

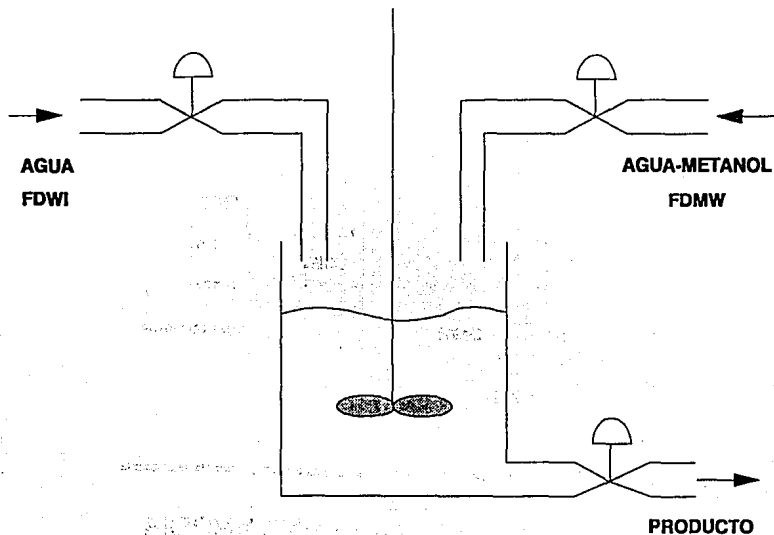
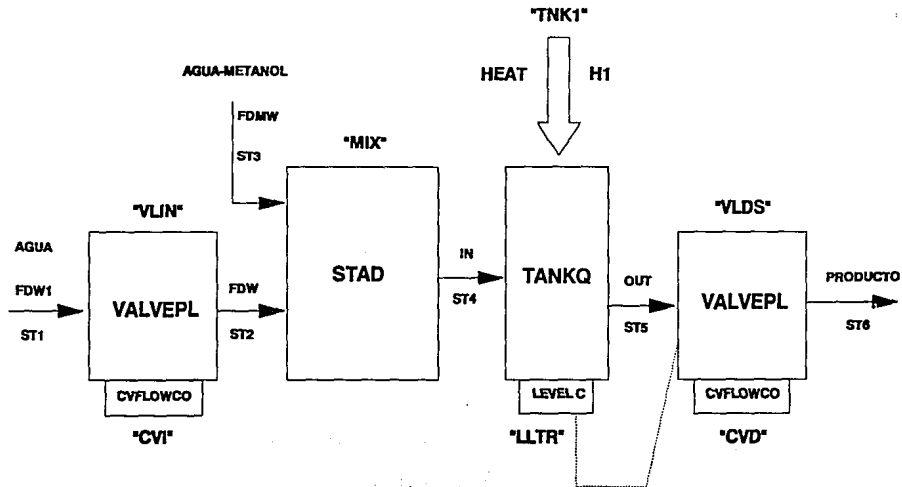


FIGURA 2.4B DIAGRAMA DE BLOQUES DE DPS



línea punteada de la Figura 2.4b. Para describir la topología del DPS, cada corriente y cada elemento es codificado, por ejemplo, el elemento válvula se convierte en "VLDS", el elemento asociado en "CVD" y ST4, ST5 y ST6 en "IN", "OUT" y "PROD", respectivamente.

4) DESCRIPCION

Los datos necesarios para describir el problema de un caso en particular se compone de las siguientes fases: especificaciones, métodos de cálculo, operaciones y salidas. Dentro de las especificaciones se dan las variables y los parámetros para el ajuste de válvulas, así como también los códigos de apagado y encendido del sistema.

Se puede usar una rutina de integración propia del DPS, o alternativamente, el usuario puede ligar cualquier rutina que desee. Si la información tal como el paso de integración, la magnitud del error, etc. no es proporcionada, son empleados valores preestablecidos por el DPS.

Son descritas las secuencias de prueba con respecto al tiempo transcurrido, así como también acciones tales como el cálculo del régimen permanente, la integración alrededor de un período de tiempo establecido, el cierre y la apertura de válvulas, etc.

Finalmente, el usuario especifica el formato y los símbolos a ser empleados en las salidas gráfica y tabular⁹.

2.7 PROCESOS BATCH Y SEMICONTINUOS

Un proceso batch ó semicontinuo (B/SC) es indiscutiblemente un sistema dinámico, por lo tanto, un programa de simulación para esta clase de procesos básicamente tiene las mismas características que poseen los simuladores diseñados para procesos continuos. Además, existen otras características que no poseen los simuladores dinámicos de procesos continuos y que presentan ciertas ventajas. Dichas características son:

1) CAMBIOS DISCONTINUOS EN EL ESTADO DEL SISTEMA

Frecuentemente, en las operaciones B/SC, el tiempo de proceso es definido implícitamente a través de la adquisición de un estado establecido tal como la concentración de ciertas especies, la temperatura o el nivel de un tanque. Para conformar dichas discontinuidades en las trayectorias de estado, el simulador deberá poseer la capacidad de identificar la frecuencia de las pruebas, ejecutar la lógica adecuada y finalmente iniciar la integración.

2) CAMBIOS CONSTANTES EN LA DIMENSION

En los procesos B/SC, el equipo de proceso no siempre está en funcionamiento. Algunas unidades pueden ser usadas de manera intermitente, como resultado de la fluctuación en la dimensión y forma de las ecuaciones de estado que deberán ser resueltas para dichas unidades. Por otra parte, en un contexto multicomponente, son empleadas condiciones de proceso y de especies distintas mientras se lleva a cabo la simulación.

3) REARREGLO DINAMICO DE LAS TRAYECTORIAS DE PROCESO

En procesos batch es muy común que varias partes del equipo puedan servir para una operación en particular. Mientras se fija la secuencia de pasos para un producto dado, un equipo debe estar sujeto a su disponibilidad o a su prioridad que se le halla asignado. Además, los productos pueden tener diferentes características y, por lo tanto, diferentes propiedades que deberán ser calculadas. Por lo tanto, la matriz de proceso no podrá permanecer fija, por lo que es necesario que se actualice continuamente.

En contraste, con los programas para el régimen permanente, se ha prestado cierta atención al desarrollo de programas de simulación para procesos B/SC. Existen trabajos realizados para procesos específicos presentados por Youle (1960), Embury y colaboradores (1977), Overturf y colaboradores (1978) y Miner y colaboradores (1980). Fruit y colaboradores (1974) y Czulek (1982) desarrollaron sistemas de aplicación general; el primero se basa en la estructura empleada por GASP IV y el segundo en la estructura de SIMULA 67¹⁸.

2.7.1 BOSS

El primer simulador de aplicación general para los procesos B/SC fué desarrollado por Joglekar y Reklaitis en 1982 y más tarde por el propio Joglekar y colaboradores en 1983. Conocido con el nombre de BOSS y de estructura modular, consiste de una serie de modelos individuales de cada una de las unidades de proceso. Las ecuaciones algebraicas y diferenciales se resuelven simultaneamente empleando un programa de integración implícito conocido como LSODAR, desarrollado por Petzold y Hindmarsh en 1982, el cual es adecuado para el ajuste de matrices dispersas. Cada unidad está representada por una ecuación de estado, por un Jacobiano opcional y por una subrutina para ajuste de prueba.

Cada una de las subrutinas de prueba codifica operaciones lógicas de cada unidad hasta llegar a un punto de decisión en su trayectoria de estado, por ejemplo, detectan si está "lleno" ó "vacío", "frío" ó "caliente", "apagado" ó "encendido", etc. El simulador utiliza una estrategia de interpolación especial para detectar la frecuencia de las pruebas de estado y realiza decisiones futuras dependiendo del tiempo de prueba de frecuencia conocida.

El sistema tiene la capacidad de actualizar el vector de estado dinámico para ordenar eficientemente los cambios en la dimensión de estado. Estos cambios se presentan en los procesos B/SC así como también en las unidades de proceso individuales que fluctúan de un estado activo a un estado pasivo y de un producto a otro.

BOSS además realiza programaciones lógicas que permiten la selección dinámica de las unidades de proceso basadas en su disponibilidad y en las prioridades asignadas por el usuario.

2.8 MODELADO Y SIMULACION DINAMICA DE LA DESTILACION

El incentivo económico es de gran importancia para la aplicación de la simulación dinámica en las columnas de destilación multicomponente para mejorar su eficiencia y ahorrar energía. Mix y colaboradores, en 1977, estimaron que un ahorro del 10% en el consumo de energía en los E.U.A., o sea, 2×10^{14} BTU's, representa un ahorro de 500 millones de dólares al año. La simulación dinámica permite al diseñador determinar si es conveniente operar en régimen permanente, si el equipo de control es el adecuado para una operación eficiente y si la integración de energía propuesta será la óptima.

El modelado dinámico de la destilación ha recibido gran atención como se observa en la Tabla 2.5. Entre estos trabajos existe un acuerdo uniforme con respecto a las suposiciones planteadas para llevar a cabo la simulación, las cuales son:

- 1) El líquido de cada plato presenta mezclado perfecto.
- 2) La acumulación de vapor en los platos es muy pequeña.
- 3) El retraso en el transporte del líquido y del vapor entre los platos es muy pequeño.
- 4) La temperatura es uniforme en cada plato.

Varios estudios demuestran la dinámica que se presenta en los platos como lo establece la fórmula del vertedero de Francis.

Sin embargo, como se verá mas adelante, se presentan muchas diferencias en la integración numérica de las ecuaciones. Una columna común se modela mediante miles de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO'S), las cuales presentan un amplio rango de respuesta que va de unos cuantos segundos a varias horas. En lo que respecta a los sistemas rígidos de ecuaciones diferenciales ordinarias es muy común que se inviertan muchas horas en llevar a cabo la simulación dinámica, aún en las computadoras más veloces.

TIPO DE DESTILACION	REFERENCIA
Destilación binaria	Gerster y colaboradores (1961, 1964) Huckaba y colaboradores (1963, 1967) Simonsmeier y colaboradores (1977)
Modelos aproximados	Weigand y colaboradores (1972) Buffham (1974)
Sistemas complejos	Kim y Friedly (1974)
Destilación multicomponente	Mah y colaboradores (1962) Waggoner y Holland (1965) Distefano (1968) Howard (1970) Ballard y colaboradores (1978) Ballard y Brosilow (1978) Morris y Svreck (1981) Prokopakis y Seider (1980, 1983)
Interacción de columnas	Cook y Brosilow (1980)
Procesos de separación	Cho y Joseph (1980)

Tabla 2.5 Modelos dinámicos y simulación de la destilación.

2.8.1 SOLUCION NUMERICA

Los sistemas de ecuaciones generados en la simulación dinámica de la destilación son conocidos como sistemas rígidos. Tales sistemas no se pueden resolver correctamente empleando algoritmos tales como el Runge-Kutta o los métodos Predictores-Correctores, debido a que el tamaño de paso máximo de estos algoritmos depende de la respuesta del sistema. Por esta razón, son necesarios muchos pasos y mucho tiempo para calcular la trayectoria.

El método alternativo para la integración de sistemas rígidos es aplicar el algoritmo de integración implícito desarrollado por Gear en 1971, el cual puede tomar tamaños de paso relativamente grandes. Desafortunadamente, cuando se aplican algoritmos implícitos a la destilación, se presentan serios inconvenientes debido, principalmente, a dos razones:

- 1) Requieren de la solución de las ecuaciones no lineales en cada paso de integración.
- 2) Requieren de la construcción de la matriz Jacobiana, la cual es bastante tediosa de calcular.

Por lo tanto, el asunto se complica mucho cuando se trabaja con varias columnas interconectadas entre sí.

En 1973, Ballard y Brosilow integraron las ecuaciones MESH empleando un Runge-Kutta semi-implícito de segundo orden y un Euler modificado para estimar los errores de truncación. De 1980 a 1983, Prokopakis y Seider aplicaron un Runge-Kutta semi-implícito modificado denominado SIRK.

En 1978, Ballard y colaboradores compararon cinco casos empleando el Runge-Kutta semi-implícito y el método del trapecoide como lo describe Holland. En cada paso, fué simulada una hora de régimen dinámico empleando un tamaño de paso variable, el cual no era mayor a un minuto. Los resultados presentados en la Tabla 2.6 muestran el éxito relativo del método semi-implícito Runge-Kutta⁹.

TORRE	PLATOS	COMPONENTES	DISTURBIO	TIEMPO DE EJECUCIÓN (MIN) EN UNIVAC 1108	
				TRAPEZOIDE	RUNGE-KUTTA SI
Separador de C3/C4	30	5	Rendimiento del rebolter	0.53	0.35
Prefraccionador	21	6	Relación de alimentación	0.27	0.30
Fracccionador de gas	80	11	Relación de la corriente lateral	Sin convergencia	3.00
Separador de gas natural	65	20	Composición de la alimentación	Sin convergencia	3.00
Separador de gas natural	65	20	Relación de alimentación	5.50	2.80

Tabla 2.6 Comparación de las técnicas de solución.

En el siguiente capítulo se mostrará brevemente un estudio acerca del control "feedback" y los distintos controladores que son más comúnmente utilizados en este tipo de sistema, la comparación de respuesta de algunos de ellos y su aplicación en los ciclos de control de variables, así como también los sistemas operativos para control en tiempo real, debido a que son la base fundamental para mantener una operación óptima del equipo y de los parámetros que intervienen en la simulación dinámica de los procesos químicos.

3.1 INTRODUCCION

Los sistemas de control se han desarrollado rápidamente, volviéndose cada vez más versátiles y complejos. Incluso, son auxiliares fundamentales de los Ingenieros Químicos para mantener el óptimo funcionamiento de los procesos industriales. Además dichos sistemas han llegado a ser pieza clave para una operación rentable dentro de las plantas de proceso. Su evolución ha sido tal que incluso personas que se desempeñan en la industria de procesos y que no tienen nada que ver con la ingeniería, pueden operarios sin tener un conocimiento previo acerca del tema.

Debido al gran aumento en los costos de energéticos, a la limitada disponibilidad de materias primas y a las estrictas medidas ambientales y de seguridad, las industrias, en el momento actual, trabajan con operaciones cada vez más rigurosas que en el pasado. Estos factores son el pilar en donde se desenvuelven el diseño, la selección, la operación, el mantenimiento y la optimización de los sistemas de control de procesos.

Por otra parte, en la actualidad, el punto clave en las industrias de procesos químicos es la productividad y en el futuro seguramente se dará mayor énfasis a esta cuestión.

Finalmente, una de las razones por el interés en el control de procesos es debido a que los ingenieros han visto al desarrollo del control como una alternativa para una mayor productividad.

CAPITULO III

ANALISIS DE RESPUESTA Y CONTROL DE LOS PARAMETROS INVOLUCRADOS EN UN PROCESO QUIMICO

3.2 CONTROL "FEEDBACK"

Considérese el proceso generalizado que se muestra en la Figura 3.1a, el cual posee una salida y , un disturbio d y una variable manipulable m . El disturbio d , también conocido como carga o carga del proceso, cambia de una manera impredecible y el objetivo del control es mantener el valor de la salida y en un valor deseado. La acción del control "feedback" se lleva a cabo de la siguiente manera:

1) Mide el valor de la salida (flujo, presión, nivel de líquido, temperatura, composición) mediante un instrumento de medición adecuado y se lo asigna a y_m .

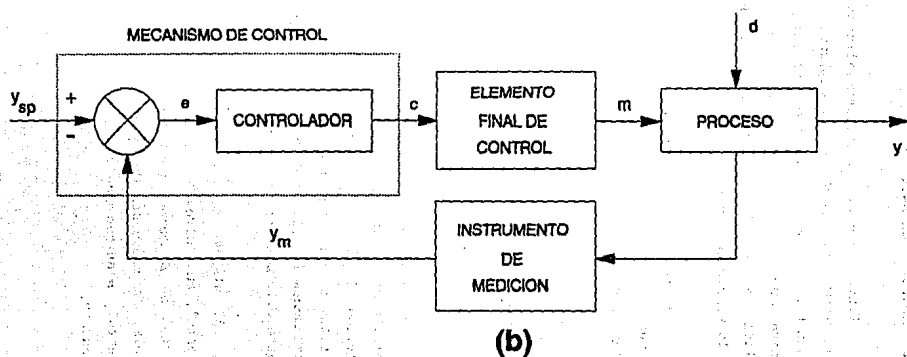
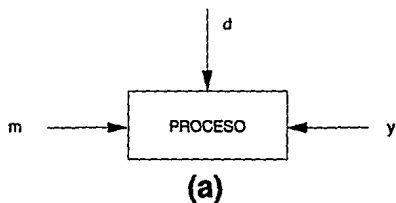
2) Compara el valor y_m con el valor deseado y_{sp} (set point o punto de ajuste) que se quiere obtener para el proceso. Calcula la diferencia, desviación o error de la siguiente forma:

$$\epsilon = y_{sp} - y_m \quad (3.1)$$

3) El valor de la desviación ϵ se le envía al controlador principal. El controlador cambia el valor de la variable manipulada m para reducir la magnitud de la diferencia ϵ . Por lo general, el controlador no altera directamente la variable manipulada, sino que es usado otro instrumento (comunmente la válvula de control) conocido como elemento final de control. La Figura 3.1b muestra lo descrito anteriormente.

Al sistema de la Figura 3.1a se le conoce como "sistema de ciclo abierto", en contraste con el sistema de control "feedback" de la Figura 3.1b al cual se le conoce como "sistema de ciclo cerrado". Cuando el valor de d cambia, la respuesta del primer sistema se le denomina "respuesta de ciclo abierto", mientras que a la segunda se le conoce como "respuesta de ciclo cerrado"⁶.

FIGURA 3.1 (a) PROCESO. (b) CICLO DE CONTROL CORRESPONDIENTE



La Figura 3.2 presenta algunos ejemplos de sistemas de control "feedback".

1) Control de flujo.- En las Figuras 3.2a y b se muestran dos sistemas "feedback" para mantener el flujo F en el valor deseado F_{sp} .

2) Control de presión.- El sistema "feedback" de la Figura 3.2c mantiene la presión de los gases en el tanque a un valor deseado P_{sp} .

3) Control de nivel de líquido.- Las Figuras 3.2d y e muestran dos sistemas "feedback" empleados para el control de los niveles de líquido en la columna de destilación y en su tanque acumulador de condensados.

4) Control de temperatura.- El sistema de la Figura 3.2f mantiene la temperatura de la corriente caliente de salida a un valor deseado T_{sp} .

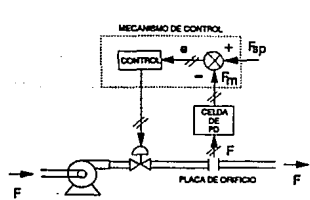
5) Control de composición.- La composición es la variable controlada en el sistema de mezclado de la Figura 3.2g. El valor deseado es C_{sp} .

Para simplificar la representación de un sistema "feedback" se utiliza un círculo que sustituye al mecanismo controlador, el cual puede contener las siguientes abreviaciones:

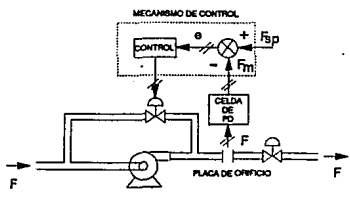
- FC para control de flujo.
- PC para control de presión.
- LC para control de nivel de líquido.
- TC para control de temperatura.
- CC para control de composición.

así como también cuadros que sustituyen al instrumento de medición y a la transmisión y que contienen las abreviaciones LT, TT, PT, FT y CT. Las Figuras 3.3a y b son equivalentes a las Figuras 3.2b y d, respectivamente.

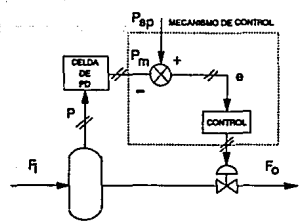
FIGURA 3.2 EJEMPLOS DE SISTEMAS FEEDBACK



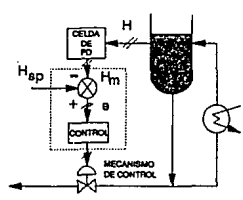
(a) CONTROL DE FLUJO



(b) CONTROL DE FLUJO



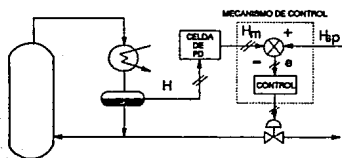
(c) CONTROL DE PRESION



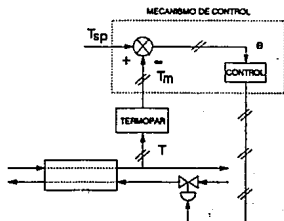
(d) CONTROL DE NIVEL DE LIQUIDO

PD = PRESION DIFERENCIAL

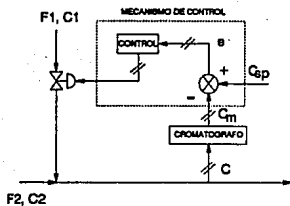
FIGURA 3.2 EJEMPLOS DE SISTEMAS FEEDBACK (CONTINUACION)



(e) CONTROL DE NIVEL DE LIQUIDO



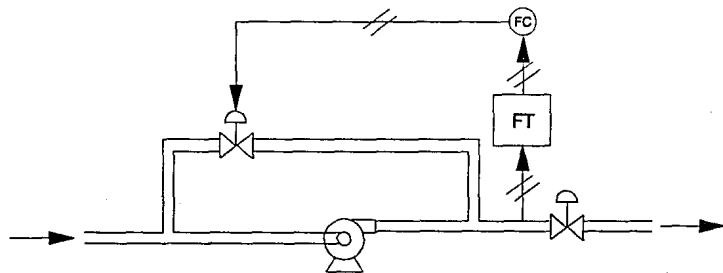
(f) CONTROL DE TEMPERATURA



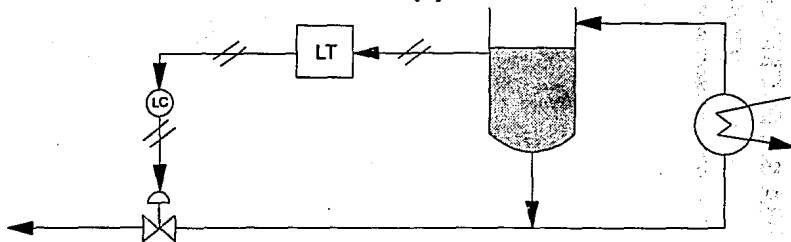
(g) CONTROL DE COMPOSICION

PD = PRESION DIFERENCIAL

**FIGURA 3.3 REPRESENTACION SIMPLIFICADA DE
LOS CICLOS DE CONTROL FEEDBACK**



(a)



(b)

Por lo tanto, los elementos básicos de un ciclo de control "feedback" son los siguientes:

1) Proceso.- El equipo junto con las operaciones unitarias físicas o químicas que se llevan a cabo (tanques, intercambiadores de calor, reactores, columnas de destilación, etc.).

2) Instrumentos de medición o medidores.- Por ejemplo, termopares para temperatura, diafragmas para presión o nivel de líquido, placas de orificio para flujo, cromatógrafos de gases o analizadores espectroscópicos para composición, etc.

3) Transmisor y líneas de transmisión.- Utilizados para cambiar la señal del medidor, llevar la señal del instrumento de medición al controlador y enviar la señal de control del controlador al elemento final de control. Estas líneas pueden ser neumáticas (aire comprimido o líquido) o eléctricas.

4) Controlador.- Incluye también la función del comparador. El controlador es la unidad lógica que decide en cuánto se debe cambiar el valor de la variable manipulada. Requiere la especificación del valor deseado (set point).

5) Elemento final de control.- Generalmente es una válvula de control. Este es el instrumento que recibe la señal de control del controlador para llevar a cabo el ajuste físico del valor de la variable manipulada.

El comportamiento de cada uno de estos elementos puede ser descrito por una ecuación diferencial o una función de transferencia equivalente²⁰.

En otras palabras, un ciclo básico de control "feedback" consta de un instrumento de medición que detecta la variable en estudio, un transmisor que convierte la señal del medidor en una señal neumática o eléctrica equivalente, un controlador que compara esta señal con el set point produciendo una señal de control apropiada, y, finalmente, un elemento final de control que cambia

el valor de la variable manipulada. Por lo general, el elemento final de control es una válvula de control operada con aire que abre y cierra para cambiar el flujo de la corriente manipulada.

El instrumento de medición, el transmisor y la válvula de control se encuentran localizados en el equipo de proceso, o sea, en campo. El controlador generalmente se localiza sobre un panel en un cuarto de control que se encuentra a cierta distancia del equipo de proceso.

La mayoría del equipo de control usado en plantas químicas y petroquímicas es neumático o electrónico. Los instrumentos neumáticos constan de dispositivos mecánicos como los diafragmas. Funcionan por medio de una corriente de aire de instrumento entre 20 y 25 psig. Por lo general, aceptan una señal de entrada de 3 a 15 psig de aire a presión y producen señales de salida alrededor del mismo rango. Los controles neumáticos son ampliamente utilizados por su seguridad, bajo costo y por ser a prueba de explosiones. El último factor puede ser extremadamente importante en muchas plantas de proceso.

Los instrumentos de control electrónico son básicamente computadoras analógicas de fabricación especial constituidas por circuitos en estado sólido. Funcionan con voltajes de 117 volts C.A. o de 24 volts C.D. El tipo de señales de entrada y de salida varía de un fabricante a otro. Los instrumentos electrónicos son mucho más caros que los neumáticos, en ocasiones por un factor de 2. Su uso se justifica cuando del cuarto de control se localiza a una distancia considerable del proceso o cuando se requiere de una transmisión instantánea de señales entre el proceso y el cuarto de control.

En un sistema neumático, la tubería de plástico o de metal que conecta el transmisor al controlador y el controlador a la válvula representa el retraso dinámico en el ciclo de control. Cuando son usadas grandes longitudes de tubería, los retrasos en la transmisión pueden llegar a ser muy significativos y disminuir el control de ciclos instantáneos, por ejemplo, en ciclos de control de flujo y en algunos ciclos de control de presión.

Los sistemas neumáticos son los dispositivos con los que están más familiarizados los Ingenieros Químicos, debido a que siguen siendo utilizados extensamente en las industrias de proceso. Todos los conceptos del análisis y diseño de estos sistemas se aplican a los sistemas electrónicos.

Finalmente, también localizado en el cuarto de control está el instrumento de operación manual/automático. Durante el arranque o bajo condiciones anormales, el operador tiene que ajustar la posición de la válvula de control por sí mismo en lugar del controlador. En la posición "manual", el operador puede mover la válvula por medio de una perilla (un regulador de presión en un sistema neumático o un potenciómetro en un sistema electrónico). En la posición "automático", la señal de salida del controlador se dirige a la válvula. La perilla sobre el panel de control regula el set point del controlador¹³.

3.3 CONTROLADORES

Entre el instrumento de medición y el elemento final de control se encuentra el controlador. Su función es recibir la señal de salida medida $y_m(t)$ y compararla con el set point y_{sp} para producir una señal actuante $c(t)$, de tal forma que regresa la salida al valor deseado y_{sp} . Sin embargo, la entrada al controlador es el error $e(t) = y_{sp} - y_m(t)$ y su salida es $c(t)$. Los distintos tipos de controladores "feedback" difieren entre sí en la forma como relacionan $e(t)$ con $c(t)$.

La señal de salida de un controlador "feedback" depende de su construcción, la cual puede ser una señal neumática (aire comprimido) para controladores neumáticos o eléctrica para controladores electrónicos.

Los controladores "feedback" que existen son:

- 1) Control proporcional.
- 2) Control integral.
- 3) Control derivativo.
- 4) Control proporcional-integral.
- 5) Control proporcional-derivativo.
- 6) Control proporcional-integral-derivativo.

De todos ellos, los más comunes son el proporcional, el proporcional-integral y el proporcional-integral-derivativo. Los detalles de su construcción difieren de fabricante a fabricante, sin embargo, sus funciones son esencialmente las mismas.

3.3.1 CONTROL PROPORCIONAL

Su salida actuante es proporcional al error:

$$c(t) = K_c \epsilon(t) + c_r \quad (3.2)$$

donde:

K_c = Ganancia proporcional del controlador.

c_r = Señal de referencia del controlador, o sea, la señal actuante cuando $\epsilon = 0$.

Un control proporcional se describe por el valor de su ganancia proporcional K_c o por su Banda Proporcional PB equivalente:

$$PB = \frac{100}{K_c} \quad (3.3)$$

La banda proporcional genera el rango alrededor del cual el error debe cambiar para llevar la señal actuante del controlador a su valor máximo. Comúnmente, $1 \leq PB \leq 500$. La Figura 3.4a muestra la acción del controlador

para $e(t) = y_{sp} - y_m(t)$.

Si K_c es grande, PB será pequeño y visceversa. La ganancia puede ser positiva o negativa por ajuste de un selector que se encuentra en el controlador. Una ganancia positiva aumenta la salida del controlador cuando la señal del proceso disminuye (controlador de acción inversa). Para una ganancia negativa, la salida del controlador disminuye, así como también la del proceso (controlador de acción directa). El signo correcto de la ganancia depende de la acción del transmisor (generalmente es directa), de la acción de la válvula (apertura o cierre) y del efecto de la variable manipulada sobre la variable controlada.

Por ejemplo, supóngase que se desea controlar la temperatura de un intercambiador de calor con una válvula de apertura. El transmisor de temperatura es de acción directa, es decir, cuando la temperatura aumenta, la salida del transmisor aumenta. Se quiere disminuir el flujo de vapor cuando la temperatura aumenta, por lo tanto, la salida del controlador disminuirá cuando la temperatura se incremente. Sin embargo, el controlador será de acción inversa.

Si se enfría en lugar de calentar, entonces el flujo enfriado deberá incrementarse cuando la temperatura aumente. Ahora bien, la acción del controlador seguirá siendo inversa si la válvula de control se cambia por una válvula de cierre para asegurar el máximo enfriamiento.

Una de las cuestiones más importantes que deben examinarse al ajustar un ciclo de control "feedback" en un proceso es que la acción del controlador sea correcta²⁰.

Por otra parte, definiendo la desviación $c'(t)$ de la señal actuante como:

$$c'(t) = c(t) - c_s \quad (3.4)$$

y tomando a:

$$c'(t) = K_c \epsilon(t) \quad (3.5)$$

se obtiene la función de transferencia para un control proporcional:

$$G_p(s) = K_c \quad (3.6)$$

3.3.2 CONTROL INTEGRAL (REAJUSTE)

La acción proporcional mueve la válvula de control en proporción directa a la magnitud del error. La acción integral mueve la válvula en base al tiempo integral del error como se muestra en la Figura 3.4b:

$$c(t) = \frac{K_c}{\tau_i} \int_0^t \epsilon(t) dt + c_s \quad (3.7)$$

donde:

τ_i = Constante de tiempo integral o de reajuste, min.

Si no hay error, la salida del controlador no moverá la válvula de control. Como el error puede ser positivo o negativo, la integral del error aumentará o disminuirá la salida del controlador dependiendo de la acción de dicho controlador (directa o inversa).

Muchos controladores son calibrados en minutos/repetición, un término que se deriva de una prueba que consiste en enviar al controlador una señal de error constante de 1 psi y observar cuánto tiempo le toma a la acción integral producir una salida de 1 psi (repetiendo la misma acción que haría un controlador proporcional con una PB de 100). Sin embargo, se deben tomar ciertas precauciones en el ajuste de este tipo de controladores, debido a que algunos fabricantes calibran sus instrumentos en repeticiones/minuto, el término recíproco del usado aquí.

La finalidad básica de la acción integral es llevar al proceso a su set point cuando se presenta un disturbio. Esto es conocido como "error cero". La acción integral o de reajuste no es muy preferida debido a que aumenta la oscilación del ciclo de control y lo lleva a la inestabilidad. No obstante, se le requiere para eliminar el error del régimen permanente.

La función de transferencia de un control integral es:

$$G_i(s) = K_c \frac{1}{\tau_I s} \quad (3.8)$$

3.3.3 CONTROL DERIVATIVO

El propósito de la acción derivativa, también conocida como acción anticipatoria, es la de predecir en el proceso el cambio de error. Su salida actuante es:

$$c(t) = K_c \tau_D \frac{de}{dt} + e \quad (3.9)$$

donde:

τ_D = Constante de tiempo derivativo, min.

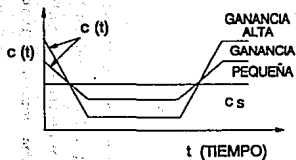
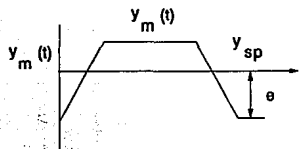
En teoría, la acción derivativa siempre proporcionará una respuesta dinámica en muchos ciclos, sin embargo, en algunos otros, surgen problemas que hacen del uso de esta acción indeseable. La función de transferencia para un control derivativo ideal es:

$$G_c(s) = K_c \tau_D s \quad (3.10)$$

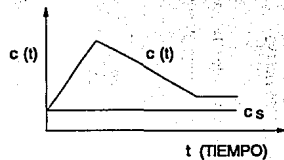
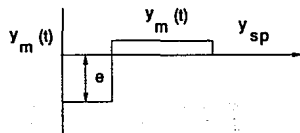
Físicamente, es imposible llevar a cabo una acción derivativa perfecta, además de que la acción derivativa ideal no puede ser realizada como tal. Las unidades derivativas o unidades con retraso de carga son empleadas para conseguir una acción derivativa aproximada. La Figura 3.4c muestra la acción

**FIGURA 3.4 ACCION DE UN CONTROL FEEDBACK:
 (a) PROPORCIONAL; (b) INTEGRAL;
 (c) DERIVATIVO IDEAL**

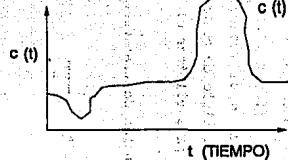
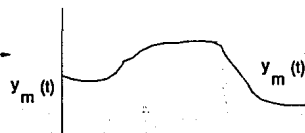
70



(a)



(b)



(c)

de un control derivativo ideal¹³. En el dominio de Laplace, su función de transferencia está dada por la siguiente expresión:

$$G_c(s) = K_c \frac{\tau_D s + 1}{\alpha \tau_D s + 1} \quad (3.11)$$

donde:

α = Constante de controles comerciales cuyos valores van de 1/6 a 1/20.

3.3.4 CONTROL PROPORCIONAL-INTEGRAL (PI)

Conocido comúnmente como control proporcional mas reajuste. Su señal actuante relacionada con el error está dada por la siguiente expresión:

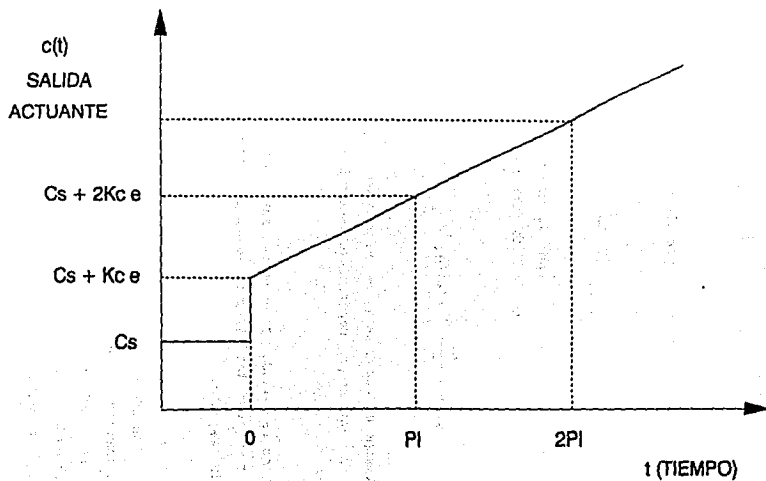
$$c(t) = K_c e(t) + \frac{K_c}{\tau_I} \int_0^t e(t) dt + c_u \quad (3.12)$$

El tiempo de reajuste τ_I es un parámetro ajustable y, en ocasiones, está expresado en minutos por repetición. Generalmente, está en el rango de $0.1 \leq \tau_I \leq 50$ min.

Algunos fabricantes no calibran sus controladores en términos de τ_I sino usando su recíproco $1/\tau_I$ (repeticiones por minuto), el cual es conocido como relación de reajuste.

En este punto sería conveniente examinar el origen del término "reajuste". Considérese que el error cambia en un orden de magnitud ϵ . La Figura 3.5 muestra la respuesta de la salida de un controlador, calculada por medio de la ecuación (3.12). Obsérvese que inicialmente la salida del controlador es $K_c \epsilon$ (la contribución del término integral es cero). Después de un período de τ_I minutos, la contribución del término integral es:

FIGURA 3.5 RESPUESTA DE SALIDA DEL CONTROL PI



$$\frac{K_c}{\tau_I} \int_0^{\tau_I} \epsilon(t) dt = \frac{K_c}{\tau_I} \epsilon \tau_I = K_c \epsilon \quad (3.13)$$

esto es, la acción del control integral "repite" la respuesta de la acción proporcional. Dicha repetición se lleva a cabo cada τ_I minutos y le ha dado su nombre al reajuste de tiempo. Por lo tanto, el tiempo de reajuste es el tiempo que necesita el controlador para repetir la acción proporcional inicial cambiando así su salida.

La acción integral provoca en la salida del controlador $c(t)$ un cambio proporcional al error existente en la salida del proceso. Por consiguiente, dicho controlador puede eliminar incluso pequeños errores.

De la ecuación (3.12) es fácil demostrar que la función de transferencia de un control proporcional-integral está dada por:

$$G_c(s) = K_c \left[1 + \frac{1}{\tau_I s} \right] \quad (3.14)$$

El término integral de un control PI provoca que la salida continúe cambiando mientras exista un error. A menudo, los errores no pueden ser eliminados rápidamente y dan suficiente tiempo para producir valores más y más grandes para el término integral (por ejemplo, una válvula completamente abierta o cerrada). A esta condición se le conoce como efecto sobreintegral. Incluso si el error regresa a cero, la acción del control seguirá actuando. Un controlador PI necesita de herramientas especiales para poder contrarrestar el efecto sobreintegral²⁰.

Por otro lado, probablemente el 75% de los controles "feedback" utilizados en plantas químicas son de este tipo. La acción integral elimina el error en el régimen permanente. Entre más pequeña sea la constante de tiempo integral τ_I , el error será eliminado más rápidamente. Si el sistema llega a ser bajoamortiguado, entonces τ_I es reducida, pero si se reduce demasiado el

ciclo se vuelve inestable¹³.

3.3.5 CONTROL PROPORCIONAL-DERIVATIVO (PD)

La acción derivativa es usada cuando el proceso tiene un gran número de elementos almacenados y, por lo tanto, presenta un retraso considerable de transferencia. Esta acción no puede ser usada individualmente, sin embargo, se puede combinar con la acción proporcional o con la acción proporcional-integral. Como la acción integral, la acción derivativa en muchos controladores PD varía con la ganancia del control. La salida actuante está dada por la siguiente ecuación:

$$c(t) = K_c e(t) + K_c \tau_D \frac{de}{dt} + \zeta \quad (3.15)$$

y, por lo tanto, su función de transferencia es:

$$G(s) = K_c (1 + \tau_D s) \quad (3.16)$$

donde:

τ_D = Constante de tiempo derivativo, min.

La gran ventaja de incluir la acción derivativa al control proporcional es el incremento de la ganancia sin producir una oscilación excesiva. Frecuentemente, es posible que el efecto de la acción derivativa al control proporcional permita un incremento suficiente de ganancia para reducir el desplazamiento (offset) como lo hace la acción integral¹⁶.

3.3.6 CONTROL PROPORCIONAL-INTEGRAL-DERIVATIVO (PID)

En la práctica industrial es comúnmente conocido como control proporcional mas reajuste mas relación. La salida actuante de este controlador es:

$$c(t) = K_c \epsilon(t) + \frac{K_c}{\tau_I} \int_0^t \epsilon(t) dt + K_c \tau_D \frac{d\epsilon}{dt} + c \quad (3.17)$$

donde:

τ_D = Constante de tiempo derivativo, min.

τ_I = Constante de tiempo integral, min ó min/repetición.

Con la presencia del término derivativo, $d\epsilon/dt$, el control PID anticipa el error que se presentará en el futuro y aplica una acción de control que es proporcional a la relación de cambio en el error. Debido a esta propiedad, la acción del control derivativo, en ocasiones, se le conoce como "control anticipatorio". En contraste, los principales inconvenientes de la acción derivativa son:

1) Para una respuesta con error constante no se lleva a cabo el control debido a que la derivada del error con respecto al tiempo es cero ($d\epsilon/dt = 0$).

2) Para una respuesta distorsionada con error cercano a cero puede calcular derivadas de orden superior y producir una acción de control que no es necesaria²⁰.

Los controles PID son utilizados en ciclos de control en donde la acción derivativa ayuda a compensar un retraso en algún lugar del ciclo. Se emplean en ciclos de control de temperatura en donde el efecto adverso del retraso en un termopar y en su capucha térmica puede ser parcialmente reducido por la acción derivativa. El control detecta el movimiento anticipandose al error y comienza a actuar sobre la válvula de control, a diferencia del control P ó PI.

El problema principal con la acción derivativa es que amplifica cualquier disturbio en la señal de proceso produciendo fluctuaciones en la posición de la válvula de control. Por lo tanto, la acción derivativa es utilizada únicamente en señales que están prácticamente libres de

perturbaciones, por ejemplo, en ciclos de temperatura y de presión de gases. Nunca es usado en ciclos de control de flujo y rara vez en ciclos de control de nivel¹³.

Finalmente, la función de transferencia de este tipo de control es:

$$G_c(s) = K_c \left[1 + \frac{1}{\tau_I s} + \tau_D s \right] \quad (3.18)$$

3.3.7 COMPARACION DE RESPUESTAS DE LAS ACCIONES DE CONTROL CONTINUO

Para resumir la discusión hecha anteriormente sobre los distintos tipos de controles existentes, se muestra en la Figura 3.6 el comportamiento de algunos de ellos, en donde la respuesta de un proceso de dos etapas con constantes de tiempo iguales para un cambio de paso unitario en la carga se compara para cuatro acciones de control que son: P, PI, PD y PDI, ajustados para dar el mismo grado de amortiguación.

1) PROPORCIONAL (P)

Puede ser considerado como el caso básico, el cual da una respuesta proporcionando una desviación máxima, un período moderado de oscilación y un desplazamiento máximo.

2) PROPORCIONAL-INTEGRAL (PI)

EL control no muestra desplazamiento, sin embargo, la eliminación del mismo da por resultado una máxima desviación y un largo período de oscilación, debido al efecto de inestabilidad de la acción integral. Por lo tanto, al control se le debe reducir la ganancia proporcional.

Por otro lado, la combinación del control proporcional e integral proporciona los siguientes efectos en la respuesta de un sistema de ciclo cerrado:

a) El orden de la respuesta se incrementa (efecto de la acción integral).

b) Se elimina el desplazamiento u offset (efecto de la acción integral).

c) Como la constante K_c se incrementa, la respuesta se vuelve instantánea (efecto de la acción proporcional) y más oscilatoria para cambios en el set point, o sea, se incrementa la relación de decaimiento y el overshoot (efecto de la acción integral). Valores grandes de K_c provocan respuestas muy sensibles que pueden llevar a la inestabilidad.

d) Como disminuye τ_I , la respuesta llega a ser más rápida pero más oscilatoria con relaciones de decaimiento y overshoots más altos (efecto de la acción integral).

3) PROPORCIONAL-DERIVATIVO (PD)

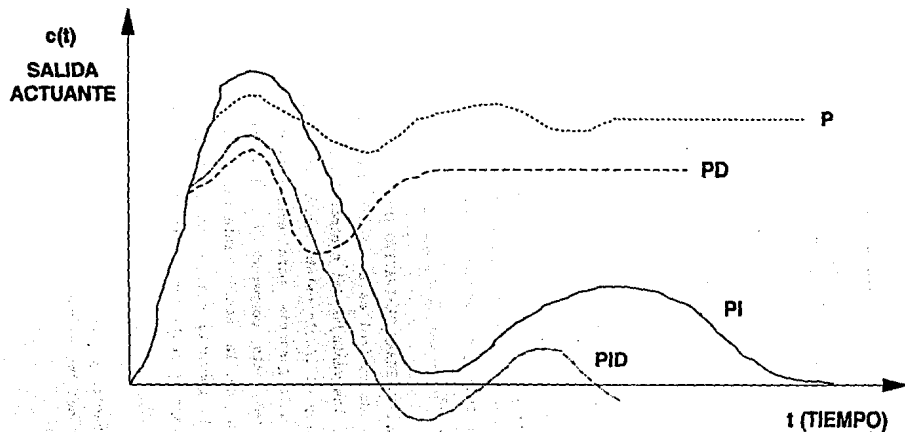
El control lleva al sistema al valor final de régimen permanente en el tiempo más corto con la desviación máxima más pequeña. EL desplazamiento residual es más pequeño que en el control proporcional por sí solo. Estos efectos se deben a la estabilidad adicional proporcionada por la acción derivativa, la cual generalmente permite un incremento considerable en la ganancia proporcional.

4) PROPORCIONAL-INTEGRAL-DERIVATIVO (PID)

Este tipo de control es una mezcla entre las ventajas y desventajas de un control PI y las ventajas del control PD. No hay desplazamiento debido a la acción integral y al efecto estabilizador de la acción derivativa que permite un incremento en la ganancia, para reducir la máxima desviación y aumentar la velocidad de respuesta comparada con los controles P y PI. El efecto desestabilizador de la acción integral, sin embargo, no permitirá tal incremento en la ganancia como en un control PD, por lo que la desviación máxima y el tiempo de restablecimiento no son tan efectivos como en un control PD.

La combinación de las tres acciones de control en la respuesta de un ciclo cerrado posee las mismas características dinámicas que un control PI.

**FIGURA 3.6 COMPARACION DE LA RESPUESTA
PARA UN CAMBIO DE CARGA EN VARIAS
ACCIONES DE CONTROL CONTINUO**



ESTA TESIS NO DEBE SALIR DE LA BIBLIOTECA

La presencia del control integral disminuye la respuesta del ciclo de un proceso. Para incrementar la velocidad de la respuesta, se puede aumentar el valor de la ganancia K_c del controlador. No obstante, si se incrementa demasiado K_c para obtener una velocidad aceptable, la respuesta se vuelve más oscilatoria y puede caer en la inestabilidad. La introducción de la acción derivativa proporciona estabilidad al sistema. Por lo tanto, se puede obtener una velocidad de respuesta aceptable si se selecciona un valor apropiado para la ganancia K_c y si se mantienen valores moderados de overshoots y de relaciones de decaimiento.

El control integral se ha omitido de esta comparación debido a que esta acción se lleva a cabo en procesos de poca capacidad. El efecto del control integral en un proceso del tipo considerado anteriormente será relativamente pobre (desviación máxima amplia y restablecimiento pequeño) y poco representativo.

Es importante tomar en cuenta que lo dicho anteriormente es una generalización y, por lo tanto, se pueden presentar excepciones en algunos sistemas, sin embargo, las características básicas de la eliminación del offset por la acción integral y un incremento en la velocidad de respuesta de la acción derivativa son fundamentales.

La cuestión sobre qué tipo de combinación de acciones debe usarse en una aplicación en particular no es aquella que pueda ser dada por una respuesta definitiva. Idealmente, el controlador más simple que proporcione un control adecuado es el que se requiere, desafortunadamente, a menudo no es posible asegurar por adelantado que será el más efectivo para una aplicación dada. Esto se puede llevar a cabo solo si la aplicación es relativamente simple o si se dispone de información suficiente en aplicaciones similares.

La importancia del diseño del sistema de control para satisfacer las características del proceso no debe pasarse por alto, sin embargo, debe tenerse en mente de que la selección del controlador depende de los requerimientos de operación del proceso y de la tolerancia permitida, por

ejemplo, valores máximos permitidos para el offset, la desviación y el tiempo de restablecimiento. Si el offset no puede ser mantenido en dicho valor, entonces debe de ser incluida la acción integral en el control puesto que ésta es la única manera de eliminar o reducir el offset en presencia de cambios significativos en la carga. La necesidad de la acción derivativa será dictada por la desviación máxima y/o por el tiempo de restablecimiento. Si un offset pequeño no es crítico para la operación, entonces se puede omitir la acción integral y el uso de la acción derivativa dependerá de otros factores y de si puede ser obtenido un offset pequeño a partir del control proporcional sin un incremento en la ganancia, generalmente dada por la incorporación de la acción derivativa. Debe apreciarse que algunas de estas consideraciones pueden ser relativamente poco significativas para el diseño, sin embargo, esto solo puede ser determinado cuando el proceso es puesto en operación¹⁶.

3.4 CICLOS DE CONTROL DE VARIABLES

Los ciclos de control más comunes son los de nivel, flujo, temperatura y presión. El tipo de controlador y sus ajustes utilizados en un sistema generalmente son los mismos para cualquier otro. Por ejemplo, muchos ciclos de control usan controles PI con una banda proporcional amplia y una acción integral instantánea.

Aquí son descritos algunos de estos ciclos y debe de tenerse en cuenta que su descripción está basada en la experiencia.

1) CICLOS DE CONTROL DE FLUJO

Los controles PI son los empleados casi exclusivamente. Se utiliza una banda proporcional amplia ($PB = 150$) o una ganancia mínima para reducir el efecto de disturbio de la señal de flujo. Dicho de otra manera, la presión diferencial cambia continuamente debido a la turbulencia del flujo. También es usado un valor bajo de la constante de tiempo integral o reajuste ($\tau_I = 0.1$ min/repeticón) para conseguir un rastreo instantáneo del set point.

2) CICLOS DE CONTROL DE NIVEL

La mayoría de los niveles de líquido representan el recuento material utilizado como capacidad de compensación. En estos casos, no importa dónde se encuentra el nivel cuando se localiza entre niveles máximos y mínimos. Por lo tanto, frecuentemente son usados los controles P en estos ciclos debido a que proporcionan un control de nivel promedio.

Por ejemplo, supóngase que el nivel es ajustado por una válvula de control que regula el flujo del líquido fuera del tanque. La banda proporcional se ajustará para que la válvula cierre cuando el nivel halla llegado a un valor mínimo establecido y abra cuando el nivel halla alcanzado su valor máximo. Si los niveles máximo y mínimo son el rango del transmisor de nivel, entonces se utilizará una banda proporcional de 100 (ganancia de 1). El set point se ajustará a un nivel del 50% (señal de 9 psig) y el controlador será reajustado en 9 psig. Por "reajuste" se debe entender la calibración en "cero" del controlador para cambiar la señal predispuesta y proporcionar la señal de salida deseada cuando el error es cero. Así, la salida del controlador irá de 3 a 15 psig al igual que la del transmisor. Si se emplea una válvula de apertura, el controlador mantendrá la válvula cerrada cuando el nivel sea mínimo y abierta cuando el nivel sea máximo.

Si se desea mantener el nivel en un 30 a un 80% del rango del transmisor, se debe de ajustar la banda proporcional en 50 (ganancia de 2) y el controlador en 9 psig con un nivel y un set point de 55%.

3) CICLOS DE CONTROL DE PRESION

Los ciclos de presión varían de ciclos instantáneos, como en el control de flujo, hasta ciclos lentos, parecidos al control de nivel. Un ejemplo de un ciclo de presión instantáneo es el de una válvula de estrangulación que actúa sobre un flujo de vapor en un tanque. La válvula tiene una acción directa sobre la presión, por lo que el control puede llevarse a cabo. Un ejemplo de un ciclo de control de presión lento es cuando la presión se mantiene por estrangulación del flujo de agua a un condensador. El flujo cambia el ΔT para llevar a cabo la condensación en el condensador. Por lo

tanto, la dinámica de la transferencia de calor y el retraso del flujo de agua a través de la coraza del condensador son introducidos en el ciclo de control de presión.

4) CICLOS DE CONTROL DE TEMPERATURA

Los ciclos de control de temperatura generalmente son lentos, debido a los retrasos del medidor y de la transferencia de calor en el proceso. Los controles frecuentemente usados en estos ciclos son los PID's. La banda proporcional se ajusta en un rango entre 50 y 100 dependiendo del tipo de transmisor, del tamaño de la válvula de control, etc. El tiempo de reajuste es del mismo orden que la constante de tiempo de proceso. En otras palabras, para una respuesta de proceso instantánea, se puede ajustar una τ_i pequeña. La constante de tiempo derivativo en ocasiones se ajusta como una constante de tiempo de proceso de cuarto orden, dependiendo de la magnitud del disturbio^{13,19}.

3.5 SISTEMAS OPERATIVOS PARA CONTROL

Un sistema operativo es un programa interactivo, generalmente proporcionado por un proveedor junto con la instalación del equipo de cómputo. Lo anterior caracteriza a una máquina virtual, esto es, todos los componentes utilizan el mismo sistema operativo. El sistema operativo proporciona una interface de alto nivel entre el usuario y la computadora.

Los sistemas operativos modernos poseen una estructura independiente con un núcleo de características básicas junto con dispositivos periféricos para proporcionar elementos más sofisticados.

Los sistemas operativos en tiempo no real, tales como UNIX, DOS y algunos más, generalmente son programas estandarizados en lo referente a comandos y estructura de los mismos, a pesar de que el código de cada uno de ellos debe de ser preparado para satisfacer los requerimientos propios del equipo en que residen.

Los sistemas operativos en tiempo real, por otra parte, son sistemas altamente específicos y normalmente son elaborados por la Compañía fabricante del sistema, esto es, en la actualidad, no existen programas estandarizados. Los programas en tiempo real generalmente son incluidos en el sistema en que residen, y bajo esta consideración muchos de ellos son ejecutados por el control del sistema operativo.

Los sistemas en tiempo real responden a acciones externas y, como consecuencia, generan señales en intervalos regulares o instantáneas. Los procesos en tiempo real son cíclicos, esto es, se llevan a cabo a intervalos regulares de tiempo o presentan una respuesta inmediata a acciones externas. En ambos casos, la interrupción permite la ejecución: el proceso inicia un nuevo ciclo seguido de una interrupción de tiempo, mientras que la siguiente ejecución inicia un nuevo ciclo seguido de una interrupción externa.

El sistema en tiempo real debe definir los intervalos de tiempo. Frecuentemente, la pérdida de dichos intervalos puede ser catastrófica; sin embargo, en algunos casos que involucran procesos cíclicos, la pérdida del intervalo puede provocar una ejecución sin consecuencias graves. La interrupción es el tiempo transcurrido entre el dato detectado y la generación de una señal de ejecución. Esto dependerá de la combinación del tiempo requerido para acceder la rutina de interrupción más el tiempo requerido para ejecutar dicha rutina. El tiempo de acceso a una rutina de interrupción dependerá del nivel de prioridad asignado con anterioridad^{10,11}.

3.5.1 SISTEMAS OPERATIVOS EN TIEMPO REAL

En el caso específico del sistema operativo en tiempo real (RTOS), existen dos características que son absolutamente esenciales:

- 1) Generación y manipulación de interrupciones.
- 2) Asignación de prioridades.

Aplicando tales características, se obtiene la mejor aproximación al verdadero proceso en tiempo real, el cual se puede llevar a cabo con un procesador común.

En la práctica, las interrupciones pueden ser reconocidas y usadas para generar una acción en aproximadamente 10 ms. En este intervalo de tiempo, pueden ser ejecutadas aproximadamente 10,000 instrucciones.

Las interrupciones necesitan ser ordenadas por medio de vectores, esto es, cualquier interrupción en particular necesita generar una acción directamente en el proceso en estudio. Como consecuencia de una interrupción, el RTOS necesita ajustar un procedimiento de decisión que involucre la combinación de programas, reinicio y suspensión del proceso. A las interrupciones, así como también a los usuarios y a las tareas a realizar, se les deben de asignar una prioridad; el tiempo alternado generalmente es poco práctico en situaciones de tiempo real.

3.5.2 ASIGNACION DE RECURSOS

El RTOS determina la naturaleza, distribución, prioridad, secuencia y duración de la asignación de recursos. Cuando dos o más usuarios requieren trabajar con el mismo archivo, a éste se le asigna un número (RN), el cual es comunicado a los usuarios; los programas de un usuario, por lo tanto, solicitan acceso por medio del RN, sin embargo, si otro usuario ya tiene acceso al archivo, el anterior deberá esperar su turno. Generalmente, los RN's no son asignados a tareas, de lo contrario, la prioridad y las señales de interrupción no podrían ser utilizadas para llevar a cabo sus propios objetivos.

Los RN's son almacenados en tablas de memoria, y cuando son requeridos por varios usuarios, se les asigna un número global RN. Si un programa tiene el control sobre un número global RN y dicho programa falla, el RTOS debe ser capaz reconocer la situación y restaurar el RN en la tabla de memoria, para

que otros usuarios puedan tener acceso al mismo.

Los RTOS también determinan la asignación de espacio de memoria para cada usuario y cada tarea, además de controlar las entradas y las salidas de dicha memoria. El acceso a la memoria se realiza en dos niveles:

1) Interactivo.- Empleando un Interpretador de Comandos, el usuario tiene acceso a un programa con una amplia variedad de comandos externos. Al ejecutar programas es posible salirse temporalmente del RTOS.

2) Programático.- El usuario tiene acceso a programas y librerías propias del sistema. En este caso, no se puede abandonar el RTOS. Por ejemplo, un programa elaborado en FORTRAN puede ser equivalente a 18,000 bytes de un archivo objeto del RTOS.

3.5.3 INTERRUPCIONES

Para el Archivo Ejecutable en Tiempo Real (RTE) del RTOS, cualquier acción externa genera una interrupción. Tal acción puede ser:

- 1) La activación de una tecla por el usuario.
- 2) La activación de un disco.
- 3) La activación de una impresora.
- 4) La activación de algún equipo periférico.

El propósito de la interrupción es el de provocar que RTOS identifique que una acción se ha llevado a cabo. La interrupción del RTE es un submódulo del RTOS: debe ser capaz de identificar la interrupción, determinar su prioridad relativa e iniciar la acción de respuesta correspondiente. Para este propósito, se incluye una tabla de interrupciones en el RTE.

Si el tiempo de resolución de la interrupción es de 10 ms, el programa puede activar las interrupciones sólo cuando las acciones iniciales se lleven a cabo en más de 10 ms. Si dos acciones se realizan en el mismo intervalo de tiempo, esto es, 10 ms, deben de ejecutarse de acuerdo al orden de prioridad, el cual, en este caso, sólo puede ser activado por un procedimiento externo.

Las rutinas de interrupción deben de ser tan breves como sea posible, para asegurar que las interrupciones de baja prioridad sean eventualmente activadas. Las rutinas pueden ser diseñadas de tal forma que los datos puedan ser transferidos rápidamente a otro programa, para que dichas rutinas sean liberadas lo más pronto posible.

3.5.4 AMBIENTE DEL USUARIO

En algunos RTOS, el sistema crea para cada uno de los usuarios un ambiente propio. Esto se lleva a cabo por medio de un Monitor de Sesión, el cual genera para cada usuario un ambiente lógico. A cada equipo de entrada/salida (I/O) se le asigna un número de unidad lógico (LU) y el Monitor de Sesión ajusta una tabla, la cual asocia los dispositivos del sistema actuales para los usuarios de los LU's antes de que tengan acceso al RTOS.

3.5.5 ADMINISTRACION DE MEMORIA

Normalmente, los programas en tiempo real deben de estar residentes en memoria, debido a que son requeridos frecuentemente y ser ejecutados rápidamente. Pueden estar almacenados en un disco y ser cargados inmediatamente después de que el sistema es activado, por lo tanto, esta parte de la memoria se convierte en el área del RTOS. El área restante es, por consiguiente, designada para ejecutar programas.

3.5.6 RELOJ DEL SISTEMA

El RTE requiere de un registro preciso del tiempo transcurrido. También puede necesitar del uso de un reloj externo de tiempo real que registre el tiempo si se presenta alguna falla eléctrica en el sistema. La precisión del reloj deberá ser del orden de 10 segundos por año.

El empleo del reloj, por lo tanto, será de:

- 1) Correr un programa a una determinada hora del día.
- 2) Retrasar la ejecución de un programa para un intervalo de tiempo específico.
- 3) Ejecutar un programa por medio de una rutina en intervalos de tiempo regulares para prevenir fallas en el sistema.
- 4) Mantener los datos constantes ante variaciones de señales externas.

Las frecuencias deberán ser muy altas para evitar pérdidas durante cambios instantáneos, pero a la vez muy bajas para evitar aleatoriedad en los datos empleados. Frecuentemente es necesario acondicionar las señales por medio de redes de frecuencia y/o amplitud.

3.5.7 CALCULOS

Generalmente, muchos cálculos en tiempo real son llevados a cabo utilizando números enteros. Empleando un procesador de 16 bites, esto significa que los números (sin tomar en cuenta el signo) en el rango de 0 a 65535 en base 10 pueden ser empleados. Se pueden presentar diversas variaciones, por ejemplo, un bit puede ser asignado al signo y/o algunos bites a la parte fraccional del número. Algunos cálculos en tiempo real pueden realizarse con punto flotante, pero con la desventaja de que los rangos para la mantisa y el exponente están muy limitados.

Frecuentemente, los programas utilizan el punto flotante para la representación de números reales, por lo que el RTOS puede requerir rutinas para convertir números reales del programa de usuario a números enteros del proceso en tiempo real, o viceversa.

3.5.8 REAL/IX

Muchos sistemas operativos en tiempo real son marcas registradas, por lo que sólo una pequeña porción de ellos es publicada. Una posible excepción es el Sistema Operativo REAL/IX elaborado por AT & T en su versión V UNIX, el cual presenta un control automático.

Tal control asegura que:

1) Cualquier tarea en tiempo real adquiere la atención directa del CPU dentro de un tiempo límite especificado.

2) Las tareas altamente prioritarias serán ejecutadas en tiempo real.

3) Las tareas de prioridad inferior no serán ejecutadas hasta que las tareas en tiempo real sean finalizadas.

4) Cualquier tarea altamente prioritaria o interrupción será controlada, no obstante si el sistema se encuentra en el modo "usuario" o modo "control automático", para asegurar la respuesta en tiempo real.

El REAL/IX emplea tanto programas de prioridad como programas de intervalos de tiempo durante la secuencia de las tareas que se llevan a cabo. Los programas pueden manipular una combinación de 256 tiempos reales, así como también, niveles de prioridad de intervalos de tiempo, asignando a las tareas en tiempo real la prioridad más alta.

Por otra parte, los subsistemas de entrada/salida (I/O) mantienen:

- 1) Operaciones asincrónicas de I/O.
- 2) Prioridad de I/O.
- 3) I/O directa entre los equipos periféricos y programas de usuario.
- 4) Secuencias de interrupciones.

Finalmente, las acciones en tiempo real se encuentran residentes en memoria, por lo cual, aumentan la cantidad de espacio en disco para otros usos. El proveedor proporciona tanto el sistema en tiempo real como el sistema UNIX estándar para asegurar la máxima compatibilidad entre ellos⁴.

En el siguiente capítulo se desarrollará un estudio acerca de las Redes Neuronales, comenzando por su definición y la forma en que trabajan, para posteriormente tratar el paradigma conocido como "propagación hacia atrás" y su aplicación a la simulación dinámica y control de procesos, como una posible alternativa para llevar a cabo simulaciones sin tener que utilizar programas de cómputo.

CAPITULO IV

REDES NEURONALES EN LA SIMULACION DINAMICA Y CONTROL DE PROCESOS QUIMICOS

4.1 INTRODUCCION

Las redes neuronales, recientemente, han llegado a ser el foco de atención, debido a su amplio rango de aplicabilidad y la facilidad con lo cual pueden manipular problemas no lineales y complejos. La tecnología de la red neuronal está bien adaptada para resolver problemas en la industria química además de ser muy importante por provocar un impacto significativo en muchas áreas de la tecnología y los negocios.

Las redes neuronales son una de las áreas de la inteligencia artificial con mayor crecimiento. La razón de dicho crecimiento es debido a que las redes neuronales poseen la capacidad de resolver problemas que han demostrado ser extremadamente complicados para las computadoras digitales. Existen dos diferencias fundamentales entre la computación neuronal y la digital. En primer lugar, las redes neuronales son inherentemente mecanismos paralelos, y, por lo tanto, pueden resolver problemas mucho más rápido que una computadora digital. En segundo lugar, y quizá lo más importante, es que muchas redes neuronales tienen la capacidad de "aprender", o sea, antes de utilizarlas se les debe presentar una serie de ejemplos, de estos ejemplos, la red aprende las relaciones gobernantes incluidas en el archivo de aprendizaje. Puesto que las relaciones gobernantes no lineales pueden ser manipuladas por la redes neuronales, dichas redes pueden proporcionar un método efectivo de costos para modelar procesos químicos.

4.2 REDES NEURONALES

Las redes neuronales pueden identificar y aprender patrones correlativos entre ajustes de datos de entrada y de valores objetivo correspondientes. Una vez que han aprendido, dichas redes pueden ser empleadas para predecir resultados a partir de nuevos datos de entrada.

Las redes neuronales imitan el proceso de aprendizaje humano. Los humanos, frecuentemente, aprenden por prueba y error. Considérese cómo aprende un niño a reconocer figuras. Uno de los juguetes comunmente usado por los pequeños es aquel que consiste de diferentes figuras sólidas (triángulos, cuadrados, círculos, etc.), las cuales pueden ser colocadas dentro de una caja únicamente a través del agujero de la figura correspondiente. Los chicos aprenden a reconocer las figuras por intentos sucesivos en la colocación de las propias figuras sólidas a través de los agujeros. Inicialmente, el ciclo de aprendizaje consiste de numerosos intentos de prueba y error, sin embargo, eventualmente las figuras son reconocidas y el niño es capaz de comparar los agujeros por medio de la inspección.

Las redes neuronales operan de manera similar. Una red debe ser enseñada por medio de datos alimentados continua y repetidamente junto con sus correspondientes resultados objetivo o finales. Después de un número suficiente de intentos iterativos, la neurona aprende a reconocer patrones en los datos y, en efecto, crea un modelo interno del proceso estudiado. La red puede entonces emplear este modelo interno para hacer predicciones cuando se presenten nuevas condiciones o datos de entrada, tal y como el niño eventualmente aprende a reconocer figuras. Es importante notar que este modelo interno no está basado en ningún mecanismo específico del proceso; la red genera por sí misma dicho modelo. Después del aprendizaje inicial y si son proporcionados más datos, la red volverá a generar un aprendizaje, por lo que será construido un modelo optimizado que se incorporará al aprendizaje previo.

Las redes neuronales pueden manipular problemas que involucran datos imprecisos o "alterados", así como también aquellos que son altamente no lineales o complejos. Se adaptan eficientemente al reconocimiento de patrones y no requieren de un conocimiento fundamental previo del proceso o fenómeno que será modelado.

Estas características hacen de las redes neuronales excelentes candidatas para resolver un amplio rango de problemas en la industria química. Entre los ejemplos se pueden incluir la clasificación de las alimentaciones multicomponentes, análisis de composición química y reconocimiento de patrones, caracterización y modelado de reactores y, en general, unidades de proceso, modelado y entendimiento de fenómenos tales como los flujos turbulentos, etc. Las redes neuronales son muy importantes por mostrar un impacto significativo en numerosas áreas de la tecnología y los negocios. Una computadora personal es adecuada para muchas de las aplicaciones de las redes.

Los métodos estadísticos convencionales requieren del usuario para especificar las funciones alrededor de las cuales los datos serán ajustados. Para especificar dichas funciones, el usuario tiene que conocer las ecuaciones que correlacionan tales datos entre sí. Ahora bien, si estas funciones no son especificadas correctamente, los datos no serán ajustados, además, se requiere de métodos matemáticos y numéricos adecuados para obtener la convergencia si dichas funciones son altamente no lineales. Las redes neuronales omiten la necesidad de especificar las ecuaciones de las correlaciones, así como también cualquier método matemático o numérico.

También es importante reconocer la diferencia entre las redes neuronales y los "sistemas expertos". A estos últimos no se les puede "enseñar"; deben ser construidos por medio de un conocimiento meticulosamente estructurado por expertos humanos en un arreglo similar a un árbol lógico. En contraste, la red neuronal aprende por sí misma, desarrollando modelos internos del proceso por asimilación directa del conocimiento, la literatura o los modelos de datos sin la necesidad de un experto humano⁵.

4.3 PROCESO DE APRENDIZAJE

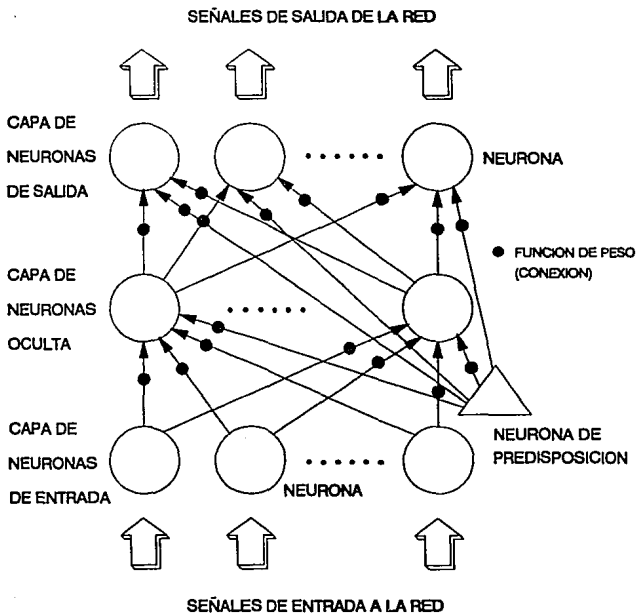
La estructura de las redes neuronales establece las bases para el almacenamiento de información y los patrones que rigen el proceso de aprendizaje de las redes. Las redes neuronales se componen de neuronas simuladas interconectadas entre sí como lo muestra la Figura 4.1. Una neurona es una entidad capaz de recibir y enviar señales y es simulada por medio de algoritmos en una computadora. Cada neurona simulada:

- 1) Recibe señales de otras neuronas.
- 2) Suma estas señales.
- 3) Transforma esta suma, generalmente, por medio de una función sigmoidea, la cual es una función monótona, diferenciable, continua y límite, por ejemplo, $f(x) = 1/[1 + \exp(-x)]$.
- 4) Envía el resultado a otras neuronas.

Una función de peso, que modifica la señal, se asocia con cada una de las conexiones entre las neuronas. El "contenido de la información" de la neurona se estructura por medio del ajuste de todas estas funciones de peso, las cuales, junto con la estructura propia de la red, constituyen el modelo generado por la red. Dicha estructura se tomó del entendimiento sobre cómo trabaja el cerebro humano. De las diversas configuraciones de redes neuronales, una de ellas, "la red de propagación hacia atrás" es particularmente relevante en Ingeniería Química.

La red de propagación hacia atrás contiene flujo de información en el modo de predicción y corrección de errores retropropagados en el modo de aprendizaje. Las redes generalmente se organizan en capas o grupos de neuronas y las conexiones se hacen entre las neuronas de capas adyacentes. Una neurona recibe señales de cada una de las neuronas de la capa anterior y transmite señales a cada una de las neuronas de la capa posterior o siguiente, por lo tanto, se requiere un mínimo de tres capas de neuronas en una red. Una red posee una capa de entrada, que como su nombre lo indica, recibe datos; una o más capas intermedias, también denominadas capas ocultas debido a que se

FIGURA 4.1 DIAGRAMA ESQUEMATICO DE UNA RED NEURONAL COMUN



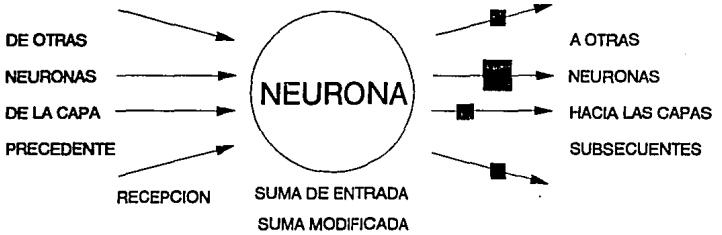
encuentran resguardadas dentro del programa, las cuales se localizan entre la capa de entrada y la capa de salida y; finalmente, la capa de salida, la cual envía resultados hacia el exterior. Además, una neurona de "predisposición", que proporciona una salida constante, se conecta a cada una de las neuronas de las capas ocultas y de salida. El número de neuronas empleadas en la capa oculta es del mismo orden de magnitud que el número de capas de entrada y de salida. Por otra parte, algunas neuronas de la capa oculta retraen el proceso de aprendizaje y en muchas ocasiones degradan la capacidad de la red.

En el modo de aprendizaje, o enseñanza, la red proporciona un ajuste de datos compuestos de valores de entrada y sus correspondientes valores de salida o resultados finales. Es entonces que la red identifica y aprende a relacionar patrones de entrada con patrones de salida, sin embargo, los datos al azar o sin relación alguna entre sí no generarán ningún tipo de aprendizaje.

4.3.1 RESULTADOS GENERADOS A PARTIR DE DATOS DE ENTRADA

Durante el proceso de generación de un resultado a partir de un dato de entrada, las señales fluyen únicamente hacia adelante, o sea, capa de entrada-capas oculta(s)-capa de salida. El ajuste de los valores de entrada es generado en las neuronas de la capa de entrada. Dichas neuronas transforman las señales de entrada y transmiten los resultados obtenidos a la capa de neuronas oculta. Cada neurona de la capa oculta recibe una señal modificada por la función de peso de su conexión correspondiente de cada una de las neuronas de la capa de entrada; estas neuronas suman, individualmente, las señales que reciben, así como también la función de peso que llega de la neurona de predisposición, modifican esta suma y transmiten el resultado a cada una de las neuronas de la capa siguiente como lo muestra la Figura 4.2. Finalmente, las neuronas en la capa de salida reciben las funciones de peso de las neuronas de la penúltima capa, suma las señales y las sumas modificadas se emiten a las salidas de la red.

FIGURA 4.2 COMO TRABAJA UNA NEURONA



4.3.2 APRENDIZAJE DE LA RED POR AJUSTE DE LOS VALORES DE PESO PARA MINIMIZAR ERRORES

Las funciones de peso de cada conexión están inicialmente en desorden. Cuando la red pasa por el periodo de aprendizaje, los errores entre los resultados de las neuronas de salida y los valores finales correspondientes esperados se propagan hacia atrás a través de la red. La propagación de las señales de error se emplea para actualizar los valores de peso de cada una de las conexiones. Iteraciones sucesivas de esta operación da como resultado un ajuste convergente de los valores de peso para producir una red a la cual se le enseñará a identificar y asimilar patrones entre ajustes de datos de entrada y sus correspondientes patrones finales de salida¹.

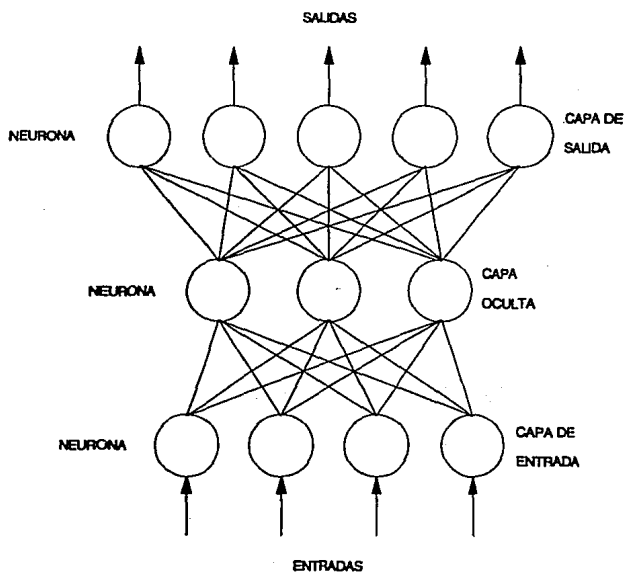
4.4 PROPAGACION HACIA ATRAS

Una red común de propagación hacia atrás se muestra en la Figura 4.3. La propagación hacia atrás es un ejemplo de una red neuronal de mapeo que desarrolla una aproximación de la función $y=f(x)$, es decir, pares x,y . La propagación hacia atrás ha sido aplicada a una gran variedad de problemas prácticos y ha tenido gran éxito por su habilidad de modelar relaciones no lineales. Entre sus aplicaciones se puede mencionar:

- 1) Síntesis y reconocimiento del lenguaje.
- 2) Reconocimiento visual de patrones.
- 3) Análisis de señales por sonar.
- 4) Análisis de mercado del gas natural.
- 5) Aplicaciones militares.
- 6) Diagnóstico médico.
- 7) Aprendizaje en sistemas de control.

Se ha empleado la propagación hacia atrás exitosamente en la simulación no lineal del espectro fluorescente inducido para predecir las concentraciones de algunas sustancias químicas y en el diseño de controles para columnas de

FIGURA 4.3 RED OCULTA DE PROPAGACION HACIA ATRAS



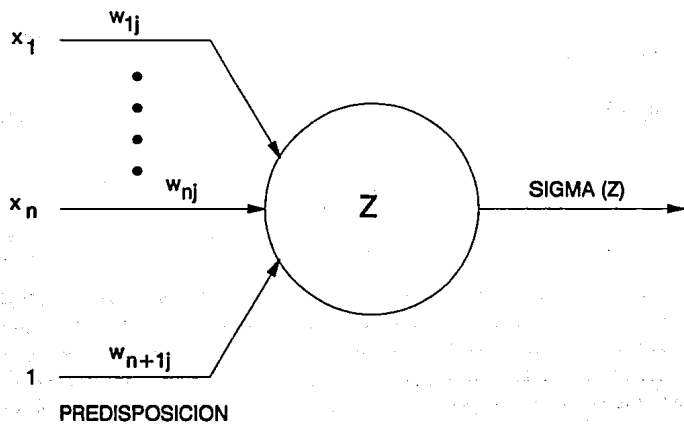
destilación a partir de ejemplos presentados a la red.

La propagación hacia atrás es una generalización de la ley del aprendizaje descendente presentada por Widrow y Hoff en 1960. Estos científicos analizaron una red neuronal compuestas por dos capas denominada ADALINE y desarrollaron un método descendente de gradiente local. Este método se generalizó en redes neuronales multicapa para el algoritmo de la propagación hacia atrás. El número de capas en una red neuronal es muy importante. En su texto clásico denominado "Perceptrones", Minsky y Papert, en 1972, demostraron que una red de dos capas del tipo estudiado por Widrow y Hoff estaba limitada en los tipos de problemas que podía resolver. Minsky y Papert especularon afirmando que el estudio de redes multicapa sería un área "estéril" o poco productiva, sin embargo, las redes multicapa pueden producir resultados que son imposibles de asimilar por redes de dos capas únicamente. Como lo demostraron Rumelhart y McClelland, en 1986, la incorporación de una capa oculta permitió al algoritmo de la propagación hacia atrás desarrollar una "representación interna" del problema, lo cual puede ser vital para su solución. Al parecer, la capa oculta da a la propagación una nueva y grandiosa dimensión en términos de su habilidad para aprender y asimilar la función $f(x)$. Uno de los puntos que se desarrolla en esta sección es que el modelado convencional y los modelos dinámicos ARMA son equivalentes a un modelo de red de propagación lineal hacia atrás de dos capas. Así, estos modelos están probablemente más limitados que los modelos de tres capas, en función de su habilidad para simular procesos dinámicos.

4.4.1 ALGORITMO

Las entradas y las salidas a la red deben de localizarse dentro del rango de 0 y 1. La red consta de tres capas: una de entrada, una oculta y una de salida. Las neuronas en la capa de entrada simplemente almacenan los valores introducidos. Las neuronas de la capa oculta y de la capa de salida llevan a cabo dos cálculos. Para explicar dichos cálculos considérese a la neurona j -ésima mostrada en la Figura 4.4 y supóngase que esta neurona se

FIGURA 4.4 J - ESIMA NEURONA



encuentra en la capa oculta. Las entradas a la neurona se componen de un vector N-dimensional x y de la señal enviada por la neurona de predisposición cuyo valor es 1. Cada una de las entradas tiene una función de peso w_{1j} asociada con ellas. El primer cálculo dentro de la neurona consiste en sumar las funciones de peso S_j de las entradas usando la siguiente expresión:

$$S_j = \sum_{i=1}^N w_{ij} x_i + w_{N+1j} \quad (4.1)$$

Posteriormente, la salida de la neurona O_j se calcula obteniendo la función sigma de S_j de la siguiente forma:

$$O_j = \sigma(S_j) \quad (4.2)$$

donde:

$$\sigma(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}} \quad (4.3)$$

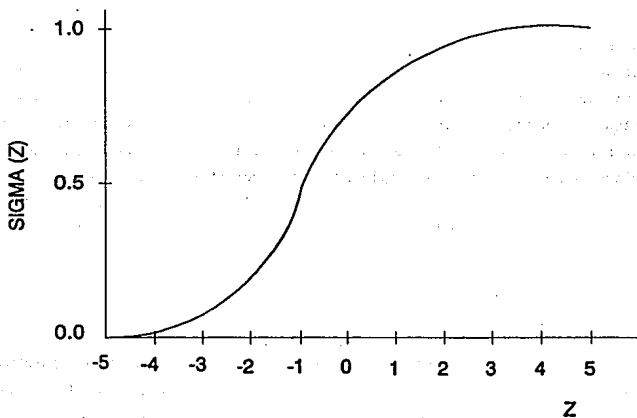
La función sigma se ilustra en la Figura 4.5. Una vez que se calculan las salidas de la capa oculta, se trasladan a la capa de salida. La capa de salida lleva a cabo los mismos cálculos que la capa oculta, esto es, emplea las ecuaciones (4.1), (4.2) y (4.3) excepto que el vector de entrada x es sustituido por el vector de salida de la capa oculta y las funciones de peso de la ecuación (4.1) son sustituidos por w_{jk} , por lo tanto, las ecuaciones de la capa de salida son:

$$S_k = \sum_{j=1}^N w_{jk} O_j + w_{N+1k} \quad (4.4)$$

$$O_k = \sigma(S_k) \quad (4.5)$$

Una red de propagación hacia atrás aprende por medio de variaciones en sus funciones de peso, asume que existen R pares $x^{(r)}, y^{(r)}$ de entrada-salida disponibles para el aprendizaje de la red y considera un criterio de error

FIGURA 4.5 FUNCION SIGMA



medido cuadrático E definido como:

$$E = \sum_{m=1}^R \sum_{k=1}^P (y_k^{(m)} - O_k^{(m)})^2 \quad (4.6)$$

Si fuera empleado un método de gradiente común para minimizar E con respecto a las funciones de peso w_{uv} , entonces $\partial E / \partial w_{uv}$ se podrá calcular y describirá una trayectoria descendente. Este método requiere de todos los pares de entrada-salida para calcular el gradiente. La propagación hacia atrás emplea la información proporcionada por el gradiente para cambiar las funciones de peso, sin embargo, el gradiente se calcula solamente con respecto a un par de entrada-salida a la vez. Dicho par se le da a la red y las funciones de peso se cambian empleando las siguientes expresiones:

$$w_{uv}^{(m)} = w_{uv}^{(m-1)} + \Delta w_{uv}^{(m)} \quad (4.7)$$

$$\Delta w_{uv}^{(m)} \propto - \frac{\partial E}{w_{uv}^{(m)}} \quad (4.8)$$

Inicialmente, las funciones de peso en la red se encuentran distribuidas al azar, y posteriormente, el primer par de entrada-salida ($m=1$) se le proporciona a la red. Puesto que la red está comenzando a aprender, las salidas O_k en general son completamente diferentes de los resultados esperados para y_k . La evaluación de la ecuación (4.8) muestra que la diferencia entre O_k y y_k se complica al ajustar las funciones de peso. Las versiones específicas de la ecuación (4.8) empleadas en cada uno de los ajustes de las funciones de peso son:

$$w_{jk}^{(m)} = \eta \sigma' (S_k) (y_k^{(m)} - O_k^{(m)}) O_j^{(m)} \quad (4.9)$$

$$w_{ij}^{(m)} = \eta \sigma' (S_j) \left[\sum_{k=1}^P [\sigma' (S_k) (y_k^{(m)} - O_k^{(m)}) w_{jk}^{(m-1)}] \right] x_i^{(m)} \quad (4.10)$$

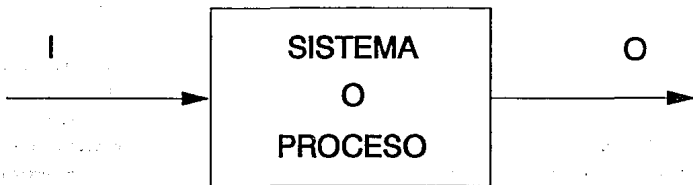
En primer lugar, se ajustan las funciones de peso entre la capa oculta y la capa de salida w_{jk} , posteriormente, se cambian las funciones de peso entre la entrada y las capas ocultas w_{ij} . Al ajustar w_{ij} son empleados los valores anteriores de w_{ij} , en otras palabras, $w_k^{(n-1)}$. Después de la representación del primer par de entrada-salida, se procede con el segundo par y así sucesivamente. Las funciones de peso se cambian en cada presentación. Los resultados serán mostrados más tarde para ilustrar cómo aprende una red de propagación hacia atrás.

Un estudio matemático más detallado con respecto a las capacidades de las redes neuronales multicapa es presentado por Cybenko en dos artículos, uno editado en 1988 y el otro en 1989. El primero muestra que las redes neuronales que poseen dos capas ocultas y cualquier función sigma no lineal continua preestablecida pueden aproximar cualquier función arbitraria continua. El segundo demuestra el hecho de que las regiones de decisión arbitraria pueden ser aproximadas por medio de redes neuronales continuas con solamente una capa interna y con cualquier función sigma no lineal continua. Estos resultados confirman la creencia de que una red común de propagación hacia atrás puede realmente aproximar cualquier función continua de R'' a R' .

4.5 METODOS DINAMICOS EMPLEADOS EN EL MODELADO DE CONTROL DE PROCESOS

El modelado de control de procesos (MBPC) es un área que ha recibido mucha atención en los últimos años. La razón de este interés es debido a que el MBPC ha sido utilizado para resolver importantes problemas de control de procesos. Generalmente, son empleados modelos dinámicos en el MBPC lineal. En esta sección será tratado brevemente el modelado y su uso en el control para explicar cómo puede ser usada la propagación hacia atrás en el modelado dinámico y el control de procesos. Como se muestra en la Figura 4.6 se tiene un sistema simple con una entrada y una salida (la extensión de los resultados a sistemas multivariables es equivalente a este sistema). Al desarrollar un modelo, se condiciona la entrada I , por ejemplo, usando una señal PRBS alrededor del valor en el régimen permanente. Los resultados obtenidos de la

FIGURA 4.6 SISTEMA CON UNA ENTRADA Y UNA SALIDA



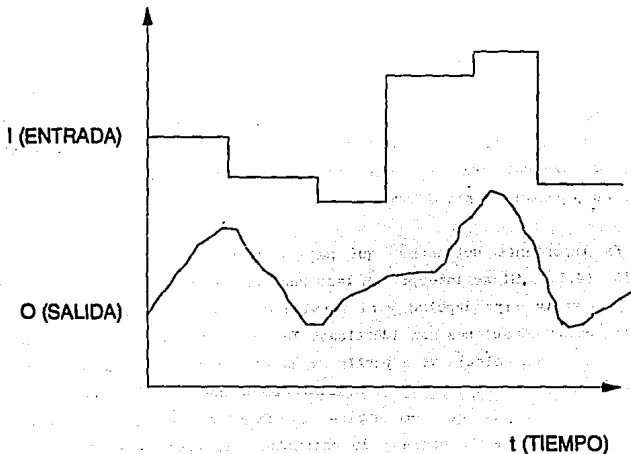
salida del sistema se ilustran en la Figura 4.7. Los valores de la entrada y la salida son registrados a tiempos discretos y empleados para desarrollar el modelo. La ecuación que proporciona la salida en el tamaño de paso $k+1$ para el modelo de respuesta tipo impulso es:

$$O_{k+1} = O_0 + \sum_{j=0}^k h_{k-j+1} I_j \quad (4.11)$$

donde las h_j 's son los coeficientes de la respuesta tipo impulso, I_j es la entrada al tiempo j y O_{k+1} es la salida al tiempo $k+1$. Los modelos de respuesta tipo paso también han sido empleados en la propagación hacia atrás, como lo muestran Cutler y Ramaker en su artículo publicado en 1980. Al emplear la ecuación (4.11) se pueden calcular las h_j 's por medio del ajuste del modelo con los datos actuales del sistema utilizando el criterio de los mínimos cuadrados. Generalmente se emplea un gran número de h_j 's, las cuales son ajustadas y posteriormente actualizadas.

Es importante detenerse aquí para comparar la ecuación (4.1) con la ecuación (4.11). Si se interpretan las funciones de peso como los coeficientes de la respuesta tipo impulso y el término de predisposición como la entrada inicial, estas ecuaciones son idénticas. Tanto las funciones de peso en la red como las h_j 's son calculadas a partir de un ajuste con mínimos cuadrados. Como se puede observar, el modelo es equivalente a una red de propagación hacia atrás de dos capas que no emplea la función sigma, sin embargo, es precisamente la función sigma y la estructura de tres capas la que da a la propagación hacia atrás la habilidad de modelar con exactitud sistemas no lineales. Puesto que los procesos químicos generalmente son sistemas no lineales, el empleo de la propagación hacia atrás para el modelado permite desarrollar modelos mucho más exactos. La comparación entre las ecuaciones (4.1) y (4.11) muestra como es posible emplear la propagación hacia atrás para el modelado dinámico. Las entradas a la red equivalen a las entradas de la planta a instantes discretos de tiempo.

**FIGURA 4.7 RESPUESTA DEL SISTEMA
A UNA ENTRADA PRBS**



tomándolo como constante en el futuro y agregándolo al lado derecho de la ecuación (4.12). Si las \hat{O}_1 's de la ecuación (4.12) se ajustan al set point O_b deseado, entonces se pueden obtener resultados a partir de las entradas actuales y futuras de la planta. Tal solución generalmente tiene que ser obtenida por medio de mínimos cuadrados debido a que hay muy pocos valores de I_1 en comparación con los valores de las salidas futuras.

En la implementación del MBPC, únicamente se emplea la entrada actual de la planta I_k . En el siguiente paso de iteración se repiten todos los cálculos. El procedimiento para el control total está contemplado en un algoritmo estructurado.

Al control adaptativo también se le puede considerar como una variante del MBPC, y, generalmente, son empleados los modelos ARMA. Los modelos tienen la forma:

$$O_{k+1} + \sum_{i=1}^n b_i O_{k-i+1} = \sum_{j=1}^n a_j I_{k-j+1} \quad (4.15)$$

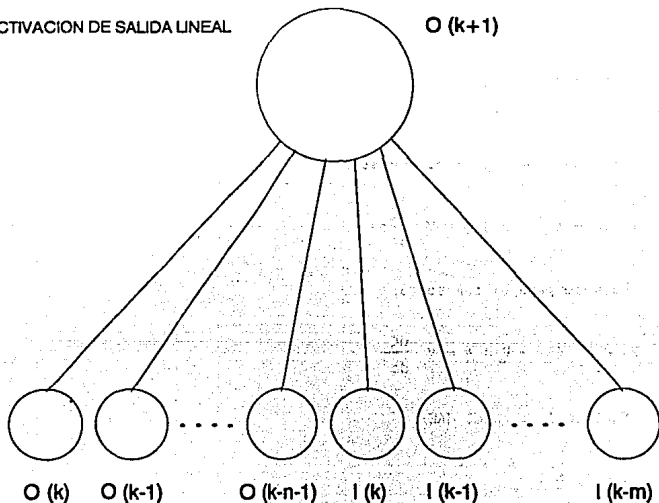
Generalmente, el número de parámetros en el modelo ARMA es significativamente pequeño en comparación con el número de h_1 's en la ecuación (4.11). Los términos a_j y b_i son estimados dentro de la red a partir de los datos de la planta. La ecuación (4.15) también es equivalente a una red neuronal de dos capas, sin nodo oculto y con funciones de activación lineal, la cual se ilustra en la Figura 4.8. Al usar una red de propagación hacia atrás con funciones sigma y tres capas, se podrá obtener mayor exactitud empleando la ecuación (4.15)².

4.6 MODELADO DINAMICO CON PROPAGACION HACIA ATRAS

En esta sección se asume que se encuentra disponible un archivo de datos históricos de entradas y salidas de un sistema. Para ilustrar la metodología que sigue la red neuronal será ejemplificado un reactor continuo de tanque agitado (CSTR). Después de describir el sistema, se presentará la metodología

**FIGURA 4.8 MODELO "ARMA" INCORPORADO
COMO UNA RED DE PROPAGACION
HACIA ATRAS DE DOS CAPAS**

ACTIVACION DE SALIDA LINEAL



empleada por la propagación hacia atrás⁸.

4.6.1 DESCRIPCIÓN DEL SISTEMA

Se ha estudiado la respuesta dinámica del pH en un reactor de tanque agitado, el cual se muestra en la Figura 4.9. El CSTR contiene dos corrientes de entrada, una de ellas alimenta hidróxido de sodio y la otra ácido acético. Puede ser obtenido un modelo dinámico para el pH en el tanque empleando el método desarrollado en 1972 por McAvoy y colaboradores. Al escribir los balances de masa del ion sodio Na^+ (ζ) y del acetato (HAC^+AC^-) (ξ) y suponiendo que las relaciones de equilibrio ácido-base y de electroneutralidad están unidas, se tiene:

Balance global para el acetato:

$$F_1 C_1 - (F_1 + F_2) \xi = V \frac{d\xi}{dt} \quad (4.16)$$

Balance para el ion sodio:

$$F_2 C_2 - (F_1 + F_2) \zeta = V \frac{d\zeta}{dt} \quad (4.17)$$

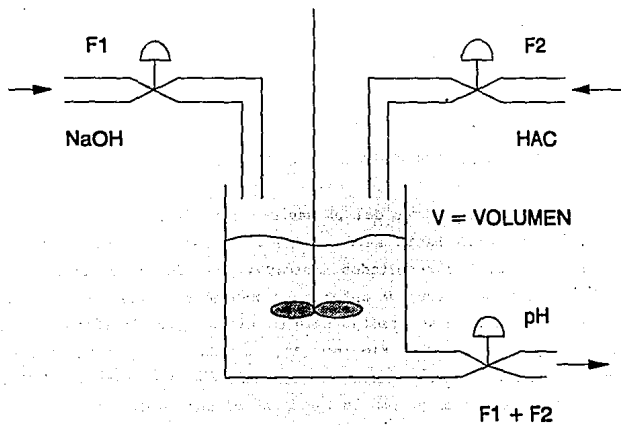
Equilibrio para el HAC:

$$\frac{[\text{AC}^+][\text{H}^+]}{[\text{HAC}]} = K_{\text{HAC}} \quad (4.18)$$

Electroneutralidad:

$$\zeta + [\text{H}^+] = [\text{OH}^-] + [\text{AC}^-] \quad (4.20)$$

**FIGURA 4.9 REACTOR CONTINUO
DE TANQUE AGITADO**



Los parámetros considerados para el CSTR se muestran en la Tabla 4.1. Se desarrolló un aprendizaje condicionando la corriente F_2 con una señal PRBS del 2% impuesta al valor a régimen permanente. Los valores de F_2 y del pH empleados para el aprendizaje de la red se muestran en la Figura 4.10. Como se puede observar, los valores del pH se graficaron dentro de 5 ordenes de magnitud. Las ecuaciones diferenciales lineales (4.16) y (4.17) son fundamentales para el modelo del pH. Las ecuaciones (4.18), (4.19) y (4.20) son ecuaciones algebraicas altamente no lineales, por lo tanto, el sistema presenta tanto características dinámicas lineales como de régimen permanente no lineal.

4.6.2 MODELADO DINAMICO CON PROPAGACION HACIA ATRAS (BDM)

Para modelar los valores del pH mostrados en la Figura 4.10 se utilizó una red de propagación hacia atrás, además de varias capas de entrada de diversas longitudes. Los resultados mostrados aquí fueron obtenidos con una red de 15 neuronas en la capa de entrada y 5 neuronas en las capas oculta y de salida. La salida del pH se predijo sólo en cinco pasos de iteración, usando un tamaño de paso Δt de 0.4 minutos. A pesar de que se simularon métodos similares al ARMA y al convencional, se encontró que precisamente ARMA fué el que dió mejores resultados y, por lo tanto, es el que se discutirá aquí.

La entrada a la red consistió de un movimiento de ventana de valores de F_2 y de pH como se muestra en la Figura 4.11. Se toma al centro de la ventana como tiempo actual t_0 . Los valores iniciales y actuales de pH y F_2 así como también los valores futuros de F_2 fueron alimentados a la red. La salida de la red es el valor del pH en el futuro. Es importante enfatizar que, puesto que el archivo de datos usado es histórico, los valores futuros (relativos al centro de la ventana) son conocidos y, por lo tanto, pueden ser empleados para el aprendizaje de la red. La sección siguiente sobre el modelo de control discute cómo puede ser empleado un optimizador para calcular los valores futuros de F_2 .

PARAMETROS USADOS EN LA SIMULACION	VALOR
Volumen del tanque	1000 lt
Flujo de ácido acético	81 lt/min
Flujo de hidróxido de sodio	515 lt/min
pH en el régimen permanente	7
Concentración del ácido acético	0.32 moles/lt
Concentración del hidróxido de sodio	0.05 moles/lt
Concentración inicial del ion acetato en el CSTR	0.0435 moles/lt
Concentración inicial del ion sodio en el CSTR	0.0432 moles/lt

Tabla 4.1 Parámetros empleados en la simulación del CSTR.

**FIGURA 4.10 RESPUESTA DEL FLUJO
DE NaOH Y DEL pH**

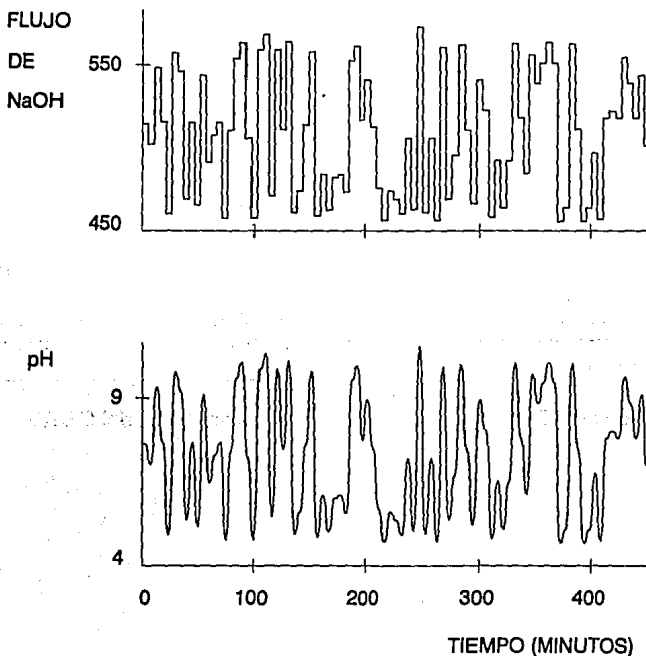
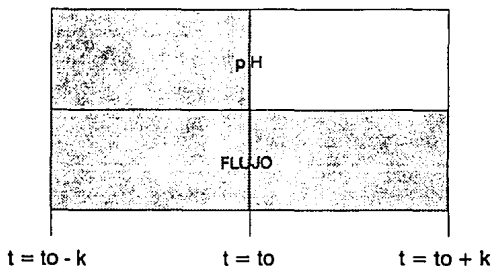


FIGURA 4.11 REPRESENTACION ESQUEMATICA DEL MOVIMIENTO DE VENTANA



MOVIMIENTO DE VENTANA



SALIDA DE LA RED



ENTRADA A LA RED

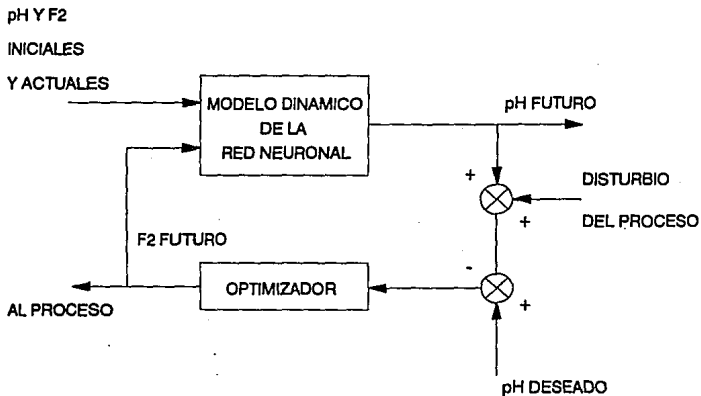
Al comienzo del proceso de aprendizaje, la ventana se localiza al inicio del archivo de base de datos. Se introducen a la red los primeros cinco valores de pH y los primeros diez valores de F_2 . Las salidas esperadas de la red son los valores del pH en $t = t_0 + 1, 2, 3, 4$ y $5 \Delta t$'s en el futuro. Después de la primera presentación de los datos, la ventana mueve a Δt hacia abajo del archivo de base de datos. Nuevamente se introducen a la red los cuatro valores iniciales y actuales del pH y F_2 , así como también los cinco valores futuros de F_2 . Este proceso continua hasta llegar al final del archivo y, posteriormente, se repite el proceso al inicio del archivo. Durante el aprendizaje, los factores de aprendizaje η en las ecuaciones (4.9) y (4.10) son bajos. Después de varios ciclos a través del archivo, la red converge debido al hecho de que las funciones de peso llevaron a cabo el ajuste de los datos proporcionados. La sección siguiente muestra como un modelo BDM puede utilizarse para el control de procesos².

4.7 MODELO PARA EL CONTROL CON PROPAGACION HACIA ATRAS (BDMC)

Una vez que el modelo ha sido aprendido, la red puede emplearse para el control de procesos muy fácilmente. La Figura 4.12 muestra el diagrama esquemático del empleo de esta red neuronal en el sistema. El método es esencialmente el mismo que el usado en la matriz dinámica de control excepto que el modelo no lineal de la red neuronal es utilizado en lugar del modelo lineal convencional. Puesto que la matriz dinámica de control ha sido discutida extensamente en la literatura, aquí solo se dará una breve descripción de ella²¹. Como lo muestra la Figura 4.12, se emplea un optimizador para calcular los valores futuros de F_2 . Las variables de optimización son $F_2(m)$ y $m=k$ hasta $k+m$. Después de M pasos de iteración, las F_2 's se toman constantes. Si el valor esperado de pH es pH_D , entonces las F_2 's pueden cambiarse para minimizar la sumatoria de las funciones de peso restando los valores de pH esperados menos los predichos de la siguiente manera:

$$\min_{F_2(m)} J = \sum_{n=1}^N [pH_D - pH(t_0 + nt)]^2 \quad (4.21)$$

FIGURA 4.12 DIAGRAMA ESQUEMATICO DEL BDMC



BDMC = MODELO PARA EL CONTROL CON PROPAGACION HACIA ATRAS

Generalmente, serán calculados varios valores futuros de F_2 pero únicamente el primero de ellos, $F_2(k)$, será implementado. Las restricciones en el tamaño de F_2 y las fluctuaciones altas y bajas de sus valores, así como los del pH podrán ser incorporadas al sistema. Este procedimiento constituye un problema de tipo estructurado. Puesto que los modelos BDM son no lineales, es más difícil resolver la optimización de la ecuación (4.21) que la optimización del modelo convencional o del modelo ARMA.

Un método alternativo para el uso de las redes neuronales en el control implica determinar el modelo del proceso inverso. Para ilustrar este método serán utilizados los datos de la Figura 4.10. Tomando como referencia la Figura 4.11 se pueden cambiar los valores futuros de pH (salidas) por los valores futuros de F_2 (entradas) y desarrollar un modelo inverso del sistema. La red podrá entonces predecir qué relaciones de flujo son necesarias para obtener el pH esperado. Se desarrolló este método empleando los datos de la Figura 4.10, con 15 entradas a la red y 5 neuronas en la capa oculta y en la de salida. Los resultados se muestran en la Figura 4.13. Como se puede notar, la red de propagación hacia atrás realiza una excelente asimilación del modelo inverso del sistema. Una vez que el modelo es aprendido, puede ser usado en un modelo de control interno como se muestra en la Figura 4.14.

La naturaleza del modelado con propagación hacia atrás es tal que le confiere una estructura adaptativa en la simulación de procesos, es decir, se pueden tener diferentes esquemas. Por ejemplo, se pueden emplear dos redes, una para el control y la otra para el aprendizaje del proceso. Ambas redes trabajarían con la misma base de datos históricos. La red para el control se detendrá mientras la segunda red continua asimilando datos nuevos disponibles. Tal aprendizaje tomaría lugar solo cuando hubiera suficiente información de entradas y salidas del proceso. Cuando hubiera una diferencia significativa entre las dos redes, la red de aprendizaje sustituiría a la de control llevando a cabo la simulación del proceso. Al desaparecer esta diferencia, la red de control comenzaría nuevamente a trabajar².

FIGURA 4.13 MODELO INVERSO DEL PROCESO

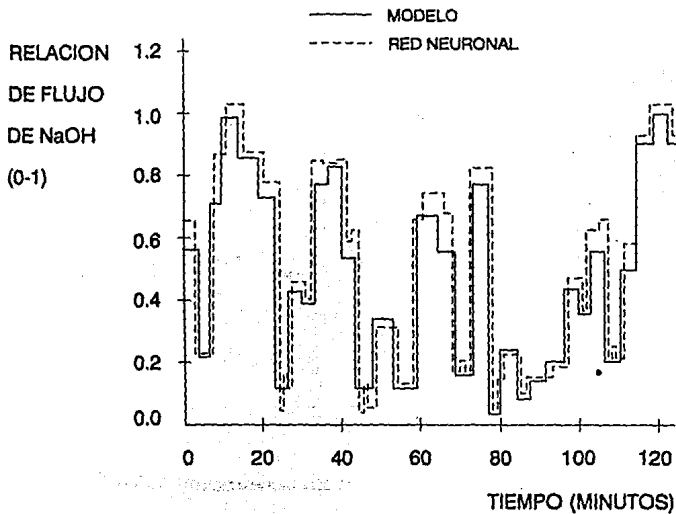
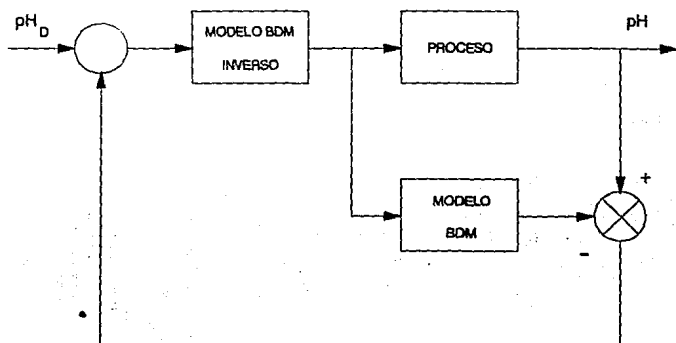


FIGURA 4.14 ESTRUCTURA DE CONTROL INTERNO QUE EMPLEA MODELOS INVERSO Y NORMAL DE REDES NEURONALES



BDM = MODELADO DINAMICO CON PROPAGACION HACIA ATRAS

En el siguiente capítulo se llevará a cabo la simulación dinámica y control de un sistema de unidades distribuidas con recirculación empleando un simulador convencional denominado DYNMIM (Programa de Simulación Dinámica Interactivo), así como también un programa de redes neuronales de propagación hacia atrás, con el objeto de demostrar que es factible realizar simulaciones confiables por medio de otras alternativas.

CAPITULO V

EJEMPLO DE APLICACION

5.1 INTRODUCCION

El diseño de procesos químicos seguros y confiables es uno de los grandes desafíos para los Ingenieros Químicos. Con el avance de la tecnología computacional, sin embargo, el análisis y la simulación se vuelven cada día más prácticos y útiles en el desarrollo del diseño. Consecuentemente, han aparecido un número considerable de simuladores de procesos en régimen permanente. Anteriormente, estos programas eran utilizados para el diseño general de plantas químicas, sin embargo, en la actualidad, se ha puesto mayor énfasis en lo concerniente a la optimización de energía, a la obtención de productos de excelente calidad y a la seguridad, entre otros, para el diseño de plantas capaces de adaptarse a perturbaciones externas, con el objeto de mantener un curso óptimo de operación. Debido a la complejidad que presenta el régimen dinámico en muchas operaciones, generalmente es difícil diseñar procesos que se adapten en su totalidad a todas y cada una de las perturbaciones externas. Lo anterior permite establecer que un simulador de procesos dinámico debe de ser desarrollado con un propósito específico, no así general.

Ahora bien, en los últimos años se ha desarrollado una alternativa para llevar a cabo simulaciones dinámicas y control de procesos químicos conocida como redes neuronales, las cuales no requieren del planteamiento de las ecuaciones que describen los modelos como se plantea en la simulación convencional, sino únicamente de alimentar bases de datos de las variables o parámetros que intervienen en un proceso determinado para su asimilación, aprendizaje y posterior interpolación cuando se desee conocer el comportamiento en un punto específico y/o extrapolación para condiciones de operación diferentes.

5.2 SIMULACION DINAMICA Y CONTROL POR MEDIO DEL DYNYSIM

El simulador dinámico empleado aquí fué desarrollado en la Universidad de Lehigh, E.U.A. en 1985 por parte del Ing. Wen-Chien Liang para obtener el grado de Doctor en Filosofía en Ingeniería Química, el cual es conocido con el nombre de "Programa de Simulación Dinámica Interactivo" o por sus siglas en inglés como DYNYSIM.

La simulación dinámica en tiempo real llevada a cabo se refiere a un proceso de unidades distribuidas, el cual consta de un mezclador, un divisor, un reactor de flujo tapón, un intercambiador de calor de doble tubería y un controlador proporcional-integral (PI), los cuales son descritos detalladamente en la siguiente sección.

El simulador, programado en FORTRAN IV, es de propósito general, esto es, puede simular diversos equipos que integran a un proceso, su estructura es modular semisequencial, en donde cada módulo o equipo es modelado por una subrutina individual, además de que cada subrutina consta de una serie de ecuaciones algebraicas y diferenciales.

El programa genera el sistema de ecuaciones de cada módulo en el orden proporcionado por el usuario, por lo que una vez establecidas las condiciones iniciales, el sistema es resuelto simultáneamente.

5.3 DESCRIPCION DEL PROCESO QUIMICO EJEMPLIFICADO

En esta sección se establece una descripción de los módulos (equipos) incluidos en el programa DYNYSIM utilizados en el ejemplo de aplicación. Cada módulo consta de 6 partes con el objetivo de acumular toda la información necesaria para obtener el máximo aprovechamiento del simulador dinámico.

1) UNIDAD ID.

A cada equipo se le asigna un entero distinto.

2) CORRIENTES

Incluye el número de corrientes de alimentación y salida asociadas con el equipo.

3) PARAMETROS

Los parámetros de la unidad individual son listados de tal forma que aparezcan en el menú de "PARAMETROS DE UNIDAD". Aquellos que se encuentran entre paréntesis con sus nombres de variables correspondientes serán utilizados en la sección denominada "DESCRIPCION DEL MODELO".

4) EDO's

Incluye el número de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden generadas por el módulo y una lista de las variables dependientes del módulo correspondiente.

5) GRAFICOS

Describe la representación gráfica de los resultados de la simulación generados automáticamente si así se requiere. Cada gráfica contiene sólo una variable. Se puede especificar el tiempo inicial, final e intervalo de salida.

6) DESCRIPCION DEL MODELO

Esta sección incluye la descripción del módulo y las ecuaciones matemáticas que lo describen.

5.3.1 MEZCLADOR

UNIDAD ID: 1.

CORRIENTES: 2 corrientes de alimentación y 1 corriente de salida.

PARAMETROS: 0.

EDO's: 0.

GRAFICOS: Ninguno.

DESCRIPCION DEL MODELO:

Este módulo simula un mezclador adiabático. Los flujos por especie química son incorporados y la temperatura de salida así como las concentraciones son recalculadas. Las ecuaciones que describen el módulo son:

$$F_o = F_{f1} + F \quad (5.1)$$

$$C_o = (F_{f1} C_{f1} + F_{f2} C_{f2}) / F_o \quad (5.2)$$

$$T_o = (F_{f1} T_{f1} + F_{f2} T_{f2}) / F_o \quad (5.3)$$

5.3.2 DIVISOR

UNIDAD ID.: 2.

CORRIENTES: 1 corriente de alimentación y 2 corrientes de salida.

PARAMETROS:

1) Fracción del divisor (a).

EDO's: 0.

GRAFICOS: Ninguno.

DESCRIPCION DEL MODELO:

El módulo simula un divisor isotérmico, el cual separa una corriente en dos al especificarse la fracción del divisor. La temperatura y las concentraciones son idénticas en las tres corrientes. La fracción del divisor es definida como la razón de flujo de la primera corriente de salida entre el flujo de la corriente de alimentación. Las ecuaciones involucradas en este módulo son:

$$F_{o1} = a F_f \quad (5.4)$$

$$F_{o2} = (1 - a) F_f \quad (5.5)$$

$$C_{o1} = C_{o2} = C_f \quad (\text{para todos los componentes}) \quad (5.6)$$

$$T_{o1} = T_{o2} = T_f \quad (5.7)$$

5.3.3 REACTOR DE FLUJO TAPON

UNIDAD ID.: 4.

CORRIENTES: 1 corriente de alimentación y 1 corriente de salida.

PARAMETROS:

- 1) Longitud del reactor (L).
- 2) Número de puntos empleados (N).
- 3) Área de sección transversal (A).
- 4) Energía de activación irreversible (E_1).
- 5) Energía de activación reversible (E_2).
- 6) Factor de frecuencia irreversible (k_1).
- 7) Factor de frecuencia reversible (k_2).
- 8) Calor de reacción (ΔH).
- 9) Flujo de calor (Q).
- 10) Coeficientes estequiométricos (a_1, a_2, \dots, a_n).
- 11) Constantes de reacción (r_1, r_2, \dots, r_n).

EDO's: $(1 + NC) N$.

GRAFICOS:

Los perfiles de las variables de estado en varios tiempos de integración son graficados con respecto a la distancia dentro del reactor.

DESCRIPCION DEL MODELO:

El módulo simula un reactor de flujo tapón a una fase. La temperatura y la composición son funciones del tiempo y la distancia en el tubo. Las pérdidas por calor son despreciables. Puede ser utilizado un controlador proporcional-integral (PI) para controlar la temperatura del reactor por variación del flujo de calor (Q). La reacción que se lleva a cabo en el módulo puede ser expresada como:



Es necesario un coeficiente estequiométrico para cada componente. Los coeficientes se especifican en el orden del número asignado a cada componente. A los productos se les asignará valores positivos y a los reactivos valores negativos. Los componentes que no participen en la reacción se les asignará el valor de cero (0). La razón de reacción puede expresarse como:

$$\text{RAZON} = K_1 \prod_{r=1}^R C_r^{e_r} - K_2 \prod_{p=1}^P C_p^{e_p} \quad (5.9)$$

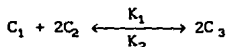
donde:

$$K_1 = k_1 \text{ EXP } (-E_1 / RT) \quad (5.10)$$

y

$$K_2 = k_2 \text{ EXP } (-E_2 / RT) \quad (5.11)$$

e_r y e_p son las constantes de reacción para el componente r y p respectivamente. Es necesaria una constante de reacción para cada componente. Los componentes que no aparezcan en la expresión de razón de reacción se les asignará el valor de cero (0). La razón de reacción está basada en el primer componente. Para otros componentes, las razones de reacción se ajustan de acuerdo a sus coeficientes estequiométricos. Por ejemplo, para la reacción:



la razón de reacción es expresada por:

$$\text{RAZON} = K_1 C_1 C_2^{1.5} - K_2 C_3$$

Los coeficientes estequiométricos se especifican como -1, -2 y 2 para el componente 1, 2 y 3, respectivamente. Las constantes de reacción son 1, 1.5 y 1.

Las ecuaciones que simulan el módulo son:

Balance de masa para el componente j:

$$A \frac{\partial C_j}{\partial t} = F \frac{\partial C_j}{\partial z} - A \text{ RAZON} \frac{a_j}{a_i} \quad (5.12)$$

Balance de energía:

$$A C_p \frac{\partial T}{\partial t} = F C_p \frac{\partial T}{\partial z} - \Delta H A \text{ RAZON} - \frac{Q}{N} \quad (5.13)$$

Las condiciones iniciales son especificadas y las condiciones a la frontera son:

a $z = 0$, $T = T_r$ y $C = C_r$ para todos los componentes.

El módulo también actualiza los parámetros de la corriente de salida:

a $z = L$, $T_o = T$ y $C_o = C$ para todos los componentes.

La relación de flujo es constante. La transferencia de calor se distribuye a lo largo del reactor. Las derivadas espaciales son aproximadas por el método numérico de líneas. El primer punto utilizado es el valor de la corriente de entrada.

5.3.4 INTERCAMBIADOR DE CALOR

UNIDAD ID.: 6.

CORRIENTES: 1 corriente de alimentación y 1 corriente de salida.

PARAMETROS:

- 1) Longitud de la unidad (ZL).
- 2) Número de puntos empleados (N).
- 3) Temperatura del fluido anular de entrada (TA0).
- 4) Relación de flujo anular (FA).
- 5) Area de sección transversal de tubería (AP).
- 6) Area de sección transversal del ánulo (AA).
- 7) Coeficientes globales de transferencia de calor (U·D).
- 8) Capacidad calorífica del fluido anular (CPA).

EDO's: 2N.

GRAFICOS:

El módulo genera gráficas que muestran los perfiles de temperatura del tubo y la coraza a un intervalo de tiempo específico. Ambos perfiles son graficados en la misma gráfica.

DESCRIPCION DEL MODULO:

El módulo simula un intercambiador de calor de doble tubería. El fluido de proceso se conduce a través de la tubería, mientras que el fluido de calentamiento o enfriamiento, cuya especificación es parte de los parámetros de la unidad, pasa a través de la coraza por su parte anular. La relación de flujo y las concentraciones se mantienen constantes.

Las ecuaciones diferenciales parciales que describen la dinámica del intercambiador de calor son:

$$\frac{\partial TP}{\partial t} = \frac{FP}{AP} \frac{\partial TP}{\partial z} - \frac{UD\pi}{C_p AP} (TP - TA) \quad (5.14)$$

$$\frac{\partial TA}{\partial t} = \frac{FA}{AA} \frac{\partial TA}{\partial z} - \frac{UD\pi}{C_p AA} (TP - TA) \quad (5.15)$$

Condiciones a la frontera:

$$TP = T_f \text{ a } z = 0.$$

$$TA = TAO \text{ a } z = L.$$

donde:

TA = Temperatura del fluido anular.

TP = Temperatura del fluido de proceso.

5.3.5 CONTROLADOR PROPORCIONAL-INTEGRAL (PI)

UNIDAD ID.: 8.

CORRIENTES: 0 corrientes de alimentación y 0 corrientes de salida.

PARAMETROS:

- 1) Número de unidad a ser controlada (NU).
- 2) Número de corriente a ser monitoreada (NS).
- 3) Punto de ajuste de temperatura (T_s).
- 4) Ganancia del controlador (K).
- 5) Tiempo integral (τ).
- 6) Factor de servicios de calentamiento máximo (M).

EDO's: 1.

GRAFICOS: Ninguno.

DESCRIPCION DEL MODELO:

El módulo simula un controlador proporcional-integral (PI), el cual es empleado para controlar la temperatura del reactor de flujo tapón al variar el flujo de calor al reactor.

Las ecuaciones que describen el módulo son:

$$e = T_s - T \quad (5.16)$$

$$Q = Q_s \left[1 - K \left(e - \frac{1}{\tau} \int e \, dt \right) \right] \quad (5.17)$$

Donde Q_s es el flujo de calor inicial, Q es el flujo de calor calculado, T es la temperatura de la corriente monitoreada.

$$x = \int e \, dt \quad (5.18)$$

y:

$$\frac{dx}{dt} = e \quad (5.19)$$

x es la variable dependiente del módulo y las ecuaciones del modelo son ahora:

$$\frac{dx}{dt} = e = T_s - T \quad (5.20)$$

$$Q = Q_s \left[1 - K \left(e - \frac{x}{\tau} \right) \right] \quad (5.21)$$

$$Q = Q_s M \text{ si } Q > Q_s M \quad (5.22)$$

$Q_s M$ es el límite superior del flujo de calor al reactor. El límite inferior por omisión es cero (0).

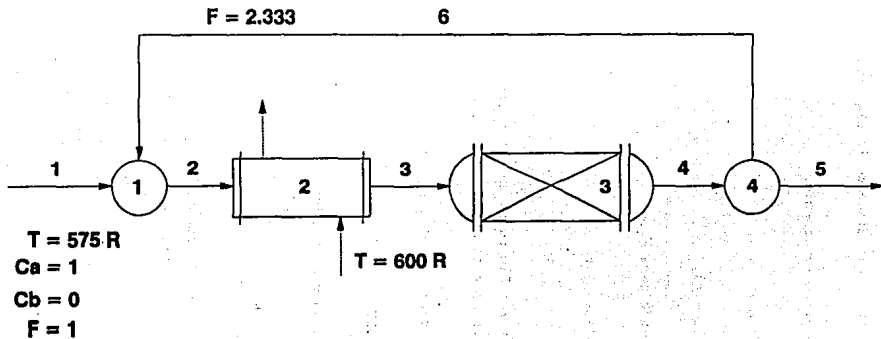
5.4 SIMULACION DINAMICA Y CONTROL DE UNIDADES DISTRIBUIDAS

El siguiente ejemplo es empleado para demostrar:

- 1) Unidades distribuidas.
- 2) Recirculación.
- 3) Opciones gráficas para unidades distribuidas.
- 4) Información de entrada y salida por archivo.

El diagrama de flujo de proceso se muestra en la Figura 5.1. Una porción de la corriente de salida del reactor de flujo tapón es recirculada al propio reactor por medio de un intercambiador de calor de doble tubería. La corriente

FIGURA 5.1 DIAGRAMA DE FLUJO DEL EJEMPLO DE APLICACION (UNIDADES DISTRIBUIDAS)



de recirculación número 6 debe de ser inicializada. El flujo de la corriente de recirculación es calculada de la siguiente forma:

En el régimen permanente:

$$F_2 = F_1 + F_6 \quad (5.23)$$

$$F_6 = F_2 (1 - r) \quad (5.24)$$

Resolviendo para F_6 :

$$F_6 = F_1 (1 - r) r \quad (5.25)$$

donde:

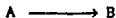
F_1 , F_2 y F_6 : Flujos de las corrientes 1, 2 y 6, respectivamente.

r : Factor de separación del divisor.

En este caso, $r = 0.3$ y $F_1 = 1.0$, por lo tanto:

$$F_6 = 2.333$$

La reacción que se lleva a cabo es una reacción irreversible del tipo:



La información requerida para la inicialización del ejemplo de aplicación está contenida en la Tabla 5.1, la cual se divide en 7 secciones que son:

SECCION 1. INFORMACION GENERAL

Aquí se especifica el título o nombre del proceso a ser simulado y el número de equipos principales.

SECCION 2. PARAMETROS DE EQUIPO

Se especifica el valor de las variables requeridas de cada equipo en particular como lo son las dimensiones, constantes propias del equipo, temperatura del fluido de entrada, coeficientes estequiométricos etc.

SECCION 3. CONDICIONES INICIALES

Para este ejemplo se proporcionan los valores iniciales de temperatura del fluido en el tubo y en la coraza para el intercambiador de calor y la temperatura y composiciones para el reactor de flujo tapón.

SECCION 4. PARAMETROS DE LAS CORRIENTES

Información general sobre las corrientes principales del proceso como lo es su temperatura y composición.

SECCION 5. PARAMETROS DE INTEGRACION

Aquí se proporciona información referente al tiempo inicial y final de simulación, así como también su incremento y la tolerancia mínima permitida para la finalización de la integración.

SECCION 6. OPCIONES DE IMPRESION

Muestra la información de salida de la simulación, ya sea por pantalla, archivo o ambos, de los resultados obtenidos del equipo principal seleccionado previamente.

SECCION 7. OPCIONES GRAFICAS

En esta sección se especifican las variables a ser graficadas, en los tiempos intermedios que se requieran, de cada uno de los equipos principales¹².

INTERACTIVE DYNAMIC SIMULATION PROGRAM (DYNSIM)

PROBLEMA O NOMBRE DE ARCHIVO: MUESTRA

ARCHIVO DE INFORMACION EQUIPO-CORRIENTE: NINGUNO

ORDEN DE UNIDAD	UNIDAD ID.	UNIDAD NUMERO	CORRIENTES DE ALIMENTACION	CORRIENTES DE SALIDA
1	1	1	1 6	2 *
2	6	2	2 *	3 *
3	4	3	3 *	4 *
4	2	4	4 *	5 6

SECCION 1. INFORMACION GENERAL

TITULO: EJEMPLO

NUMERO DE COMPONENTES:

2

CAPACIDAD CALORIFICA:

60.000 BTU/cu. ft/°R

CONSTANTE DEL GAS IDEAL:

1.987 BTU/lbmol°R

Tabla 5.1 Parámetros de inicialización de DYNSIM.

SECCION 2. PARAMETROS DE EQUIPO

UNIDAD NUMERO: 2	
EQUIPO: INTERCAMBIADOR DE CALOR	
LONGITUD DEL INTERCAMBIADOR:	10.000 ft
NUMERO DE PUNTOS EMPLEADOS:	11
TEMPERATURA DEL FLUIDO DE ENTRADA:	600.000 °R
RELACION DE FLUJO VOLUMETRICO:	1.000
AREA DE SECCION TRANSVERSAL DE TUBERIA:	0.100 sq. ft
AREA DE SECCION TRANSVERSAL ANULAR:	0.100 sq. ft
COEFICIENTE GLOBAL DE TRANSFERENCIA DE CALOR:	3.000 BTU/ft hr °R
CAPACIDAD CALORIFICA DEL FLUIDO ANULAR:	50.000 BTU/cu. ft/°R

UNIDAD NUMERO: 3	
EQUIPO: REACTOR DE FLUJO TAPON	
LONGITUD DE LA UNIDAD:	20.000 ft
NUMERO DE PUNTOS EMPLEADOS:	11
AREA DE SECCION TRANSVERSAL:	5.000 sq. ft
ENERGIA DE ACTIVACION (IRREVERSIBLE):	35,000 BTU/lbmol
ENERGIA DE ACTIVACION (REVERSIBLE):	0 BTU/lbmol
FACTOR DE FRECUENCIA (IRREVERSIBLE):	1 E+13 1/min
FACTOR DE FRECUENCIA (REVERSIBLE):	0.00 1/min
CALOR DE REACCION:	10,000 BTU/lbmol de A
SERVICIOS DE CALENTAMIENTO:	0 BTU/hr
COEFICIENTES ESTEQUIOMETRICOS:	-1 1
CONSTANTES DE REACCION:	1 0

UNIDAD NUMERO: 4	
EQUIPO: DIVISOR	
RELACION DEL DIVISOR:	0.300

Tabla 5.1 Parámetros de inicialización de DYNMIM (continuación).

SECCION 3. CONDICIONES INICIALES

UNIDAD NUMERO: 2

TEMPERATURA DEL FLUIDO
EN EL TUBO (°R)

TEMPERATURA DEL FLUIDO
EN LA CORAZA (°R)

575.00	600.00
575.00	600.00
575.00	600.00
575.00	600.00
575.00	600.00
575.00	600.00
575.00	600.00
575.00	600.00
575.00	600.00
575.00	600.00
575.00	600.00

UNIDAD NUMERO: 3

TEMPERATURA
(°R)

COMPONENTE 1
(x)

COMPONENTE 2
(x)

575.00	1.0000	0.0000
575.00	1.0000	0.0000
575.00	1.0000	0.0000
575.00	1.0000	0.0000
575.00	1.0000	0.0000
575.00	1.0000	0.0000
575.00	1.0000	0.0000
575.00	1.0000	0.0000
575.00	1.0000	0.0000
575.00	1.0000	0.0000
575.00	1.0000	0.0000

Tabla 5.1 Parámetros de inicialización de DYNMIM (continuación).

SECCION 4. PARAMETROS DE CORRIENTES

NUMERO	RELACION DE FLUJO	TEMPERATURA (°R)	COMPONENTE 1 (x)	COMPONENTE 2 (x)
1	1.000	575.00	1.0000	0.0000
6	2.333	575.00	1.0000	0.0000

SECCION 5. PARAMETROS DE INTEGRACION

TIEMPO INICIAL:	0.000 hr
TIEMPO FINAL:	10.000 hr
INCREMENTO DE TIEMPO:	0.500 hr
TOLERANCIA ABSOLUTA:	1 E-04
TOLERANCIA RELATIVA:	1 E-03
SISTEMA: 1) RIGIDO, 2) NO RIGIDO:	2

SECCION 6. OPCIONES DE IMPRESION

TIPO DE SALIDA (1=PANTALLA, 2=ARCHIVO, 3=AMBOS):	2
RE-ESCRIBIR ARCHIVO (0=NO, 1=SI):	1
NOMBRE DEL ARCHIVO DE SALIDA:	DATOS
NOMBRE DEL ARCHIVO DE ENTRADA:	DATOSXX
NUMERO DE UNIDADES MOSTRADAS:	2
UNIDAD(ES) NUMERO:	2 3
NUMERO DE CORRIENTES MOSTRADAS:	1
CORRIENTE(S) NUMERO:	5

Tabla 5.1 Parámetros de inicialización de DYNMIM (continuación).

SECCION 7. OPCIONES GRAFICAS

RANGO DE TIEMPO DEL BANCO DE DATOS:		
TIEMPO INICIAL:		0.000 hr
TIEMPO FINAL:		10.000 hr
INCREMENTO DE TIEMPO:		0.500 hr
RE-ESCRIBIR ARCHIVO(S) DE GRAFICA(S) (0=NO, 1=SI):		1
NUMERO DE UNIDADES A SER GRAFICADAS:		2
UNIDAD NUMERO: 2		
VARIABLE(S) A SER GRAFICADA(S) EN EL INTERCAMBIADOR DE CALOR		
1: TEMPERATURA EN EL TUBO		
2: TEMPERATURA EN LA CORAZA		
ELECCION(ES):		1 2
TIEMPOS A SER GRAFICADOS (hr):		
0.00	0.50	1.00 1.50 2.00 5.00 10.00
UNIDAD NUMERO: 3		
VARIABLE(S) A SER GRAFICADA(S) EN EL REACTOR DE FLUJO TAPON		
1: TEMPERATURA		
2: CONCENTRACION		
ELECCION(ES):		1 2
TIEMPOS A SER GRAFICADOS (hr):		
0.00	0.50	1.00 1.50 2.00 5.00 10.00

Tabla 5.1 Parámetros de inicialización de DYN SIM (continuación).

En la Tabla 5.2 se presentan los resultados obtenidos en la simulación dinámica del proceso de unidades distribuidas comenzando con información referente a los parámetros de integración como lo es el título de la simulación, tiempos e intervalo de integración, número de ecuaciones diferenciales de primer orden empleadas, algoritmo de integración y tolerancia para finalizar con los valores de los perfiles de temperatura del fluido en el tubo y en la coraza para el intercambiador de calor y los perfiles de temperatura y composición para el reactor de flujo tapón en intervalos de tiempo de 0.00, 0.50, 1.00, 1.50, 2.00, 5.00 y 10.00 horas de simulación.

PARAMETROS DE INTEGRACION

TITULO:	EJEMPLO
PROBLEMA O NOMBRE DE ARCHIVO:	MUESTRA
TIEMPO INICIAL:	0.0000 hr
TIEMPO FINAL:	10.000 hr
INTERVALO DE TIEMPO:	0.5000 hr
NUMERO DE ECUACIONES DE PRIMER ORDEN:	55
ALGORITMO DE INTEGRACION:	NO RIGIDO
TOLENCIA ABSOLUTA:	1 E-4
TOLENCIA RELATIVA:	1 E-3

Tabla 5.2 Resultados obtenidos de DYNMIM.

TIEMPO = 0.000 hr

INTERCAMBIADOR DE CALOR, UNIDAD NUMERO 2

DISTANCIA (ft)	TEMPERATURA DEL FLUIDO EN EL TUBO (°R)	TEMPERATURA DEL FLUIDO EN LA CORAZA (°R)
0	575.00	600.00
1	575.00	600.00
2	575.00	600.00
3	575.00	600.00
4	575.00	600.00
5	575.00	600.00
6	575.00	600.00
7	575.00	600.00
8	575.00	600.00
9	575.00	600.00
10	575.00	600.00

REACTOR, UNIDAD NUMERO 3

DISTANCIA (ft)	TEMPERATURA (°R)	COMPONENTE (X1)	COMPONENTE (X2)
0	575.00	1.0000	0.0000
2	575.00	1.0000	0.0000
4	575.00	1.0000	0.0000
6	575.00	1.0000	0.0000
8	575.00	1.0000	0.0000
10	575.00	1.0000	0.0000
12	575.00	1.0000	0.0000
14	575.00	1.0000	0.0000
16	575.00	1.0000	0.0000
18	575.00	1.0000	0.0000
20	575.00	1.0000	0.0000

CORRIENTE NO.	RELACION DE FLUJO	TEMPERATURA (°R)	COMPONENTE NUM. 1	COMPONENTE NUM. 2
5	1.0000	575.00	1.0000	0.0000

Tabla 5.2 Resultados obtenidos de DYN SIM (continuación).

T I E M P O = 0.500 hr

INTERCAMBIADOR DE CALOR, UNIDAD NUMERO 2

DISTANCIA (ft)	TEMPERATURA DEL FLUIDO EN EL TUBO (°R)	TEMPERATURA DEL FLUIDO EN LA CORAZA (°R)
0	560.41	591.09
1	561.68	591.40
2	562.58	591.66
3	563.62	591.86
4	564.77	592.12
5	565.77	592.66
6	566.88	593.68
7	568.03	595.13
8	569.18	596.73
9	570.42	598.32
10	571.31	600.00

REACTOR, UNIDAD NUMERO 3

DISTANCIA (ft)	TEMPERATURA (°R)	COMPONENTE (X1)	COMPONENTE (X2)
0	571.31	0.91248	0.08752
2	554.83	0.87633	0.12367
4	554.26	0.87626	0.12374
6	554.49	0.87634	0.12366
8	554.40	0.87629	0.12371
10	554.38	0.87630	0.12370
12	554.38	0.87630	0.12370
14	554.38	0.87630	0.12370
16	554.38	0.87630	0.12370
18	554.38	0.87630	0.12370
20	554.38	0.87630	0.12370

CORRIENTE NO.	RELACION DE FLUJO	TEMPERATURA (°R)	COMPONENTE NUM. 1	COMPONENTE NUM. 2
5	1.0000	554.38	0.87630	0.12370

Tabla 5.2 Resultados obtenidos de DYN SIM (continuación).

TIEMPO = 1.000 hr

INTERCAMBIADOR DE CALOR, UNIDAD NUMERO 2

DISTANCIA (ft)	TEMPERATURA DEL FLUIDO EN EL TUBO (°R)	TEMPERATURA DEL FLUIDO EN LA CORAZA (°R)
0	554.49	583.25
1	555.30	584.23
2	555.97	585.44
3	556.95	586.78
4	557.90	588.20
5	558.32	589.72
6	559.40	591.41
7	560.27	593.30
8	561.21	595.39
9	562.11	597.62
10	563.46	600.00

REACTOR, UNIDAD NUMERO 3

DISTANCIA (ft)	TEMPERATURA (°R)	COMPONENTE (X1)	COMPONENTE (X2)
0	563.46	0.87697	0.12303
2	546.74	0.82455	0.17545
4	545.57	0.82450	0.17550
6	545.93	0.82492	0.17508
8	545.83	0.82462	0.17538
10	545.77	0.82467	0.17533
12	545.78	0.82469	0.17531
14	545.78	0.82468	0.17532
16	545.78	0.82468	0.17532
18	545.78	0.82468	0.17532
20	545.78	0.82468	0.17532

CORRIENTE NO.	RELACION DE FLUJO	TEMPERATURA (°R)	COMPONENTE NUM. 1	COMPONENTE NUM. 2
5	1.0000	545.78	0.82468	0.17532

Tabla 5.2 Resultados obtenidos de DYN SIM (continuación).

TIEMPO = 1.500 hr

INTERCAMBIADOR DE CALOR, UNIDAD NUMERO 2

DISTANCIA (ft)	TEMPERATURA DEL FLUIDO EN EL TUBO (°R)	TEMPERATURA DEL FLUIDO EN LA CORAZA (°R)
0	550.69	579.60
1	551.32	581.04
2	552.16	582.60
3	553.12	584.30
4	553.73	586.12
5	554.14	588.07
6	555.41	590.15
7	556.38	592.37
8	556.02	594.76
9	558.23	597.30
10	559.38	600.00

REACTOR, UNIDAD NUMERO 3

DISTANCIA (ft)	TEMPERATURA (°R)	COMPONENTE (X1)	COMPONENTE (X2)
0	559.38	0.85414	0.14586
2	541.86	0.79188	0.20812
4	540.07	0.79139	0.20861
6	540.48	0.79254	0.20746
8	540.42	0.79190	0.20810
10	540.33	0.79191	0.20809
12	540.32	0.79197	0.20803
14	540.33	0.79196	0.20804
16	540.33	0.79196	0.20804
18	540.33	0.79196	0.20804
20	540.33	0.79196	0.20804

CORRIENTE NO.	RELACION DE FLUJO	TEMPERATURA (°R)	COMPONENTE NUM. 1	COMPONENTE NUM. 2
5	1.0000	540.33	0.79196	0.20804

Tabla 5.2 Resultados obtenidos de DYN SIM (continuación).

TIEMPO = 2.000 hr

INTERCAMBIADOR DE CALOR, UNIDAD NUMERO 2

DISTANCIA (ft)	TEMPERATURA DEL FLUIDO EN EL TUBO (°R)	TEMPERATURA DEL FLUIDO EN LA CORAZA (°R)
0	547.78	577.58
1	548.45	579.12
2	549.26	580.93
3	549.93	582.95
4	550.60	584.89
5	551.40	587.11
6	552.34	589.26
7	553.01	591.74
8	553.82	594.15
9	554.49	597.17
10	555.50	600.00

REACTOR, UNIDAD NUMERO 3

DISTANCIA (ft)	TEMPERATURA (°R)	COMPONENTE (X1)	COMPONENTE (X2)
0	555.93	0.83503	0.16497
2	538.55	0.76738	0.23262
4	536.00	0.76738	0.23262
6	536.60	0.76798	0.23202
8	536.60	0.76797	0.23203
10	536.60	0.76797	0.23203
12	536.60	0.76797	0.23203
14	536.60	0.76796	0.23204
16	536.60	0.76796	0.23204
18	536.60	0.76796	0.23204
20	536.60	0.76796	0.23204

CORRIENTE NO.	RELACION DE FLUJO	TEMPERATURA (°R)	COMPONENTE NUM. 1	COMPONENTE NUM. 2
5	1.0000	536.60	0.76796	0.23204

Tabla 5.2 Resultados obtenidos de DYN SIM (continuación).

TIEMPO = 5.000 hr

INTERCAMBIADOR DE CALOR, UNIDAD NUMERO 2

DISTANCIA (ft)	TEMPERATURA DEL FLUIDO EN EL TUBO (°R)	TEMPERATURA DEL FLUIDO EN LA CORAZA (°R)
0	538.93	572.09
1	539.58	574.27
2	540.11	576.57
3	540.78	578.99
4	541.63	581.54
5	542.54	584.23
6	543.09	587.06
7	543.78	590.05
8	545.04	593.19
9	545.12	596.51
10	546.62	600.00

REACTOR, UNIDAD NUMERO 3

DISTANCIA (ft)	TEMPERATURA (°R)	COMPONENTE (X1)	COMPONENTE (X2)
0	546.62	0.78357	0.21643
2	530.55	0.69640	0.30360
4	524.48	0.68367	0.31633
6	523.35	0.69048	0.30952
8	523.57	0.69285	0.30715
10	523.63	0.69120	0.30880
12	523.52	0.69047	0.30953
14	523.47	0.69079	0.30921
16	523.47	0.69095	0.30905
18	523.48	0.69089	0.30911
20	523.48	0.69085	0.30915

CORRIENTE NO.	RELACION DE FLUJO	TEMPERATURA (°R)	COMPONENTE NUM. 1	COMPONENTE NUM. 2
5	1.0000	523.48	0.69085	0.30915

Tabla 5.2 Resultados obtenidos de DYN SIM (continuación).

TIEMPO = 10.000 hr

INTERCAMBIADOR DE CALOR, UNIDAD NUMERO 2

DISTANCIA (ft)	TEMPERATURA DEL FLUIDO EN EL TUBO (°R)	TEMPERATURA DEL FLUIDO EN LA CORAZA (°R)
0	532.08	568.46
1	532.48	571.01
2	533.56	573.56
3	534.09	576.38
4	534.90	579.06
5	535.97	582.42
6	536.78	585.64
7	537.58	588.73
8	538.66	592.22
9	539.46	595.71
10	540.81	600.00

REACTÓR, UNIDAD NUMERO 3

DISTANCIA (ft)	TEMPERATURA (°R)	COMPONENTE (X1)	COMPONENTE (X2)
0	540.16	0.74107	0.25893
2	527.68	0.66054	0.33946
4	520.23	0.62295	0.37705
6	516.07	0.61705	0.38295
8	514.05	0.62779	0.37221
10	513.52	0.63369	0.36631
12	513.58	0.63262	0.36738
14	513.58	0.63262	0.36738
16	513.58	0.63262	0.36738
18	513.58	0.63262	0.36738
20	513.58	0.63262	0.36738

CORRIENTE NO.	RELACION DE FLUJO	TEMPERATURA (°R)	COMPONENTE NUM. 1	COMPONENTE NUM. 2
5	1.0000	513.58	0.63262	0.36738

Tabla 5.2 Resultados obtenidos de DYN SIM (continuación).

5.5 SIMULACION DINAMICA Y CONTROL POR MEDIO DE REDES NEURONALES (ALGORITMO DE PROPAGACION HACIA ATRAS)

La red neuronal empleada para la simulación dinámica fué desarrollada por la Compañía Neurosym Corporation en Texas, E.U.A. en 1990. El paquete de programación es conocido como "Neurosym. Neurocomputing Library" y el paradigma utilizado para el ejemplo de unidades distribuidas fué el de la propagación hacia atrás.

Este paradigma fué seleccionado debido a tres características fundamentales que son:

1) El problema planteado fué hetero-asociativo, esto significa que la salida fué distinta a la entrada. El aprendizaje requirió de una entrada con su correspondiente salida.

2) Fué seleccionada una red feedforward. Las salidas son determinadas únicamente por las entradas, distinto a la red feedback, en donde las salidas son determinadas por las entradas y las salidas previas.

3) Fué requerido de un aprendizaje supervisado. Se dispuso de una prueba de ajuste de datos para definir la salida deseada para una entrada dada³.

Los resultados obtenidos en la simulación con el DYNYSIM fueron alimentados a la red neuronal para su asimilación, aprendizaje y ajuste. Posteriormente, se llevaron a cabo interpolaciones para los mismos intervalos de tiempo empleados con el DYNYSIM, esto es, 0.00, 0.50, 1.00, 1.50, 2.00, 5.00 y 10.00 horas de simulación obteniéndose así los resultados mostrados en la Tabla 5.3, con el mismo formato de la Tabla 5.2 para fines comparativos, es decir, perfiles de temperatura del fluido en el tubo y en la coraza para el intercambiador de calor y los perfiles de temperatura y composición para el reactor de flujo tapón.

TIEMPO = 0.000 hr

INTERCAMBIADOR DE CALOR, UNIDAD NUMERO 2

DISTANCIA (ft)	TEMPERATURA DEL FLUIDO EN EL TUBO (°R)	TEMPERATURA DEL FLUIDO EN LA CORAZA (°R)
0	575.00	600.00
1	575.00	600.00
2	575.00	600.00
3	575.00	600.00
4	575.00	600.00
5	575.00	600.00
6	575.00	600.00
7	575.00	600.00
8	575.00	600.00
9	575.00	600.00
10	575.00	600.00

REACTOR, UNIDAD NUMERO 3

DISTANCIA (ft)	TEMPERATURA (°R)	COMPONENTE (X1)	COMPONENTE (X2)
0	575.00	1.0000	0.0000
2	575.00	1.0000	0.0000
4	575.00	1.0000	0.0000
6	575.00	1.0000	0.0000
8	575.00	1.0000	0.0000
10	575.00	1.0000	0.0000
12	575.00	1.0000	0.0000
14	575.00	1.0000	0.0000
16	575.00	1.0000	0.0000
18	575.00	1.0000	0.0000
20	575.00	1.0000	0.0000

CORRIENTE NO.	RELACION DE FLUJO	TEMPERATURA (°R)	COMPONENTE NUM. 1	COMPONENTE NUM. 2
5	1.0000	575.00	1.0000	0.0000

Tabla 5.3 Resultados obtenidos de la Red Neuronal.

TIEMPO = 0.500 hr

INTERCAMBIADOR DE CALOR, UNIDAD NUMERO 2

DISTANCIA (ft)	TEMPERATURA DEL FLUIDO EN EL TUBO (°R)	TEMPERATURA DEL FLUIDO EN LA CORAZA (°R)
0	560.50	591.27
1	561.53	591.28
2	562.59	591.43
3	563.65	591.75
4	564.74	592.24
5	565.83	592.95
6	566.93	593.87
7	568.04	595.04
8	569.16	596.47
9	570.28	598.18
10	571.40	600.19

REACTOR, UNIDAD NUMERO 3

DISTANCIA (ft)	TEMPERATURA (°R)	COMPONENTE (X1)	COMPONENTE (X2)
0	570.91	0.90490	0.09510
2	556.23	0.88845	0.11155
4	553.03	0.87833	0.12167
6	553.92	0.87327	0.12673
8	555.05	0.87200	0.12800
10	555.07	0.87326	0.12674
12	554.29	0.87579	0.12421
14	553.72	0.87832	0.12168
16	554.12	0.87959	0.12041
18	555.09	0.87832	0.12168
20	554.14	0.87326	0.12674

CORRIENTE NO.	RELACION DE FLUJO	TEMPERATURA (°R)	COMPONENTE NUM. 1	COMPONENTE NUM. 2
5	1.0000	554.14	0.87326	0.12674

Tabla 5.3 Resultados obtenidos de la Red Neuronal (continuación).

TIEMPO = 1.000 hr

INTERCAMBIADOR DE CALOR, UNIDAD NUMERO 2

DISTANCIA (ft)	TEMPERATURA DEL FLUIDO EN EL TUBO (°R)	TEMPERATURA DEL FLUIDO EN LA CORAZA (°R)
0	554.45	583.22
1	555.30	584.28
2	556.12	585.45
3	556.91	586.74
4	557.70	588.17
5	558.50	589.73
6	559.34	591.45
7	560.23	593.32
8	561.19	595.37
9	562.24	597.60
10	563.39	600.01

REACTOR, UNIDAD NUMERO 3

DISTANCIA (ft)	TEMPERATURA (°R)	COMPONENTE (X1)	COMPONENTE (X2)
0	563.10	0.86593	0.13407
2	548.00	0.84219	0.15781
4	544.53	0.82758	0.17242
6	545.31	0.82028	0.17972
8	546.41	0.81846	0.18154
10	546.46	0.82030	0.17970
12	545.71	0.82396	0.17604
14	545.15	0.82762	0.17238
16	545.52	0.82944	0.17056
18	546.46	0.82761	0.17239
20	545.55	0.82028	0.17972

CORRIENTE NO.	RELACION DE FLUJO	TEMPERATURA (°R)	COMPONENTE NUM. 1	COMPONENTE NUM. 2
5	1.0000	545.55	0.82028	0.17972

Tabla 5.3 Resultados obtenidos de la Red Neuronal (continuación).

TIEMPO = 1.500 hr

INTERCAMBIADOR DE CALOR, UNIDAD NUMERO 2

DISTANCIA (ft)	TEMPERATURA DEL FLUIDO EN EL TUBO (°R)	TEMPERATURA DEL FLUIDO EN LA CORAZA (°R)
0	550.56	579.59
1	551.48	581.04
2	552.28	582.61
3	553.00	584.30
4	553.68	586.11
5	554.37	588.06
6	555.10	590.15
7	555.92	592.38
8	556.87	594.76
9	557.99	597.30
10	559.32	600.00

REACTOR, UNIDAD NUMERO 3

DISTANCIA (ft)	TEMPERATURA (°R)	COMPONENTE (X1)	COMPONENTE (X2)
0	559.04	0.84100	0.15900
2	543.01	0.81276	0.18724
4	539.17	0.79540	0.20460
6	539.84	0.78672	0.21328
8	540.95	0.78457	0.21543
10	541.02	0.78676	0.21324
12	540.28	0.79111	0.20889
14	539.70	0.79546	0.20454
16	540.06	0.79763	0.20237
18	541.00	0.79544	0.20456
20	540.11	0.78672	0.21328

CORRIENTE NO.	RELACION DE FLUJO	TEMPERATURA (°R)	COMPONENTE NUM. 1	COMPONENTE NUM. 2
5	1.0000	540.11	0.78672	0.21328

Tabla 5.3 Resultados obtenidos de la Red Neuronal (continuación).

TIEMPO = 2.000 hr

INTERCAMBIADOR DE CALOR, UNIDAD NUMERO 2

DISTANCIA (ft)	TEMPERATURA DEL FLUIDO EN EL TUBO (°R)	TEMPERATURA DEL FLUIDO EN LA CORAZA (°R)
0	547.77	577.51
1	548.48	579.21
2	549.20	580.99
3	549.93	582.88
4	550.68	584.89
5	551.44	587.02
6	552.22	589.29
7	553.00	591.72
8	553.80	594.30
9	554.61	597.06
10	555.44	600.01

REACTOR, UNIDAD NUMERO 3

DISTANCIA (ft)	TEMPERATURA (°R)	COMPONENTE (X1)	COMPONENTE (X2)
0	555.65	0.82073	0.17927
2	539.46	0.79018	0.20982
4	535.38	0.77142	0.22855
6	535.93	0.76210	0.23790
8	537.05	0.75983	0.24017
10	537.22	0.76227	0.23773
12	536.59	0.76704	0.23296
14	536.05	0.77179	0.22821
16	536.34	0.77415	0.22585
18	537.20	0.77176	0.22824
20	536.40	0.76225	0.23775

CORRIENTE NO.	RELACION DE FLUJO	TEMPERATURA (°R)	COMPONENTE NUM. 1	COMPONENTE NUM. 2
5	1.0000	536.40	0.76225	0.23775

Tabla 5.3 Resultados obtenidos de la Red Neuronal (continuación).

TIEMPO = 5.000 hr

INTERCAMBIADOR DE CALOR, UNIDAD NUMERO 2

DISTANCIA (ft)	TEMPERATURA DEL FLUIDO EN EL TUBO (°R)	TEMPERATURA DEL FLUIDO EN LA CORAZA (°R)
0	538.90	572.09
1	539.54	574.27
2	540.20	576.57
3	540.89	578.99
4	541.60	581.54
5	542.35	584.23
6	543.11	587.06
7	543.91	590.05
8	544.72	593.19
9	545.57	596.51
10	546.43	600.00

REACTOR, UNIDAD NUMERO 3

DISTANCIA (ft)	TEMPERATURA (°R)	COMPONENTE (X1)	COMPONENTE (X2)
0	546.60	0.76536	0.23464
2	530.59	0.72208	0.27792
4	524.55	0.69555	0.30445
6	523.24	0.68239	0.31761
8	523.48	0.67926	0.32074
10	523.75	0.68278	0.31722
12	523.64	0.68961	0.31039
14	523.37	0.69637	0.30363
16	523.34	0.69972	0.30028
18	523.62	0.69629	0.30371
20	523.44	0.68272	0.31728

CORRIENTE NO.	RELACION DE FLUJO	TEMPERATURA (°R)	COMPONENTE NUM. 1	COMPONENTE NUM. 2
5	1.0000	523.44	0.68272	0.31728

Tabla 5.3 Resultados obtenidos de la Red Neuronal (continuación).

TIEMPO = 10.000 hr

INTERCAMBIADOR DE CALOR, UNIDAD NUMERO 2

DISTANCIA (ft)	TEMPERATURA DEL FLUIDO EN EL TUBO (°R)	TEMPERATURA DEL FLUIDO EN LA CORAZA (°R)
0	532.14	568.44
1	532.63	570.98
2	533.30	573.63
3	534.11	576.38
4	534.98	579.25
5	535.88	582.27
6	536.73	585.43
7	537.51	588.76
8	538.15	592.26
9	538.63	595.95
10	538.88	599.85

REACTOR, UNIDAD NUMERO 3

DISTANCIA (ft)	TEMPERATURA (°R)	COMPONENTE (X1)	COMPONENTE (X2)
0	539.43	0.72894	0.27106
2	528.45	0.67209	0.32791
4	520.89	0.63709	0.36291
6	516.15	0.61962	0.38038
8	513.65	0.61533	0.38467
10	512.81	0.61989	0.38011
12	513.03	0.62894	0.37106
14	513.73	0.63814	0.36186
16	514.33	0.64317	0.35683
18	514.25	0.63967	0.36033
20	512.88	0.62331	0.37669

CORRIENTE NO.	RELACION DE FLUJO	TEMPERATURA (°R)	COMPONENTE NUM. 1	COMPONENTE NUM. 2
5	1.0000	512.88	0.62331	0.37669

Tabla 5.3 Resultados obtenidos de la Red Neuronal (continuación).

5.6 ANALISIS DE RESULTADOS

De la Figura 5.2a a la Figura 5.8a se muestran los resultados obtenidos, en forma gráfica, de las simulaciones llevadas a cabo tanto con el DYNMIM como con la red neuronal de propagación hacia atrás. En ellas se grafican los perfiles de temperatura del fluido en el tubo y en la coraza para el intercambiador de calor en función de la distancia o longitud del equipo.

De la Figura 5.2b a la Figura 5.8b se presentan los perfiles de temperatura para el reactor de flujo tapón, así como también los perfiles de concentración que se muestran de la Figura 5.2c a la Figura 5.8c.

Los intervalos de tiempo graficados fueron los mismos que se utilizaron para llevar a cabo las simulaciones, o sea, 0.00, 0.50, 1.00, 1.50, 2.00, 5.00 y 10.00 horas de simulación.

Cabe señalar que los perfiles de temperatura del fluido en el tubo y en la coraza para el intercambiador de calor, así como también los perfiles de concentración en el reactor son prácticamente idénticos en ambos tipos de simulación debido a que su tendencia es lineal, sin embargo, en los perfiles de temperatura del reactor se presentan variaciones de tipo sinusoidal, en la porción horizontal, por parte de los datos proporcionados por la red neuronal debido al cambio repentino en la pendiente en donde al parecer hubo pequeñas variaciones al efectuar el ajuste correcto de los datos empleados para su aprendizaje.

**FIGURA 5.2a INTERCAMBIADOR DE CALOR
TIEMPO = 0.00 hr**

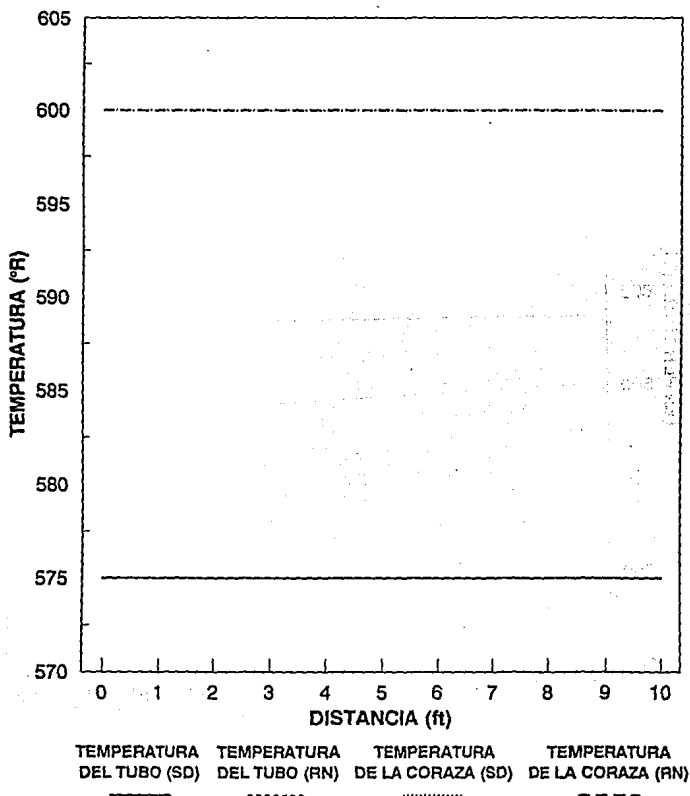
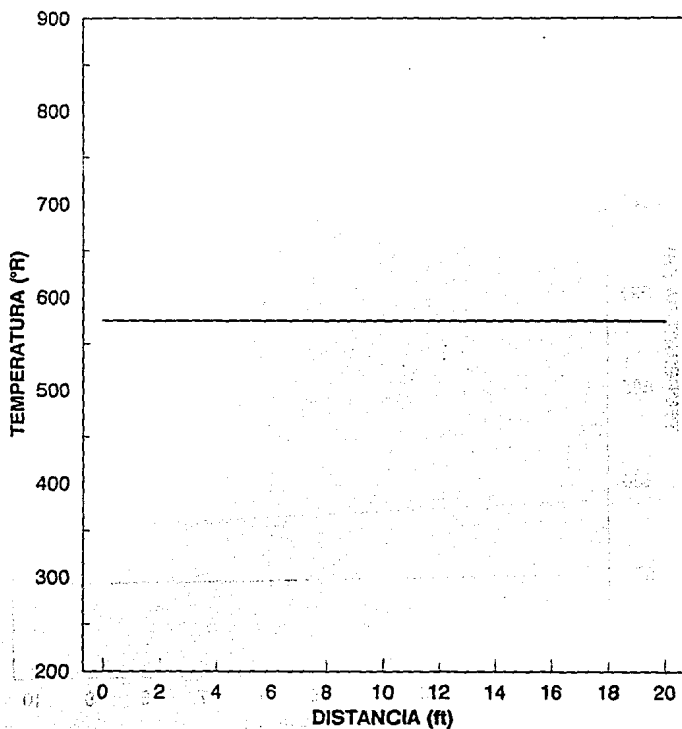
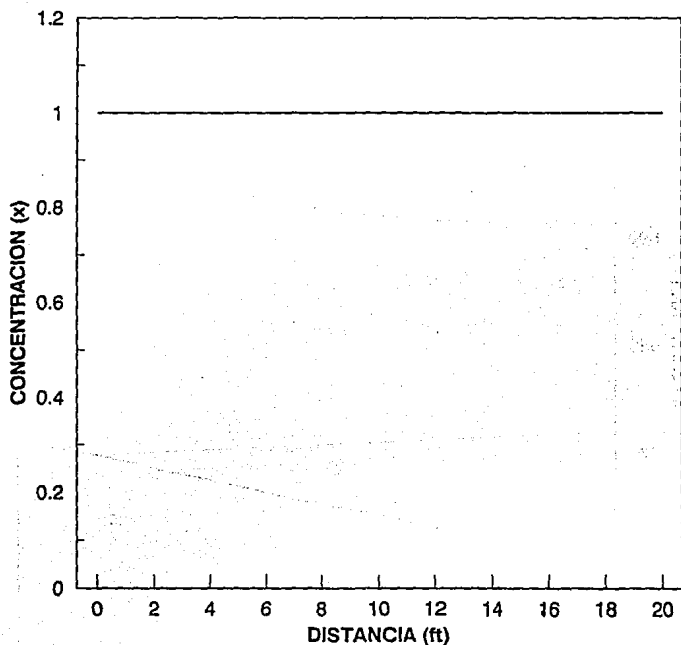


FIGURA 5.2b REACTOR DE FLUJO TAPON
TIEMPO = 0.00 hr



TEMPERATURA (SD) TEMPERATURA (RN)

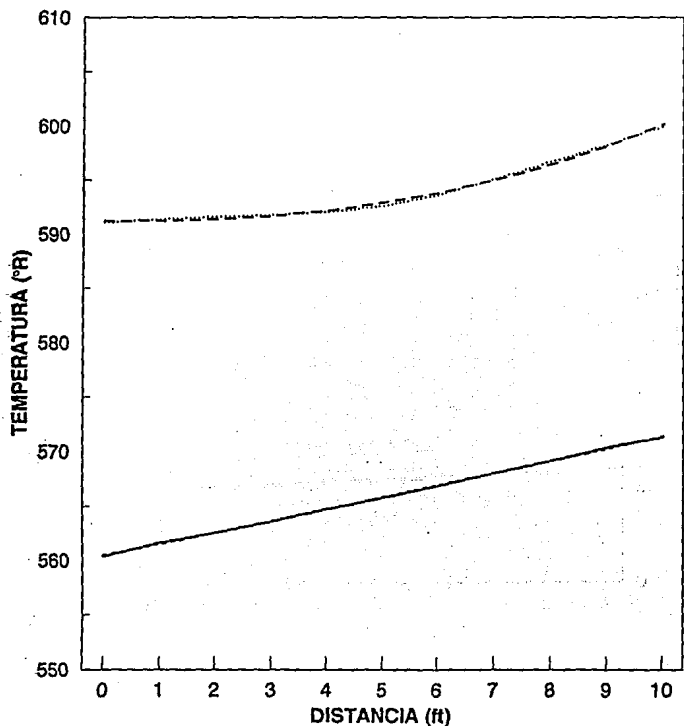
FIGURA 5.2c REACTOR DE FLUJO TAPON
TIEMPO = 0.00 hr



CONCENTRACION DEL COMPONENTE 1 (SD) CONCENTRACION DEL COMPONENTE 1 (RN)

CONCENTRACION DEL COMPONENTE 2 (SD) CONCENTRACION DEL COMPONENTE 2 (RN)

**FIGURA 5.3a INTERCAMBIADOR DE CALOR
TIEMPO = 0.50 hr**



TEMPERATURA DEL TUBO (SD) TEMPERATURA DEL TUBO (RN) TEMPERATURA DE LA CORAZA (SD) TEMPERATURA DE LA CORAZA (RN)
 ————— - - - - - - . - . -

FIGURA 5.3b REACTOR DE FLUJO TAPON
TIEMPO = 0.50 hr

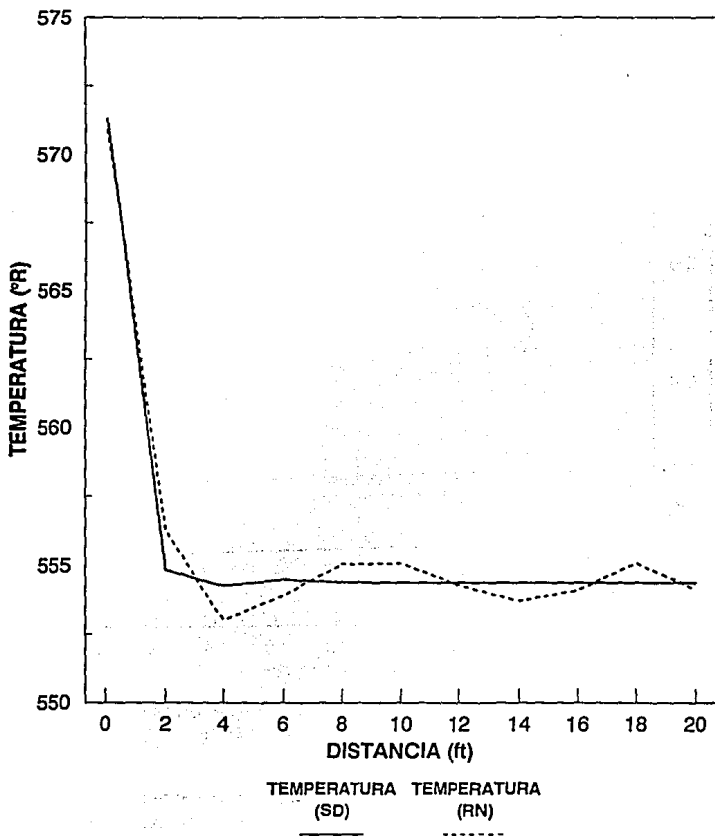
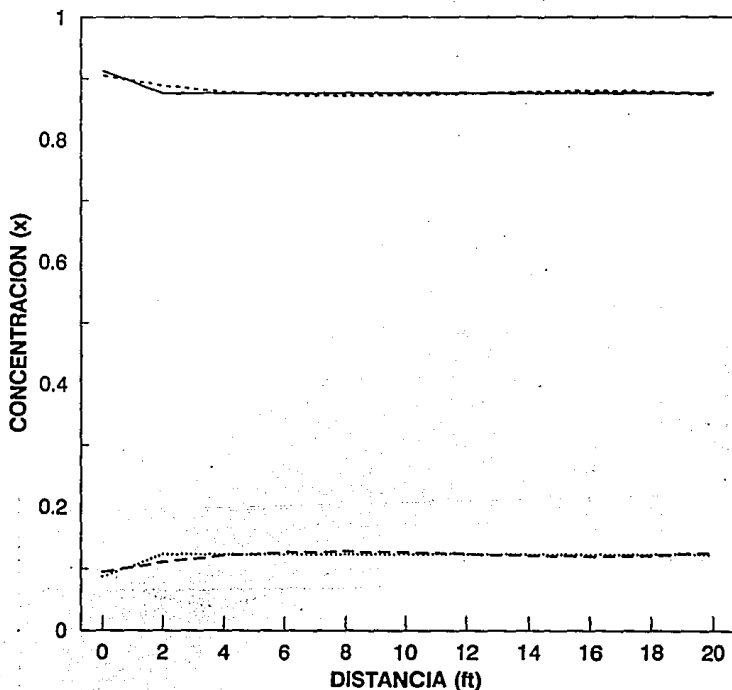


FIGURA 5.3c REACTOR DE FLUJO TAPON
TIEMPO = 0.50 hr



CONCENTRACION DEL COMPONENTE 1 (SD)	CONCENTRACION DEL COMPONENTE 1 (RN)
—————	- - - - -
CONCENTRACION DEL COMPONENTE 2 (SD)	CONCENTRACION DEL COMPONENTE 2 (RN)
.....	- - - - -

FIGURA 5.4a INTERCAMBIADOR DE CALOR TIEMPO = 1.00 hr

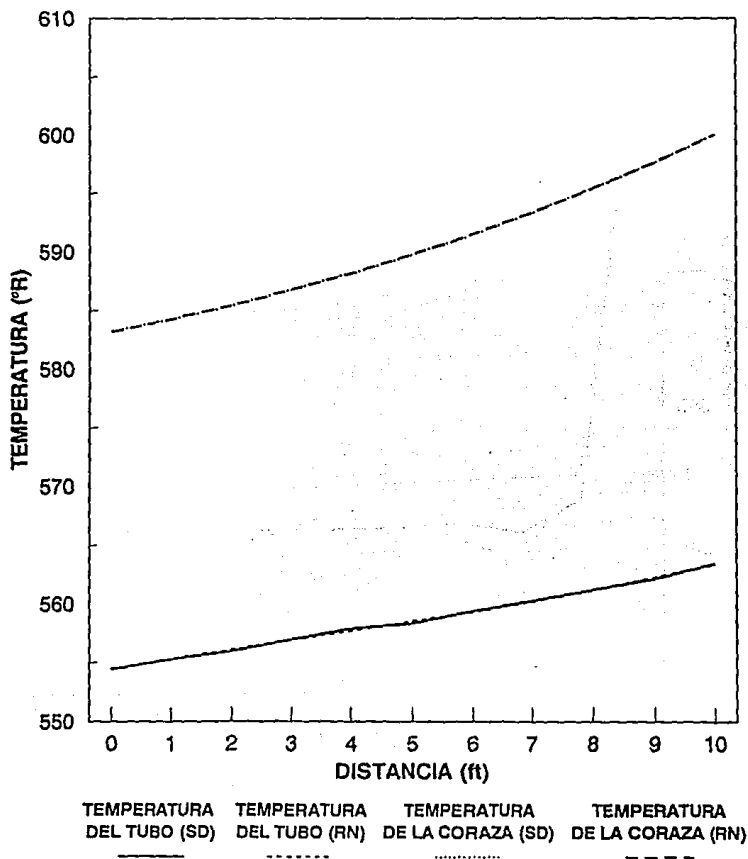


FIGURA 5.4b REACTOR DE FLUJO TAPON
TIEMPO = 1.00 hr

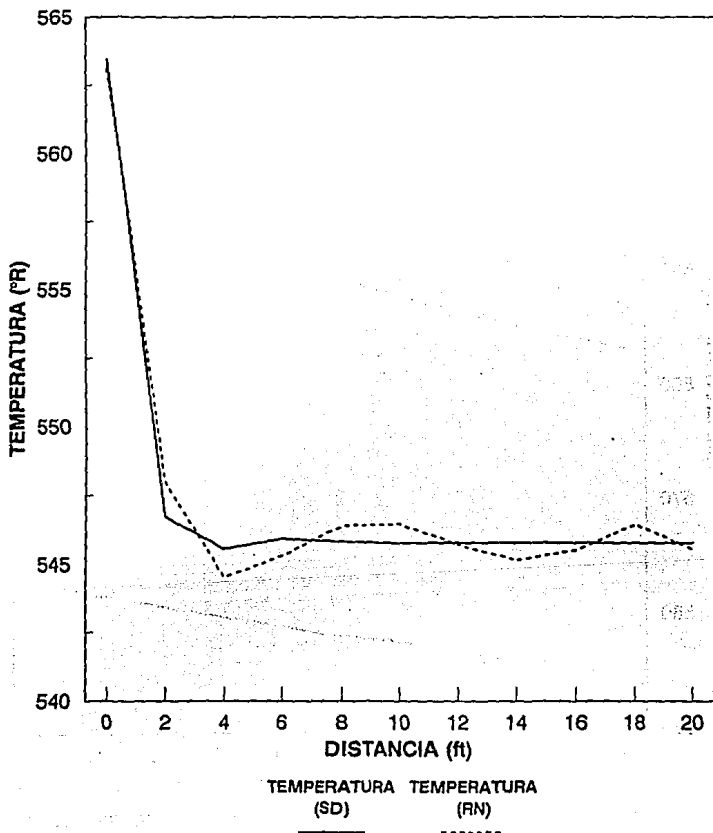
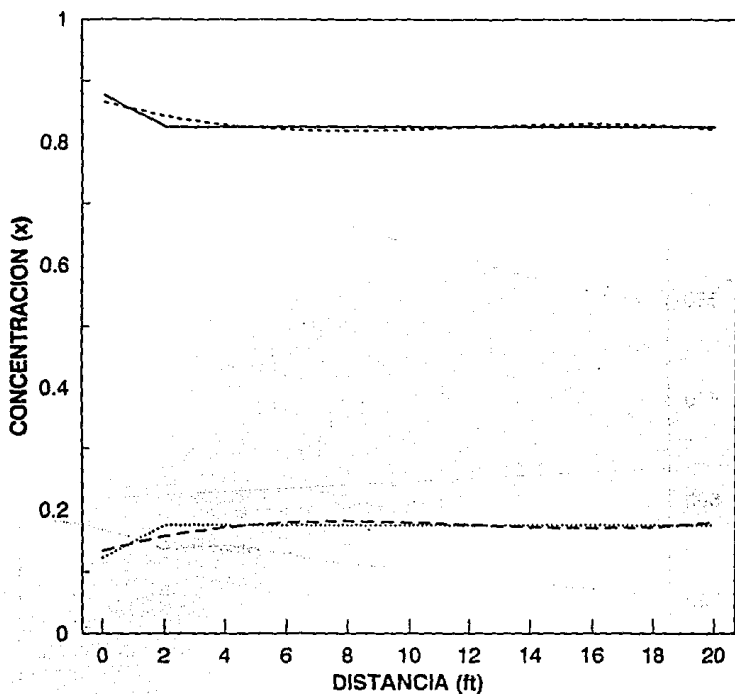


FIGURA 5.4c REACTOR DE FLUJO TAPON
TIEMPO = 1.00 hr



CONCENTRACION DEL COMPONENTE 1 (SD) CONCENTRACION DEL COMPONENTE 1 (RN)

—————

- - - - -

CONCENTRACION DEL COMPONENTE 2 (SD) CONCENTRACION DEL COMPONENTE 2 (RN)

.....

- . - . -

FIGURA 5.5a INTERCAMBIADOR DE CALOR

TIEMPO = 1.50 hr

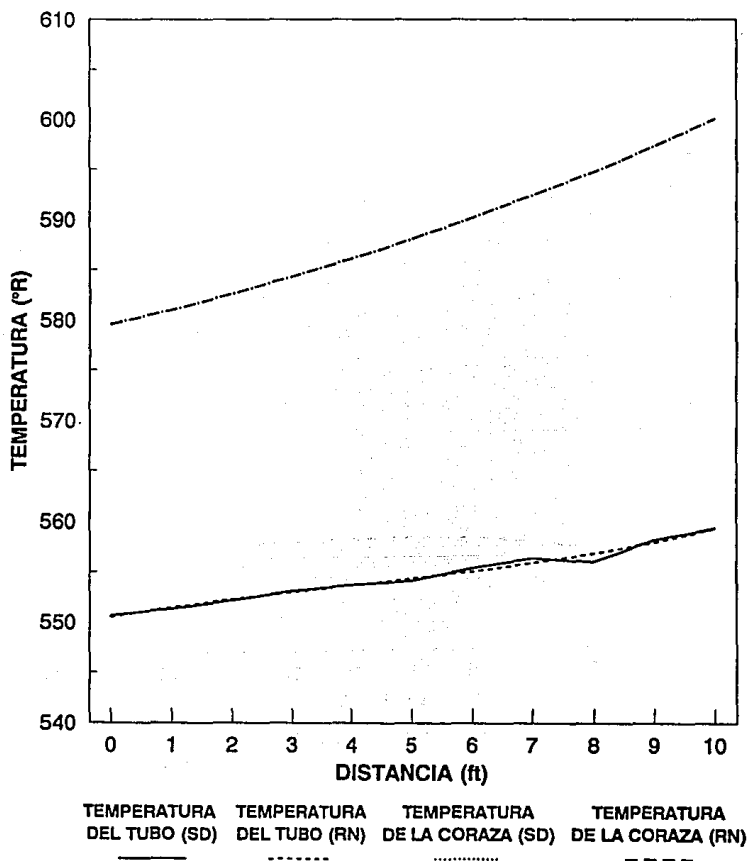


FIGURA 5.5b REACTOR DE FLUJO TAPON
TIEMPO = 1.50 hr

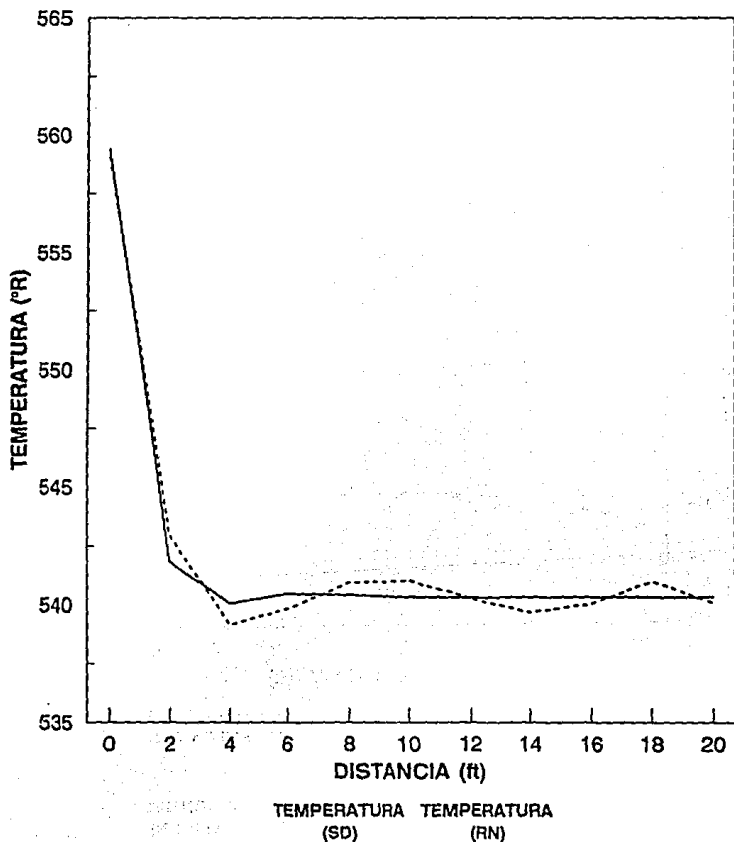
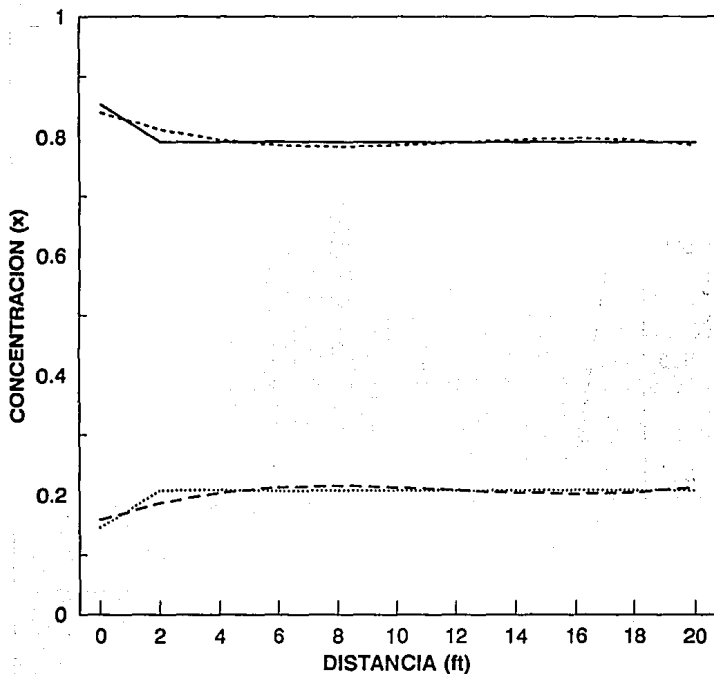


FIGURA 5.5c REACTOR DE FLUJO TAPON
TIEMPO = 1.50 hr



CONCENTRACION DEL COMPONENTE 1 (SD) CONCENTRACION DEL COMPONENTE 1 (RN)

CONCENTRACION DEL COMPONENTE 2 (SD) CONCENTRACION DEL COMPONENTE 2 (RN)

FIGURA 5.6a INTERCAMBIADOR DE CALOR

TIEMPO = 2.00 hr

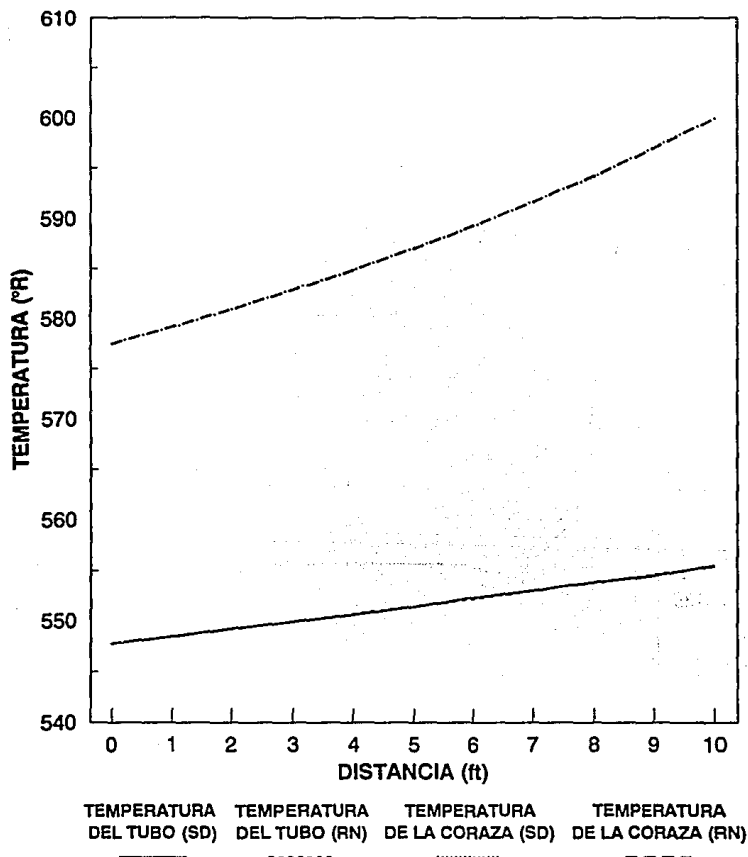


FIGURA 5.6b REACTOR DE FLUJO TAPON
TIEMPO = 2.00 hr

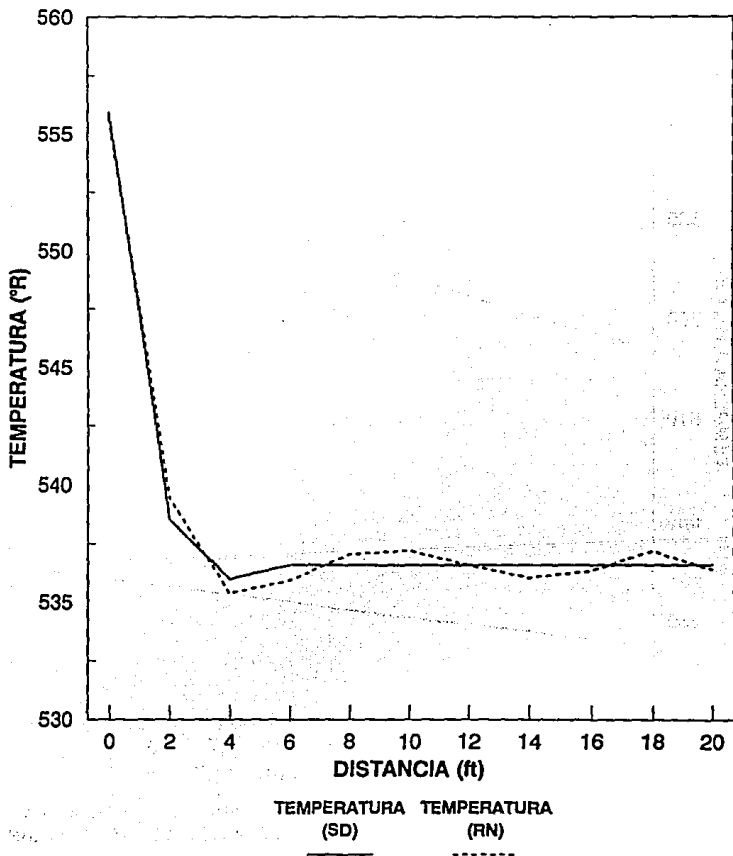
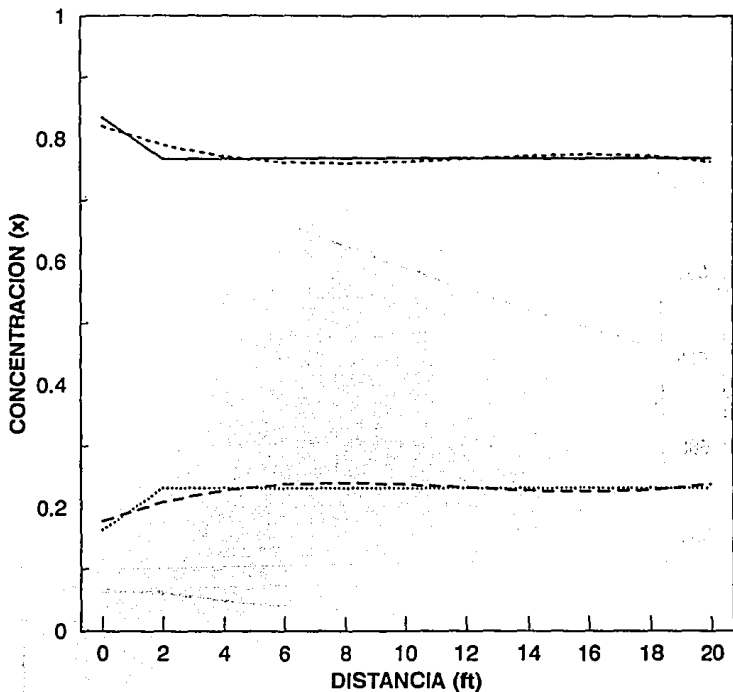


FIGURA 5.6c REACTOR DE FLUJO TAPON
TIEMPO = 2.00 hr



CONCENTRACION DEL
 COMPONENTE 1 (SD)

CONCENTRACION DEL
 COMPONENTE 1 (RN)

CONCENTRACION DEL
 COMPONENTE 2 (SD)

CONCENTRACION DEL
 COMPONENTE 2 (RN)

FIGURA 5.7a INTERCAMBIADOR DE CALOR

TIEMPO = 5.00 hr

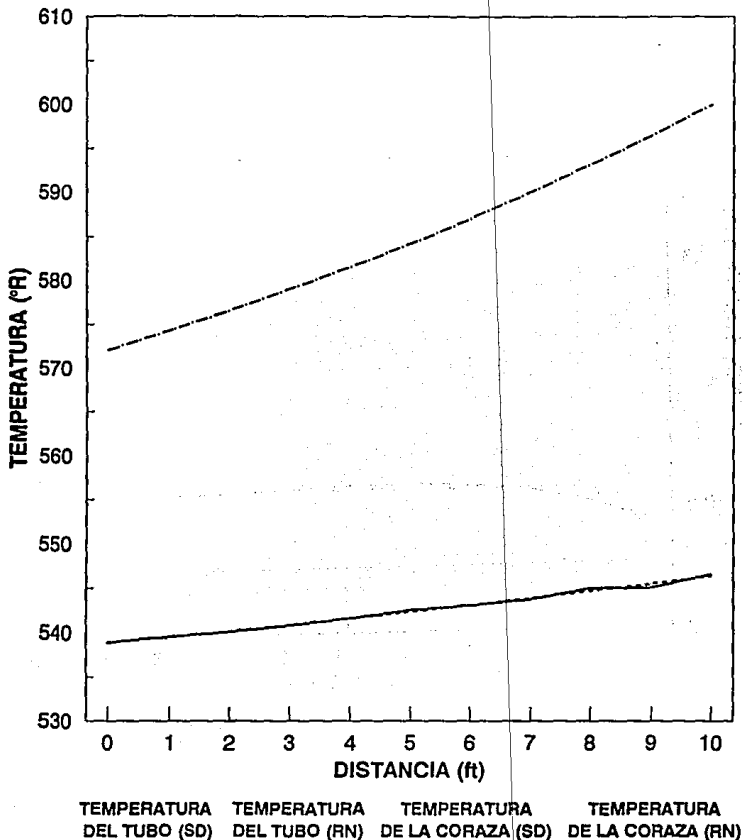


FIGURA 5.7b REACTOR DE FLUJO TAPON
TIEMPO = 5.00 hr

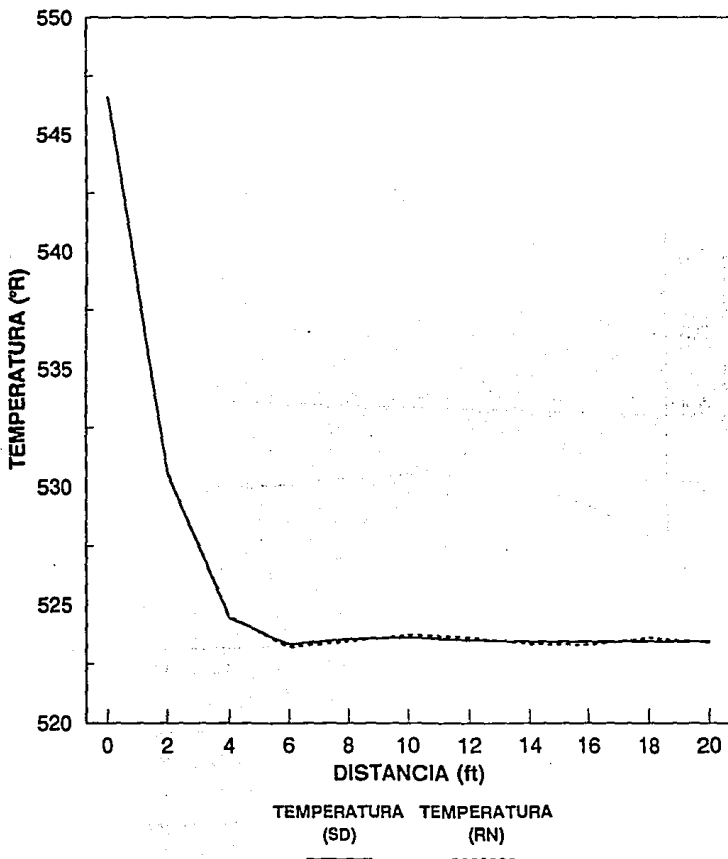
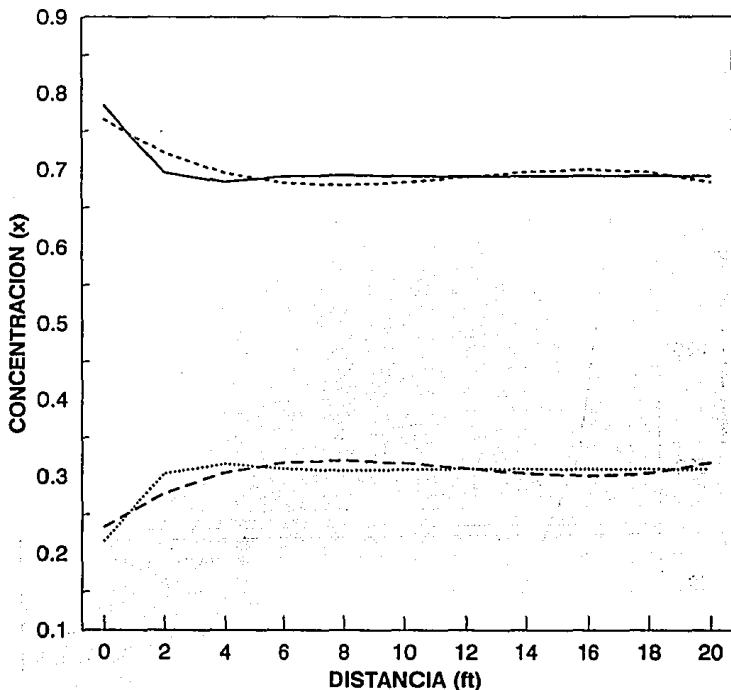


FIGURA 5.7c REACTOR DE FLUJO TAPON

TIEMPO = 5.00 hr



_____ CONCENTRACION DEL COMPONENTE 1 (SD) - - - - - CONCENTRACION DEL COMPONENTE 1 (RN)

..... CONCENTRACION DEL COMPONENTE 2 (SD) - - - - - CONCENTRACION DEL COMPONENTE 2 (RN)

FIGURA 5.8a INTERCAMBIADOR DE CALOR
TIEMPO = 10.00 hr

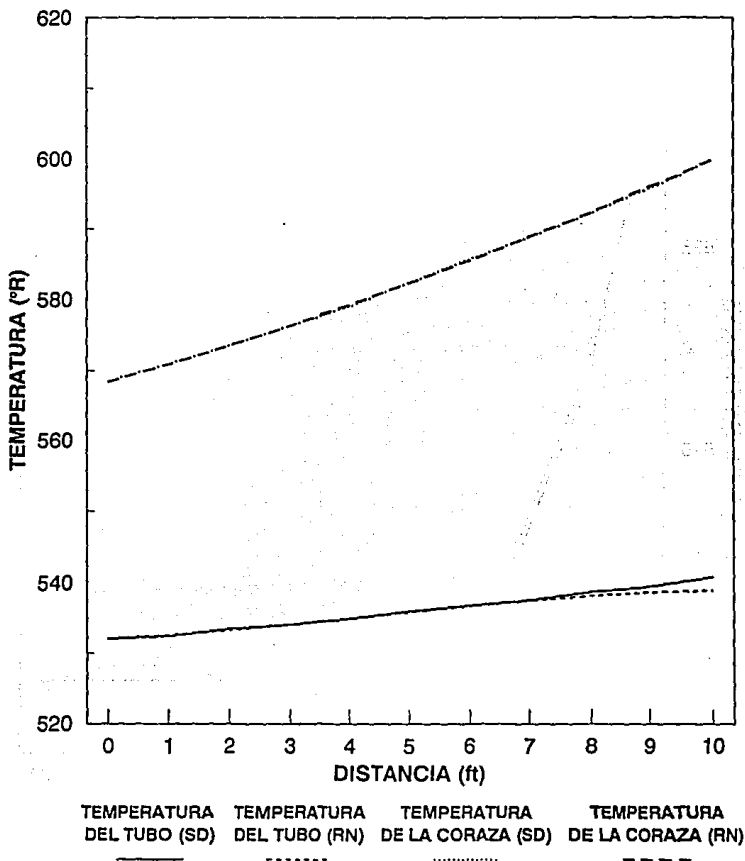
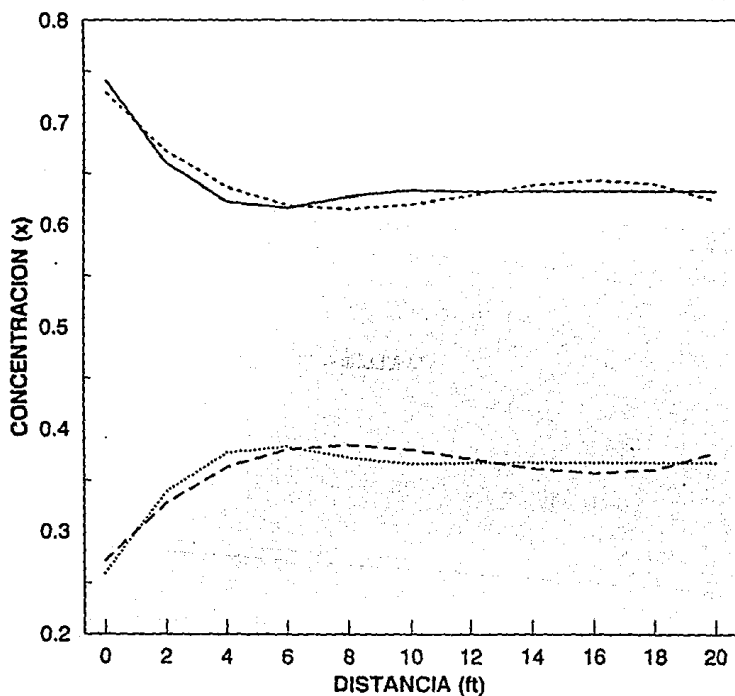


FIGURA 5.8c REACTOR DE FLUJO TAPON
TIEMPO = 10.00 hr



CONCENTRACION DEL COMPONENTE 1 (SD) CONCENTRACION DEL COMPONENTE 1 (RN)

CONCENTRACION DEL COMPONENTE 2 (SD) CONCENTRACION DEL COMPONENTE 2 (RN)

CONCLUSIONES

Las redes neuronales se presentan como una alternativa real para la resolución de modelos teóricos rigurosos. Dichos modelos han sido empleados para calcular propiedades de un proceso que no pueden ser medidos directamente o lo suficientemente rápido para controlar el proceso. Si los modelos teóricos necesitan de datos para corregir cualquier variación dentro de los mismos modelos, parece razonable que estos datos puedan ser aplicados en las redes neuronales para desarrollar modelos válidos equivalentes.

Debido a lo anterior y a los resultados obtenidos en el ejemplo de aplicación, es factible llevar a cabo el análisis y estudio de la simulación dinámica y control de procesos químicos en tiempo real mediante el empleo de redes neuronales, en sustitución de los simuladores dinámicos de modelos teóricos, debido a que dichos programas presentan las siguientes ventajas:

1) No es necesario un experto para desarrollar modelos para una red neuronal de un proceso químico, sin embargo, es conveniente tener conocimiento sobre el proceso para verificar los resultados de la red.

2) Puede ser desarrollada con un menor tiempo de programación y un menor tiempo de verificación que el que se toma para elaborar un modelo teórico.

3) Puede aprender del proceso en estudio, es decir, no es necesario un ajuste cuando se presentan variaciones en los parámetros del proceso.

4) No necesita conocer las características exactas, configuraciones o condiciones de operación de un proceso; una red neuronal aprende dicha información del proceso.

5) Si una unidad de proceso presenta variaciones, la red neuronal puede aprender y ajustarse a las perturbaciones sin tener que emplear un modelo experto.

6) Después del proceso de aprendizaje, una red neuronal no realiza cálculos iterativos, sino que lleva a cabo la correlación de los datos por medio de un polinomio. La red puede proporcionar respuestas en una fracción de segundo, a diferencia de un modelo teórico.

Una red neuronal instalada adecuadamente utilizará una red que proporcionará los valores iniciales y otra red que aprenderá de los datos generados por el proceso. Esta característica permitirá la disminución del tiempo de respuesta de la red neuronal cuando se presentan cambios en el proceso.

Por otra parte, una desventaja de una red neuronal es la cantidad de datos necesarios para elaborar un modelo confiable. Son necesarios de 100 a miles de casos (datos) para crear un modelo de red neuronal. El número de casos requeridos depende de las variaciones que presenten los datos y del número de entradas, factores que influyen considerablemente en los resultados. Afortunadamente, en la actualidad, existen sistemas de información para plantas de procesos muy confiables. Muchas plantas tienen la capacidad de registrar grandes cantidades de datos y pueden poseer datos almacenados de varios años atrás.

Un buen aprendizaje deberá contener condiciones límite, datos de alta calidad representativos del proceso y ser suficientemente diversos para incorporar la información clave a la red neuronal. Las mediciones de las variables del proceso empleadas en los cálculos deberán mantenerse constantes, por medio de controles, para que tales mediciones puedan ser obtenidas con un alto grado de confiabilidad.

Finalmente, tal vez las redes neuronales no sean la mejor alternativa para todas las situaciones. Esto incluye aplicaciones en donde no se dispone de una gran cantidad de datos para crear una red neuronal, de cuando exista un modelo teórico que represente con gran exactitud al proceso o cuando pueda ser generado fácilmente un modelo empleando técnicas de regresión lineal.

REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

- 1) Bhagat, Phiroz; "An Introduction to Neuronal Nets", Chem. Engng. Progress, 86, 55-60, (1990).
- 2) Bhat, N. and McAvoy, T. J.; "Use of Neuronal Nets for Dynamic Modeling and Control of Chemical Process Systems", Computers chem. Engng., 14, No. 4/5, 573-584, (1990).
- 3) Blaesi, John and Jensen, Bruce; "Can Neuronal Networks Compete With Process Calculations?", INTECH, 39, No. 12, 34-37, (1992).
- 4) Chesmond, C. J., Wilson, P. A., and Le Pla, M. R.; "Advanced Control System Technology", Edward Arnold, Great Britain, 205-234, 1991.
- 5) Gevarter, William B.; "Introduction to Artificial Intelligence", Chem. Engng. Progress, 83, 21-43, (1987).
- 6) Gordon, Lewis M.; "Basic Concepts, Terminology and Techniques for Process Control", Chem. Engng., 90, 58-66, (1983).
- 7) Himmelblau, David M. y Bischoff, Kenneth B.; "Análisis y Simulación de Procesos", Reverté, S.A., Barcelona, España, 1-12, 1976.

- 8) Hoskins, J. C. and Himmelblau, D. M.; "Artificial Neuronal Network Models of Knowledge Representation in Chemical Engineering", Computers chem. Engng., 12, No. 9/10, 881-890, (1988).
- 9) Husain, Asghar; "Chemical Process Simulation", Wiley Eastern Limited, New Delhi, India, 1-3, 199-243, 1986.
- 10) Jovic, Fran; "Expert Systems in Process Control", Chapman and Hall, Great Britain, 16-27, 105-119, 1992.
- 11) Jovic, Fran; "Process Control Systems. Principles of design, operation and interfacing", 2a. Chapman and Hall, 157-181, 1992.
- 12) Liang, Wen-Chien; "An Interactive Dynamic Flowsheet Simulation Program", Doctor of Philosophy in Chemical Engineering, Lehigh University, U.S.A., 1985.
- 13) Luyben, William L.; "Process Modeling, Simulation, and Control for Chemical Engineers", 2a. McGraw-Hill Chemical Engineering Series, U.S.A., 1-11, 305-345, 1990.
- 14) "NeuroSym. Neurocomputing Library", NeuroSym Corporation, Texas, U.S.A., 1990.
- 15) Ogata, Katsuhiko; "Ingeniería de Control Moderna", Prentice-Hall Hispanoamericana, S.A., México, D.F., 1-15, 1990.

16) Pollard, A.; "Process Control", Heinemann Chemical Engineering Series, London, England, 134-184, 1971.

17) "Real-Time Graphics and Measurement/Control Tools for Microsoft C", Ver. 2.0, Quinn-Curtis, U.S.A., 1991.

18) Seborg, Dale E., Edgar, Thomas F., and Mellichamp, Duncan A.; "Process Dynamics and Control", John Wiley and Sons, U.S.A., 501-527, 1989.

19) Shinskey, F. G.; "Process Control Systems Application, Design, and Adjustment", 3a. McGraw-Hill Book Company, U.S.A., 75-111, 1988.

20) Stephanopoulos, George; "Chemical Process Control. An Introduction to Theory and Practice", Prentice-Hall International Series, New Jersey, U.S.A., 241-278, 1984.

21) Venkatasubramanian, Venkat and Chan, King; "A Neuronal Network Methodology for Process Fault Diagnosis", AIChE Journal, 35, No. 12, 1993-2002. (1989).