

GENERADOR AUTOMÁTICO DE MODELOS MATEMÁTICOS PARA SIMULACIÓN Y OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS INDUSTRIALES

Alejandro O. Domancich^{a,b,c}, Tomás. Touceda^b, Nélide B. Brignole^{a,b} y Patricia M. Hoch^{a,c}

^a*Planta Piloto de Ingeniería Química – CONICET Complejo CRIBABB, Camino La Carrindanga km.7 CC 717, Bahía Blanca, Argentina.*

^b*Laboratorio de Investigación y Desarrollo en Computación Científica (LIDeCC), Universidad Nacional del Sur, Av. Alem 1253, 8000, Bahía Blanca, Argentina.*

^c*Departamento de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Sur, Av. Alem 1253, Bahía Blanca, Argentina.*

Email address: {adomancich, p.hoch}@plapiqui.edu.ar; {nbb}@cs.uns.edu.ar

Palabras clave: Modelos Matemáticos, Procesos Químicos, Simulación, Optimización

Resumen. En este trabajo se presenta un software para la generación automática de modelos matemáticos de plantas de procesos. El mismo permite obtener el sistema de ecuaciones que representa el funcionamiento de una planta de procesos a partir del ingreso al programa de la topología de la misma. Una vez obtenido el sistema de ecuaciones, se puede llevar a cabo la resolución del mismo por medio de alguno de los algoritmos para resolución ya conocidos, teniendo en cuenta las características del sistema obtenido.

El generador posee una interfase amigable que permite al usuario ingresar fácilmente la topología de la planta y obtener el sistema completo de ecuaciones que representa el comportamiento de la misma. Otra característica de interés es la etapa de verificación, la cual se encarga de llevar a cabo el chequeo de compuestos pertenecientes a las corrientes que ingresan o salen de los equipos, así como también de verificar las fases de las mismas. El software resulta flexible a la incorporación de nuevos equipos o paquetes termodinámicos de manera relativamente sencilla, siguiendo una metodología desarrollada en lenguaje XML. También resulta adaptable el formato de los modelos matemáticos generados a los diferentes programas de resolución que quieran ser ejecutados para simular u optimizar los mismos. Actualmente, el formato elegido para ello es compatible con el software comercial GAMS, de manera tal de poder sacar provecho de la gran cantidad de algoritmos de resolución que este posee.

1 INTRODUCCIÓN

Las plantas de procesos químicos están formadas generalmente por una gran cantidad de equipos industriales, los cuales se encuentran relacionados entre sí por medio de corrientes de materia que ingresan y salen de los mismos. El comportamiento de dichas plantas puede ser predicho a través de una simulación de la misma, o mejorado a través de una optimización de su funcionamiento. La simulación de una planta permite predecir el comportamiento de los procesos que forman parte de la misma bajo determinadas condiciones. Por otro lado, la optimización de la misma implica encontrar el valor que ciertas variables del proceso deben tener para que el funcionamiento de la planta resulte óptimo, de acuerdo a los objetivos fijados previo a la resolución del problema.

Para llevar a cabo esta tarea, es necesario contar con modelos matemáticos de cada uno de los equipos que integran la planta química (Biegler, 1989), los cuales relacionan entre sí a todas las variables que intervienen en el proceso mediante ecuaciones algebraicas provenientes de balances de masa y energía, relaciones de equilibrio y ecuaciones termodinámicas que representan el funcionamiento de la planta en estado estacionario (Bhushan y Rengaswamy, 2000; Singh y Hahn, 2005). Debido a la gran cantidad de equipos que integran una planta de procesos, los modelos matemáticos resultantes son generalmente de grandes dimensiones, haciendo fundamental la utilización de herramientas computacionales para llevar a cabo las tareas de simulación y optimización. Resulta deseable también que dichas herramientas, además de permitir al usuario llevar a cabo la resolución de los modelos matemáticos, asistan al mismo en el modelado de los procesos. De esta manera se puede ver facilitada una tarea que, para procesos de grandes dimensiones, puede resultar difícil y a la vez tediosa de realizar.

Las herramientas de modelado comúnmente reportadas en la literatura intentan asistir a usuarios con diversas necesidades. Marquardt (1994) presentó un trabajo de revisión acerca del modelado asistido por computadora. Más tarde, Bogusch y Marquardt (1997) resaltaron la importancia de llevar a cabo un adecuado modelado estructurado, desarrollando VeDa, un modelo de datos orientado a objetos.

De acuerdo a Vazquez-Roman y co (1996), las técnicas de modelado pueden ser clasificadas en dos categorías. La primera de ellas corresponde a paquetes que contienen una librería de modelos para la descripción de unidades individuales, como son SpeedUp (Perkins y Sargent, 1982) o gPROMS (Pantelides y Barton, 1992). La segunda categoría incluye generadores basados en descripciones físicas del proceso, por medio de las leyes fundamentales. Siguiendo esta metodología, Vazquez-Roman y co (1996) desarrollaron KBMoSS, un sistema de soporte de modelado con una interfase flexible implementada a través de la programación orientada a objetos. Por otro lado, Dietrich y Eigenberg (1995) desarrollaron Bimap, el cual emplea computación simbólica para manipular un set de ecuaciones básico, una vez que el usuario ha definido las suposiciones y simplificaciones deseadas. Es importante destacar que una buena interfase resulta una parte indispensable de un generador de modelos, sobre todo cuando se trata de modelos complejos y de grandes dimensiones (Berrais, 1998).

A pesar de que los principios que gobiernan los diferentes procesos son relativamente semejantes en todos ellos (se basan principalmente en balances de masa y de energía), cada aplicación específica a la que se quiera asignar el generador de modelos (diseño de instrumentación, reconciliación de datos, simulación, optimización, etc) requiere de una demanda especial. Entre las diferentes necesidades con las que el usuario puede enfrentarse se encuentran: diferente grado de detalle en el modelo matemático a obtener, facilidades en la incorporación de nuevos equipos si el software pretende ser flexible a diversas aplicaciones,

adecuada sintaxis en el sistema de ecuaciones generado, el cual dependerá de los algoritmos de resolución utilizados una vez obtenido el modelo matemático, etc.

En este trabajo se presenta un software para la generación automática de modelos matemáticos de plantas de procesos químicos. Este software, permite al usuario ingresar cualquier planta y obtener el modelo matemático que representa el proceso en cuestión. Dichos modelos matemáticos pueden ser luego utilizados para simular u optimizar el funcionamiento de cualquier planta química, resolviendo el sistema de ecuaciones obtenido, mediante la utilización de un simulador orientado a ecuaciones. De esta manera, uno puede disponer del sistema completo de ecuaciones que representa el proceso en cuestión, sin tener la necesidad de ingresar manualmente uno a uno los modelos de los equipos que conforman la planta.

El programa se encarga de generar el modelo completo de la planta a partir del ingreso, por parte del usuario, de la topología de la misma. Esto resulta de suma utilidad ya que, como se describe en este trabajo, el usuario puede combinar las ventajas de un simulador orientado a objetos con las que posee la metodología orientada a ecuaciones. Una vez obtenido automáticamente el sistema completo de ecuaciones que representa el modelo en cuestión, el usuario podrá llevar a cabo su resolución matemática, mediante la utilización de alguno de los algoritmos disponibles para ello. Dado que los programas comerciales existentes deben ser tratados como “cajas negras”, en el sentido de que es imposible tener acceso al código fuente adaptando el mismo a nuestras necesidades, fue necesario desarrollar un software completamente nuevo que cumpla con los requisitos establecidos previo a su desarrollo. Se obtuvo entonces una herramienta que posee una interfase amigable, con facilidades para la incorporación de nuevos equipos por parte del usuario, y que resulta capaz de interactuar de manera directa con GAMS (Brooke y *co.*, 2004), software orientado a ecuaciones utilizado para simulación y optimización de procesos.

Este trabajo incluye, en primer lugar, una descripción teórica de lo que se conoce como simulación de procesos (sección 2), dando detalles de las etapas que conforman una simulación así como también los diferentes enfoques que pueden ser utilizados para llevar a cabo la simulación de un proceso industrial. Luego se describe brevemente el concepto de optimización de procesos (sección 3), mencionando los elementos que conforman un problema de optimización, así como también los tipos de problema que se pueden presentar y las metodologías existentes en la literatura para llevar a cabo la resolución de los mismos. La sección 4 presenta en detalle el generador de modelos desarrollado, detallando sus principales características. Finalmente, en la sección 5 se incluyen las conclusiones respecto al software desarrollado y presentado en este trabajo.

2 SIMULACIÓN DE PROCESOS

La simulación de un determinado proceso permite predecir qué comportamiento tendrá el mismo bajo ciertas condiciones dadas. Para un determinado conjunto de datos de entrada y parámetros fijos de un equipo en particular, la simulación permite obtener las condiciones de salida que ese proceso tendrá. Básicamente consiste en resolver un sistema de ecuaciones generado a partir del modelado matemático del equipo, teniendo ese modelo igual número de ecuaciones que de variables, es decir, conformando un sistema cuadrado sin grados de libertad.

2.1 Etapas en el desarrollo de un modelo para simulación

Biegler (1989) define las siguientes etapas como las más comunes a seguir para realizar la simulación de una planta de procesos químicos:

- Definición de la estructura del flowsheet: En esta etapa es donde se comienza a formar el ambiente de simulación por medio de bloques que representan las unidades de operación y corrientes que representan flujos de materia y energía entre dichas unidades.
- Desarrollo de modelos para cada unidad de proceso: Como se explicó anteriormente, un modelo define el sistema de ecuaciones que será utilizado para calcular los balances de masa y energía para cada unidad de proceso.
- Elección de un sistema de unidades consistentes: Para comodidad del usuario se elige el sistema de unidades que mejor se ajuste a los datos que manejará el problema.
- Especificación de los componentes (especies químicas) presentes en las corrientes de procesos: Los simuladores poseen bancos de datos de propiedades de los diferentes compuestos, así como también paquetes para cálculo de propiedades termodinámicas y físicas.
- Selección de modelos para cálculo de propiedades físicas: Es necesario elegir algún modelo termodinámico adecuado para predecir propiedades de mezclas y fenómenos tales como entalpías molares de mezclas, equilibrio líquido-vapor, volumen molar de la mezcla, etc.
- Satisfacción de los grados de libertad de un flowsheet: Una vez definido el modelo se deben fijar los grados de libertad del sistema. Algunos ejemplos de variables típicas que pueden ser fijadas para satisfacer los grados de libertad son: variables de corrientes de alimentación (flujos molares, composiciones, temperaturas y presiones), procesos químicos (grados de avance, conversión y coeficientes estequiométricos), especificaciones de diseño (caudales molares de productos y especificaciones de pureza) y parámetros de equipos (caídas de presión, eficiencia de los equipos, diámetro de los platos de una columna).
- Selección de un método numérico para la resolución: Dado que el modelo matemático resulta generalmente no lineal, se debe recurrir a algún método numérico para llevar a cabo su resolución. Para una correcta resolución se debe tener en cuenta la robustez y rapidez con que opera cada uno de los métodos.
- Chequeo de resultados: Esta etapa es fundamental, ya que la resolución numérica puede arrojar resultados sin sentido físico. Es importante chequear los resultados obtenidos en la simulación y compararlos, de ser posible, con datos reales del proceso.

2.2 Clasificación de los simuladores de procesos

Existen principalmente dos clases de simuladores de procesos químicos: secuencial modular y orientado a ecuaciones. A continuación se incluye una explicación de cada tipo de simulador con sus ventajas y desventajas:

a) Enfoque secuencial modular

El enfoque secuencial modular es una aproximación para resolver problemas de simulación siguiendo la estructura del flowsheet del proceso. Esta estrategia sugiere un particionamiento y un orden de precedencia, resolviendo entonces el problema en partes, de a un equipo por vez hasta completar el proceso. Es básicamente la tecnología seleccionada para la simulación de procesos en estado estacionario. Las ventajas y desventajas que presenta esta estrategia son:

Ventajas

- El programa ejecutivo resulta muy simple, ya que es cada equipo del proceso quien ese encarga de realizar los cálculos, dada la entrada a cada uno de ellos.
- Bajos requisitos de memoria de computadora, dado que se resuelve cada uno de los equipos de manera individual.
- Cuentan con una completa librería que modelan gran cantidad de operaciones unitarias, por lo que casi cualquier planta de procesos puede ser simulada con algún software basado en este enfoque.
- Pueden aplicarse diferentes estrategias de resolución numérica para cada uno de los equipos existentes según sea la conveniencia.
- La estrategia de resolución que sigue este enfoque es intuitiva para el usuario, ya que se resuelve equipo por equipo en el orden en que el flowsheet fue creado.
- Los mensajes de error son más fáciles de corregir, ya que en general se informan para cada equipo de manera específica.

Desventajas

- Tiene dificultad para converger en procesos altamente integrados, es decir, con gran cantidad de corrientes de reciclo.
- No se tiene acceso a los modelos matemáticos de los equipos, y puede resultar un trabajo considerable el agregado de modelos programados por el usuario.
- Resulta dificultoso y de gran costo computacional realizar cálculos de diseño, donde la entrada del equipo no es dato sino una variable a determinar.
- Pueden converger problemas mal especificados, por ejemplo, especificaciones redundantes.
- Debido a la metodología de cálculo que emplea, es un enfoque difícil de extender a cálculos de tipo dinámico y de optimización.

b) Enfoque orientado a ecuaciones

El enfoque orientado a ecuaciones, también conocido como simultáneo o basado en ecuaciones, es el principal competidor de la estrategia secuencial modular. Esta estrategia resulta generalmente más sencilla de describirse que de ser llevada a cabo en una implementación de software: en lugar de resolver los equipos de manera modular, de a uno por vez, un simulador orientado a ecuaciones agrupa todas las ecuaciones que representan el modelo matemático de la planta completa e intenta resolverlas de manera simultánea. Más específicamente, la estrategia orientada a ecuaciones está conformada por los siguientes pasos:

- Tanto las ecuaciones como las variables del modelo se encuentran definidas de manera individual para cada uno de los equipos de la planta. Es decir, el modelo se descompone de manera modular al igual que en la estrategia anterior, sin ser aprovechado esto a la hora de llevar a cabo la resolución del sistema de ecuaciones.
- Estas ecuaciones y variables son luego ensambladas de manera tal de formar un gran sistema no lineal de ecuaciones.
- Se incorporan al modelo especificaciones adicionales de manera tal de llevar a cero los grados de libertad del problema, obteniendo así un problema cuadrado de solución única.
- El sistema se resuelve de manera simultánea por medio de la utilización de alguna rutina de cálculo para sistemas no lineales.

A continuación se detallan las ventajas y desventajas que esta estrategia presenta:

Ventajas

- Esta estrategia resulta mucho más eficiente que la secuencial modular para flowsheets con ciclos.
- Resulta muy eficiente para problemas de diseño, donde se deben determinar parámetros de equipos que en una simulación serían datos. Para resolver este tipo de problema de manera secuencial es necesario suponer los parámetros tomando diferentes valores hasta que se cumplan las condiciones de salida que el problema real tiene. En el enfoque simultáneo esto no es necesario, ya que el sistema de ecuaciones sigue siendo el mismo, por lo que la resolución no cambia si se trata de simulación de un proceso o de diseño.
- Debido a que la metodología trabaja directamente con ecuaciones y variables y no con modelos ocultos, resulta sencillo el agregado de nuevos modelos a la simulación, o la modificación de los modelos existentes.
- Es fácilmente extensible a otro tipo de cálculos como son el estado dinámico y la optimización, los cuales pueden ser llevados a cabo por diferentes rutinas de cálculo.
- Es posible aplicar estrategias de particionamiento que agilicen la resolución de estos grandes sistemas de ecuaciones, solucionando así una de las grandes desventajas de esta estrategia.
- Es más sencillo de realizar el diagnóstico para cierto tipo de errores en la formulación del problema. Por ejemplo, si existe un problema en la especificación del modelo, un simulador orientado a ecuaciones tiene la posibilidad de chequear el sistema completo de ecuaciones en búsqueda del mismo, como por ejemplo puede ser la singularidad del modelo.

Desventajas

- Generalmente los métodos numéricos desarrollados para sistemas no lineales no son tan confiables y robustos como el enfoque secuencial. Más aún, para grandes sistemas de ecuaciones es necesario conocer previamente una aproximación a la solución del sistema, de manera tal de brindar adecuados puntos iniciales al método numérico para que este converja hacia la solución.
- El enfoque necesita de mayores recursos computacionales para llevar a cabo los cálculos de los grandes sistemas de ecuaciones.
- Tanto los modelos matemáticos como las rutinas para cálculo de propiedades termodinámicas deben ser ingresados por el usuario, resultando esto una tarea compleja y que debe ser llevada a cabo con sumo cuidado, de manera tal de ingresar en forma correcta todos los modelos matemáticos.

3 OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS

Llevar a cabo la resolución de un problema de optimización implica encontrar el valor que deben tomar las variables que forman parte del modelo matemático, para hacer óptima una determinada función. A diferencia de los problemas de simulación, los problemas de optimización cuentan con un número mayor de variables que de ecuaciones, las cuales son fijadas mediante el cumplimiento de ciertos requerimientos para encontrar el óptimo buscado. Los problemas de optimización se componen básicamente de tres elementos:

- **Función objetivo:** Es la medida cuantitativa del funcionamiento del modelo que se desea optimizar (maximizar o minimizar). Como ejemplo de funciones objetivo se

pueden mencionar: la minimización de costos operativos de una planta, la maximización de los beneficios netos de venta, la minimización de la materia prima utilizada en la fabricación de un producto, etc.

- **Variables:** Representan las decisiones que se pueden tomar para afectar el valor de la función objetivo. Desde un punto de vista funcional se pueden clasificar en variables *independientes o de control* y variables *dependientes o de estado*, aunque matemáticamente todas son iguales.
- **Restricciones:** Representan el conjunto de relaciones (expresadas mediante ecuaciones e inecuaciones) que ciertas variables está obligadas a satisfacer.

Existen algunos problemas de optimización que se desvían ligeramente del esquema presentado anteriormente. Ellos son:

- **Sistemas de ecuaciones lineales/no lineales:** No existe una función objetivo como tal. Únicamente interesa encontrar una solución factible a un problema con un conjunto dado de restricciones.
- **Optimización sin restricciones:** Se trata de encontrar el conjunto de valores de las variables que determinan el mínimo/máximo de una función objetivo, sin tener que cumplir con algún grupo de restricciones impuestas.
- **Optimización multiobjetivo:** Se trata de problemas con más de una función objetivo. El problema que se plantea es cómo trabajar con varias funciones objetivo a la vez. Teniendo en cuenta que el óptimo para un objetivo no lo es para otro, son objetivos en conflicto entre sí.

3.1 Métodos de optimización

A continuación se incluye la clasificación de los métodos utilizados para llevar a cabo la optimización de un determinado modelo matemático:

- **Métodos clásicos:** Son los métodos que habitualmente se pueden encontrar en los libros de optimización (Hillier y Lieberman, 1997; Edgar y Himmelblau, 1988). Entre ellos se encuentran la optimización lineal, lineal mixta entera, no lineal, estocástica, dinámica, etc.
- **Métodos metaheurísticos:** Dentro de este grupo se encuentran los algoritmos evolutivos (genéticos entre otros), el método del recocido simulado (*simulated annealing*) y las búsquedas heurísticas (método tabú, búsqueda aleatoria, etc).

De manera general, se puede afirmar que los métodos clásicos buscan y garantizan la obtención de un óptimo local mientras que los métodos metaheurísticos tienen mecanismos específicos para alcanzar un óptimo global aunque no garantizan su alcance.

4 GENERADOR DE MODELOS PARA SIMULACIÓN Y OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS INDUSTRIALES

A continuación se presentan las principales características del generador de modelos desarrollado, detallando las diferentes partes que componen el programa.

4.1 Objetivos de diseño del software y características principales del mismo

En cuanto a los objetivos específicos de diseño del software generador de modelos, los mismos se definieron de manera tal que el programa contara con:

- Visualización completa de la planta de procesos, de manera tal que resulte natural y sencillo el ingreso al programa de una nueva planta.
- Utilización de programación orientada a objetos, cuya filosofía permite una representación natural del tipo de información que se maneja en el armado de una planta de procesos (cada equipo representa un objeto independiente).
- Modelado matemático riguroso y preciso de plantas reales así como también de las propiedades físicas y químicas de las corrientes que integran el proceso.
- Adecuada sintaxis en el modelo generado, de manera tal que el mismo pueda ser ingresado a un directamente simulador orientado a ecuaciones.
- Flexibilidad en las opciones de modelado, de manera tal de facilitar la incorporación de nuevos modelos de equipos y ecuaciones termodinámicas.
- Chequeos de consistencia y validación de datos.
- Herramientas inteligentes que permitan facilitar el ingreso de la topología de la planta, así como también realizar chequeos en corrientes y equipos.
- Capacidad para el tratamiento de plantas de dimensión industrial.
- Guía para desarrolladores, la cual detalle la metodología a seguir para incorporar nuevos equipos o paquetes termodinámicos, así como también modificar los modelos ya existentes.

En base al cumplimiento de estos objetivos, se desarrolló entonces un software que posee una interfase amigable y permite al usuario ingresar la topología completa de una planta química de manera secuencial, seleccionando de un menú los equipos que forman parte de la misma. El programa tiene incorporada una etapa de verificación, la cual se encarga de chequear de manera automática que el flowsheet ingresado no contenga inconsistencias en los compuestos de las corrientes que ingresan o salen de los equipos, así como también en las fases de las mismas.

Una vez llevados a cabo con éxito los chequeos mencionados anteriormente, el programa genera automáticamente el modelo matemático completo que representa el proceso en cuestión, en un formato compatible con el software comercial orientado a ecuaciones GAMS. De esta manera, dicho modelo pueda ser simulado u optimizado dependiendo de las necesidades del usuario. El programa informa al usuario las dimensiones del modelo de manera tal que el mismo pueda analizar si el modelo resultante es cuadrado o si posee grados de libertad que permitan llevar a cabo la optimización del mismo.

El enfoque utilizado para llevar a cabo la programación del paquete se denomina orientado a objetos. El mismo permite darle la suficiente flexibilidad al programa como para que el usuario pueda incorporar cualquier tipo de equipo con mínimo esfuerzo. Para ello, debe seguirse una determinada sintaxis desarrollada en Lenguaje Extensible de Marcas (XML) (Raik, E, 2001). Cada uno de los equipos ingresados por el usuario, así como también los modelos termodinámicos, son tratados como bloques independientes, los cuales una vez

programados son incorporados de manera directa al módulo principal, resultando así disponibles para su utilización en cualquier caso que quiera ingresarse.

Es importante destacar que la sintaxis con la que los modelos matemáticos son generados puede ser modificada fácilmente, de manera tal de adaptar los modelos a los diferentes programas de resolución que quieran ser utilizados. En nuestro caso en particular se eligió generar una salida totalmente compatible con GAMS de manera tal de poder aprovechar la gran cantidad de algoritmos de resolución con los que cuenta dicho software. De esta manera, el usuario genera de manera externa y mediante la utilización de nuestro software el modelo de la planta en cuestión, pudiendo introducir luego el mismo a GAMS para realizar la simulación u optimización del mismo

4.2 Descripción del software

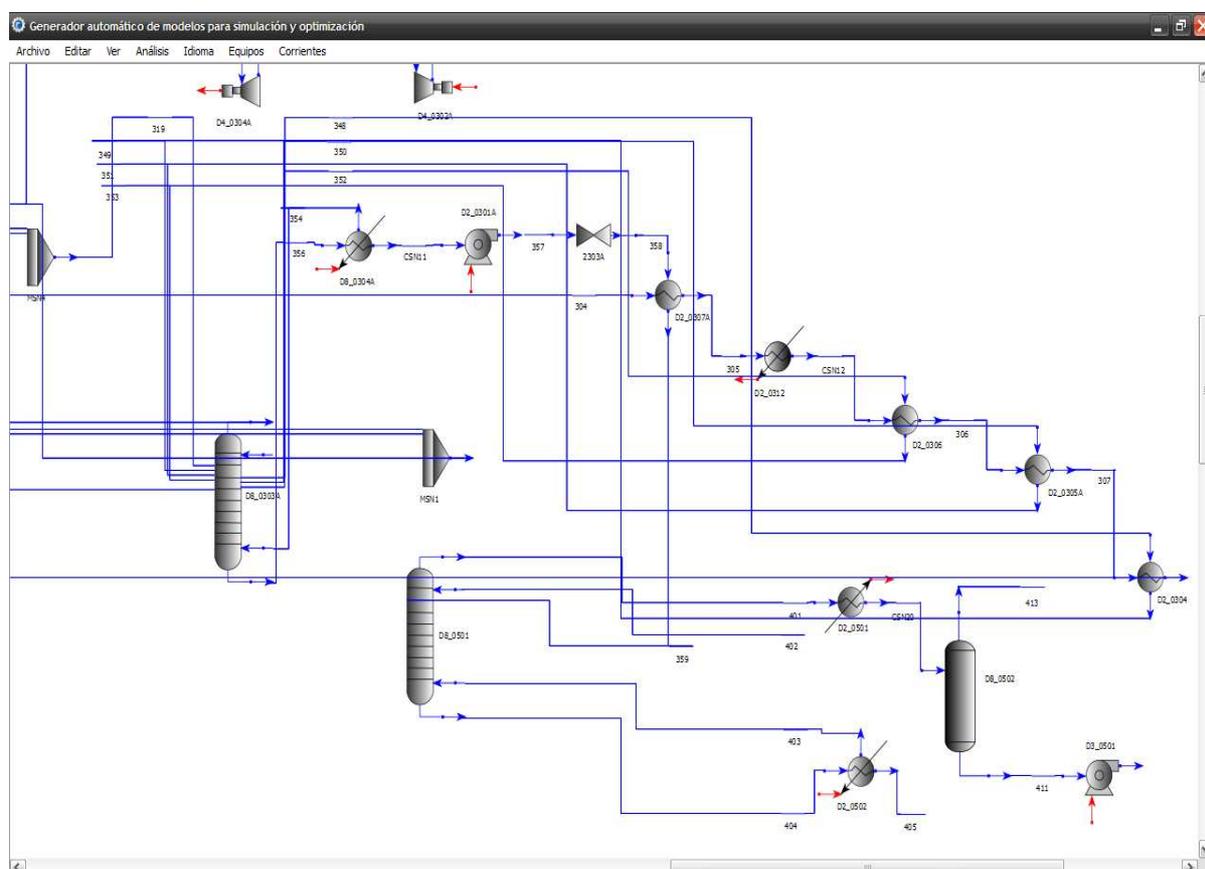


Figura 1: Captura de pantalla del área principal del software para un caso de estudio.

A continuación se describen los principales componentes del software. La figura 1 muestra una captura de pantalla del mismo, donde se visualiza un caso de estudio incorporado.

Área principal

Se trata de la parte del programa destinada al ingreso de la topología del proceso a estudiar. Sobre ella el usuario dibuja el flowsheet del proceso del cual se generará el modelo matemático.

Archivos

Permite generar un nuevo archivo y guardar los cambios generados en él, así como también abrir modelos previamente desarrollados con el software. También desde este menú es posible imprimir el flowsheet que haya sido ingresado.

Editar

Este menú permite modificar en todo momento los compuestos que forman parte del modelo, así como también seleccionar la fuente con que son nombrados los equipos en el flowsheet.

Ver

Permite al usuario incrementar o reducir el tamaño del flowsheet.

Idioma

Brinda la opción de utilizar el software en castellano o inglés.

Análisis

Este menú se encarga de llevar a cabo el análisis de consistencias del modelo, así como también de generar el modelo matemático final que representa el proceso en cuestión. El procedimiento por el cual se lleva a cabo está dividido en dos etapas:

- **Chequeo de consistencias:** Una vez ingresada la topología completa de la planta, se lleva a cabo esta primera etapa, la cual se encarga de chequear que no existan inconsistencias entre los equipos y las corrientes que ingresan o abandonan los mismos. El chequeo verifica que las fases de las corrientes sean las correctas de acuerdo al equipo a las que están conectadas, así como también de verificar la correcta definición de los compuestos que forman parte de ellas.
- **Generación del modelo matemático:** Una vez realizados con éxito los chequeos respectivos, se genera el modelo matemático completo que representa el comportamiento de la planta en cuestión. El modelo luego puede ser guardado en formato HTML (Lenguaje de Marcas de Hipertexto) de manera tal de poder ser manipulado con mayor facilidad.

Equipos

Contiene la librería de equipos de la que dispone el usuario para construir la topología de la planta. Una vez seleccionado y ubicado un equipo en el área principal, el usuario debe ingresar dentro de él de manera tal de especificar el mismo de manera completa. Al ingresar al equipo se abre una ventana del mismo la cual permite al usuario definir el nombre del mismo, así como también sus conexiones y parámetros conocidos. Contiene los siguientes ítems:

- **General:** Ventana reservada para que el usuario ingrese el nombre del equipo, así como también cualquier nota que desee referida al mismo. La figura 2 muestra la ventana "General" para una bomba centrífuga.

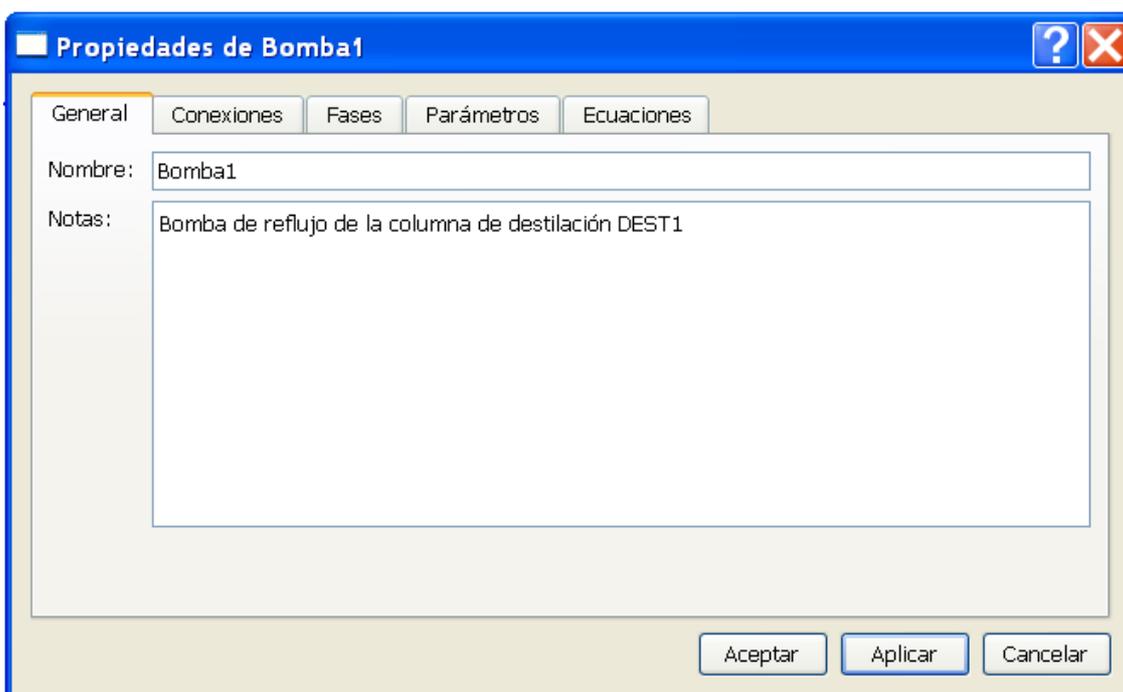


Figura 2: Ventana “General” del equipo para definición del nombre del mismo y notas.

- **Conexiones:** En esta ventana se definen las corrientes de materia que ingresan y egresan del equipo (ver figura 3).

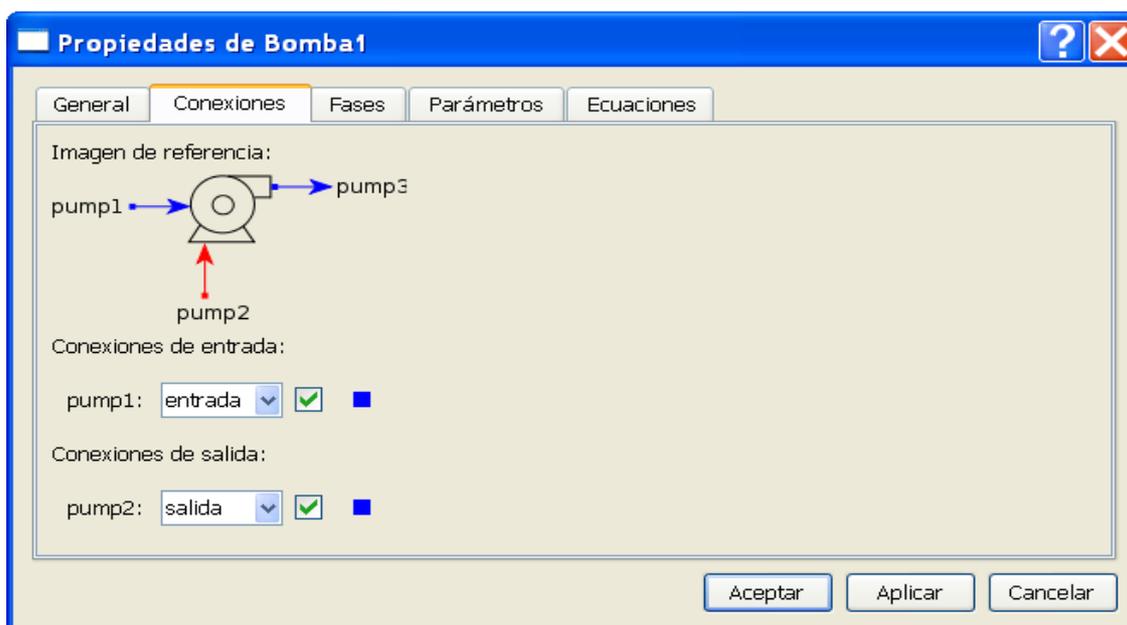


Figura 3: Definición de las corrientes de entrada y salida del equipo.

- **Fases:** Informa, de acuerdo al equipo con que se está trabajando, en qué fase se deben encontrar las corrientes que sean conectadas al mismo (ver figura 4).

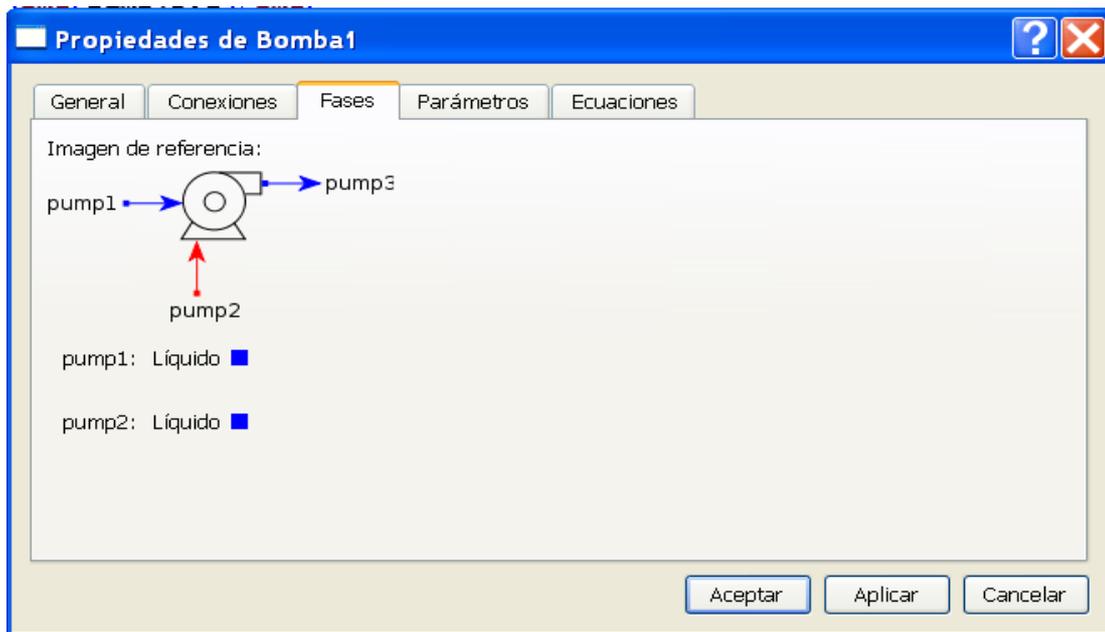


Figura 4: Pantalla de información sobre las fases admitidas por el equipo.

- Parámetros:** Desde esta ventana se ingresan al programa los valores de los parámetros característicos del equipo (ver figura 5), como por ejemplo: caída de presión en el mismo, potencia consumida, eficiencia, etc. Dichos parámetros deben ser ingresados si son valores conocidos, ya que si no se ingresa número alguno (siendo 0.00 el valor por defecto) se indica al programa que dichos parámetros son en realidad variables cuyo valor será luego calculado mediante la simulación u optimización del modelo.

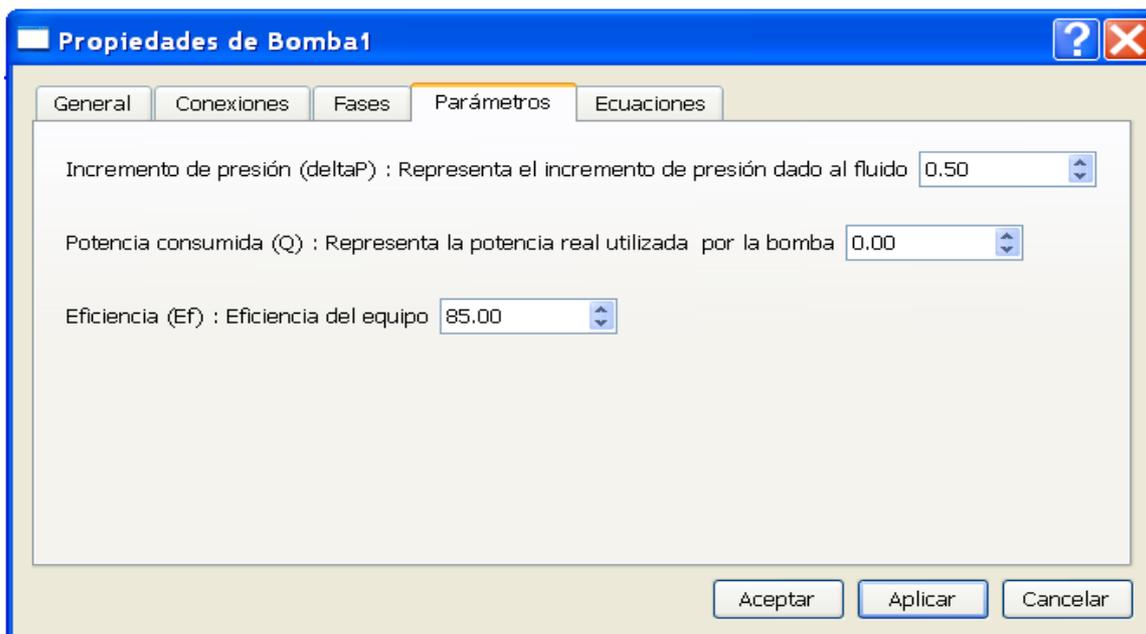


Figura 5: Definición de los parámetros del equipo.

- **Ecuaciones:** Muestra la lista total de ecuaciones del equipo (figura 6). Por defecto se encuentra seleccionado un determinado grupo de ecuaciones, teniendo el usuario la posibilidad de seleccionar las que desee de acuerdo al nivel de detalle con que se quiera modelar el equipo.

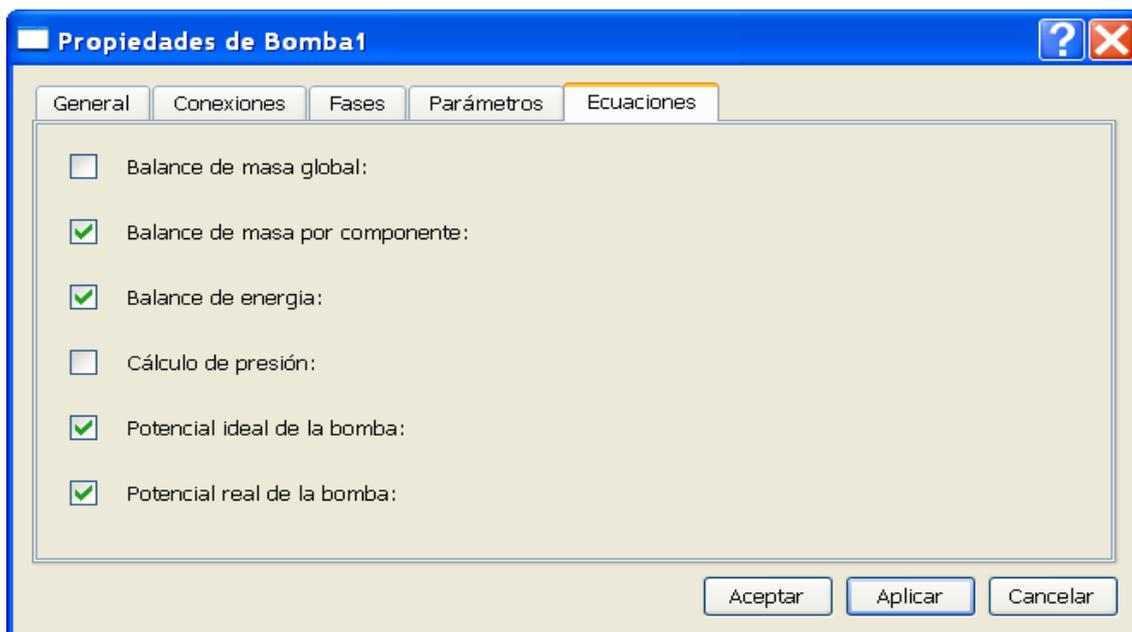


Figura 6: Definición de las ecuaciones que forman parte del modelo matemático del equipo.

Corrientes

Contiene las corrientes materiales que utiliza el usuario para realizar las conexiones entre equipos. Una vez ubicada la corriente en el área principal, el usuario debe ingresar dentro de ella de manera tal de completar las especificaciones necesarias de la misma. Al ingresar a la corriente se abre una ventana que contiene los siguientes ítems:

- **General:** Ventana reservada para que el usuario ingrese el nombre de la corriente, así como también cualquier nota que desee referida a la misma. También se debe definir la fase en que se encuentra la misma, es decir, líquido, vapor o mezcla. La figura 7 muestra la ventana "General" para una determinada corriente.

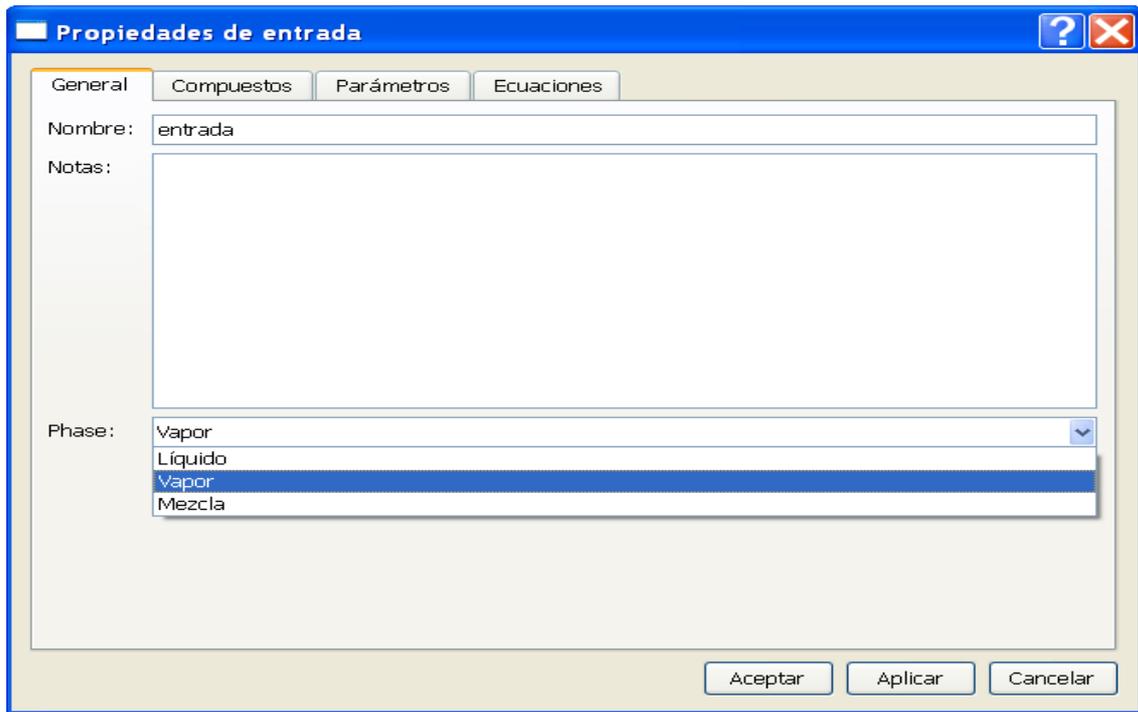


Figura 7: Definición de las propiedades de la corriente. Pantalla "General".

- **Compuestos:** En esta ventana el usuario define los compuestos que forman parte de la corriente que está siendo definida (figura 8). Para ello se debe seleccionar de la lista total de compuestos que forman parte de la simulación (definida al comenzar un nuevo caso de estudio) aquellos que integran dicha corriente.

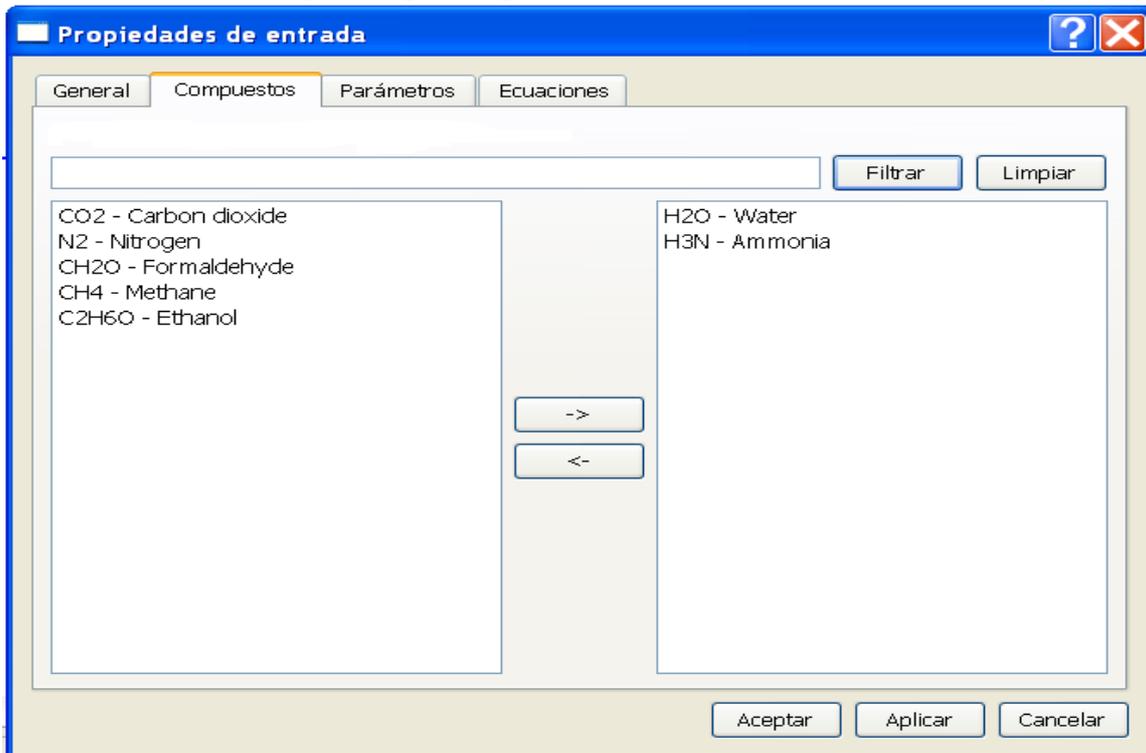
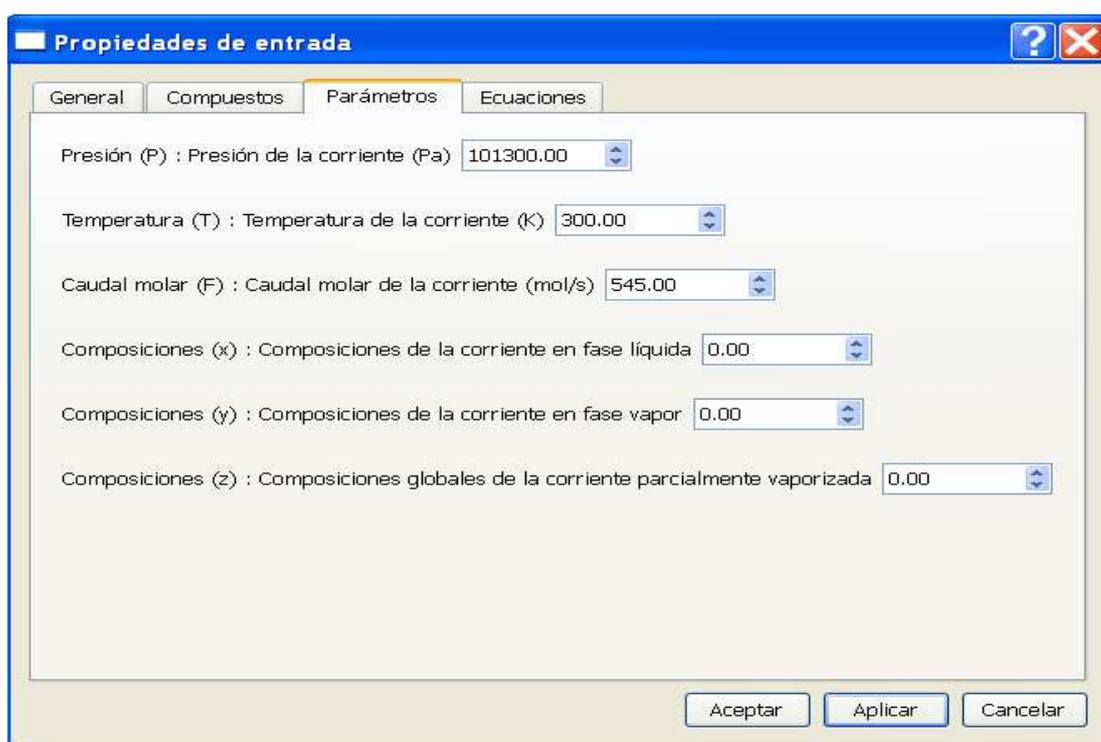


Figura 8: Definición de los compuestos que integran la corriente.

- **Parámetros:** Esta ventana contiene una lista de las variables medibles que forman parte de la corriente, es decir: caudal, composición, temperatura y presión (ver figura 9). El usuario debe ingresar los valores de las variables que sean conocidas, y dejar vacíos los campos de aquellas que quedarán como incógnitas y serán calculadas con la simulación u optimización del modelo.



The image shows a software window titled "Propiedades de entrada" with a blue header bar. Inside, there are four tabs: "General", "Compuestos", "Parámetros", and "Ecuaciones". The "Parámetros" tab is selected. The window contains six input fields, each with a label and a numerical value in a text box with a small up/down arrow icon to its right. The fields are: "Presión (P) : Presión de la corriente (Pa)" with value 101300.00; "Temperatura (T) : Temperatura de la corriente (K)" with value 300.00; "Caudal molar (F) : Caudal molar de la corriente (mol/s)" with value 545.00; "Composiciones (x) : Composiciones de la corriente en fase líquida" with value 0.00; "Composiciones (y) : Composiciones de la corriente en fase vapor" with value 0.00; and "Composiciones (z) : Composiciones globales de la corriente parcialmente vaporizada" with value 0.00. At the bottom right of the window are three buttons: "Aceptar", "Aplicar", and "Cancelar".

Figura 9: Definición de las variables medidas de la corriente.

- **Ecuaciones:** Muestra la lista total de ecuaciones que modelan las propiedades físicas, químicas y de equilibrio de la corriente en cuestión (ver figura 10). La ventana posee una función denominada "Tildar ecuaciones" la cual, una vez definida la fase de la corriente, selecciona de manera automática solamente las ecuaciones que correspondan a la fase de la corriente, no incluyendo en el modelo aquellas que no debieran formar parte del mismo.

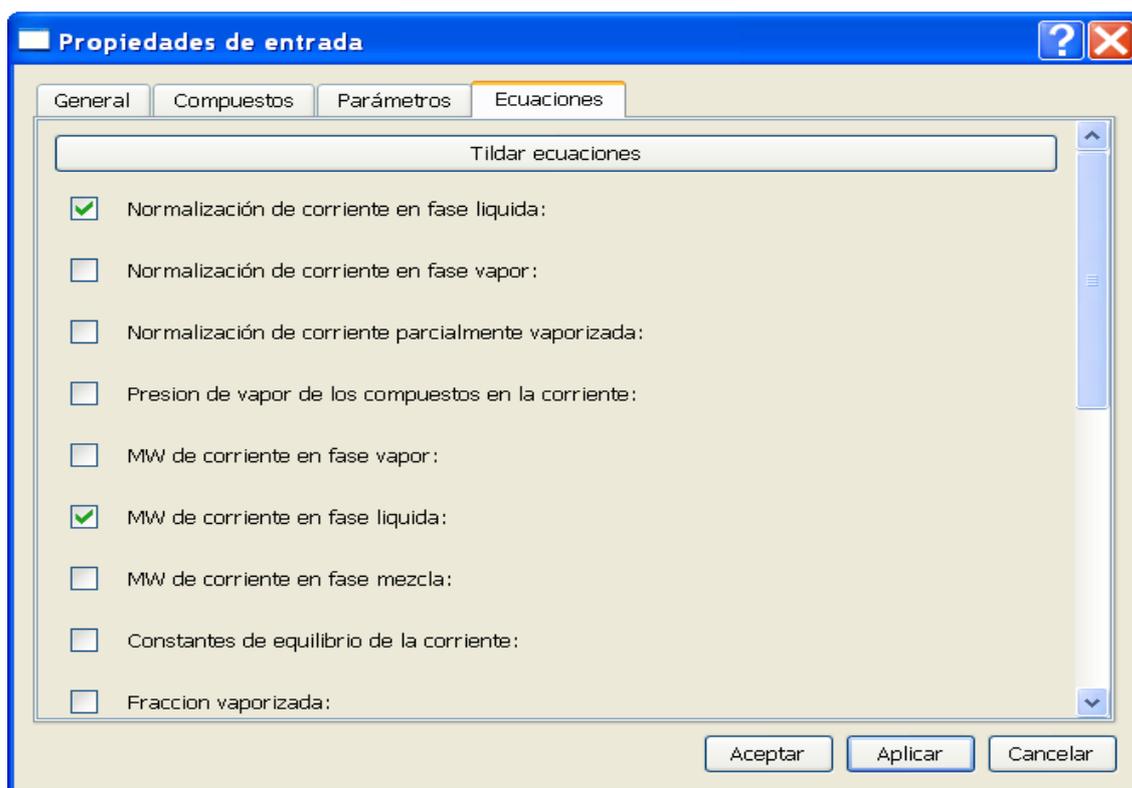


Figura 10: Selección de las ecuaciones que modelan las propiedades físicas y químicas de la corriente

5 CONCLUSIONES

En este trabajo se presentó un software para la generación automática de modelos matemáticos de plantas de procesos. El mismo permite obtener el sistema de ecuaciones que representa el funcionamiento de una planta de procesos a partir del ingreso al programa de la topología de la misma. Una vez obtenido el sistema de ecuaciones, se puede llevar a cabo la resolución del mismo por medio de alguno de los algoritmos disponibles para ello, teniendo en cuenta las características del sistema obtenido.

El software posee una interfase amigable que permite al usuario ingresar la topología completa de una planta química de manera secuencial, seleccionando de un menú los equipos que forman parte de la misma. El programa tiene además incorporada una etapa de verificación, la cual se encarga de chequear de manera automática que el flowsheet ingresado no contenga inconsistencias en los compuestos de las corrientes que ingresan o salen de los equipos, así como también en las fases de las mismas.

Una vez realizados los chequeos automáticos, se genera el modelo matemático completo que representa el proceso en cuestión, en un formato compatible con GAMS, de manera tal que dicho modelo pueda ser simulado u optimizado dependiendo de las necesidades del usuario. Se eligió en particular la sintaxis de GAMS poder aprovechar la gran cantidad de algoritmos de resolución con los que cuenta dicho software. Es importante destacar que no resulta dificultoso modificar dicha sintaxis de manera tal de adaptarlo a cualquier otro programa o algoritmo de resolución que quiera ser utilizado.

El generador de modelos fue desarrollado utilizando un enfoque de programación orientado a objetos. De esta manera resulta flexible a la incorporación de nuevos equipos o paquetes termodinámicos de manera relativamente sencilla, siguiendo una metodología desarrollada en lenguaje XML.

Mediante la utilización de este generador de modelos, el usuario obtiene, de manera externa al programa resolutor, el modelo de cualquier planta de procesos, pudiendo introducir luego el mismo a GAMS para realizar la simulación u optimización del mismo, sin tener necesidad de conocer la sintaxis específica de dicho programa.

REFERENCIAS

- Berrais, A. Knowledge-based expert systems: user interface applications. *Advances in Engineering Software*, Vol. 28 No. 1, pp. 31-42, 1998.
- Bhushan, M. y Rengaswamy, R. Design of Sensor Location Based on Various Fault Diagnostic Observability and Reliability Criteria. *Computers & Chemical Engineering*, Vol. 24 No. 2-7, pp. 735-741, 2000.
- Biegler, L. Chemical Process Simulation. *Chemical Engineering Progress*, pp 50-61, 1989.
- Bogusch, R y Marquardt, W. A formal representation of process model equations. *Computers & Chemical Engineering*, Vol. 21 No. 10, pp. 1105-1115, 1997.
- Brooke, A.; Kendrick, D.; Meeraus, A. y Raman, R. GAMS: A User's guide, 2004.
- Dietrich, E. y Eigenberg, G. Bimap, a tool for computer aided modeling in chemical reaction engineering equation oriented dynamic simulation: current status and future perspectives. *Computers & Chemical Engineering*, 19S, pp. 773-778, 1995.
- Edgar T. y Himmelblau, D. Optimization of Chemical Processes. McGraw-Hill, 1988.
- Hillier, F. y Lieberman, G. Introduction to Operations Research. McGraw-Hill, 1997
- Marquardt, W. Trends in computer-aided process modeling. *Proc. of 5th International Symposium on Process Systems Engineering*, Kyongju, Korea, 1, pp. 1-24, 1994.
- Pantelides, J y Barton, P. Equation oriented dynamic simulation: current status and future perspectives. *Computers & Chemical Engineering*, 17S, pp. 263-285, 1993
- Perkins J. y Sargent R. Speedup: a computer program for steady-state and dynamic simulation and design of chemical processes. *AIChE Symp Series*, Vol 78 (214), 1-11, 1982
- Raik, E. Learning XML. Ed. O'Reilly, 2001
- Singh, A. y Hahn, J. Determining optimal sensor locations for state and parameter estimation for stable nonlinear systems. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, Vol 44 No 15, pp. 5645-5659, 2005.
- Singh, A. y Hahn, J. Sensor location for stable nonlinear dynamic systems: Multiple sensor case. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, Vol 45 No 10, pp. 3615-3623, 2006.
- Vazquez-Roman, R.; King, J.; Bañares, R. KBMoSS: a process engineering modeling support system. *Computers & Chemical Engineering*, Vol. 20, pp. 309-314, 1996