

**Título de la Tesis: “Optimización dinámica de procesos de gran escala”**

**Doctorado en Ingeniería Química**

**Autor: De la Torre, Vanesa Lorena**

**Director: Dr. José Alberto Bandoni**

## **Resumen**

Los Procesos de Adsorción Periódica (Periodic Adsorption Processes, PAPs) se han convertido en los últimos años en una tecnología clave para la separación de gases en la industria química. Los PAPs operan a temperatura y presión ambiente y requieren por consiguiente menor inversión de capital que las tecnologías de separación de gases convencionales como destilación criogénica. Los modelos que representan los PAPs están conformados por Ecuaciones a Derivadas Parciales (Partial Differential Equations, PDEs) en tiempo y espacio con condiciones de borde periódicas que vinculan los distintos pasos del proceso.

Existe un especial interés en la comunidad científica por el diseño, optimización y control de los PAPs dada su creciente importancia industrial. Particularmente el control de tales sistemas es necesario a los fines de reducir el impacto económico debido a ineficiencias temporales causadas por variaciones en la demanda de producto o perturbaciones en la corriente de alimentación. Tales cambios generan en el proceso una baja recuperación de producto, sobreproducción y no cumplimiento de las especificaciones de producto. Además, es importante resaltar que el control de los PAPs representa un desafío significativo para las técnicas de control convencionales.

En esta tesis se han propuesto estrategias de control y optimización flexibles y confiables a los fines de sobrellevar los inconvenientes asociados a la naturaleza intrínseca altamente no lineal de los PAPs. Así mismo, resulta esencial el empleo de herramientas computacionales sofisticadas y eficientes dada la complejidad matemática asociada a la resolución de estos sistemas. Los beneficios de los enfoques propuestos son demostrados a través de procesos de separación complejos.

Título de la Tesis: "Optimización dinámica de procesos de gran escala"

Doctorado en Ingeniería Química

Autor: De la Torre, Vanesa Lorena

Director: Dr. José Alberto Bandoni

### Abstract

Periodic Adsorption Processes (PAPs) have become a key technology for gas separation. PAPs operate at ambient conditions and require by far less capital investment than other gas separation technologies. As a result, they have become especially attractive for bulk gas separations of oxygen, nitrogen and hydrogen. Models for PAPs are multiple instances of Partial Differential Equations (PDEs) in time and space with periodic boundary conditions that link the processing steps together.

Particularly, the control of such systems is necessary for reducing the economic impact of low recovery, wasteful overproduction and low product specifications caused by varying production demands or incoming disturbances in feed streams. However, PAPs also represent a significant challenge to standard control techniques. In this contribution, a flexible and reliable control and novel nonlinear programming strategy is developed to overcome the difficulties associated to the inherent nonlinear nature of PAPs. The approach incorporates the use of sophisticated and efficient computational tools as Automatic Differentiation. The overall optimization and control strategy is applied to complex PAPs. Results on these examples demonstrate tremendous potential over previous studies.