

**Título de la Tesis: “Resolución eficiente de problemas en ingeniería de procesos :
aprovechamiento de la estructura de la matriz de incidencia”**

Doctorado en Ingeniería Química

Autor: Domancich, Alejandro Omar

Directores: Hoch, Patricia Mónica - Brignole, Nélida Beatriz

Resumen

El objetivo de esta Tesis ha sido desarrollar métodos para análisis estructural de modelos matemáticos y resolución de problemas en ingeniería de procesos. Estos métodos pueden ser aplicados a los campos de diseño de instrumentación, simulación y optimización de procesos químicos. Se utilizó como herramienta el Método Directo (MD), que es una técnica novedosa de análisis estructural. El MD es un nuevo algoritmo de particionamiento que efectúa un reordenamiento estructural de la matriz de incidencia correspondiente al modelo de estado estacionario de un proceso, para llevarla a una forma triangular inferior en bloques y establecer una descomposición en subsistemas y un orden de precedencia. La Tesis puede dividirse en dos partes: un análisis cualitativo de procesos químicos (estudio de modelos desde un punto de vista estructural) y un análisis cuantitativo (resolución de modelos matemáticos). El primer tipo de análisis resulta aplicable al campo de diseño de instrumentación, mientras que el segundo es aplicable a los campos de simulación y optimización de procesos. La contribución original realizada en el campo de diseño de instrumentación está dada por el desarrollo de una versión modificada del MD, denominada Método Directo Extendido (MDE). Este nuevo algoritmo consiste en la implementación de un módulo que cuantifica la no linealidad inherente a un sistema de ecuaciones. Este módulo guía al MD tradicional hacia la descomposición del modelo matemático en subsistemas con el menor grado de no linealidad posible, es decir potencialmente más fáciles de resolver. Mediante la aplicación del MDE, se obtiene una reducción en la no linealidad de los subsistemas obtenidos a través del análisis de observabilidad. Al mismo tiempo, el algoritmo es capaz de incrementar la cantidad de bloques generados de mínimo tamaño. La aplicación del MDE favorece el proceso global de diseño de instrumentación en tres aspectos principales: incremento en la velocidad de procesamiento de datos, provisión de conocimiento adicional acerca del nivel de redundancia del modelo y simplificación en la tarea de reconciliación de datos de una planta. Con respecto a los campos de simulación y optimización de procesos, la contribución realizada consistió en desarrollar un paquete completo que permite generar, particionar y resolver modelos matemáticos pertenecientes a plantas químicas; no sólo tratando los casos cuadrados, sino también los modelos que dan lugar a estructuras rectangulares. La resolución se realiza luego de efectuadas dos etapas. En la primera, el usuario obtiene de manera automática 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. En una segunda etapa, el programa particiona el modelo obtenido (utilizando de manera interna el MDE) y brinda una estrategia de resolución en bloques. Luego, se lleva a cabo la simulación u optimización del modelo dependiendo de las características del mismo. El paquete desarrollado es sencillo de utilizar y flexible para cualquier proceso químico con el que se desee trabajar, combinando además las ventajas que naturalmente posee el enfoque de simulación secuencial modular con las del enfoque orientado a ecuaciones.

**Título de la Tesis: “Resolución eficiente de problemas en ingeniería de procesos :
aprovechamiento de la estructura de la matriz de incidencia”**

Doctorado en Ingeniería Química

Autor: Domancich, Alejandro Omar

Directores: Hoch, Patricia Mónica - Brignole, Nélide Beatriz

Abstract

The general purpose of this thesis was to develop methods for both the structural analysis of mathematical models and the resolution of problems in process engineering. These methods can be applied to instrumentation design, simulation and optimization fields. The Direct Method (DM), which is a novel technique for structural analysis, was employed. Based on graph theory, the DM carries out a structural reordering of the incidence matrix that corresponds to the steady-state model of a process. This restructuring leads to a block-lower triangular form. The partitioning implicitly defines both a block-decomposition and the precedence order among blocks. The thesis can be divided in two main parts: a qualitative analysis of chemical processes (from a structural point of view, it is a model study) and a quantitative analysis (resolution of mathematical models). The first kind of examination is practical for instrumentation design, while the second one can be applied to process simulation and optimization fields. The original contribution made in the field of instrumentation design is the development of a modified DM version, which was called the Extended Direct Method (EDM). This algorithm consists in the implementation of a module that quantifies the nonlinearity inherent to an equation system. This module guides the traditional DM towards the decomposition of the mathematical model in subsystems with the smallest possible degree of nonlinearity, i.e. potentially easier to solve. The results show that the EDM is able to reduce the nonlinearity of the subsystems obtained through the observability analysis procedure. At the same time, it can successfully increase the number of minimum size subsystems. The EDM application contributes to the improvement of the DSS global performance in three main aspects: it increases the data processing speed; it provides additional knowledge about the redundancy level of the model and it simplifies the data reconciliation task for a plant. Regarding the fields of process simulation and optimization, the main contribution consists in the development of a complete package for the generation, the partition and the resolution of mathematical models that belong to chemical plants, not only treating the square models, but also dealing with rectangular structures. The resolution is carried out after having completed two main stages. Firstly, the user obtains automatically the equation system that represents the process plant behaviour, by feeding the plant topology to the software programme. In the second stage, the programme partitions the model (by internally using the EDM) and proposes a block-resolution strategy. Then, the simulation and optimization are carried out, depending on the model characteristics. The developed package is user-friendly and flexible for any chemical process, thus combining the advantages of the sequential modular approach with those of the equation-oriented one.