

**Título de la Tesis: “Modelamiento y optimización en procesos de separación criogénica”**

**Doctorado en Ingeniería Química**

**Autor: Rodríguez, Mariela Alejandra**

**Directores: Dra. Ma. Soledad Díaz - Dra. Patricia M. Hoch**

## **Resumen**

La optimización dinámica de procesos complejos integrados ha despertado gran interés en los últimos años y requiere tanto de modelos suficientemente rigurosos para predecir condiciones realistas de operación como de algoritmos de resolución robustos y eficientes para los problemas de gran tamaño resultantes.

En esta tesis se han formulado modelos dinámicos rigurosos, basados en primeros principios, para las principales unidades que componen una planta de procesamiento de etano por turboexpansión en un marco de optimización dinámica con enfoque simultáneo. Las contribuciones de esta tesis incluyen modelos de sistemas a parámetros distribuidos que representan intercambiadores de calor a contracorriente con y sin cambio de fase, unido al modelado termodinámico con una ecuación de estado cúbica. Otros aportes incluyen modelos rigurosos de índice uno para columnas de destilación, con un manejo adecuado de las condiciones de solubilidad de dióxido de carbono en las etapas superiores de la columna, como restricciones de camino del problema de optimización dinámica.

**Título de la Tesis: “Modelamiento y optimización en procesos de separación criogénica”**

**Doctorado en Ingeniería Química**

**Autor: Rodríguez, Mariela Alejandra**

**Directores: Dra. Ma. Soledad Díaz - Dra. Patricia M. Hoch**

La principal contribución consiste en la formulación de un modelo completo de plantas criogénicas de extracción de etano mediante la integración de los modelos correspondientes a las unidades que, además de los ya mencionados, abarca modelos dinámicos de tanques separadores y turboexpansores, también desarrollados en el marco de esta tesis.

Finalmente, se han formulado los problemas de optimización dinámica integrados a algoritmos simultáneos de resolución, donde las variables de optimización y las de estado diferenciales y algebraicas se aproximan por polinomios a tramos y el sistema de ecuaciones diferenciales y algebraicas se discretiza por colocación ortogonal sobre elementos finitos. Los algoritmos de resolución del problema de Programación No Lineal resultante emplean un método de Punto Interior con técnicas de Programación Cuadrática Sucesiva en espacio reducido, que resultan eficientes y robustas.

La metodología presentada en esta tesis, unida a resultados numéricos que concuerdan con datos reales de una planta en operación, permite el estudio sistemático de la dinámica de la planta para operabilidad y control, y a la vez avanzar hacia la optimización dinámica en línea de la planta con modelos rigurosos basados en primeros principios.

**Título de la Tesis: “Modelamiento y optimización en procesos de separación criogénica”**

**Doctorado en Ingeniería Química**

**Autor: Rodríguez, Mariela Alejandra**

**Directores: Dra. Ma. Soledad Díaz - Dra. Patricia M. Hoch**

### **Abstract**

Dynamic optimization of large scale integrated processes has received increasing attention in the last few years. It requires reliable dynamic models with robust and efficient optimization algorithms.

This dissertation addresses the formulation of dynamic first principles models for the main units in a cryogenic natural gas processing plant within a simultaneous optimization approach. Main contributions include formulation of models for distributed parameter systems representing countercurrent heat exchangers with and without phase change and thermodynamic predictions with a cubic equation of state. The development of a rigorous index one dynamic model for a distillation column is another contribution whose main original feature is the direct formulation of carbon dioxide solubility constraints in the upper stages of the column as path constraints relating component fugacity in both phases. The use of a cubic equation of state with binary interaction coefficients tuned to the actual hydrocarbon mixture provides reliable predictions for equilibrium and solubility calculations.

**Título de la Tesis: “Modelamiento y optimización en procesos de separación criogénica”**

**Doctorado en Ingeniería Química**

**Autor: Rodríguez, Mariela Alejandra**

**Directores: Dra. Ma. Soledad Díaz - Dra. Patricia M. Hoch**

The main contribution is the formulation of an integrated dynamic model for the entire plant, which not only includes the above mentioned ones, but models for high pressure separators and turboexpanders, also developed in this dissertation. The large scale dynamic optimization problem has been formulated within a simultaneous framework, where both control and state variables are represented as piecewise polynomial functions over finite elements in time and the differential-algebraic system is discretized using orthogonal collocation over these finite elements. This converts the dynamic problem to an algebraic nonlinear program, which is solved with an Interior Point algorithm coupled with reduced space Successive Quadratic Programming strategies.

The proposed methodology provides numerical results in agreement with plant data and it can be used to address controllability and operability issues. At the same time, it constitutes a powerful tool to dynamic real time optimization of an entire plant based on first principles models.