

**TRABAJO ESPECIAL DE GRADO**

**DESARROLLO DE UNA HERRAMIENTA DE SIMULACIÓN  
PARA ESTUDIAR Y EVALUAR LA OPERACIÓN Y CONTROL  
DE UNA UNIDAD DE COMPRESIÓN DE GAS NATURAL**

Presentado ante la Ilustre

Universidad Central de Venezuela

Por el Br. Carrasquel M., Nelson A.

Para optar al Título

de Ingeniero Químico

Caracas, 2015

# **TRABAJO ESPECIAL DE GRADO**

## **DESARROLLO DE UNA HERRAMIENTA DE SIMULACIÓN PARA ESTUDIAR Y EVALUAR LA OPERACIÓN Y CONTROL DE UNA UNIDAD DE COMPRESIÓN DE GAS NATURAL**

TUTOR ACADEMICO: Prof. Andrés Rosales

CO-TUTOR: MSc. Domingo Ramírez

Presentado ante la Ilustre

Universidad Central de Venezuela

Por el Br. Carrasquel M., Nelson A.

Para optar al Título

de Ingeniero Químico

Caracas, 2015

Caracas, Junio de 2015

Los abajo firmantes, miembros del Jurado designado por el Consejo de Escuela de Ingeniería Química, para evaluar el Trabajo Especial de Grado presentado por Bachiller Nelson Antonio Carrasquel Marrero, titulado:

**“Desarrollo de una herramienta de simulación para estudiar y evaluar la operación y control de una unidad de compresión de gas natural”**

Consideran que el mismo cumple con los requisitos exigidos por el plan de estudio conducente al Título de Ingeniero Químico, y sin que ello signifique que se hacen solidarios con las ideas expuestas por el autor, lo declarar APROBADO



Prof. Nelson Mata  
Jurado



Prof. José Sorrentino  
Jurado



Prof. Andrés Rosales  
Tutor Académico



Prof. Domingo Ramírez  
Tutor Académico

Carrasquel M., Nelson A.

## **DESARROLLO DE UNA HERRAMIENTA DE SIMULACIÓN PARA ESTUDIAR Y EVALUAR LA OPERACIÓN Y CONTROL DE UNA UNIDAD DE COMPRESIÓN DE GAS NATURAL**

**Tutores Académicos: Prof. Andrés Rosales. Prof. Domingo Ramírez.**

**Tesis. Caracas, U.C.V. Facultad de Ingeniería. Escuela de Ingeniería Química.**

**Año 2015, 105 pp.**

**Palabras claves:** Simulación Dinámica, Red de Flujo-Presión, Gas Natural, Python, LabVIEW, Antisurge, Simulador UniSim Design, Modbus.

**Resumen.** En la industria de producción y acondicionamiento del gas natural, los compresores centrífugos forman parte de los principales equipos industriales utilizados, máquinas que trabajan en un rango limitado de operación, que pueden conllevar a graves o peligrosas consecuencias a causa de la indebida operación de las mismas, hoy en día el estudio y análisis de la operación de estos equipos y su interacción con los demás equipos en una planta de compresión de gas natural, puede ser realizado a través del uso de un simulador dinámico. El presente trabajo tiene como propósito el desarrollo de una herramienta de simulación para lograr este fin, donde se integra el modelado, simulación, control y operación en los ambientes de desarrollo Python y LabVIEW, partiéndose de una simulación construida en un simulador comercial, donde se simula una etapa típica de compresión de gas natural; para la cual se estudiaron los modelos involucrados que describen el comportamiento en estado estacionario y en estado transitorio, con evaluación de propiedades mediante la ecuación de estado de Peng-Robinson en los distintos equipos presentes en la simulación, y se desarrollaron con el paradigma de programación orientada a objetos, una verificación y validación de estos desarrollos se realizó, analizándose la respuesta transitoria ante cambios en las condiciones de operación con respecto al simulador comercial, como también la actuación de los controles capacidad y antisurge para mantener las condiciones de operación ante perturbaciones en el sistema, se desarrolló además, una interfaz de operación de fácil comprensión que puede ser instalada y lista para usarse en un computador, obteniéndose finalmente una herramienta de simulación en tiempo real, que permite estudiar y evaluar la operación y control de una unidad de compresión de gas natural.

# ÍNDICE GENERAL

ÍNDICE DE FIGURAS.....	viii
ÍNDICE DE TABLAS .....	x
CAPÍTULO I.....	1
FUNDAMENTOS DE LA INVESTIGACIÓN.....	1
Planteamiento del Problema.....	1
Objetivo General .....	3
Objetivos Específicos.....	3
CAPÍTULO II .....	4
ANTECEDENTES.....	4
CAPÍTULO III .....	7
MARCO TEÓRICO.....	7
LabVIEW .....	7
Python .....	7
Modelado de procesos.....	9
Simulador de procesos .....	10
Red de Flujo-Presión.....	11
Modbus.....	13
SciPy .....	14
Surge .....	14
Curvas características de un compresor .....	15
CAPÍTULO IV.....	19
MARCO METODOLÓGICO.....	19

Seleccionar una planta como caso base cuya configuración y equipos hayan sido simulados utilizando un simulador de procesos comercial .....	19
Realizar un análisis de grados de libertad del proceso de compresión .....	19
Desarrollar el modelado termodinámico con ecuaciones cúbicas de estado por el método de Peng-Robinson para las corrientes de fluidos .....	20
Programar los modelos de los equipos de una unidad de compresión de gas natural en estado estacionario y dinámico .....	21
Programar los modelos matemáticos de los lazos de control anti-surge y control de desempeño .....	31
Validar la herramienta desarrollada comparando y analizando los resultados obtenidos con el simulador de procesos comercial .....	31
Desarrollar una interfaz amigable y de fácil entendimiento .....	32
CAPÍTULO V .....	34
RESULTADOS Y DISCUSION DE RESULTADOS .....	34
Seleccionar una planta como caso base cuya configuración y equipos hayan sido simulados utilizando un simulador de procesos comercial .....	34
Realizar un análisis de grados de libertad del proceso de compresión .....	39
Desarrollar el modelado termodinámico con ecuaciones cúbicas de estado por el método de Peng-Robinson para las corrientes de fluidos .....	42
Programar los modelos de los equipos de una unidad compresión de gas natural en estado estacionario y dinámico.....	51
Programar los modelos matemáticos de los controles anti-surge y control de desempeño.....	62
Validar la herramienta desarrollada comparando y analizando los resultados obtenidos con el simulador de procesos comercial .....	64
Desarrollar una interfaz amigable y de fácil entendimiento .....	73

CAPÍTULO VI.....	79
CONCLUSIONES .....	79
RECOMENDACIONES .....	81
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	82
APENDICE.....	85
ANEXOS .....	94

## ÍNDICE DE FIGURAS

Figura N° 1. Objeto automóvil. Fuente: (Aspen Technology, Inc., 2011).....	8
Figura N° 2. Diagrama de flujo de una planta típica pequeña. ....	12
Figura N° 3. Red de flujo presión del diagrama de flujo de la figura N° 2 (Boys, 2014). Editado .....	12
Figura N° 4. Curvas características de un compresor centrífugo. (Elaboración Propia) .....	15
Figura N° 5. Modelo cúbico del rendimiento de un compresor a una velocidad dada (Elaboración propia).....	17
Figura N° 6. Módulo de válvula (Elaboración propia) .....	22
Figura N° 7. Modulo enfriador (Elaboración propia). ....	23
Figura N° 8. Esquema de cálculo para resolución de un compresor politrópico (Elaboración propia).....	25
Figura N° 9. Modulo separador (Elaboración propia). ....	28
Figura N° 10. Diagrama de Flujo de Procesos de la Simulación del Caso Base. ....	35
Figura N° 11. Análisis de Iteraciones para convergencia del algoritmo de sustitución sucesiva. ....	50
Figura N° 12. Secuencia de resolución de una simulación de estado estacionario (Elaboración propia).....	52
Figura N° 13. Secuencia de resolución de la simulación de estado estacionario para la herramienta de simulación (Elaboración propia). ....	53
Figura N° 14. Red de flujo-presión de la unidad de compresión de gas natural (Elaboración propia).....	54
Figura N° 15. Sincronización de los hilos de ejecución de Python para la herramienta de simulación (Elaboración propia). ....	58
Figura N° 16. Desempeño del Compresor K-100. ....	63
Figura N° 17. Respuesta a lazo cerrado de la capacidad y la velocidad para (a) 196 MMSCFD deseado. (b) 186 MMSCFD deseado. ....	67



Figura N° 18. Respuesta de los lazos de control de (a) temperatura y (b) presión para 196 MMSCFD.....	70
Figura N° 19. Respuesta de los lazos de control de (a) temperatura y (b) presión para 186 MMSCFD.....	71
Figura N° 20. Elementos de despliegue de valores numéricos. ....	73
Figura N° 21. Pestaña “Alimentación” de la herramienta de simulación. ....	74
Figura N° 22. Pestaña “Compresor - Enfriador" en la herramienta de simulación.....	75
Figura N° 23. Pestaña “Rendimiento” de la herramienta de simulación. ....	76
Figura N° 24. Despliegue de un control de procesos en la herramienta de simulación. .....	77
Figura N° 25. Pestaña “Separador” de la herramienta de simulación.....	78

## ÍNDICE DE TABLAS

Tabla N° 1. Especificaciones de las corrientes para el caso estacionario. ....	36
Tabla N° 2. Especificaciones de los equipos para el caso estacionario. ....	37
Tabla N° 3. Resultados de los equipos para el caso estacionario en el simulador comercial. ....	38
Tabla N° 4. Resultados de las corrientes para el caso estacionario en el simulador comercial. ....	39
Tabla N° 5. Grados de Libertad de los equipos presentes en el caso base. ....	40
Tabla N° 6. Lazos de control de procesos con sus variables manipuladas y de proceso. ....	41
Tabla N° 7. Estructura básica del objeto Componente. ....	43
Tabla N° 8. Estructura básica de las propiedades del objeto Corriente. ....	45
Tabla N° 9. Estructura de métodos del objeto Corriente. ....	47
Tabla N° 10. Grados de libertad de los equipos de la herramienta de simulación. ....	53
Tabla N° 11. Tiempo de cómputo de la simulación de estado estacionario a diferente número de iteraciones del método de sustitución sucesiva. ....	60
Tabla N° 12. Parámetros seleccionados para la sincronización de los hilos de ejecución. ....	61
Tabla N° 13. Resultados de simulación de estado estacionario para condiciones normales de operación. ....	64
Tabla N° 14. Resultados de simulación de estado estacionario para una temperatura de 292,75 y una presión de 14,7 bar en la corriente de alimentación. ....	65

# CAPÍTULO I

## FUNDAMENTOS DE LA INVESTIGACIÓN

En el presente capítulo se presenta el planteamiento del problema, objetivo general y los objetivos específicos.

### **Planteamiento del Problema**

Los compresores centrífugos son los equipos principalmente utilizados en la industria del gas y petróleo para las unidades de compresión del gas natural o del gas asociado; siendo máquinas de flujo de gases muy complejas que trabajan en un rango de operación limitado, cuyo control es de vital importancia para la seguridad, protección y eficiencia de las mismas (Hansen, 2008), requiriéndose de personal capacitado para la adecuada operación de estas unidades. Por otro lado las simulaciones dinámicas con fines de adiestramiento a operadores han cobrado importancia en la última década como herramientas de enseñanza donde se pueden señalar las siguientes ventajas:

- (a) Reducción del tiempo de adiestramiento de años a meses, debido a que cada aprendiz puede trabajar en su propia simulación a su ritmo.
- (b) Reducción de costos de adiestramiento e instrucción, debido a que se reduce el tiempo usado por el entrenador para transferir el conocimiento al aprendiz.
- (c) Reducción de riesgos ya que la simulación provee una mejor comprensión del proceso a estudiar, con lo cual se reducen incidentes y accidentes operacionales.

- (d) Mejoramiento del rendimiento de las unidades y operaciones, ya que el aprendiz logra identificar y aislar problemas de operación, y tomar acciones correctivas al respecto (GSE Systems, Inc., 2013).

Las alternativas comerciales para el desarrollo de estos sistemas de entrenamiento existen en el mercado mencionando como ejemplos, Aspen HYSYS Dynamics y Simtronics DSS-100, herramientas competitivas que sirven con el propósito de entrenamiento. Sin embargo se requiere de la adquisición de costosas licencias de los mismos, cabe mencionar además que poseen poca libertad a la hora de reproducir los esquemáticos de procesos encontrados en las industrias.

En base a lo planteado, la presente propuesta de Trabajo Especial de Grado busca desarrollar una herramienta de simulación para propósitos de entrenamiento de una unidad de compresión típica de gas natural, siendo utilizados en específico los lenguajes de programación Python y LabVIEW, en los cuales se incluye modelado matemático para la ejecución de la simulación estacionaria y dinámica, y por último los esquemáticos de operación respectivamente.

Python, siendo un lenguaje de programación interpretado multiplataforma, posee una librería de herramientas científicas de aplicación para el cálculo numérico y optimización llamada SciPy, además de una librería de comunicación llamada pymodbus que implementa el protocolo de comunicación industrial estándar Modbus. Estos, en conjunto, permiten el desarrollo de los modelos matemáticos para la ejecución de una simulación dinámica, como también la publicación de las variables de proceso de interés a través de una red TCP/IP. Por otro lado, LabVIEW siendo un lenguaje de programación gráfico, cuyo propósito es el de crear y desplegar sistemas de medición y control, posee una librería de compatibilidad con Modbus, librerías de control PID y herramientas de visualización que permiten el desarrollo del monitoreo y control de las variables de procesos de una simulación desarrollada a través de Python; Ambos lenguajes y sus ambientes de desarrollo permiten la compilación de los programas o desarrollos con independencia de ejecución, es decir, sin necesidad por parte del usuario de adquirir una licencia de LabVIEW o descargar e instalar Python.

Finalmente la presente investigación servirá como metodología de trabajo para futuros trabajos especiales en la escuela de Ingeniería Química, donde se incluye programación de modelos estacionarios y dinámicos, con su respectiva termodinámica, lo cual seguirá las metodologías ampliamente documentadas en la bibliografía convencional utilizada en pregrado, todo esto a su vez basándose en trabajos especiales de Grado anteriores realizados en la escuela de Ingeniería Química.

Una vez planteado el interés de la presente investigación es necesario reflejar los objetivos que se desean lograr para el desarrollo de la misma, por tal razón se tiene:

### **Objetivo General**

Desarrollar una herramienta de simulación de una unidad de compresión de gas natural en lenguaje de programación informático para propósitos de adiestramiento que permita evaluar, validar y controlar el proceso simulado.

### **Objetivos Específicos**

- Seleccionar una planta como caso base cuya configuración y equipos hayan sido simulados utilizando un simulador de procesos comercial.
- Realizar un análisis de grados de libertad del proceso de compresión.
- Desarrollar el modelado termodinámico con ecuaciones cúbicas de estado por el método de Peng-Robinson para las corrientes de fluidos.
- Programar los modelos de los equipos de una unidad de compresión de gas natural en estado estacionario y dinámico.
- Programar los modelos matemáticos de los lazos de control antisurge y control de desempeño.
- Validar la herramienta desarrollada comparando y analizando los resultados obtenidos con el simulador de procesos comercial.
- Desarrollar una interfaz amigable y de fácil entendimiento.

## CAPÍTULO II

### ANTECEDENTES

En esta sección se describen trabajos realizados antes del presente estudio. En los cuales se ha desarrollado modelado termodinámico y simulación de procesos, como también modelado y control de compresores centrífugos.

(Gammiero M., 2005). En su Trabajo Especial de Grado desarrolló y evaluó diferentes algoritmos de sustituciones sucesivas, para el cálculo de equilibrio liquido-vapor con ecuaciones de estado cúbicas; analizando los distintos métodos para la determinación de la fracción de vapor y sus rutinas numéricas, las correlaciones para la estimación de las relaciones de equilibrio, y las distintas propuestas para actualizar las relaciones de equilibrio en el proceso iterativo. Por otra parte, modifica el cálculo del flash para minimizar los problemas que convergen a la solución trivial; y, finalmente, propone un nuevo algoritmo combinando los distintos métodos estudiados.

Como resultados, Gammiero obtiene que el método de Leibovici-Neoschil con la rutina de Newton-Raphson, es la opción más eficiente para el cálculo de equilibrio liquido-vapor; con respecto a las correlaciones de las relaciones de equilibrio, la propuesta de Wilson es la más efectiva ya que obtiene la convergencia para un número mayor de casos, en cuanto a la actualización de las relaciones de equilibrio, el algoritmo GDEM con ciclos de tres iteraciones es el más rápido de todas las opciones. Y por último encuentra que el algoritmo nuevo propuesto converge para un 100% de los casos estudiados y con un tiempo de cómputo menor a cualquier otra metodología.

(Anzola S., 2011). En su Trabajo Especial de Grado desarrolló el modelado matemático en estado estacionario y dinámico, a lazo abierto y cerrado, de los

equipos que conforman un tren de compresión de tres etapas, cuyo propósito es acondicionar el gas reformado a la presión requerida para la síntesis de metanol, incluyéndose la turbina de vapor asociada; realizó la programación del modelado matemático mediante la herramienta de desarrollo MATLAB, siguiendo un esquema secuencial modular en la integración de los distintos modelos para el estado estacionario, mientras que, para la simulación dinámica siguió un patrón orientado a ecuaciones.

Seguidamente validó los modelos con datos operacionales y con un simulador comercial, obteniendo el desarrollo de una metodología sistemática para la entonación de un desacoplador estático, una nueva curva de rendimiento para la turbina y finalmente la incorporación de un algoritmo adaptivo para los equipos enfriadores, capaz de predecir los cambios de fase.

(Rebolledo C. & Gómez M., 2012). En su Proyecto Especial de Grado desarrollaron un algoritmo de control de Capacidad y Prevención antisurge/antistonewall en la herramienta de desarrollo MATLAB, para un compresor centrífugo modelado con la herramienta de simulación dinámica de procesos Aspen Hysys, el cual fue un proceso de compresión de una etapa del compresor K-301 de la sección 300 de la planta de METOR<sup>1</sup>, seguidamente desarrollaron una comunicación entre Aspen Hysys y MATLAB a través de un programa intermediario programado en Visual Studio, que sirvió de puente de comunicación, este programa establecía una conexión OLE<sup>2</sup> con Hysys y una conexión TCP/IP con MATLAB, con los cuales realizó el intercambio de datos; finalmente implementaron y evaluaron las estrategias de control incluyendo la propuesta de una capa de protección SIS<sup>3</sup> al proceso. Obteniendo como resultado la prevención de las condiciones de surge y stonewall como también la recuperación de la operación normal bajo condiciones de operación donde ocurren estos fenómenos.

---

<sup>1</sup> Abreviación de Metanol de Oriente, METOR, S.A.; empresa productora de metanol (alcohol metílico) de calidad Grado Federal AA.

<sup>2</sup> OLE acrónimo de Object Linking and Embedding, cuya traducción es "incrustación y enlazado de objetos", es un sistema de objetos distribuido y un protocolo desarrollado por Microsoft.

<sup>3</sup> SIS acrónimo de Sistema Instrumentado de Seguridad, cuyo propósito principal es llevar un proceso a un estado seguro de operación.

(Varela V., 2013). En su Trabajo Especial de Grado desarrolló y evaluó el modelado matemático para la simulación de una unidad de destilación típica, usando una interconexión entre las herramientas de desarrollo LabVIEW y MATLAB, donde este último fue utilizado para la resolución de las ecuaciones en el modelado matemático de las propiedades termodinámicas y en el modelado de las operaciones unitarias, usando en la simulación estacionaria la metodología de resolución secuencial tradicional. LabVIEW fue utilizado como interfaz de usuario, además se hizo la selección de una planta modelada en un simulador de procesos comercial para la validación de los resultados, obteniendo finalmente una herramienta que permite la simulación de un proceso de destilación con válvulas, bombas e intercambiadores de calor como operaciones unitarias para el diseño y evaluación del proceso de destilación.



## CAPÍTULO III

### MARCO TEÓRICO

En este capítulo se describen las bases teóricas fundamentales para este Trabajo Especial de Grado.

#### **LabVIEW**

Es un lenguaje y a la vez entorno de programación gráfica para la creación de aplicaciones de forma rápida y sencilla, acrónimo de Laboratory Virtual Instrument Engineering Workbench, originalmente orientado a control de instrumentos electrónicos usados en el desarrollo de sistemas de instrumentación (Lajara Vizcaíno & Plegrí Sebastiá, 2007). Actualmente LabVIEW tiene su mayor aplicación en el diseño e implementación de sistemas de medición y control (Piedra & Pesantez, 2009).

#### **Python**

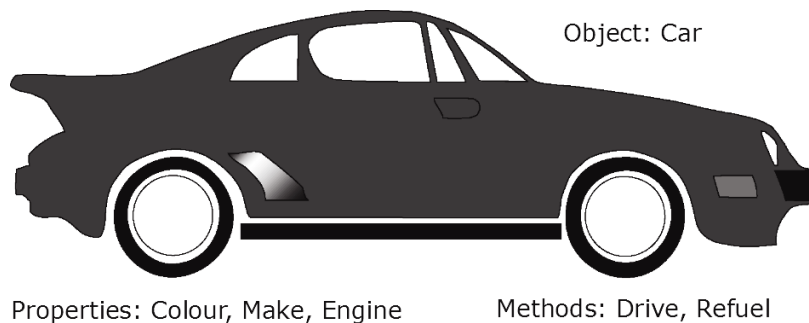
Es un lenguaje de programación interpretado, con tipado dinámico, multiplataforma y orientado a objetos; detallándose,

- (a) Lenguaje Interpretado: Es aquel lenguaje cuya ejecución se realiza mediante un programa intermedio llamado intérprete, a diferencia de los lenguajes compilados cuyos códigos son compilados a lenguaje máquina, que pueden ser ejecutados directamente por el hardware de una computadora.
- (b) Tipado dinámico: Esta característica se refiere a que la declaración del tipo de dato (real, entero, booleano, carácter o cadena de caracteres) que va a contener una variable no es necesaria. Su tipo de dato se determina en tiempo de ejecución a medida que se le asigne valores de distintos tipos de dato, permitiendo que una variable pueda cambiar o mutar el tipo de dato.

(c) Multiplataforma: El intérprete que ejecuta los programas o códigos fuente de Python, se encuentra disponible en las distintas plataformas o sistemas operativos (Windows, Linux, Mac OS, Unix, etc.).

(d) Orientación a objetos: Éste es un paradigma de programación, en el que los conceptos del mundo real relevantes para desarrollar se traducen a clases y objetos en nuestro código o programas (González Duque).

Un objeto es un contenedor que almacena un conjunto de funciones y variables relacionadas (Aspen Technology, Inc., 2011). Las funciones de un objeto son llamados métodos y las variables propiedades, en la Figura N° 1 se muestra la abstracción de un objeto (un automóvil) de la vida real a objeto de programación, donde si el mismo fuese un objeto, tendría un conjunto de propiedades como marca, color, numero de puertas, etc. Y sus métodos serian funciones o acciones concretas como encender, conducir, abrir puerta o llenar tanque de combustible.



**Figura N° 1.** Objeto automóvil. Fuente: (Aspen Technology, Inc., 2011)

Utilizando las propiedades y métodos de un objeto es posible definir, manipular e interactuar con el objeto. Cada propiedad del automóvil es una variable que tiene un valor asociado, el color sería definido por una cadena de caracteres o un valor hexadecimal, el kilometraje sería definido por un valor punto flotante simple. Los métodos no son más que funciones y subrutinas asociadas al objeto.

Un objeto puede contener otros objetos que son subconjuntos lógicos del objeto principal. Un objeto automóvil puede contener otros objetos tales como motor o llanta, estos a su vez pueden tener un conjunto de métodos y propiedades independientes (Aspen Technology, Inc., 2011).

## **Modelado de procesos**

La representación matemática de cualquier sistema físico o proceso es llamado modelo. Un modelo de procesos químicos es formulado basado en el desarrollo de balances de masa, energía y cantidad de movimiento del sistema o proceso. Aparte de estos balances, cálculos termodinámicos son necesarios para predecir las propiedades y condiciones de los fluidos en el sistema. La simulación es el proceso de resolver el modelo matemático (Mehta & Reddy, 2015).

Las ecuaciones del modelo pueden ser clasificadas como modelo de estado estacionario, dinámico, agregado, distribuido, estocástico y empírico.

El modelado de procesos y un entendimiento de simulación son prerequisites para entender los sistemas/simuladores de entrenamiento.

Un modelo de estado estacionario no toma en cuenta el elemento de tiempo, mientras que el modelo dinámico sí. Los modelos de estado estacionario están típicamente representados por ecuaciones algebraicas, mientras que los modelos dinámicos son representados por ecuaciones diferenciales algebraicas donde principalmente la variable independiente es el tiempo. En el modelado de los procesos químicos, estos sistemas de ecuaciones bien sean algebraicos o diferenciales algebraicos, parten de los balances de masa, energía y cantidad de movimiento que describen el proceso. El modelado dinámico, al tomar en cuenta el elemento tiempo, permite estudiar la respuesta transitoria de un sistema o proceso mediante la simulación. Estas respuestas transitorias tienen gran aplicación en la investigación y desarrollo, diseño y operación de plantas. Entre las distintas aplicaciones se pueden mencionar las siguientes:

- Control y optimización de condiciones de operación.
- Simulación de arranques, paradas, y situaciones de emergencia para analizar las estrategias de control y verificar el diseño de sistemas de seguridad.
- Determinación de las interacciones de varios equipos.

- Adiestramiento de operadores para el manejo de la operación normal de la planta, situaciones de emergencia y estudio de solución de problemas.

A diferencia de épocas anteriores, el uso de las computadoras ha facilitado la resolución de estos modelos y lo más importante resolverlos con buen rendimiento.

### **Simulador de procesos**

Un modelo de simulación dinámica consiste en un sistema de ecuaciones diferenciales y algebraicas describiendo el proceso a ser simulado. En un simulador de procesos el sistema de ecuaciones a resolver es típicamente construido por la integración de modelos de equipos en un diagrama de flujo. Cada modelo de equipo contiene un conjunto de ecuaciones definido y las conexiones de corriente emparejan este conjunto de ecuaciones a un sistema más largo, este conjunto de ecuaciones corresponde a los balances de masa, energía y cantidad de movimiento pertinentes a cada equipo u operación unitaria. De este sistema general pueden resolverse de forma directa todas sus ecuaciones simultáneamente con un solucionador tradicional de ecuaciones diferenciales y algebraicas, siendo muy práctico para simulaciones pequeñas. Sin embargo, con simulaciones muy grandes se hace la descomposición de este sistema en piezas más pequeñas para resolverse, generándose ventajas en la velocidad de cálculo y también en la robustez (Boys, 2014).

Muchas aplicaciones de las simulaciones dinámicas requieren un modelo de simulación que cubra toda la planta, con una multitud de operaciones unitarias y equipos incluidos. Tales modelos tienden a crecer bastante con facilidad, por lo que requieren estrategias de cálculo eficientes para resolverlos de una manera adecuadamente rápida, robusta y conveniente.

La estrategia de cálculo más aplicada en los simuladores comerciales de procesos químicos, para la ejecución de una simulación de estado dinámico, es hacer un desacople del sistema de ecuaciones general en dos sistemas ecuaciones independientes, donde en uno de estos sistemas se simula de forma prioritaria las ecuaciones o modelos que son de naturaleza fluidodinámica, principalmente usando

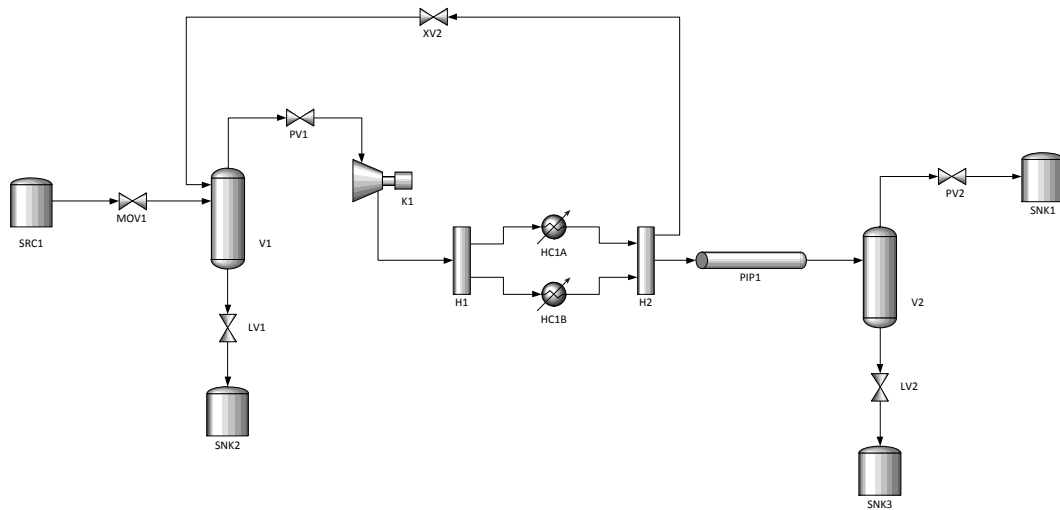
los balances de cantidad de movimiento e involucrando el elemento tiempo, y el segundo sistema de ecuaciones simula el estado estacionario, el cual incluye los sistemas de ecuaciones restantes con la adición de los modelos para determinar las propiedades de los fluidos, esta simulación de estado estacionario se resuelve aplicando el enfoque secuencial modular mientras que la fluidodinámica se resuelve mediante la metodología de red de Flujo-Presión.

### **Red de Flujo-Presión**

La red de flujo-presión es un método ampliamente aplicado para lograr la resolución fluidodinámica de un sistema. El modelo de simulación es tratado como una red de nodos de presión y dispositivos de flujo, o también llamados unidades de transferencia. Esta red tiene solo presiones y flujos como variables desconocidas, y por lo tanto, consiste en un conjunto de ecuaciones más pequeñas para ser integradas de forma implícita.

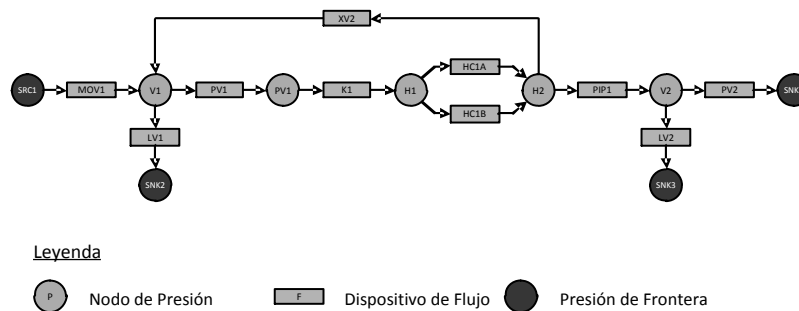
Una vez que la red de flujo presión ha sido resuelta, todas las ecuaciones restantes que incluyen balances de energía y balances molares se resuelven separadamente en bloques más pequeños. Esto conduce a un desglose secuencial de los cálculos que se pueden realizar computacionalmente eficientes (Boys, 2014).

Para ilustrar este enfoque la figura N° 2 muestra un diagrama de flujo representativo de una planta pequeña.



**Figura N° 2.** Diagrama de flujo de una planta típica pequeña.

Y la figura N° 3 muestra como esta planta es proyectada en una red de flujo presión.



**Figura N° 3.** Red de flujo presión del diagrama de flujo de la figura N° 2 (Boys, 2014). Editado

En el sistema de la figura N° 2 la red de flujo presión es construida de la siguiente manera. Para cada equipo que tenga una diferencia de presión entre sus entradas y salidas se le designa un dispositivo de flujo o unidad de transferencia, para este trabajo se adoptará el término unidad de transferencia, cada unidad de transferencia añade una ecuación de flujo y un flujo desconocido al sistema, por lo general esta ecuación de flujo es una relación algebraica entre las presiones adyacentes. Para cada corriente entre unidades de transferencia se designa un nodo de presión denominado nodo de presión pasivo y para cada equipo cuya presión es única e invariable en un determinado momento, como por ejemplo un separador, se designa un nodo de

presión denominado nodo de presión activo, la principal diferencia entre el nodo de presión pasivo y el activo es que en este último ocurre una acumulación o retención de masa, cada nodo de presión bien sea activo o pasivo añade una ecuación de presión y una presión desconocida al sistema, esta ecuación de presión por lo general es un balance de masa. El sistema es dinámico por naturaleza, debido especialmente a los equipos de acumulación de materia en los nodos de presión activos, para estos balances de masa, que son ecuaciones diferenciales ordinarias, se aplica un método de integración implícita en orden de resolver estas ecuaciones diferenciales en cada paso de tiempo (Boys, 2014).

Para este trabajo la estrategia de cálculo a aplicar para el modelado y simulación dinámica es la red de flujo-presión en conjunto con una simulación de estado estacionario, que incluyen el modelado de las propiedades de los fluidos con ecuaciones cúbicas de estado, haciendo la descomposición del modelo general siguiendo una programación fuertemente orientada a objetos, para el desarrollo y modelado de los distintos equipos y operaciones unitarias incluidos en la planta de compresión a seleccionar.

### **Modbus**

Es un protocolo de comunicaciones basado en la arquitectura maestro/esclavo o cliente/servidor; el cual fue diseñado originalmente para la comunicación de controladores lógicos programables y que se convirtió luego en un protocolo de comunicación estándar abierto en la industria. Existen versiones de implementación para puertos serie o Ethernet (TCP/IP) que permiten el monitoreo y control de una red de dispositivos y comunicar la información a un ordenador (Modbus Organization, 2012).

Para este trabajo especial de grado el protocolo Modbus es el enlace entre la simulación dinámica de la etapa de compresión desarrollada en el lenguaje Python y la interfaz de operación desarrollada en el ambiente de desarrollo LabVIEW.

## **SciPy**

Es un ecosistema de código abierto de software para el lenguaje de programación Python usado por científicos, analistas e ingenieros para la computación científica y/o el cálculo numérico. Posee librerías para álgebra lineal, integración, interpolación, procesamiento de imágenes y señales, estadística, resolución de ecuaciones diferenciales y optimización que son utilizados en las tareas más comunes de las ciencias y la ingeniería (SciPy community, 2014).

Para este trabajo especial de grado estas librerías y herramientas cumplen con las expectativas para la resolución de los distintos modelos a desarrollar, y así obtener una herramienta de simulación.

## **Surge**

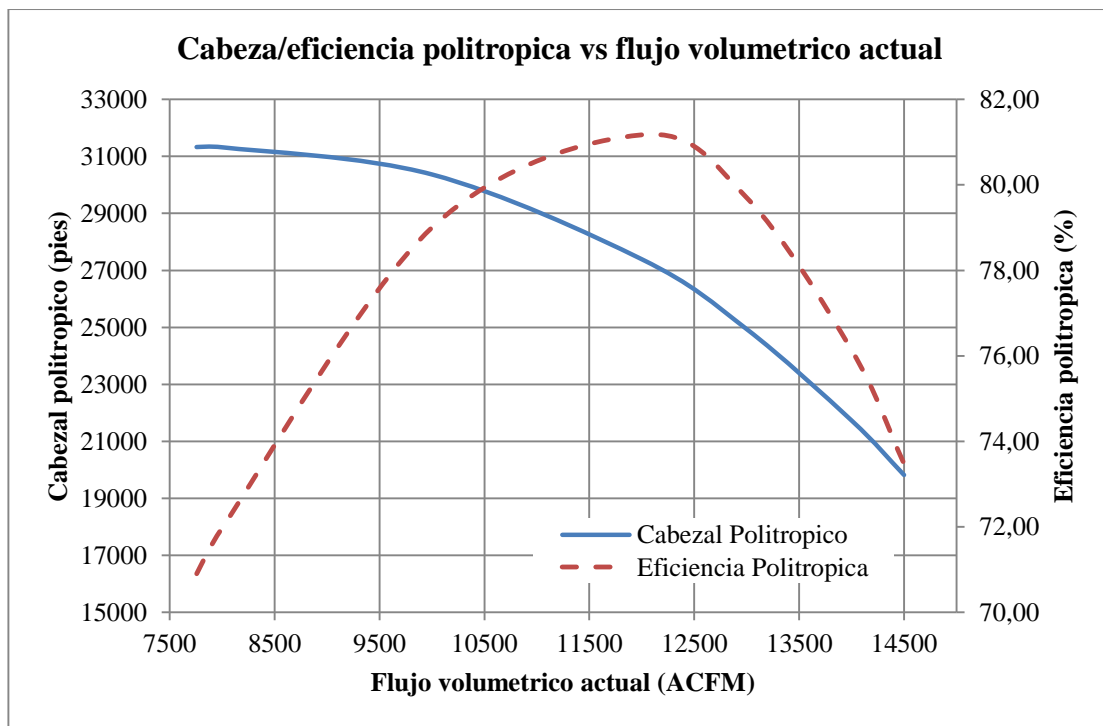
Según (Green, 1992) es una condición de funcionamiento inestable de un compresor también conocida como oscilación que ocurre cuando el caudal se reduce a un punto tan por debajo de las condiciones de diseño que se tiene un funcionamiento errático. Es por esto que se debe tener un sistema de control antisurge capaz de detectar la alteración potencial y compensarla de forma automática.

De acuerdo a (Mokhatab & Poe, 2012) la condición de surge en un compresor es un fenómeno rápido y el tiempo de muestreo de los controles antisurge deben tener un orden de 50 milisegundos lo que hace necesario que el modelo de simulación dinámica utilizado deba ser capaz de capturar este fenómeno y por ende tener pasos de integración más pequeños de 50 milisegundos.



### Curvas características de un compresor

El cálculo del desempeño de un compresor tiene su punto inicial en el uso de curvas de cabezal y eficiencia, también conocidos como mapas del compresor, que están basados en pruebas realizadas en el compresor, los fabricantes de compresores suministran estas curvas para definir el rendimiento entre las bridas de los mismos, y en orden de tener un sistema de coordenadas en común para estas curvas, en la práctica se emplea el uso del cabezal politrópico y eficiencia politrópica en función del flujo volumétrico actual (Hansen, 2008), un ejemplo de estas curvas se puede apreciar en el siguiente gráfico.



**Figura N° 4.** Curvas características de un compresor centrífugo. (Elaboración Propia)

Las curvas características entregadas por el fabricante tienen un límite de operación para la curva de cabezal politrópico a una velocidad de operación fija, como se puede apreciar en la Figura N° 4 el límite inferior de flujo volumétrico establece donde ocurre o podría ocurrir la condición de surge, mientras que el límite superior presenta otro fenómeno conocido como stonewall, para un compresor de velocidad variable el

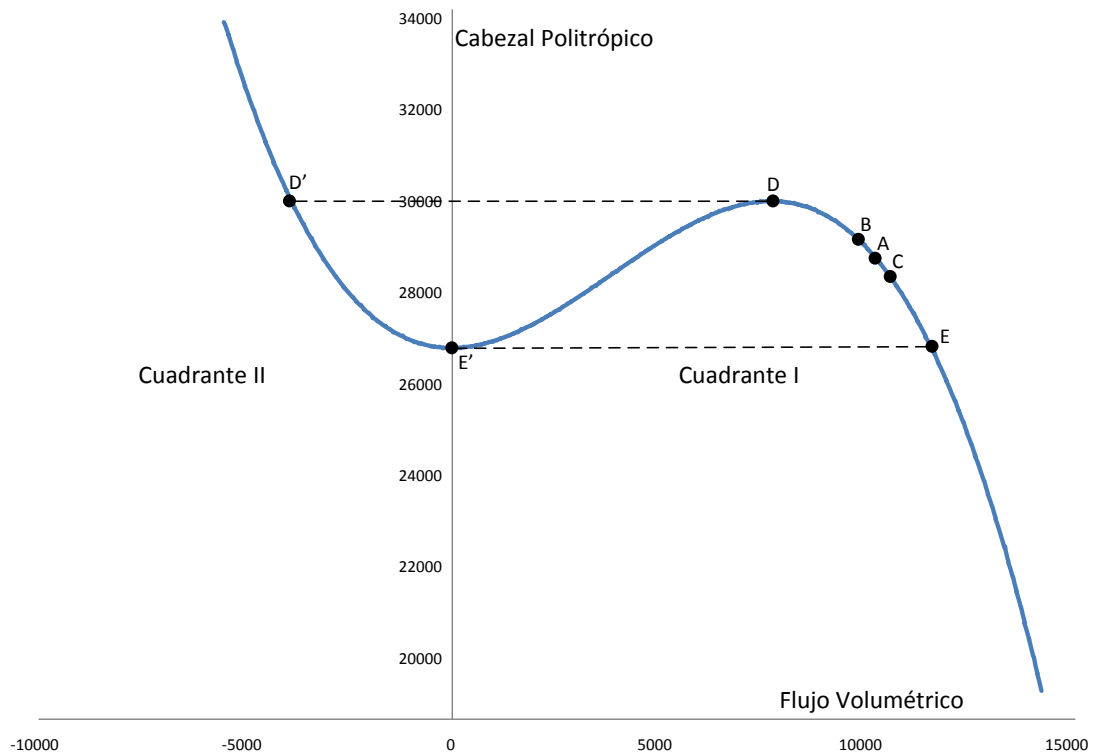
fabricante del compresor puede proveer esta información para varias velocidades de operación, a menores velocidades de operación el compresor entrega menor cabezal politrópico para un mismo flujo volumétrico; existe la creencia de que el compresor siempre entregará el mismo cabezal a una velocidad de operación dada con el mismo flujo volumétrico actual, sin importar las condiciones a la entrada del mismo, sin embargo, cuando existen cambios significativos en la compresibilidad del gas el cabezal puede presentar variaciones, pero estas desviaciones del comportamiento real suelen ser relativamente pequeñas si las condiciones de entrada a evaluar: temperatura, presión, composición y factor de compresibilidad, no difieren mucho de las condiciones reportadas por el fabricante al momento de construir estas curvas, esta información es presentada mediante gráficas o datos tabulares, para los cuales, un modelo de regresión debe ser implementado en orden de ser utilizado para el modelado en estado dinámico de un compresor centrífugo, tal modelo debe tener la capacidad de poder representar todo el rango de operación del compresor como también la condición de surge; (Bøhagen, 2007) estudió un modelo matemático que permite representar las características del compresor centrífugo con velocidad variable como un desarrollo polinomial de dos variables independientes, que tiene la forma siguiente:

$$\psi(w_c, \omega) = c_3(\omega) \cdot w_c^3 + c_2(\omega) \cdot w_c^2 + c_0(\omega) \text{ Ecuación 1}$$

$$c_i(\omega) = c_{i2} \cdot \omega^2 + c_{i1} \cdot \omega + c_{i0} \text{ Ecuación 2}$$

Donde  $w_c$  representa una expresión de la cantidad de flujo a la entrada del compresor y  $\omega$  una expresión de la cantidad de la velocidad angular, para este trabajo se adoptara  $w_c$  como el flujo volumétrico expresado en pies cúbicos actuales por minutos y  $\omega$  como revoluciones por minuto, debido a que estas unidades de ingeniería son las principales utilizadas por los fabricantes de compresores; la variable  $\psi$  representa el cabezal politrópico o la eficiencia politrópica para una curva de rendimiento, las cuales se expresan en unidades de pies y porcentaje respectivamente, este modelo por ser de orden cúbico en función del flujo volumétrico actual, presenta un máximo local en el primer cuadrante del sistema de

coordenadas del mapa del compresor y un mínimo local en el segundo cuadrante como se puede observar en la siguiente figura.



**Figura N° 5.** Modelo cúbico del rendimiento de un compresor a una velocidad dada (Elaboración propia).

En la Figura N° 5 la curva de color azul representa el rendimiento de un compresor centrífugo a una velocidad de operación fija, donde el punto A representa una condición de operación normal, a partir de este punto y al comenzar un decremento del flujo volumétrico a la entrada del compresor, el punto de operación empieza a desplazarse hacia la izquierda por esta curva alcanzando el punto B, si la caída del flujo continua, eventualmente el punto de operación alcanzará el punto D, el cual es el máximo local, este punto representa el límite de operación estable y la condición de surge empieza a ocurrir, se experimenta una inversión del flujo en el compresor, pero el cabezal entregado continúa siendo el mismo, haciendo que el punto de operación se traslade al punto D', un decremento del cabezal entregado por el compresor empieza a ocurrir haciendo que el punto de operación disminuya hacia el punto E', el cual es

el mínimo local y es donde justamente el flujo volumétrico actual es cero, al llegar a este punto el punto de operación es desplazado hacia el punto E, que posiblemente se encuentre en el rango de operación normal del compresor, si la causa de la disminución del flujo a la entrada del compresor aun continúa, el punto de operación se desplazará nuevamente al punto D, creándose un comportamiento cíclico el cual imita las oscilaciones de flujo que ocurren durante el fenómeno de surge. En este trabajo especial de grado se emplea y desarrolla este modelo para el desempeño del compresor centrífugo, y un control antisurge para evitar la condición de surge.

## CAPÍTULO IV

### MARCO METODOLÓGICO

En esta sección se describe la metodología que se llevó a cabo para desarrollar y alcanzar los objetivos planteados en este Trabajo Especial de Grado.

#### **Seleccionar una planta como caso base cuya configuración y equipos hayan sido simulados utilizando un simulador de procesos comercial**

Se seleccionó una planta de una unidad de compresión de gas natural, ya modelada y simulada en algún simulador comercial. Como caso base, se seleccionó una planta de compresión disponible en los ejemplos de simulaciones dinámicas del UniSim Design Suite, donde se simula una planta de compresión de gas; esta planta incluye como operaciones un mínimo de: un separador principal, un compresor centrífugo, un enfriador, un separador de condensados y una válvula de reciclo; y la misma sirvió como guía y referencia para las especificaciones de la alimentación, especificaciones y dimensiones de equipos, parámetros de controles y parámetros de simulación.

#### **Realizar un análisis de grados de libertad del proceso de compresión**

Una vez seleccionado el caso base se analizaron y estudiaron los grados de libertad del proceso de compresión y sus operaciones unitarias siguiendo la metodología estudiada e implementada por (Varela V., 2013), en donde para cada caso de simulación –estacionaria o dinámica- se estudió el número de ecuaciones que describen el modelado matemático del proceso y el número de variables desconocidas, para así establecer cuales variables pueden o deben ser especificadas, por el usuario o desarrollador en el modelado para que éste pueda ser resuelto, y así obtener una simulación, todo esto con el propósito de tener una comprensión de los procesos a modelar, así como verificar la consistencia del caso base y el número de

lazos de control, este análisis de grado de libertad permite además sintetizar la estructura de los modelos termodinámicos y fluidodinámicos de los módulos de procesos a desarrollar.

Para una simulación de estado estacionario se requiere conocer los grados de libertad de diseño, pero para este trabajo especial de grado se partió de un enfoque para un proceso ya diseñado, las dimensiones de los equipos no se contabilizaron como variables para el análisis de grados de libertad de diseño, debido a que los equipos de la simulación del caso base ya poseen esta información. Estos análisis para las corrientes y operaciones unitarias comúnmente encontradas en las herramientas de simulación estacionaria, ya han sido descritos y expuestos en la literatura, y se tomaron como grados de libertad y especificaciones de diseño para los equipos y procesos las recomendaciones hechas por (Dimian, Bildea, & Kiss, 2014).

Para la simulación dinámica existen dos enfoques, los grados de libertad de control y las especificaciones de flujo presión; una vez que la simulación de estado estacionario ha sido especificada, se requiere conocer el número de grados de libertad de control, siendo este el número de variables que pueden ser controladas, este número puede ser determinado como el número de variables que se pueden manipular (Luyben, 1996); y por otro lado, para resolver la red de flujo-presión un número de especificaciones de flujo o presión son requeridas, este análisis de grados de libertad para estas especificaciones ya han sido estudiados y descritos en la literatura, el número de grados de libertad requeridos para la resolución de la red de flujo-presión es igual al número de corrientes de fronteras, pero solo el número de especificaciones es importante mas no el lugar o el tipo (flujo o presión) (Mohajer, Young, & Svrcek, 2008).

### **Desarrollar el modelado termodinámico con ecuaciones cúbicas de estado por el método de Peng-Robinson para las corrientes de fluidos**

El modelado matemático para las relaciones de equilibrio en un sistema de dos fases, propiedades termodinámicas, propiedades residuales y coeficientes de fugacidad de una corriente de fluidos, se realizó analizando e implementando la bibliografía

convencional de termodinámica del equilibrio, prefiriéndose la formulación propuesta por Smith & Van Ness, con la cual se realizaron consideraciones especiales para la convergencia de los coeficientes de reparto en el equilibrio, estudiando y analizando las metodologías, conclusiones y recomendaciones estudiadas por Gammiero aplicados para una corriente de gas natural.

El desarrollo se hizo en un módulo de programación fuertemente orientada a objetos, que se usó por los distintos módulos u objetos destinados para el desarrollo de los equipos u operaciones unitarias; este módulo se desarrolló siguiendo el principio de la regla de las fases y en concordancia con las entradas de un módulo típico de corriente de un simulador comercial, donde -especificándose las composiciones globales de una mezcla de hidrocarburos de un gas natural- solo se requieren dos propiedades intensivas para la determinación del estado de equilibrio (Smith, Van Ness, & Abbott, 2003).

Esas dos propiedades pueden ser combinaciones de las siguientes propiedades: temperatura, presión, factor de vaporización, entalpia y/o entropía, con excepción de la combinación de entalpia con entropía; con el fin de obtener como resultado las propiedades antes mencionadas, las composiciones, factores de compresibilidad y densidades de las fases encontradas, además de las relaciones de equilibrio de los componentes<sup>4</sup>.

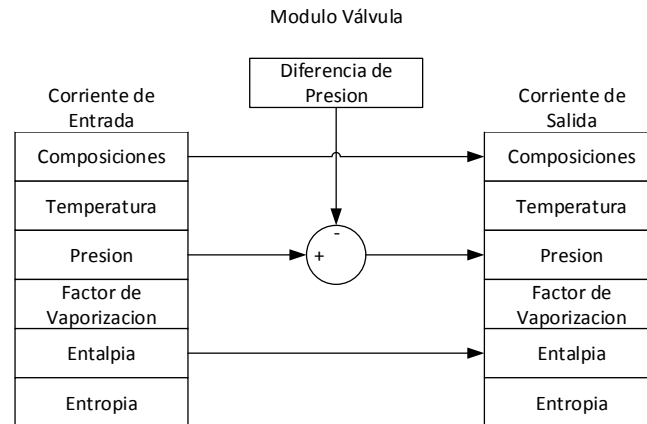
### **Programar los modelos de los equipos de una unidad de compresión de gas natural en estado estacionario y dinámico**

El modelado para cada operación unitaria en estado estacionario se desarrolló a partir del análisis de los grados de libertad, para cada equipo u operación unitaria de la simulación del caso base y las simplificaciones del desarrollo de los balances de masa, energía y cantidad de movimiento, con un desarrollo fuertemente orientado a objetos e implementando el módulo de corriente y sus clases mencionadas anteriormente en el lenguaje de programación Python; en la siguiente figura se

---

<sup>4</sup> En adelante se hará referencia como módulo de Corriente

muestra un esquema del modelado termodinámico de una válvula implementando el módulo de corriente.

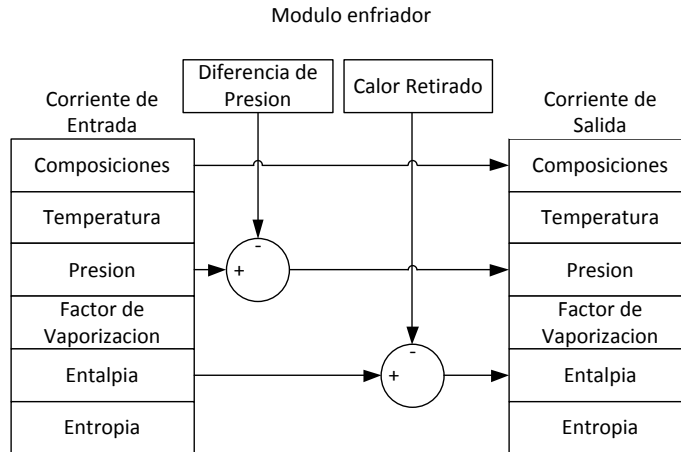


**Figura N° 6.** Módulo de válvula (Elaboración propia)

Como se muestra en la Figura N° 6 al no haber una transformación de las especies involucradas a la entrada de la válvula, la corriente de salida posee las mismas composiciones globales de la entrada, pero con una presión que se da por una caída de presión como grado de libertad de diseño para la ejecución de la simulación estacionaria, o determinada por la red de flujo-presión para el ejecución de la simulación dinámica; por ser la válvula un proceso -que ocurre teóricamente de forma isentálpica- la corriente de salida viene especificada por la misma entalpia de la entrada, completándose los requisitos para la resolución de la corriente de salida con la combinación presión y entalpia; y, por ende, la resolución de la válvula.

En la siguiente figura se muestra el modelado termodinámico de un enfriador, el cual es un intercambiador de calor entre una corriente de fluido y una corriente energética.





**Figura N° 7.** Modulo enfriador (Elaboración propia).

Para el desarrollo del enfriador se parte de un enfoque similar al desarrollo del módulo Válvula, como se puede apreciar en la Figura N° 7, donde la salida estará especificada por la diferencia de presión a través del equipo como grado de libertad de diseño, bien sea especificada para la ejecución de la simulación estacionaria o determinada por la red de flujo-presión para la simulación dinámica, pero adicionalmente, la entalpia de esta salida, será la entalpia de entrada menos un calor retirado que está especificado para la resolución de la simulación estacionaria, o determinado por algún control de temperatura en la ejecución dinámica a lazo cerrado como grado de libertad adicional, dando como resultado una corriente de salida que está especificada por la combinación entalpia y presión, completándose así los grados de libertad para la resolución de la misma y por ende la resolución del enfriador.

El modelado de estado dinámico requiere la incorporación a estos últimos equipos, válvula y enfriador, un modelo fluidodinámico el cual está definido por una ecuación que relaciona las presiones a la entrada y salida, con el flujo molar que pasa a través de los mismos, siendo la ecuación de flujo que incorpora una variable de flujo desconocida a la red de flujo-presión, esta ecuación es denominada ecuación de flujo de resistencia simple y tiene la siguiente forma.

$$F = k \times A \times \sqrt{\rho \times (P_e - P_s)} \text{ Ecuación 3}$$

Donde  $F$  corresponde al flujo molar que pasa a través del equipo, siendo  $\rho$  la densidad molar a la entrada y,  $P_e$  y  $P_s$  las presiones a la entrada y salida respectivamente<sup>5</sup>. Para la inicialización de la herramienta de simulación, un dimensionamiento automático de estos equipos es realizado para determinar el parámetro el parámetro  $k$ , denominado coeficiente de resistencia, este parámetro se obtiene haciendo un arreglo de la Ecuación 1, tendiéndose la siguiente ecuación.

$$k = \frac{F}{A \times \sqrt{\rho \times (P_e - P_s)}} \text{ Ecuación 4}$$

El parámetro  $A$  corresponde a la apertura de la válvula la cual para el diseño se usa el valor 0,5 como defecto para el módulo válvula, mientras que para el enfriador este parámetro toma el valor de 1.

El modelado termodinámico del compresor sigue un cambio de estado politrópico entre la entrada y la salida, este cambio está descrito mediante las relaciones de presión y temperatura descrita por las ecuaciones siguientes:

$$H_p = \frac{z_e \times R \times T_e}{MW \times g} \times \frac{n_v}{n_v - 1} \times \left[ \left( \frac{P_s}{P_e} \right)^{\frac{n_v - 1}{n_v}} - 1 \right] \text{ Ecuación 5}$$

$$T_s = T_e \times \left( \frac{P_s}{P_e} \right)^m \text{ Ecuación 6}$$

Siendo el parámetro  $m$  descrito por la siguiente ecuación.

$$m = \frac{z_e \times R}{c_p} \times \left( \frac{1}{\eta_p} - 1 \right) - \frac{\log \frac{T_{ss}}{T_e}}{\log \frac{P_s}{P_e}} \text{ Ecuación 7}$$

El requisito fundamental para la resolución del compresor politrópico, es que se debe asegurar que tanto la entrada y salida del mismo cumplen con las relaciones descritas por la Ecuación 5 y la Ecuación 6. El parámetro  $n_v$  siendo el exponente politrópico de volumen debe ser resuelto numéricamente, de tal manera que se cumpla con la

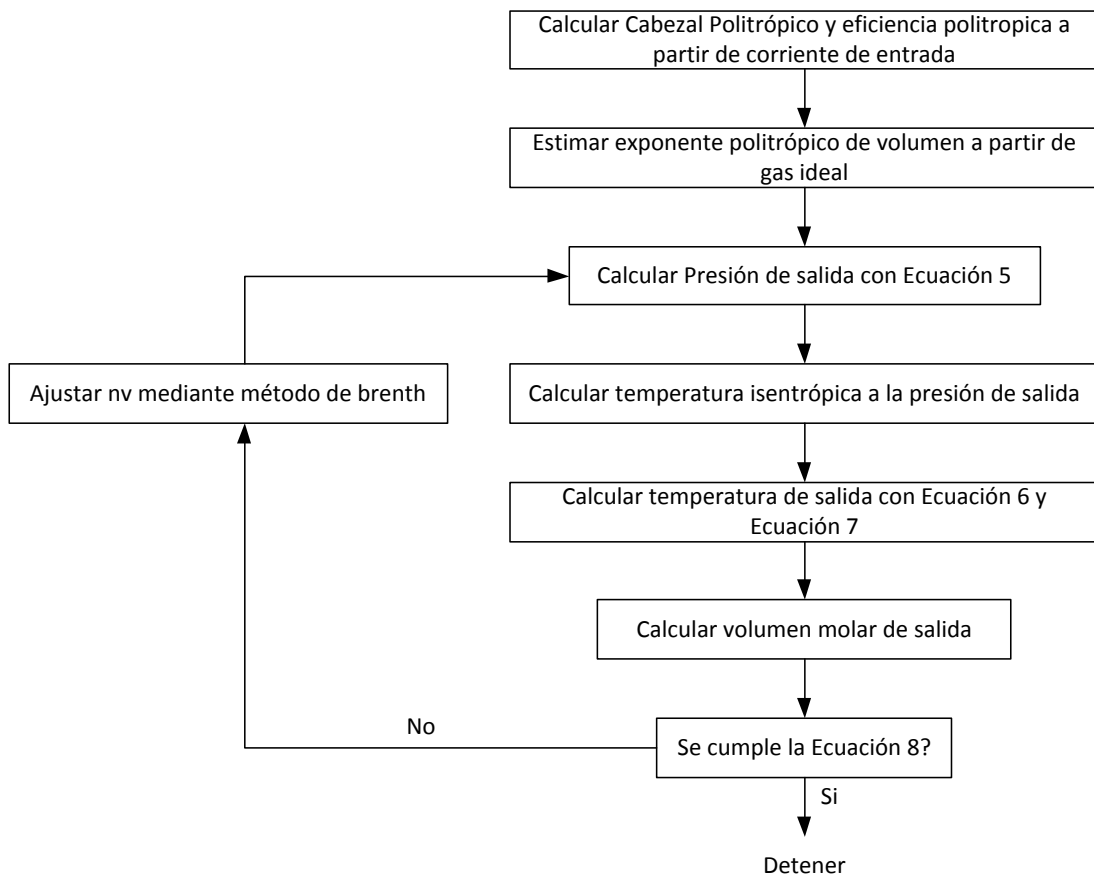
---

<sup>5</sup> En adelante se usará esta nomenclatura de presiones para los demás equipos y operaciones unitarias.

relación fundamental de cambio de estado politrópico descrito por la siguiente ecuación.

$$n_v = \frac{\log \frac{P_s}{P_e}}{\log \frac{V_e}{V_s}} \text{ Ecuación 8}$$

En donde la relación de los logaritmos de las presiones y los volúmenes molares es igual al exponente politrópico de volumen. Para la resolución numérica de este parámetro y el rendimiento del compresor se desarrolló esquema de cálculo descrito por la siguiente figura.



**Figura N° 8.** Esquema de cálculo para resolución de un compresor politrópico (Elaboración propia).

Como se observa en la Figura N° 8 se parte del cálculo de los parámetros cabezal politrópico y eficiencia politrópica, los cuales corresponden a los términos  $H_p$  y  $\eta_p$  en la Ecuación 5 y Ecuación 7 respectivamente, estos se calculan a partir de las curvas

características del compresor, usando el flujo volumétrico actual a la entrada del mismo y la velocidad de operación especificada, luego se estima el exponente politrópico de volumen a partir de la relación que existe entre la eficiencia politrópica y el exponente politrópico, en un cambio de estado ideal el cual está descrito por la ecuación siguiente:

$$n_v = \frac{\eta_P}{\eta_P^{\frac{k-1}{k}}} \text{ Ecuación 9}$$

El exponente politrópico para un gas ideal viene dado por la siguiente ecuación.

$$k = \frac{C_p}{C_p - R} \text{ Ecuación 10}$$

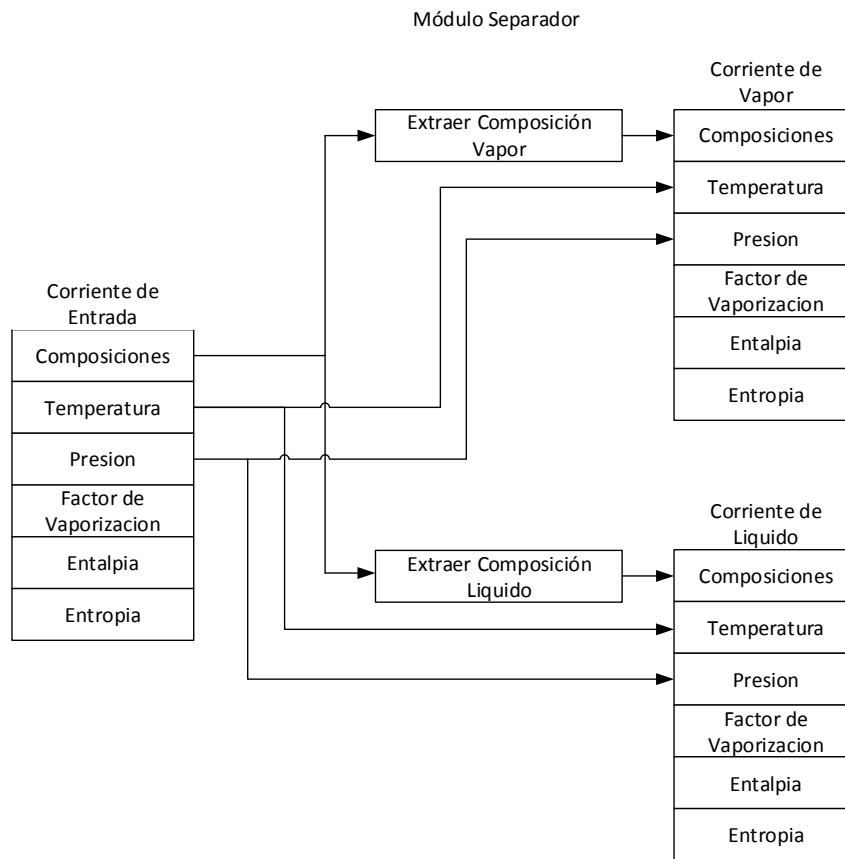
Siendo  $C_p$  y  $R$ , la capacidad calórica a presión constante y la constante universal de los gases respectivamente. Una vez estimado el exponente politrópico de volumen, se calcula la presión de salida haciendo un arreglo de la Ecuación 5, a partir de esta presión y la entropía de la corriente de entrada, se implementa el modulo corriente para construir una corriente auxiliar, y con las propiedades intensivas mencionadas y las composiciones globales de la corriente de entrada, se determina la temperatura isentrópica, el cual es el parámetro  $T_{ss}$  en la Ecuación 7; seguido se calcula la temperatura de salida, lo cual permite obtener una posible temperatura y presión de salida del compresor politrópico, con esta presión y temperatura, implementando el modulo corriente se determina el volumen molar correspondiente y se procede por último a verificar si se cumple o no la relación descrita por la Ecuación 8, si se cumple con cierta tolerancia se finaliza el cálculo y se obtiene la corriente de salida correspondiente, de lo contrario se ajusta el exponente politrópico de volumen y se vuelve al cálculo de la presión de salida.

Los parámetros adicionales presentes en este conjunto de ecuaciones son propiedades en la corriente de entrada especificándose,  $z_e$  como el factor de compresibilidad del gas,  $MW$  como el peso molecular, y por último el parámetro  $g$  como la constante de gravedad.

El modelado en estado dinámico del compresor se desarrolló al igual que la válvula y el enfriador, descrito por una relación de las presiones a la entrada y la salida con el flujo molar que pasa por el mismo, haciendo un desacople de la termodinámica, se asume para este cálculo que las temperaturas permanecen constantes, este planteamiento permite calcular un exponente politrópico de volumen que solo es variante con respecto a las presión y no a las temperaturas, este cálculo se realiza de igual forma con la Ecuación 6, pero los volúmenes molares se recalculan en base a las presiones de entrada y salida, una vez obtenido, se procede a calcular el cabezal politrópico mediante la Ecuación 3, a partir del mismo se obtiene el flujo volumétrico actual mediante el uso de las curvas características, en base a las condiciones de presión y temperatura a la entrada, y la velocidad de operación se puede obtener el flujo molar que pasa a través del compresor en algún momento determinado de la simulación dinámica, este esquema de cálculo permite obtener la ecuación y la variable de flujo desconocida a la red de flujo-presión que corresponde al compresor como unidad de transferencia.

Los detalles de cómo se emplean las curvas características para el cálculo del desempeño del compresor y determinar así el flujo volumétrico a partir del cabezal politrópico se detalla en el apéndice.

En la siguiente figura se muestra un esquema del modelado termodinámico para la simulación estacionaria de un separador o tambor de separación, implementando el módulo corriente.



**Figura N° 9.** Modulo separador (Elaboración propia).

Para el desarrollo del separador se considera que el proceso u operación unitaria ocurre de forma adiabática e isobárica, despreciándose además el cabezal de líquido; para la simulación estacionaria las corrientes de salida, salida de líquido y salida de vapor, poseen como especificaciones la misma combinación temperatura y presión de la corriente de entrada, pero sus composiciones globales son las composiciones de cada fase en la corriente de entrada como se muestra en la Figura N° 9, composiciones de líquido de la corriente de entrada para las composiciones globales de la corriente de salida de líquido, y composiciones de vapor de la corriente de entrada para las composiciones globales de la corriente de salida de vapor.

Para la simulación dinámica se agregaron al separador las siguientes variables de interés dinámico, nivel del líquido y presión en el separador, las corrientes de salida ahora están especificadas por la fluido dinámica y termodinámica del mismo; para el separador en estado dinámico se resuelven constantemente con cierta frecuencia, pero

no simultáneamente, el balance de masa y el balance de energía; el balance de masa es resuelto por la red de flujo-presión, porque el desarrollo de este balance agrega a la red de flujo-presión una ecuación de presión y una presión desconocida, esta ecuación de presión es la siguiente.

$$V_t = V_g + V_l \text{ Ecuación 11}$$

La Ecuación 11 describe que el volumen de las fases encontradas,  $V_g$  y  $V_l$ , donde la suma de estos es igual al volumen total del separador, algunos autores describen esta ecuación como balance de volumen, donde el volumen de cada fase es determinado a través del producto de la densidad molar con la masa molar, obteniéndose las ecuaciones siguientes:

$$V_g = \rho_g \times m_g \text{ Ecuación 12}$$

$$V_l = \rho_l \times m_l \text{ Ecuación 13}$$

Donde  $\rho$  y  $m$  corresponden a la densidad y masa respectivamente, y los subíndices  $l$  y  $g$  a la fase gas y líquido respectivamente, la densidad es una propiedad que es determinada mediante el factor de compresibilidad de cada fase, durante la resolución de la red de flujo-presión esta propiedad se asume que solo es dependiente de la presión, y su cálculo se realiza a través del módulo Corriente, los efectos de la temperatura sobre esta propiedad son determinados en la resolución del balance de energía.

Las masas son obtenidas durante el cálculo a través de balances de masa desarrollados mediante una integración en el paso de tiempo simulado en cada una de las fases encontradas, obteniéndose las siguientes ecuaciones.

$$m_g = (F \times \psi - V) \times dt + m_{g,ant} \text{ Ecuación 14}$$

$$m_l = (F \times (1 - \psi) - L) \times dt + m_{l,ant} \text{ Ecuación 15}$$

Donde  $F$  y  $\psi$  corresponden al flujo molar y factor de vaporización de la corriente de entrada respectivamente,  $V$  y  $L$  corresponden al flujo molar de vapor y líquido en las corrientes de salida del separador respectivamente, el término  $dt$  es el paso de integración utilizado para simular la dinámica del proceso, y los términos  $m_{g,ant}$  y  $m_{l,ant}$  corresponden a las masas molares de las fases determinadas en el paso de integración anterior, en la integración de este modelado en la red de flujo-presión los términos  $F$ ,  $V$  y  $L$ , son sustituidos por las ecuaciones de flujo de las unidades de transferencia adyacentes al separador.

Una vez determinada la presión del separador y sus flujos adyacentes por la red de flujo-presión, se determina la temperatura del mismo resolviéndose el balance de energía, la resolución y evaluación de estas ecuaciones permite obtener la presión y temperatura del separador, así como también las especificaciones de las corrientes de salida, con la combinación presión y entalpía para ser resueltas por la simulación de estado estacionario.

Para la simulación de estado estacionario se hizo la integración de los equipos involucrados en la simulación del caso base, aplicando estos modelos en la programación de objetos en base a su jerarquía organizacional, y para su resolución se interconectaron siguiendo las secuencias modulares presentes en el diagrama de flujo de procesos y los grados libertad del caso base.

Para la simulación de estado dinámico se construyó una red de flujo-presión de los equipos involucrados aplicando sus ecuaciones de flujo y ecuaciones de presión, descritas anteriormente en la programación de objetos en base a los elementos teóricos de la red de flujo-presión, siguiendo los mismos grados de libertad de control de los controles presentes y los grados de libertad de la red de flujo-presión.



## **Programar los modelos matemáticos de los lazos de control anti-surge y control de desempeño**

El modelado matemático del control de seguridad anti-surge y el control de capacidad del compresor se desarrolló en el lenguaje de programación Python, siguiendo las estrategias y filosofías de control estudiadas, analizadas y propuestas por (Rebolledo C. & Gómez M., 2012), donde se aplica un control de capacidad cuyo propósito es controlar la presión de succión del compresor manipulando la velocidad del mismo; para este trabajo se tomara como variable a control, el flujo volumétrico estándar a la entrada del compresor, y haciendo uso del protocolo de comunicación Modbus para la comunicación de la información, estos controles se alimentaron de las variables de procesos necesarias provenientes de la simulación dinámica desarrollada en Python. Los controles fueron modelados con la ecuación característica del algoritmo PID -el cual significa Proporcional, Integral y Derivativo- esta ecuación es la siguiente.

$$OP(t) = OP \times (t - 1) + K_c \times \left( e(t) + \frac{1}{T_i} \times e(t) \times h + T \times \frac{(e(t) - 2 \times e(t-1) + e(t-2)))}{h} \right) \text{ Ecuación 16}$$

## **Validar la herramienta desarrollada comparando y analizando los resultados obtenidos con el simulador de procesos comercial**

Una vez seleccionada la planta como caso base, y desarrollada la simulación dinámica descrita en este Trabajo Especial de Grado, se compararon los resultados de ambas simulaciones considerándose las variables principales de operación de los equipos presentes, en estado estacionario y dinámico para las mismas especificaciones y grados de libertad.

Para la validación de la herramienta de simulación en estado estacionario, se compararon las variables de operación de los equipos principales, como también los resultados de las corrientes de producto de interés, con respecto al caso base en condiciones normales de operación.

Para la validación de la herramienta de simulación en estado dinámico, se hicieron pruebas a lazo abierto y a lazo cerrado, con el fin de poder representar y validar el comportamiento de la planta ante perturbaciones en el sistema, como también el rechazo de las mismas.

En un principio el comportamiento de la herramienta de simulación ante una capacidad nueva deseada, se estudió realizando cambios en la capacidad de la planta, a través del control de capacidad, estos cambios fueron un aumento y una reducción en la capacidad normal de operación a los siguientes valores respectivamente, 196 y 186 MMSCFD, estos valores se introdujeron en el set-point del control de capacidad y se estudiaron ambas respuestas de la herramienta en un tiempo de simulación de 5 minutos; y por último, se compararon y se analizaron estas respuestas con las respuestas del caso base en el simulador comercial ante los mismos cambios.

Por último para estudiar y validar la respuesta del control antisurge se simuló un falla de la válvula de alimentación, donde aplicándose una tasa de cambio dinámica de 0,5%/s del actuador de posición, se llevó la apertura de la válvula de alimentación a 25%, para esto fue realizada una prueba donde la planta opera a condiciones normales de operación, procediéndose a la ejecución de la falla de la válvula, estudiándose y analizándose la respuesta transitoria del lazo de control antisurge ante la caída del flujo de alimentación.

### **Desarrollar una interfaz amigable y de fácil entendimiento**

En el presente trabajo se desarrolló una interfaz de operación de fácil entendimiento, siguiendo un aspecto visual similar al de esquemáticos de procesos que puedan encontrarse en la industria, esta interfaz sirve de propósito para la visualización y manipulación de las variables de operación de la herramienta de simulación, para ello se usó el entorno de desarrollo LabVIEW, que permite la configuración de características y elementos visuales para el monitoreo, tales como, controles, indicadores, botones y gráficas, así como también la incorporación de imágenes personalizadas.

Una vez desarrollada la simulación, los controles y la interfaz de operación, se implementó el protocolo Modbus mediante el uso de la librería nimodbus en el código fuente de esta interfaz, para la conexión en una red local TCP/IP y permitir la unión de estos desarrollos, convirtiéndose finalmente en una herramienta de simulación para estudiar y evaluar la operación y control de una planta de compresión de gas natural.

Por último se compiló todo este sistema desarrollado en un solo empaquetamiento instalador de LabVIEW, que puede ser instalado y listo para usarse en un computador con sistema operativo Windows de 32 bits con independencia de ejecución.

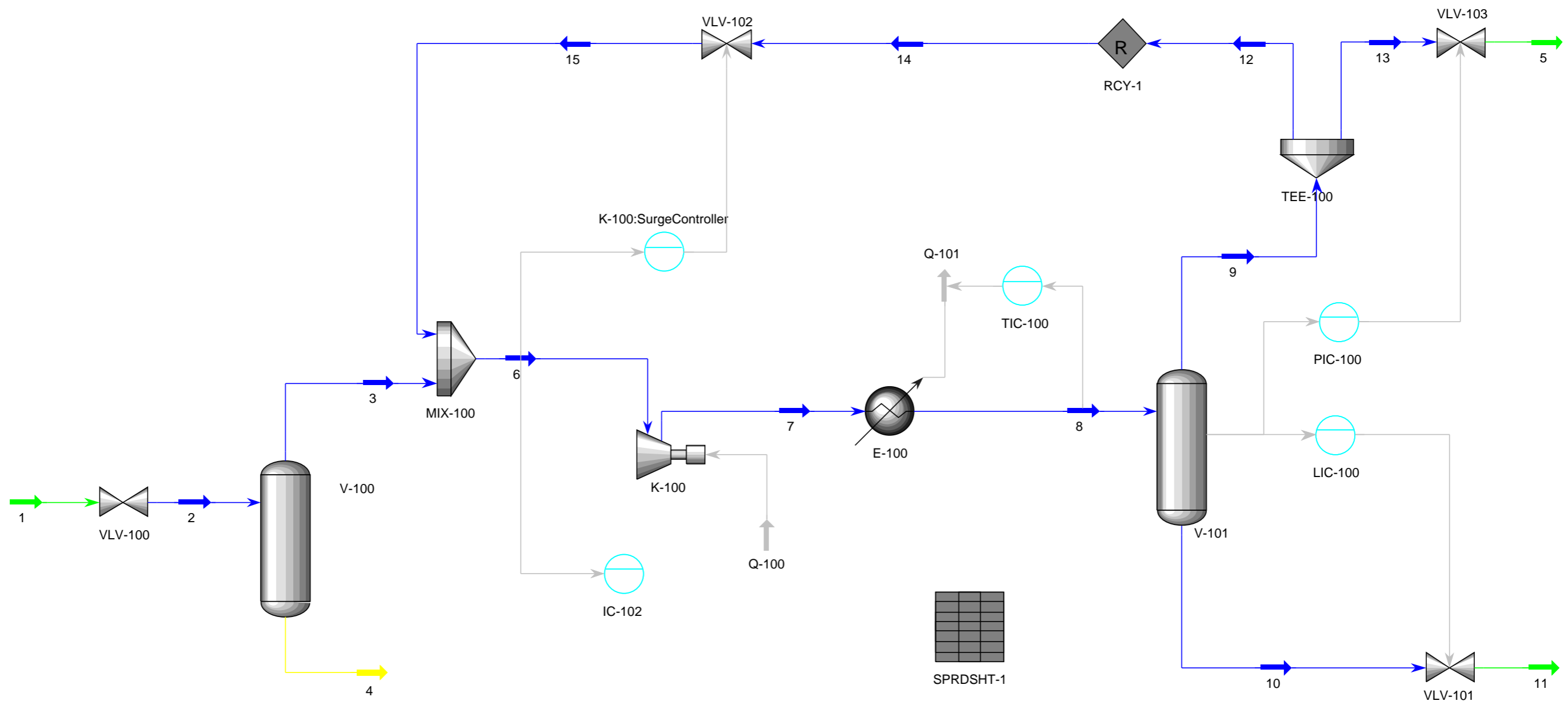
## **CAPÍTULO V**

### **RESULTADOS Y DISCUSION DE RESULTADOS**

#### **Seleccionar una planta como caso base cuya configuración y equipos hayan sido simulados utilizando un simulador de procesos comercial**

La figura N° 8 muestra el diagrama de flujo de procesos de la unidad de compresión de gas natural, extraída de la simulación seleccionada contenida en los casos de ejemplo del UniSim Design Suite.

En este diagrama se tiene un proceso de compresión de gas natural, el cual está constituido de forma modular por tres válvulas de regulación de flujo, dos separadores bifásicos, un compresor politrópico, un enfriador, una válvula de reciclaje y cinco controles PID; siendo cuatro de ellos controles de procesos y uno como control de prevención de surge; estos equipos, sus características y controles cumplen con las expectativas mínimas para el desarrollo de los distintos modelos y su respectiva validación.



**Figura N° 10.** Diagrama de Flujo de Procesos de la Simulación del Caso Base.

A continuación se presentan las Tabla N° 1 y Tabla N° 2, las cuales describen las especificaciones de la corriente de alimentación del proceso de compresión, representada en el diagrama de flujo de procesos en la Figura N° 1 con la corriente 1 a la izquierda del mismo, como también las especificaciones de los equipos para la simulación del caso base en condiciones estacionarias en el simulador comercial.

**Tabla N° 1.** Especificaciones de las corrientes para el caso estacionario.

	1
Temperatura (K)	308,15
Presión (bar)	14,00
Flujo molar (mole/min)	159412,61
Composiciones molares	
Metano	0,83701
Etano	0,09610
Propano	0,03821
Isobutano	0,00642
Butano	0,01112
Isopentano	0,00381
Pentano	0,00332
Hexano	0,00223
Heptano	0,00178

**Tabla N° 2.** Especificaciones de los equipos para el caso estacionario.

Equipo	Especificación	Valor/Condición
VLV-100	Diferencia de Presión (bar)	1,3656
V-100	Isobárico	SI
	Adiabático	SI
MIX-100	Igualdad de Presiones	SI
K-100	Curvas Características	SI
	Velocidad de Operación (rpm)	5950
E-100	Diferencia de Presión (bar)	0,1303
	Calor Retirado (kW)	8457,16
V-101	Isobárico	SI
	Adiabático	SI
VLV-101	Diferencia de Presión (bar)	0,3826
TEE-100	Relación de Flujo Corriente 13	0
VLV-103	Diferencia de Presión (bar)	0,3470

Las especificaciones de las corrientes presentadas en la Tabla N° 1 en conjunto con las especificaciones de los equipos presentadas en la Tabla N° 2, comprenden la información necesaria para la resolución del caso base en estado estacionario; una vez resuelta la simulación en estado estacionario, las condiciones obtenidas son las condiciones normales de operación, las cuales son el punto de partida para modelado y resolución de la simulación dinámica, resumiéndose las condiciones normales de operación de los equipos más resaltantes para la validación del modelado de estado estacionario de este trabajo en la tabla siguiente:

**Tabla N° 3.** Resultados de los equipos para el caso estacionario en el simulador comercial.

Equipo	Especificación	Valor
V-100	Presión de Operación (bar)	12,634
	Temperatura de Operación (K)	307,3458
K-100	Presión de Descarga (bar)	24,14
	Temperatura de Descarga (K)	360,0162
	Potencia Consumida (kW)	5673,52
	Eficiencia Politrópica	0,8042
E-100	Temperatura de Descarga (K)	291,3396
	Presión de Descarga (bar)	24,056

De igual forma se presenta la tabla siguiente, donde se muestra los productos o corrientes de salida de la simulación.



**Tabla N° 4.** Resultados de las corrientes para el caso estacionario en el simulador comercial.

	9	11
Temperatura (K)	291,1208	291,1208
Presión (bar)	23,70	23,66
Flujo molar (mole/min)	159219,86	192,76
Composiciones molares		
Metano	0,83788	0,11874
Etano	0,09613	0,06983
Propano	0,03815	0,09131
Isobutano	0,00638	0,03566
Butano	0,01103	0,08642
Isopentano	0,00373	0,06852
Pentano	0,00323	0,07859
Hexano	0,00205	0,14987
Heptano	0,00142	0,30106

Estos resultados presentes en la Tabla N° 4, sirven de base para la validación y comparación de los resultados del modelado de estado estacionario, en las respectivas corrientes de salida de la herramienta de simulación.

#### **Realizar un análisis de grados de libertad del proceso de compresión**

Se realizó un análisis de grados de libertad para identificar el número de variables que deben ser establecidas para resolver el sistema de ecuaciones, que describe el modelo que posee cada módulo de cálculo, bien sea corrientes o equipos dentro del proceso de compresión, y se determinó el número de grados de libertad de control del mismo.

Para este análisis se tomó en consideración que para las operaciones unitarias encontradas en la simulación descrita por la Figura N° 10, las que estén descritas y

modeladas con las mismas series de ecuaciones tendrán los mismos grados de libertad, tendiéndose la siguiente tabla.

**Tabla N° 5.** Grados de Libertad de los equipos presentes en el caso base.

	Operación Unitaria	Grados de Libertad	Especificaciones-(grados de libertad)
1	Válvula	$(NC + 2) + 1$	Diferencia de presión - (1)
2	Separador Flash	$(NC + 2) + 2$	Isobárico/Adiabático - (2)
3	Compresor	$(NC + 2) + 1$	Velocidad de operación - (1)
4	Enfriador	$(NC + 2) + 2$	Diferencia de presión/Calor retirado - (2)
5	Mezclador	$N(NC + 2) + 1$	Presión de salida - (1)
6	Tee(Divisor)	$N - 1$	Relaciones de flujo - (1)

Como se puede apreciar en la Tabla N° 5, los grados de libertad vienen dados por expresiones algebraicas, en donde el término NC corresponde al número de componentes de la corriente a procesar, siendo además, la agrupación  $(NC + 2)$  correspondiente a las especificaciones que deben hacerse en la corriente de entrada de cada operación unitaria, si la corriente de entrada de una operación está conectada a la salida de otra operación, estas especificaciones,  $(NC + 2)$ , están dadas por la salida de esta última operación, en caso contrario el usuario o desarrollador debe especificarlas, y por último el término N corresponde al número de corrientes que entran a un mezclador o que salen de un equipo divisor; al aplicar estas reglas a la simulación de caso base en el simulador comercial para los equipos presentes, se tiene un total de 13 grados de libertad, un dimensionamiento de las válvulas y el enfriador presentes se realiza en orden de tener el coeficiente de resistencia simple, que es utilizado luego por la simulación dinámica, este dimensionamiento agrega a los sistemas de ecuaciones una ecuación adicional sin variables adicionales, reduciéndose los grados de libertad, al haber 4 válvulas y un enfriador, con los cuales se obtienen 8 grados de libertad en total para el caso base en el simulador comercial, la simulación dinámica

adicionalmente incorpora a los sistemas de ecuaciones, ecuaciones de carácter dinámico sin variables adicionales, como son las ecuaciones de presión de los separadores y el balance de masa a la salida del compresor, obteniéndose finalmente un total de 5 grados de libertad del procesos de compresión de gas natural, este número representa a su vez los grados de libertad de control, siendo 5 el máximo número de controles que pueden proponerse para este proceso; para la simulación del caso base se encontraron 5 lazos de control de procesos, verificándose así la consistencia de la simulación, estos lazos de control se listan en la siguiente tabla con sus respectivas variables de procesos y elementos finales de control.

**Tabla N° 6.** Lazos de control de procesos con sus variables manipuladas y de proceso.

Control - (Función)	Variable de proceso	Variable manipulada
IC-100 - (Control de Capacidad)	Flujo estándar corriente 6	Velocidad de operación del compresor K-100
TIC-100 - (Control de Temperatura)	Temperatura corriente 8	Flujo de energía de corriente Q-101
PIC-100 - (Control de Presión)	Presión del separador V-101	Apertura de la válvula VLV-103
LIC-100 (Control de nivel)	Nivel de líquido del separador V-101	Apertura de la válvula VLV-101
ASC-100 (Control antisurge)	Flujo Actual corriente 6	Apertura de la válvula VLV-102

Finalmente la simulación dinámica requiere las especificaciones de la red de flujo-presión, para la simulación del caso base todas las corrientes de frontera se seleccionaron así como la ubicación de las especificaciones, y la presión de las mismas como el tipo de especificaciones, con excepción de la corriente 4 la cual se especificó con flujo molar igual a cero.

### **Desarrollar el modelado termodinámico con ecuaciones cúbicas de estado por el método de Peng-Robinson para las corrientes de fluidos**

El modelado termodinámico de una corriente de fluido, se desarrolló con una estructura de programación orientada a objetos, abstrayendo las características de un fluido en la realidad, el cual está compuesto por una cantidad determinada de compuestos químicos, donde cada uno de los mismos en base a sus características intrínsecas contribuye al comportamiento general del fluido en el que está contenido, siguiendo este esquema se desarrolló en un principio un objeto denominado Componente, una estructura de este objeto puede apreciarse en la tabla siguiente:

**Tabla N° 7.** Estructura básica del objeto Componente.

Nombre	Descripción		
Componente	Objeto que abstrae el concepto de un componente o compuesto químico, el cual posee unas propiedades o características intrínsecas del mismo (atributos), y otras propiedades que dependen de la temperatura o presión del sistema (métodos) en su forma pura.		
<b>Atributos o propiedades</b>			
Identificador	Descripción	Tipo de variable	
nombre	Nombre característico del compuesto químico, e.g. Metano	Cadena de Caracteres	
formula	Formula química del compuesto químico, e.g. "CH4"	Cadena de Caracteres	
parametros	Conjunto de información numérica o parámetros necesarios para el cálculo o búsqueda de propiedades del compuesto químico.		Objeto
	Identificador	Descripción	Tipo de variable
	MW	Peso molecular	Real
	Tb	Temperatura de ebullición	Real
	Tc	Temperatura del punto crítico	Real
	Pc	Presión del punto crítico	Real
	Vc	Volumen molar del punto crítico	Real
	Zc	Factor de compresibilidad a condiciones críticas	Real
	omega	Factor acéntrico	Real
	Ttriple	Temperatura del punto triple	Real
	Ptriple	Presión del punto triple	Real
	Hf	Entalpía de formación	Real
	Gf	Energía libre de formación	Real
	CpVap	Parámetros del polinomio que modela la capacidad calorífica del vapor saturado	Diccionario
Vp	Parámetros del modelo de la presión de vapor	Diccionario	
<b>Métodos</b>			
Identificador	Argumentos o parámetros o de entrada	Salida	
a	T: Temperatura a evaluar	Parámetro volumétrico a	
da	T: Temperatura a evaluar	Derivada del parámetro volumétrico a con respecto a la temperatura	
b	N/A	Parámetro volumétrico b	
K	T: Temperatura a evaluar P: Presión a evaluar	Estimación de la relación de equilibrio en una mezcla de hidrocarburos	
Hgas	T: Temperatura	Entalpía del vapor saturado	
Sgas	T: Temperatura	Entropía del vapor saturado	
Vp	T: Temperatura	Presión de vapor	

Como se puede apreciar en la Tabla N° 7 la estructura del objeto Componente permite almacenar como propiedades del objeto las propiedades constantes de una especie pura como también los parámetros para el cálculo de las propiedades dependientes de la temperatura, y como métodos aquellas funciones de un componente puro que dependen de la temperatura y presión.

Este objeto antes de su empleo se inicializa principalmente suministrándole el nombre del componente que abstrae de la realidad, como por ejemplo Metano, donde en base a este nombre se le asigna todas sus propiedades y parámetros correspondientes desde una base de datos que posee la información de todos los componentes a utilizar para este trabajo.

Por último para completar el modelado de una corriente de fluido se desarrolló un objeto denominado Corriente, una estructura de este objeto puede apreciarse en la siguiente tabla.

**Tabla N° 8.** Estructura básica de las propiedades del objeto Corriente.

Nombre	Descripción		Tipo de variable	
Corriente	Objeto que abstrae el concepto de una corriente de fluidos, el cual posee unas propiedades o características intrínsecas del mismo (atributos), y métodos para su resolución en base a la regla de las fases como información inicial.			
<b>Atributos o propiedades</b>				
Identificador	Descripción		Tipo de variable	
nombre	Nombre de identificación de la corriente		Cadena de Caracteres	
componentes	Lista de objetos tipo Componente que están presentes en la corriente		Lista	
composiciones	Diccionario que almacena las composiciones molares de los componentes presentes en la corriente		Diccionario	
flujoMolar	Flujo molar de la corriente		Real	
composicionesGas	Diccionario que almacena las composiciones molares de la fase gaseosa de la corriente		Diccionario	
composicionLiquido	Diccionario que almacena las composiciones molares de la fase liquida de la corriente		Diccionario	
propiedadesEntrada	Propiedades termodinámicas de inicialización para la aplicación de las reglas de las fases ante la resolución computacional de la corriente		Objeto	
	Identificador	Descripción	Tipo de variable	
	Phi	Factor de vaporización	Real	
	P	Presión de la corriente	Real	
	T	Temperatura de la corriente	Real	
	H	Entalpia especifica de la corriente	Real	
	S	Entropía especifica de la corriente	Real	
propiedadesSalida	Propiedades termodinámicas resultantes de la resolución computacional de la corriente, y posee la misma estructura de la propiedad "propiedadesEntrada"		Objeto	
PropiedadesFluidos	Objeto que almacena las propiedades los fluidos de las fases presentes en la corriente		Objeto	
	Identificador	Descripción	Tipo de variable	
	Gas	Propiedades de los fluidos de la fase gaseosa		Objeto
		Identificador	Descripción	Tipo de variable
		densidad_molar	Densidad molar	Real
		Z_factor	Factor de compresibilidad	Real
		masa_molar	Masa molar	Real
	Identificador	Descripción	Tipo de variable	
	Liquido	Propiedades de los fluidos de la fase liquida		Diccionario
		Identificador	Descripción	Tipo de variable
		densidad_molar	Densidad molar	Real
		Z_factor	Factor de compresibilidad	Real
		masa_molar	Masa molar	Real
flujos	Objeto que almacena los flujos molares y volumétricos de las fases encontradas		Objeto	
	Identificador	Descripción	Tipo de variable	
	Gas	Flujos molar y volumétrico de la fase gaseosa		Objeto
		Identificador	Descripción	Tipo de variable
		flujo_molar	Flujo molar	Real
		flujo_Volumetrico	Flujo volumétrico	Real
	Identificador	Descripción	Tipo de variable	
	Liquido	Flujos molar y volumétrico de la fase liquida		Objeto
		Identificador	Descripción	Tipo de variable
		flujo_molar	Flujo molar	Real
flujo_Volumetrico		Flujo volumétrico	Real	
entropias	Objeto que almacena las entropías específicas de las fases presentes		Objeto	
	Identificador	Descripción	Tipo de variable	
	Sgas	Entropía especifica del gas	Real	
	Sliquido	Entropía especifica del liquido	Real	
entalpias	Objeto que almacena las entalpias específicas de las fases presentes		Objeto	
	Identificador	Descripción	Tipo de variable	
	Hgas	Entalpia especifica del gas	Real	
	Hliquido	Entalpia especifica del liquido	Real	

Como se puede apreciar en la Tabla N° 8 el objeto Corriente permite almacenar una lista de los objetos Componente presentes, sus composiciones molares y el flujo molar como entradas principales, además un objeto identificado como “propiedadesEntrada” para la asignación de los grados de libertad necesarios para la resolución de la corriente, siguiendo la regla de las fases, esta resolución permite completar la información de la estructura que se presenta en estas tablas, como las propiedades termodinámicas específicas, como también las composiciones y propiedades de los fluidos de cada fase, el detalle de los modelos matemáticos implementados para el cálculo de cada propiedad se encuentra indexado en los apéndices; para la determinación de estas propiedades, una serie de métodos deben ser ejecutados de manera de determinar en qué fase o estado de agregación coexiste la corriente, para los grados de libertad especificados y las composiciones de las fases en caso de encontrarse en equilibrio termodinámico, esta serie de métodos pertenecientes a la estructura del objeto Corriente se puede apreciar en las siguientes tablas.



**Tabla N° 9.** Estructura de métodos del objeto Corriente.

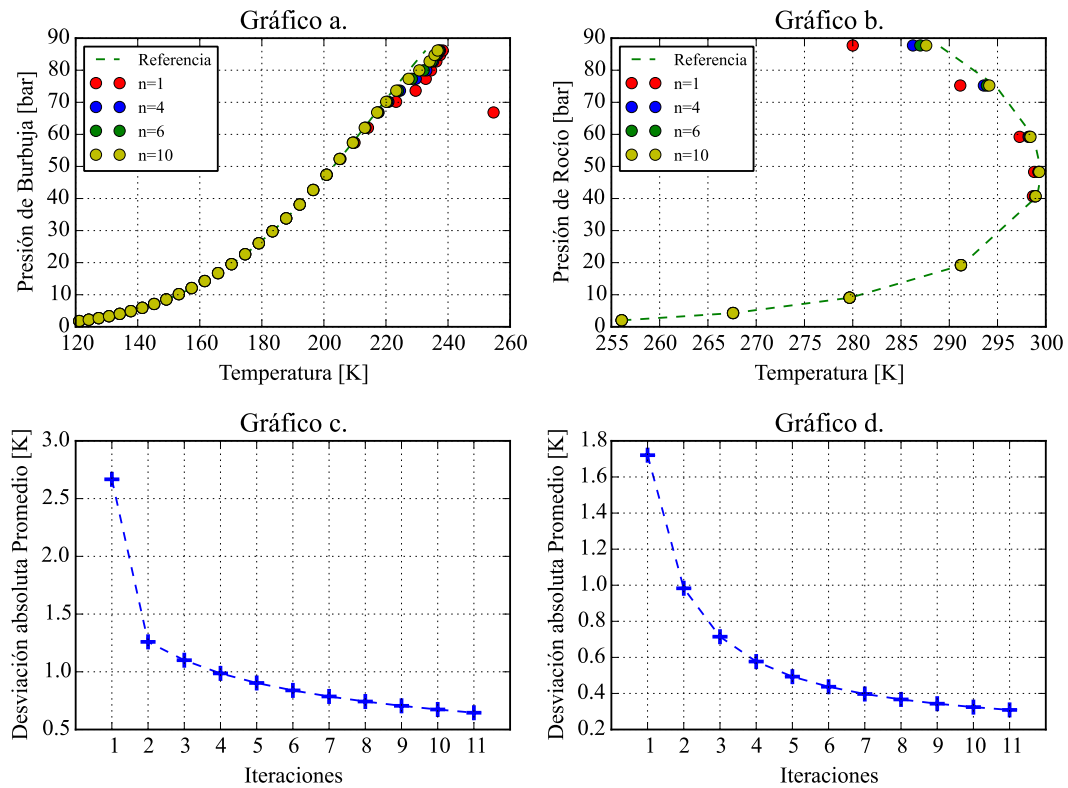
Nombre	Descripción	
Corriente	Objeto que abstrae el concepto de una corriente de fluidos, el cual posee unas propiedades o características intrínsecas del mismo (atributos), y métodos para su resolución en base a la regla de las fases como información inicial.	
<b>Métodos</b>		
Identificador	Argumentos o parámetros o de entrada	Salida
actualizar	N/A	N/A
fijarPropiedad	prop: Propiedad termodinámica valor: Valor de la propiedad a fijar	N/A
fijarMezcla	listaComponentes: Lista de los componentes de la corriente listaComposicion: Lista de las composiciones de los componentes en la corriente	N/A
fijarFlujoMolar	flujo: Flujo molar de la corriente	N/A
puntoDeBurbuja	datos: Presión a la cual se avaluara el punto de burbuja	N/A
puntoDeRocio	datos: Presión a la cual se avaluara el punto de rocío	N/A
obtenerEstado	T: Temperatura P: Presión	Estado en el cual se encuentra la corriente: “Vapor”, “Liquido” o “Mezcla”
kIterador	T: Temperatura P: Presión phi: Factor de vaporización	Lista de las relaciones de equilibrio a un numero de iteraciones del método de sustitución sucesiva
rachfordRice	T: Temperatura P: Presión	Factor de vaporización
propiedadesEquilibrio	T: Temperatura P: Presión phi: Factor de vaporización	Información de las condiciones de un equilibrio liquido-vapor estructurada en un diccionario: factor de vaporización, composiciones de las fases y relaciones de equilibrio
coeficienteFugacidad	componente: Componente de la mezcla T: Temperatura P: Presión estado: Estado Z: factor de compresibilidad	Coefficiente de fugacidad de un componente en la mezcla de una fase en equilibrio
Z	T: Temperatura P: Presión composiciones: Composiciones estado: Estado	Factor de compresibilidad
amezcla	T: Temperatura composiciones: Composiciones	Parámetro volumétrico a de mezcla
bmezcla	composiciones: Composiciones	Parámetro volumétrico b de mezcla
damezcla	T: Temperatura composiciones: Composiciones	Derivada del parámetro volumétrico a de mezcla
entalpiaDeMezcla	T: Temperatura P: Presión estado: Estado equilibrio: Información de las condiciones de un equilibrio	Entalpia de mezcla de una corriente
entropiaDeMezcla	T: Temperatura P: Presión estado: Estado equilibrio: Información de las condiciones de un equilibrio	Entropía de mezcla de una corriente
obtenerPropiedades	T: Temperatura P: Presión phi: Factor de vaporización	Información de las propiedades de los fluidos de las fases presentes: Densidad, factor de compresibilidad y masa molar

La Tabla N° 9 muestra los métodos principales necesarios para la resolución de la corriente, como también los métodos adicionales para la determinación de las propiedades de los fluidos y las condiciones de equilibrio requeridos para este trabajo.

Para la resolución de un objeto Corriente se deben usar los métodos reportados en la Tabla N° 9 de manera de establecer cuáles son los componentes y sus composiciones, fijar los grados de libertad según la regla de las fases, y por último ejecutar el método “actualizar”, el cual en base a la información suministrada, determina en qué estado se encuentra la corriente, determina además las condiciones de equilibrio en caso de presentarse un equilibrio liquido-vapor, aplicando el método de sustitución sucesiva y finalmente determina todas las propiedades termodinámicas de la corriente como también las propiedades de los fluidos de las fases presentes, toda esta información determinada es almacenada en la misma estructura del objeto en las propiedades reflejadas en la Tabla N° 8.

La resolución termodinámica de los múltiples objetos tipo Corriente en un diagrama de flujo de procesos tiene asociado un tiempo de cómputo y consumo de recurso, este tiempo tiende a ser mayor a medida que aumenta el número de corrientes en el diagrama, como también cuando se reducen las tolerancias en los métodos numéricos, para una simulación cuyo factor de tiempo real es igual a uno, este tiempo de cómputo para la resolución termodinámica debe estar sincronizado, lo más posible, con el tiempo o paso de integración utilizado para la resolución de la red de flujo presión en la simulación dinámica; si este tiempo de integración requiere ser relativamente pequeño y el tiempo de resolución termodinámica relativamente grande, para una simulación en tiempo real se tiene como consecuencia un desfase temporal de las variables, entre las presiones, flujos molares y temperaturas en el sistema con respecto al comportamiento real o esperado, es por esto mismo que se debe tomar en cuenta reducir cierta precisión en la termodinámica, de manera de reducir el tiempo de cómputo de la resolución de la misma, mejorando la robustez de la simulación y mantener su ejecución en tiempo real sin desfase temporal.

Para lograr este fin, en este trabajo se optó por abandonar la convergencia numérica del método de sustitución sucesiva en el equilibrio liquido-vapor, por un número de iteraciones fijo, debido principalmente a que para distintas composiciones de hidrocarburos a distintas condiciones de equilibrio, Gammiero en el 2005, reportó que se pueden obtener entre 36 y 86 segundos para la resolución del equilibrio, y un número de iteraciones por encima de 790 para la determinación de la fracción de vapor, para lograr un balance entre precisión y rendimiento, se realizó un análisis de las desviaciones que pueden presentarse en el cálculo del equilibrio liquido-vapor a diferentes número de iteraciones, con respecto al equilibrio reportado por el simulador comercial, la siguiente gráfica muestra las curvas de rocío y burbuja de referencia para la composición de alimentación, y sus respectivas aproximaciones a diferentes número de iteraciones, como también las desviaciones absolutas promedios a diferentes número de iteraciones para el método de sustitución sucesiva.



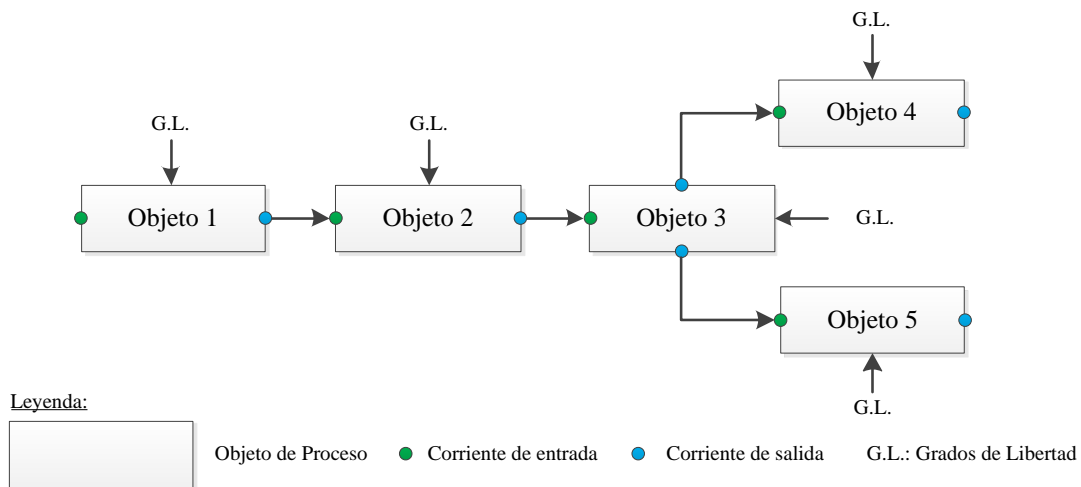
**Figura N° 11.** Análisis de Iteraciones para convergencia del algoritmo de sustitución sucesiva.

El Grafico a y Grafico b de la Figura N° 11 muestran respectivamente el comportamiento de la curva de burbuja y rocío reportadas por el simulador comercial, con líneas segmentadas como referencia, y también mediante dispersiones el comportamiento aproximado de la curva de burbuja y rocío a 1, 4, 6, y 10 iteraciones para el método de sustitución sucesiva desarrollado por este trabajo, estos gráficos muestran que a medida que aumenta el número de iteraciones la curva aproximada se acerca de forma aparente a la curva de referencia, esta proximidad se cuantifica en los gráficos c y d, que muestran la desviación absoluta promedio de la temperatura de la curva de burbuja y rocío respectivamente a las mismas presiones reportadas en la referencia, a medida que aumenta el número de iteraciones, para ambos comportamientos las desviaciones disminuyen tendiendo hacia un comportamiento asintótico por debajo de 1 Kelvin de desviación en la temperatura. Para este trabajo,

al no necesitarse un modelado riguroso sí no aproximado, y teniendo un balance entre la precisión y el rendimiento se establece como 4 el número de iteraciones para el algoritmo de sustitución sucesiva, aceptándose desviaciones de 0.8390 Kelvin para el líquido y 0.4372 Kelvin para el vapor.

### **Programar los modelos de los equipos de una unidad compresión de gas natural en estado estacionario y dinámico**

El modelado de los equipos de la unidad de compresión de gas natural para el estado estacionario, se desarrolló siguiendo la técnica de programación orientada a objetos, de manera de, tener así una organización en los sistemas a modelar con cierta correspondencia con los equipos u operaciones unitarias encontradas en la realidad y/o en el simulador comercial, los objetos que sirven de propósito a los equipos son denominados objetos de Proceso, los cuales corresponden a un equipo de la vida real (válvula, separador, compresor y enfriador), permitiendo que la simulación pueda ser construida a partir de un diagrama de flujo de procesos, cada objeto de Proceso posee el desarrollo del modelado matemático que le corresponde, y los mismos son desarrollados de forma independiente del fluido que procesan, esto hace que los objetos tengan robustez y agilidad al momento de simular otros fluidos o mezclas de componentes, como también otras estructuras o diagramas de flujo de procesos distintos, cada objeto de Proceso posee una corriente de entrada y una corriente de una salida, a excepción del separador que posee dos corrientes de salida, estas corrientes computacionalmente son representadas por objetos de Corriente, cada equipo en base sus especificaciones, la corriente de entrada y las ecuaciones pertinentes, determina los grados de libertad de la corriente o corrientes de salida, y finalmente procede a la resolución de estas.



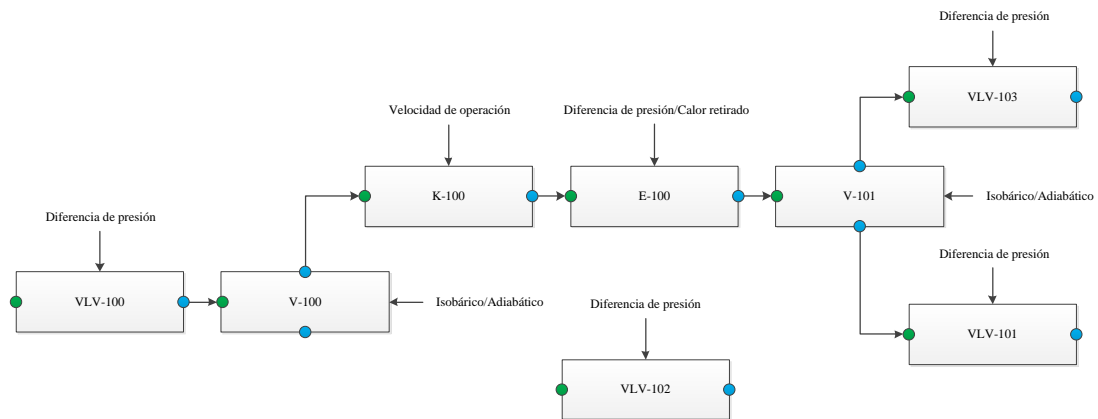
**Figura N° 12.** Secuencia de resolución de una simulación de estado estacionario (Elaboración propia).

Como se puede observar en la Figura N° 12, un modelo de una planta en estado estacionario se hace mediante la conexión de estos objetos de proceso a través de sus corrientes de entrada y salida, siendo los objetos de Corriente la información principal que se comparte o se comunica entre los equipos u objetos de Proceso, una vez especificado todos los grados de libertad necesarios en todos los objetos, la resolución del modelo de simulación de una planta en general, se hace mediante el enfoque secuencial, donde la secuencia computacional de resolución se hace en la misma dirección de los fluidos o corrientes en el diagrama de flujo de procesos, a partir de la corriente de alimentación se transmite esta misma al primer equipo, en este equipo una vez resuelta la corriente o corrientes de salida, esta última se transmite al siguiente objeto de proceso para su respectiva resolución, y así sucesivamente hasta llegar a las corrientes de productos.

A continuación se presenta la siguiente tabla la cual resume cada una de las especificaciones necesarias de los equipos para la resolución secuencial, la cual se basa en el análisis de grados de libertad, como también se presenta el diagrama de la secuencia de resolución para la planta a modelar en estado estacionario.

**Tabla N° 10.** Grados de libertad de los equipos de la herramienta de simulación.

	Operación Unitaria	Especificaciones
1	Válvula	Diferencia de presión
2	Separador Flash	Isobárico/Adiabático
3	Compresor	Velocidad de operación
4	Enfriador	Diferencia de presión/Calor retirado

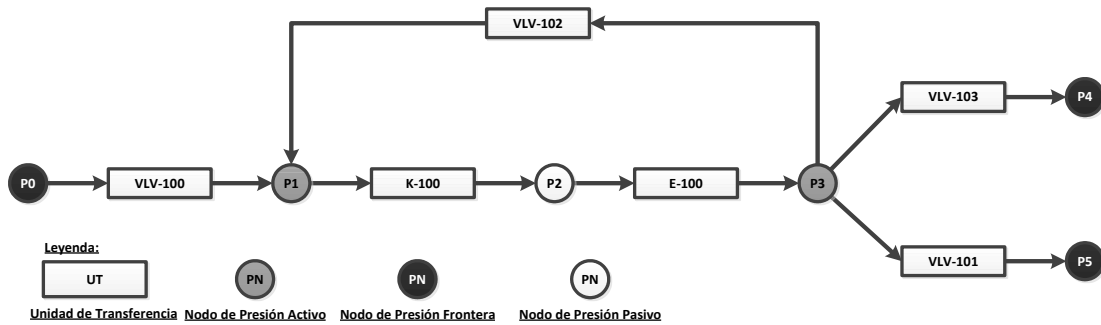


**Figura N° 13.** Secuencia de resolución de la simulación de estado estacionario para la herramienta de simulación (Elaboración propia).

Como se puede observar en la Figura N° 13, el modelado en estado estacionario de la planta de compresión sigue un esquema secuencial, en base al diagrama de flujo de procesos y a los grados de libertad analizados para la planta seleccionada, como se muestran en la Tabla N° 10, la válvula de recirculación o antisurge VLV-102 es modelada de forma desacoplada, debido a que en condiciones normales de operación no hay flujo molar a través de ella por estar en posición cerrada, tomándose una copia del objeto de Corriente de salida de vapor del separador V-101 y suministrándolo al objeto de Proceso VLV-102, pero con un flujo molar de cero.

Para el modelado dinámico de la planta la metodología de red de flujo-presión fue implementada, donde se construyó una topología de red a partir de los objetos de

procesos ya resueltos para el modelado del estado estacionario, una unidad de transferencia para cada equipo que no posea acumulación de masa, un nodo activo para cada separador o equipo que acumule masa, y por último un nodo pasivo entre unidades de transferencia. La siguiente figura muestra la topología de red de la red de flujo-presión para la unidad de compresión de gas natural.



**Figura N° 14.** Red de flujo-presión de la unidad de compresión de gas natural (Elaboración propia).

Como se observa en la Figura N° 14, en la red de flujo-presión se tiene como variables desconocidas las presiones P1, P2 y P3, como también los flujos de las unidades de transferencia; siguiendo la metodología de resolución de la red de flujo-presión los balances de masa y de volumen en los nodos de presión se pueden expresar mediante las siguientes ecuaciones.

$$\begin{cases} F_{K-100} - F_{E-100} = 0 \\ V_{T,1} = V_{g,1} + V_{l,1} \\ V_{T,2} = V_{g,2} + V_{l,2} \end{cases} \text{ Ecuación 17}$$

Donde,

$F$ : Representa el flujo molar de la unidad de transferencia adyacente al nodo de presión.



Y los subíndices 1 y 2 representan los separadores V-100 y V-101 respectivamente. Al desarrollarse estas ecuaciones en términos de las presiones de los nodos se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones.

$$\begin{cases} f_{K-100}(P_1, P_2) - k_{E-100} \times A \times \sqrt{\rho_3 \times (P_3 - P_2)} = 0 \\ V_{T,1} = \rho_{g,1} \cdot [(F_{VLV-100} \times \psi - (f_{K-100}(P_1, P_2) - F_{VLV-102})) \times dt + m_{g,ant1}] + \rho_{l,1} \cdot [(F_{VLV-100} \times (1 - \psi) - L) \times dt + m_{l,ant1}] \\ V_{T,2} = \rho_{g,2} \cdot [(F_{E-100} \times \psi - (F_{VLV-103} + F_{VLV-102})) \times dt + m_{g,ant2}] + \rho_{l,2} \cdot [(F_{E-100} \times (1 - \psi) - F_{VLV-101}) \times dt + m_{l,ant2}] \end{cases}$$

Ecuación 18

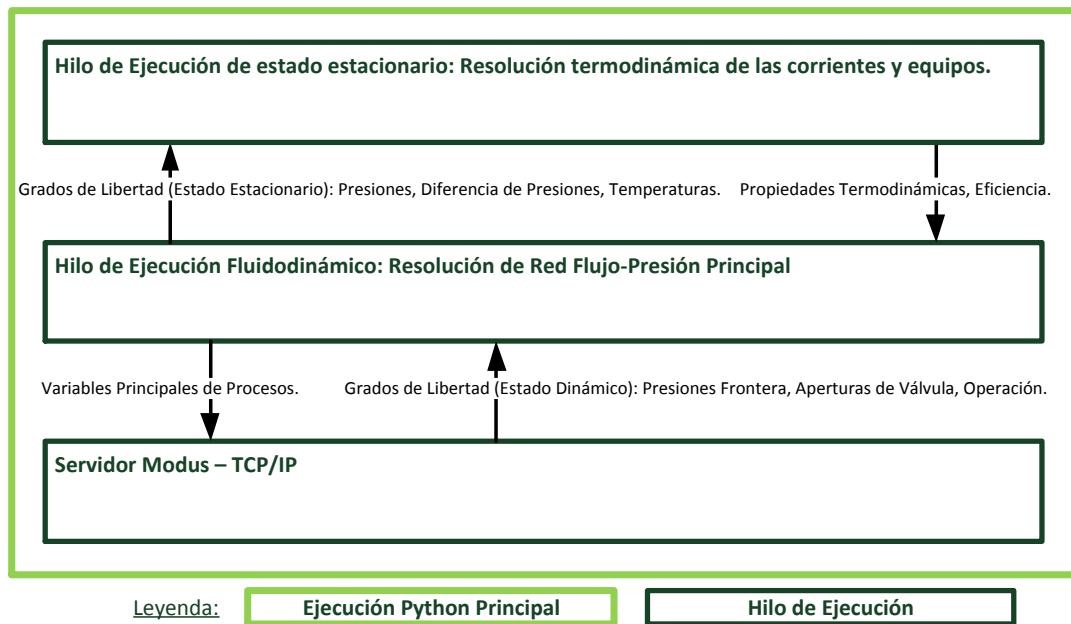
Donde los términos de flujos molares de válvulas son sustituidos por sus respectivas ecuaciones de flujo de resistencia simple, teniéndose como resultado el siguiente sistema de ecuaciones.

$$\left\{ \begin{array}{l} f_{K-100}(P_1, P_2) - k_{E-100} \times A \times \sqrt{\rho_2 \times (P_2 - P_3)} = 0 \\ V_{T,1} = \rho_{g,1} \cdot \left[ \left( k_{VLV-100} \times A \times \sqrt{\rho_0 \times (P_0 - P_1)} \times \psi - \left( f_{K-100}(P_1, P_2) - k_{VLV-102} \times A \times \sqrt{\rho_3 \times (P_3 - P_1)} \right) \right) \times dt + m_{g,ant1} \right] + \dots \\ \quad + \rho_{l,1} \cdot \left[ \left( k_{VLV-100} \times A \times \sqrt{\rho_0 \times (P_0 - P_1)} \times (1 - \psi) - L \right) \times dt + m_{l,ant1} \right] \\ V_{T,2} = \rho_{g,2} \cdot \left[ \left( k_{E-100} \times A \times \sqrt{\rho_2 \times (P_2 - P_3)} \times \psi - \left( k_{VLV-103} \times A \times \sqrt{\rho_3 \times (P_3 - P_4)} + k_{VLV-102} \times A \times \sqrt{\rho_3 \times (P_3 - P_1)} \right) \right) \times dt + m_{g,ant2} \right] + \dots \\ \quad + \rho_{l,2} \cdot \left[ \left( k_{E-100} \times A \times \sqrt{\rho_2 \times (P_2 - P_3)} \times (1 - \psi) - k_{VLV-101} \times A \times \sqrt{\rho_3 \times (P_3 - P_5)} \right) \times dt + m_{l,ant2} \right] \end{array} \right.$$

Ecuación 19

Obteniéndose finalmente un sistema ecuaciones cuyas variables a determinar son las presiones en los nodos,  $P_1$ ,  $P_2$  y  $P_3$ , al ser un sistema de 3 ecuaciones con 3 variables desconocidas lo convierte en un sistema determinado y con solución, la resolución de este sistema de ecuaciones para la obtención de estas presiones y por consiguiente los flujos molares, se desarrolló a partir de los módulos de optimización de la herramienta de cómputo científico SciPy, usándose en específico la función `scipy.optimize.fsolve`, la cual determina de forma genérica las raíces de un sistema de ecuaciones no lineales, implementando una modificación del método híbrido de Powell, cada ecuación en este sistema corresponde a un balance de masa y de volumen en cada nodo bien sea activo o pasivo, cada término de flujo molar en estos balances se sustituye por su respectivo método de flujo correspondiente a la unidad de transferencia que modela, reduciendo así todo el sistema de flujo-presión a un sistema de ecuaciones que tiene como variables desconocidas las presiones de los nodos, una vez determinadas estas presiones son evaluados todos los flujos molares de la red con sus respectivas unidades de transferencia, obteniéndose así, todas las presiones y flujos para cada paso de tiempo de la simulación dinámica.

La resolución de las variables de esta red permite obtener las especificaciones de diferencias de presión que se muestran en la Tabla N° 10 para los objetos de Proceso y en la Figura N° 13, procediéndose nuevamente a la resolución secuencial antes mencionada, esta resolución secuencial actualiza las propiedades de los fluidos en cada corriente que entra o sale de cada objeto de proceso, esta información generada, que fundamentalmente es la densidad y factores de compresibilidad de los fluidos, es suministrada a las unidades de transferencias de la red de flujo-presión, para que el cálculo de las próximas condiciones de flujo y presión se haga de forma sincronizada y correspondiente, de esta manera el enfoque general de las variables de la herramienta de simulación varíen tanto fluidodinámica como termodinamicamente.



**Figura N° 15.** Sincronización de los hilos de ejecución de Python para la herramienta de simulación (Elaboración propia).

La simulación dinámica, que se denomina hilo de ejecución fluidodinámico, se ejecuta de forma concurrente con una simulación de estado estacionario, la cual se denomina hilo de ejecución estacionario, esta interacción de los hilos de ejecución se puede apreciar en la Figura N° 15, la simulación dinámica resuelve las presiones necesarias para las especificaciones de la simulación de estado estacionario, estas especificaciones son las mismas diferencias de presión mostradas en la Tabla N° 10, la simulación en estado estacionario resuelve las propiedades termodinámicas de los fluidos en cada corriente que entra o sale de un objeto de procesos, mediante el mismo enfoque secuencial antes mencionado, esta información generada es suministrada a las unidades de transferencia de la red de flujo-presión para que el cálculo de las próximas condiciones de flujo y presión se haga de forma sincronizada y correspondiente, mediante el hilo de ejecución fluidodinámico; entre ambos hilos de ejecución debe existir una sincronización para que desde un enfoque general todas las variables tengan una condición de correspondencia, los principales parámetros que permiten tener un control o regulación de esta sincronización son el tiempo o paso de

integración de la simulación dinámica, las tolerancias para la resolución de la red de flujo-presión y los balances de energía, y el número de iteraciones del método de sustitución sucesiva, a medida que se aumenta este último, el hilo de ejecución termodinámico requiere de mayor tiempo para la resolución en estado estacionario de todos los objetos de procesos y objetos corrientes presentes en la simulación, mientras que a su vez al reducir las tolerancias mencionadas el hilo de ejecución fluidodinámico requiere de mayor tiempo para la resolución de las presiones y flujos presentes en la red de flujo-presión, pero existe un criterio que se impone sobre la decisión y selección de los valores de estos parámetros y es el efecto del paso de integración sobre la desviación de las presiones y temperaturas de los nodos activos con respecto al comportamiento real o deseado, ya que al modelarse estos nodos con ecuaciones diferenciales requieren de un método de integración numérica para su resolución, a medida que este paso de integración se hace más pequeño mayor precisión se tiene en el comportamiento transitorio de las variables a integrar, las plantas de compresión y los compresores son por lo general de dinámica muy rápida y tiempos muerto muy bajos; originalmente el caso base posee una configuración de paso de integración de 0,5 segundos para la resolución dinámica, pero el autor recomienda que para estudiar respuestas transitorias muy rápidas como por ejemplo la acción del controlador antisurge, 0,1 segundos es el paso de integración requerido para así evitar las desviaciones e imprecisiones de las variables en la red de flujo-presión, teniéndose el rango 0,1-0,5 segundos como expectativa para el paso de integración, siendo 0,1 el valor que genera mayor precisión y 0,5 el que genera menor precisión, una selección entre este rango en conjunto con el número de iteraciones del método de sustitución sucesiva, y las tolerancias para la resolución de la red de flujo-presión se debe hacer de tal manera que exista un sincronización entre los hilos de ejecución, para obtenerse una herramienta de simulación cuya ejecución es en tiempo real; la siguiente tabla muestra los tiempos promedio de resolución del hilo de ejecución termodinámico a diferentes números de iteraciones del método de sustitución sucesiva.

**Tabla N° 11.** Tiempo de cómputo de la simulación de estado estacionario a diferente número de iteraciones del método de sustitución sucesiva.

Numero de Iteraciones	Tiempo Promedio de Resolución (s)
2	0,1480
3	0,1800
4	0,2945
5	0,3460
6	0,3910
7	0,4250
8	0,5240
9	0,5490
10	0,6034
20	0,6450
50	0,8370
100	1,1030
200	1,4910

Como se puede observar en la Tabla N° 11, a medida que aumenta el número iteraciones requerido por el método de sustitución sucesiva para la resolución de los equilibrios termodinámicos, aumenta también el tiempo promedio de resolución del hilo de ejecución termodinámico en toda la unidad de compresión de gas natural, los únicos números de iteraciones cuyos tiempos de resolución correspondientes están dentro del rango de expectativa del paso de integración, son desde 2 hasta 7 iteraciones, al ser tiempos de resolución promedio se descarta el número de iteraciones 7, por estar próximo al límite superior del rango de expectativa para el paso de integración. Por otro lado la resolución del hilo de ejecución dinámica con distintos pasos de integración dentro del rango de expectativa, puede ejecutarse en un tiempo promedio por debajo de 0,1 segundos lo cual indica que cualquier tolerancia y

cualquier paso de integración puede elegirse dentro del rango de expectativa, para así poder cumplir con una simulación de ejecución en tiempo real, quedando la decisión del paso de integración dependiendo principalmente del número de iteraciones del método de sustitución sucesiva, la sincronización de los hilos ejecución debe ser de tal manera que ocurra una ejecución del hilo fluidodinámico por cada ejecución del hilo termodinámico, pero al ser las variables de procesos químicos resultantes de la ejecución termodinámica, temperaturas y composiciones, variables con una dinámica más lenta que las variables de procesos químicos resultantes de la ejecución fluidodinámico, se puede aceptar varias ejecuciones del hilo fluidodinámico por cada ejecución del hilo termodinámico, para tener entonces un balance entre precisión, rendimiento y robustez se seleccionaron los siguientes parámetros para la regulación de la sincronización los cuales se reportan en la siguiente tabla.

**Tabla N° 12.** Parámetros seleccionados para la sincronización de los hilos de ejecución.

Parámetro	Valor
Paso de Integración	0,25 segundos
Numero de Iteraciones	4
Tolerancias	1.0e-6

Como se puede apreciar en la Tabla N° 12 el número de iteraciones seleccionado para el método de sustitución sucesiva es 4 iteraciones, el paso de integración en la resolución de la red de flujo-presión y los balances energéticos es 0,25 segundos, y por último las tolerancias para la resolución de estos mismos modelos es de 1.0e-6, estos parámetros generan una sincronización donde la herramienta de simulación tiene en promedio dos ejecuciones del hilo fluidodinámico por cada ejecución del hilo termodinámico, alcanzándose estabilidad numérica de todos los modelos involucrados, estabilidad de cómputo y robustez de la herramienta; se menciona adicionalmente que para el análisis de estos parámetros se usó un computador con los siguientes recursos de computo, un procesador Intel Core i3-3220 de capacidad de

3,30 GHz y una memoria RAM de capacidad de 4 GB, es posible que para computadores con inferiores capacidades se deba tener cierta flexibilidad con respecto a estos parámetros, principalmente en la selección del número de iteraciones ya que es el parámetro más dependiente para la sincronización de los hilos de ejecución.

Adicionalmente como se puede apreciar en la Figura N° 15, existe un hilo de ejecución adicional, para la publicación y comunicación de las variables principales de procesos con la interfaz de operación, este hilo de ejecución consta de un servidor modbus a través de una red Ethernet mediante el protocolo TCP/IP sobre el puerto 502.

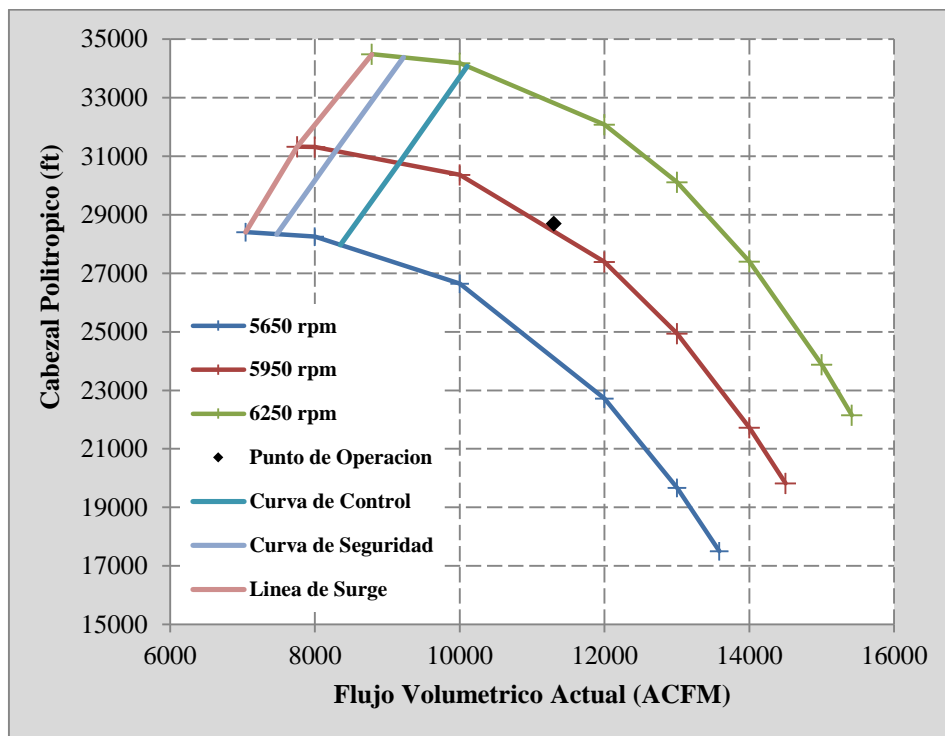
### **Programar los modelos matemáticos de los controles anti-surge y control de desempeño**

El modelado matemático del control de desempeño o capacidad sigue la filosofía de una estructura típica de un control por retroalimentación, un algoritmo de control PID es implementado para rechazar las perturbaciones o recibir cambios en el set-point de la nueva capacidad de la planta, la variable a controlar es la capacidad de gas admitido por el compresor politrópico K-100, medida en millones de pies cúbicos estándar por día (MMSCFD), la cual se controla a través de la manipulación automática de la velocidad de operación del compresor, variable medida en revoluciones por minutos (rpm), la salida de este controlador posee un límite de operación el cual está impuesto por la velocidad máxima de operación del compresor la cual es 6250 rpm y la velocidad mínima de operación la cual es 5650 rpm, en condiciones normales de operación el compresor K-100 opera a una velocidad de 5950 rpm.

De igual forma el modelado matemático del control antisurge, se basa en un control por retroalimentación, un algoritmo de control PID es implementado para mantener el flujo volumétrico a la entrada del compresor K-100, en una curva de control sobre las curvas características del mismo cuando un caída del flujo volumétrico a la entrada



del compresor ocurre, manipulando de forma automática la apertura de la válvula de reciclo V-104, llamada válvula antisurge, para recuperar este flujo volumétrico a la entrada del compresor K-100, la válvula de reciclo V-104 en condiciones normales de operación se encuentra cerrada, la salida del control antisurge se encuentra saturada con la salida de 0% para la apertura del reciclo, la curva de control esta desplazada 15% con respecto al punto máximo de operación en el sistema de coordenadas Cabezal Politrópico vs Flujo Actual que se puede observar en la siguiente figura.



**Figura N° 16.** Desempeño del Compresor K-100.

Este control posee un set-point variable, ya que el mismo depende de la diferencia de presión en el compresor, adicionalmente posee una línea de seguridad donde se toma acciones más drásticas para evitar la condición de surge, la cual están desplazada como se observa en la Figura N° 16, a un 5% con respecto al punto máximo de operación, donde la válvula antisurge se abre un 50% respectivamente.

Una rutina adicional es incorporada para la interacción entre estos controles, ya que la acción de uno afecta el desempeño del otro; un desacople del control de capacidad es

implementado cuando el control antisurge tiene que abrir la válvula de recirculación, pasando la acción del controlador de capacidad de automático a manual; esto se debe principalmente a que una apertura de la válvula de recirculación genera de forma inmediata un sobre flujo en la entrada del compresor, si este flujo rebaza la capacidad deseada de la planta, el control de capacidad reduciría la velocidad de operación del compresor, estas interacciones conllevan a una inestabilidad de flujo mayor aumentando el riesgo de tener una condición de operación inestable.

**Validar la herramienta desarrollada comparando y analizando los resultados obtenidos con el simulador de procesos comercial**

Para la validación de la herramienta de simulación se tomó como variables principales para este análisis los resultados mostrados en la Tabla N° 3, y se calcularon las desviaciones relativas porcentuales con respecto al caso base en el simulador comercial, a condiciones normales de operación, estos resultados se pueden observar en la siguiente tabla.

**Tabla N° 13.** Resultados de simulación de estado estacionario para condiciones normales de operación.

Equipo	Especificación	Caso Base	Herramienta de Simulación	Desviación Relativa (%)
V-100	Presión de Operación (bar)	12,6340	12,6344	0,0032
	Temperatura de Operación (K)	307,3458	307,4997	0,0501
K-100	Presión de Descarga (bar)	24,1400	24,2954	0,6437
	Temperatura de Descarga (K)	360,0162	361,4968	0,4113
	Potencia Consumida (kW)	5683,67	5884,06	3,5256
	Eficiencia Politrópica	0,8042	0,8078	0,4449
E-100	Temperatura de Descarga (K)	291,3396	290,0602	0,4391
	Presión de Descarga (bar)	24,0560	24,2021	0,6073

Las variables que resultan de la simulación estacionaria para las especificaciones reportadas en la Tabla N° 2 en el modelado desarrollado para este trabajo, se

muestran en la columna Herramienta de Simulación de la Tabla N° 13 para los equipos presentes, las desviaciones relativas poseen una desviación por debajo del 1% para la mayoría de las variables, con excepción de la potencia consumida por el compresor K-100, la cual posee una desviación del 3,53%, esta desviación es relativamente grande con respecto a las demás variables, debido a que la potencia es una propiedad extensiva que depende de la capacidad del compresor y la diferencia de entalpia del fluido a través del mismo, a medida que aumenta la desviación en la diferencia de entalpia de gas comprimido, mayor es la desviación de la Potencia Consumida.

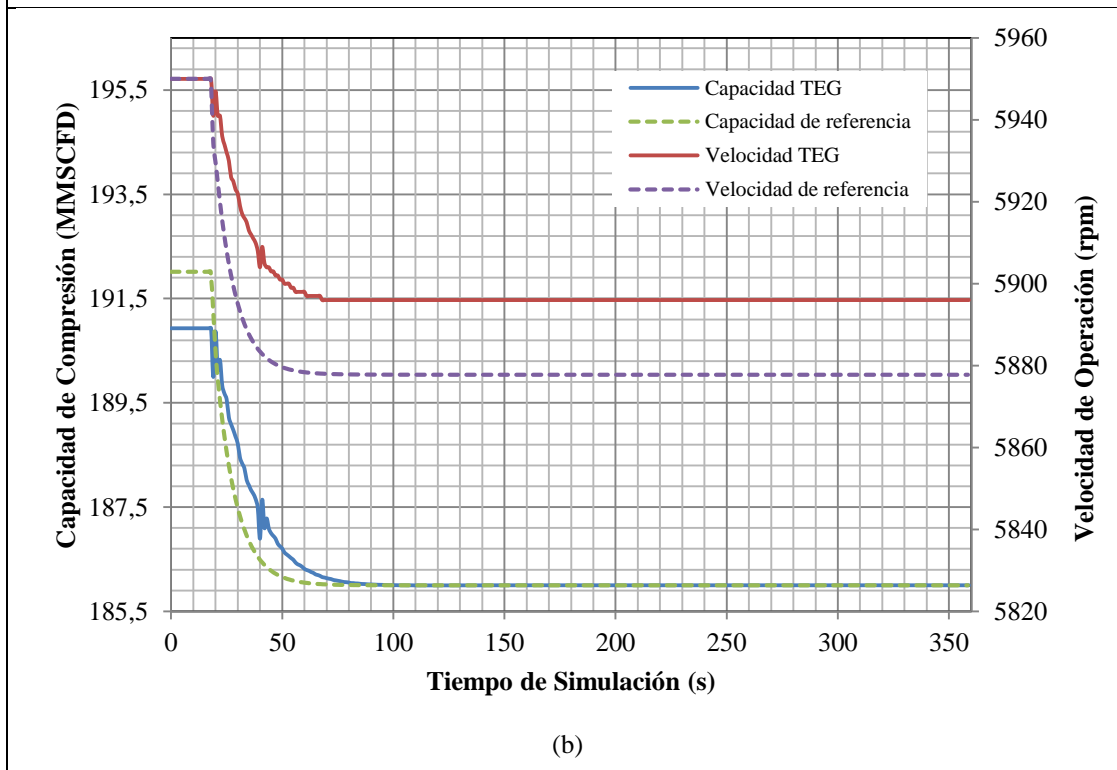
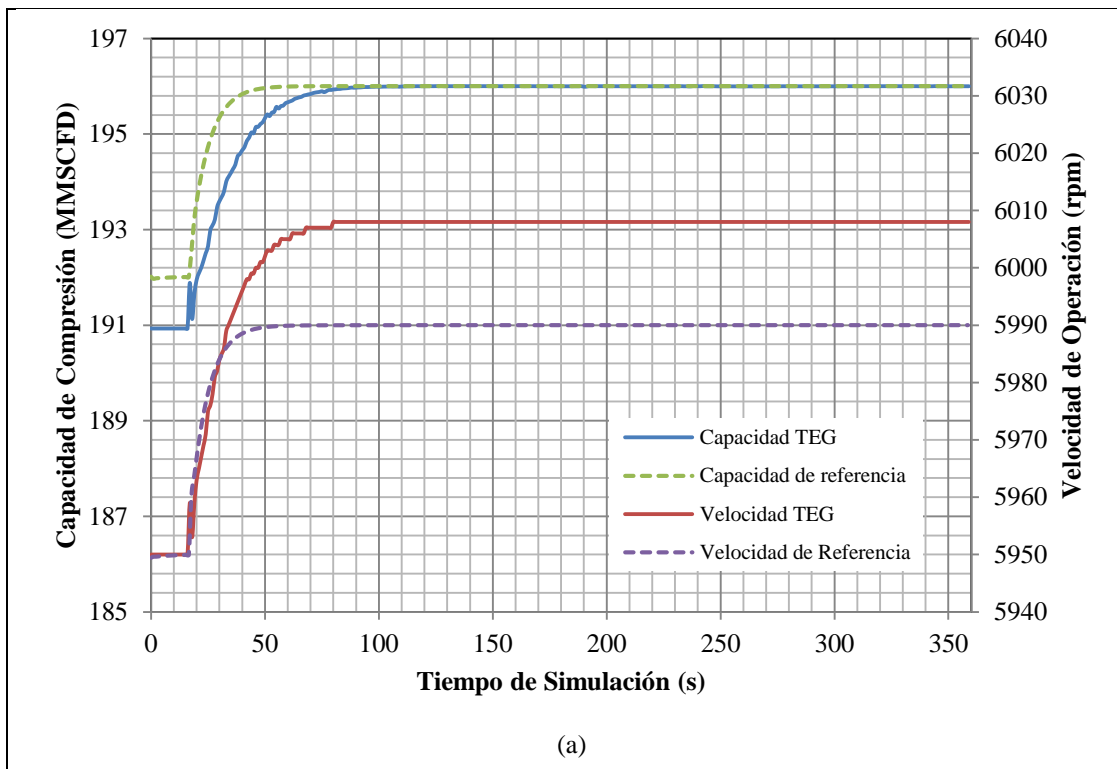
para extender y asegurar un poco más el uso de los Objetos, módulos y modelos desarrollados una segunda prueba adicional en estado estacionario fue realizada, en donde se hicieron cambios en las condiciones de la corriente de alimentación y se evaluó el resultado de las mismas variables, para estos cambios se usó 292,75 K y 14,7 bar, como la temperatura y presión respectivamente, los resultados de esta prueba se muestran en la siguiente tabla que sigue un esquema similar al de la Tabla N° 13.

**Tabla N° 14.** Resultados de simulación de estado estacionario para una temperatura de 292,75 y una presión de 14,7 bar en la corriente de alimentación.

Equipo	Especificación	Caso Base	Herramienta de Simulación	Desviación Relativa (%)
V-100	Presión de Operación (bar)	13,3344	13,3344	0,0000
	Temperatura de Operación (K)	291,8477	292,0258	0,0610
K-100	Presión de Descarga (bar)	27,1453	27,3298	0,6797
	Temperatura de Descarga (K)	350,0903	352,2015	0,6030
	Potencia Consumida (kW)	6105,19	6391,15	4,6839
	Eficiencia Politrópica	0,7821	0,7835	0,1832
E-100	Temperatura de Descarga (K)	283,5717	282,0601	0,5331
	Presión de Descarga (bar)	27,0520	27,2365	0,6821

Como se muestra en la Tabla N° 14, para esta segunda prueba las variables siguen la misma tendencia de comportamiento mostrado en la Tabla N° 13, y analizados en el párrafo anterior, en comparación con los resultados anteriores al haber una condición de alimentación alejada de las condiciones normales de operación, las desviaciones de las variables en general aumentan pero la mayoría de las variables poseen todavía desviaciones por debajo del 1%, mientras que la potencia una desviación mayor ahora del 4.68%. Estas desviaciones presentes en ambas pruebas son desviaciones relativamente pequeñas y al no necesitar de un nivel de rigurosidad tan elevado como suele suceder en el estudio o análisis económicos, estas desviaciones pueden ser aceptadas para estudiar la operación y control de la planta de compresión de referencia.

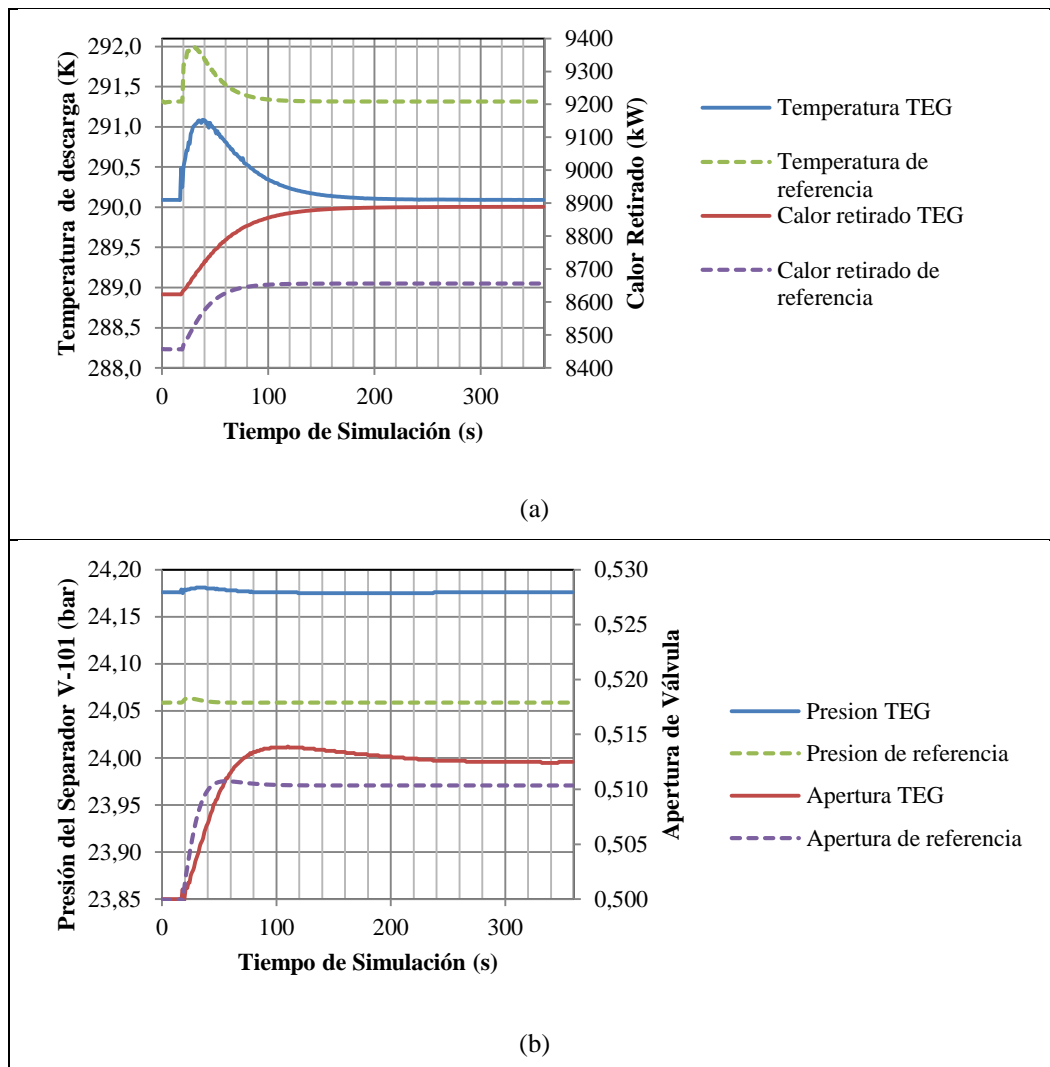
La validación de la herramienta de simulación en estado dinámico se realizó haciendo cambios en la capacidad deseada para un tiempo de simulación de 5 minutos, ambos cambios partieron de las condiciones normales de operación, las capacidades introducidas fueron, 196 MMSCFD y 186 MMSCFD en el set-point del control de capacidad, y las respuestas de la capacidad a lazo cerrado se reflejan en las siguientes gráficas.



**Figura N° 17.** Respuesta a lazo cerrado de la capacidad y la velocidad para (a) 196 MMSCFD deseado. (b) 186 MMSCFD deseado.

El control de capacidad como se puede observar en la Figura N° 17 para ambos cambios fue satisfactorio alcanzándose las nuevas capacidades deseadas, las cuales están descritas por las curvas de capacidad TEG, para el cambio de 196 MMSCFD como se puede observar en el grafico (a) en orden de alcanzar la nueva capacidad la velocidad de operación del compresor K-100 debe de aumentarse y para el cambio de 186 MMSCFD como se puede observar en el grafico (b) en orden de alcanzar la nueva capacidad la velocidad de operación del compresor K-100 debe de reducirse, ambos comportamientos en comparación con los comportamientos de referencia reportados por el simulador comercial tienen ciertas desviaciones, en principio porque parten de capacidades de operación distintas, es necesario resaltar que estas capacidades son las condiciones normales de operación resultantes de la resolución de la simulación estacionaria para los mismo grados de libertad, las desviaciones en el comportamiento transitorio son principalmente el tiempo en el que se alcanza la nueva capacidad deseada, como se puede observar esta capacidad es alcanzada primero por el simulador comercial, pero ambos comportamientos poseen las mismas características de asentamiento, sin sobrepicos ni oscilaciones, al estudiarse las respuestas de los lazos de control de capacidad para llevar la operación a las nuevas capacidades deseadas cambiando para esto la velocidad de operación del compresor K-100, se puede observar en el gráfico (a) que para la herramienta de simulación la velocidad de operación tiene el mismo comportamiento aparente que el simulador comercial al ocurrir el cambio de capacidad, pero al no alcanzarse la misma capacidad deseada debido a que en condiciones normales de operación la herramienta de simulación ya parte con una desviación con respecto al simulador comercial la velocidad de operación debe seguir ascendiendo hasta poder alcanzarse la nueva capacidad deseada arrojando desviación en el tiempo de transición, para el segundo cambio como se puede observar en el grafico (b) una acción más drástica es tomada por el control de capacidad en el simulador comercial para poder llegar a la nueva capacidad deseada en comparación con la herramienta de simulación.

Estos cambios en la capacidad generan comportamientos transitorios en las demás variables de operación de la planta de compresión generando perturbaciones en los demás controles activos y operativos, el control de presión del separador V-101 y el control de temperatura del enfriador E-100, haciendo que las variables de procesos de entrada de estos controles se desvíen de sus puntos de consigna, por ende una acción por parte de estos controladores debe ser realizada para mantener las variables de procesos controladas, rechazando así las perturbaciones, para el cambio de capacidad de 196 MMSCFD se pueden observar los comportamientos transitorios de estos lazos de control mencionados en la siguiente figura.



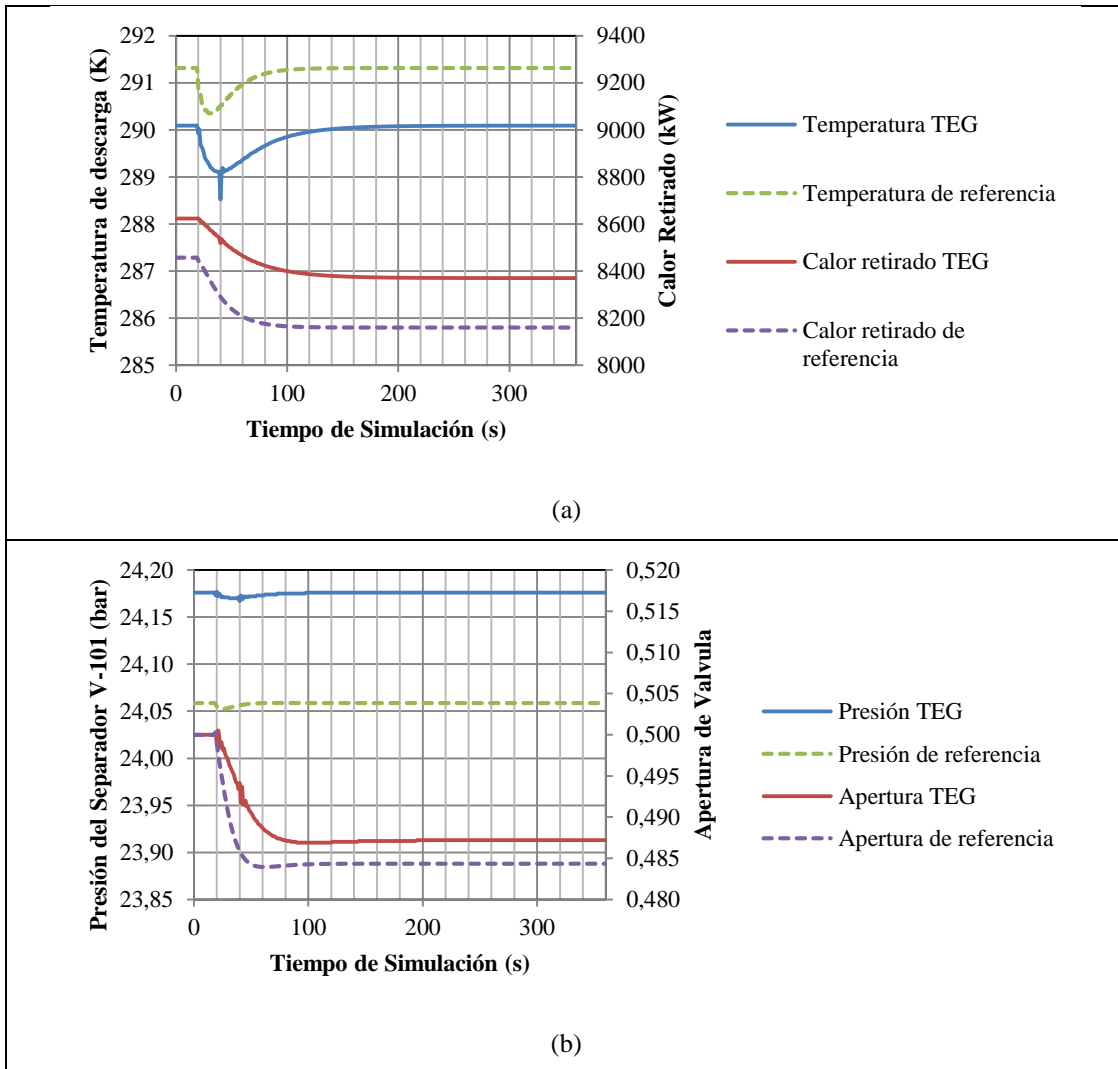
**Figura N° 18.** Respuesta de los lazos de control de (a) temperatura y (b) presión para 196 MMSCFD

Al haber un aumento en la capacidad de la planta sin haber cambios en el calor retirado del compresor la temperatura de descarga del enfriador E-100 comienza a aumentar al igual que la presión del separador V-101 por una presurización debido al aumento del flujo molar a la entrada del mismo como se puede observar en los gráficos (a) y (b) de la Figura N° 18, este comportamiento ocurre tanto en el simulador comercial como en la herramienta de simulación desarrollada, las acciones de los controles TIC-100 y PIC-100 es aumentar el calor retirado y la apertura de válvula de la válvula VLV-103 para mantener la temperatura de descarga del



enfriador E-100 y la presión del separador V-101 respectivamente; para ambos gráficos el control de las variables de procesos es satisfactorio sin oscilaciones.

Para el cambio de capacidad de 186 MMSCFD se pueden observar los comportamientos transitorios de los controles de temperatura TIC-100 y presión PIC-100 en la siguiente figura.



**Figura N° 19.** Respuesta de los lazos de control de (a) temperatura y (b) presión para 186 MMSCFD.

Al haber una reducción en la capacidad de la planta sin haber cambios en el calor retirado del compresor la temperatura de descarga del enfriador E-100 comienza a reducir al igual que la presión del separador V-101 por una despresurización debido a

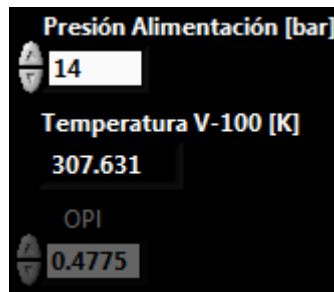
la reducción del flujo molar a la entrada del mismo como se puede observar en los gráficos (a) y (b) de la Figura N° 19, este comportamiento ocurre tanto en el simulador comercial como en la herramienta de simulación desarrollada, las acciones de los controles TIC-100 y PIC-100 es reducir el calor retirado y la apertura de la válvula VLV-103 para mantener la temperatura de descarga del enfriador E-100 y la presión del separador V-101 respectivamente; para ambos gráficos el control de las variables de procesos es satisfactorio sin oscilaciones.

En la herramienta de simulación desarrollada para este trabajo el tiempo de resolución de los hilos de ejecución en concurrencia no pudo lograrse en tiempo real por debajo de 0,15 segundos de paso de integración, debido principalmente a que el lenguaje de programación Python por ser un lenguaje interpretado tiene menor rendimiento en cuanto a velocidad de cálculo, y en base a lo establecido en la teoría con respecto al tiempo requerido por un simulador para evaluar la respuesta de un control antisurge en tiempo real hizo que la validación del control antisurge fuese solo de naturaleza fluidodinámica, deshabilitándose así la ejecución termodinámica; en este sentido para la validación del control antisurge solo la ejecución del hilo de ejecución fluidodinámico fue considerado con un tiempo de integración de 50 milisegundos lográndose resolver la red de flujo-presión en tiempo real; la simulación de la falla de la válvula de alimentación para ambas pruebas fue realizada, haciendo que el modelo dinámico simulara una caída progresiva del flujo molar de alimentación a la planta de compresión y los resultados de la acción del controlador antisurge de manera de evitar la condición de surge se pueden observar en el siguiente gráfico.

## Desarrollar una interfaz amigable y de fácil entendimiento

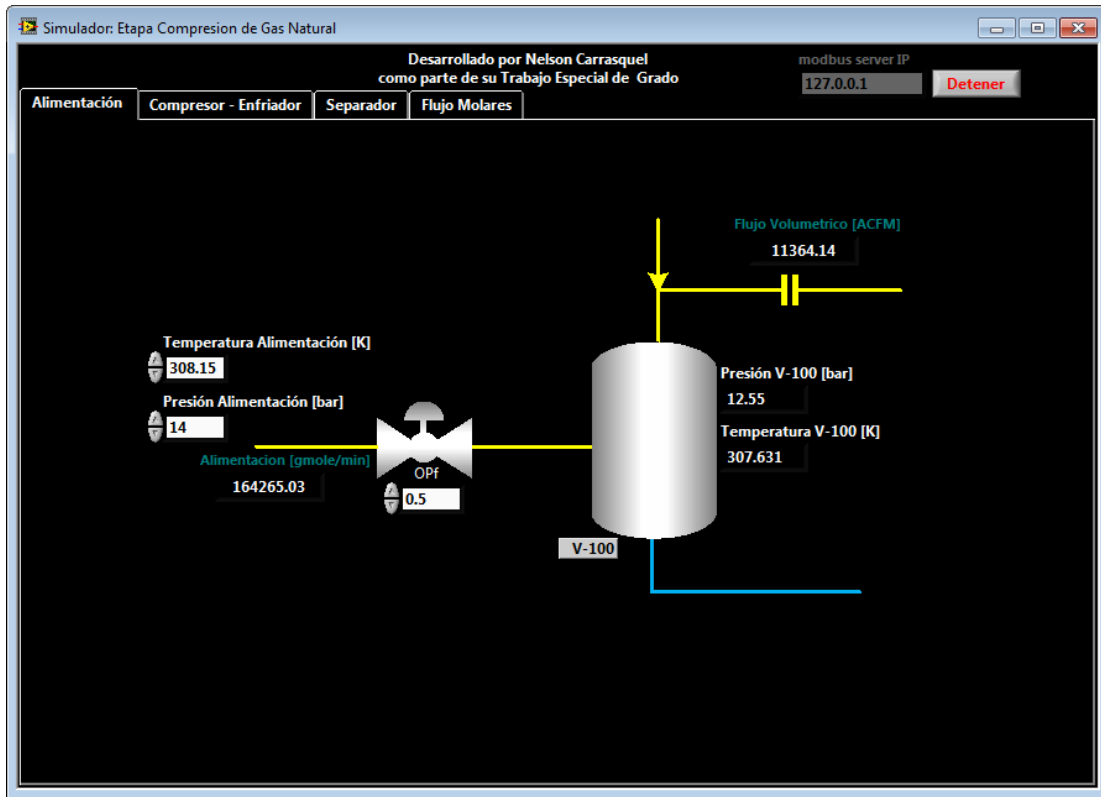
Para entendimiento y practicidad de uso por parte del usuario final de la herramienta de simulación se desarrolló una interfaz de operación de fácil comprensión para personas que posean conocimientos en el área de operación y control de procesos. La información, despliegue y visualización esta condensada en una sola ventana que incorpora pestañas, botones, indicadores, controles, ilustraciones y graficas que permiten interactuar con la simulación dinámica de la planta de compresión de gas natural. La interfaz de operación está comprendida por 3 pestañas principales donde cada pestaña representa una sección de la planta y una última pestaña donde se grafican los flujos molares principales de la planta.

En esta interfaz de operación existen 3 tipos de elementos principales que despliegan información del proceso como se puede observar en la Figura N° 20, los indicadores y controles, los cuales son cuadros de valores numéricos, los cuadros cuyos fondos son de color negro son indicadores de variables, solo muestran información de alguna variable del proceso y no son editables, los cuadros cuyos fondos son de color blanco muestran información de algún equipo de proceso o condición de frontera que puede ser manipulable, como por ejemplo una apertura de válvula o la presión de alimentación, y por último los cuadros cuyos fondos son de color gris, los cuales son elementos que están bloqueados por defecto pero pueden ser manipulables cuando la acción que los bloquea pasa a una acción manual, como por ejemplo un control de proceso que bloquea el ajuste manual del elemento final del control.



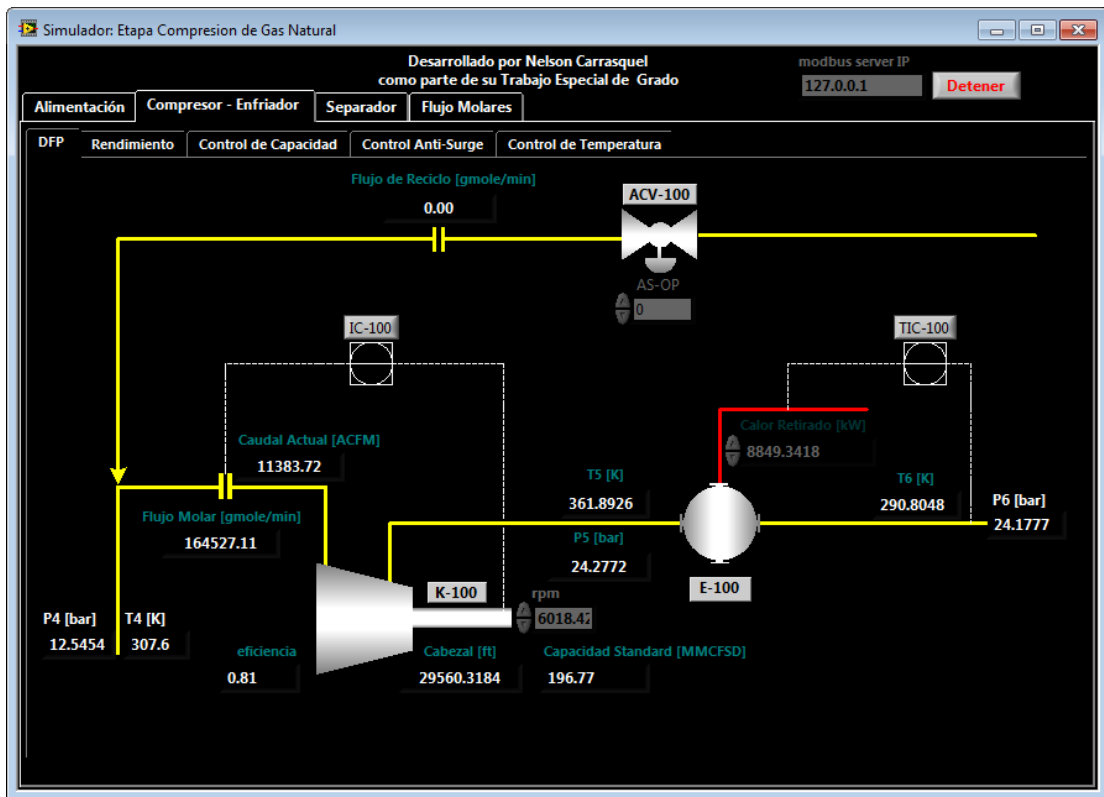
**Figura N° 20.** Elementos de despliegue de valores numéricos.

La pestaña “Alimentación” muestra un despliegue del separador o contenedor del gas de alimentación a la planta y válvula que regula la alimentación a este separador, como se puede observar en la Figura N° 21.



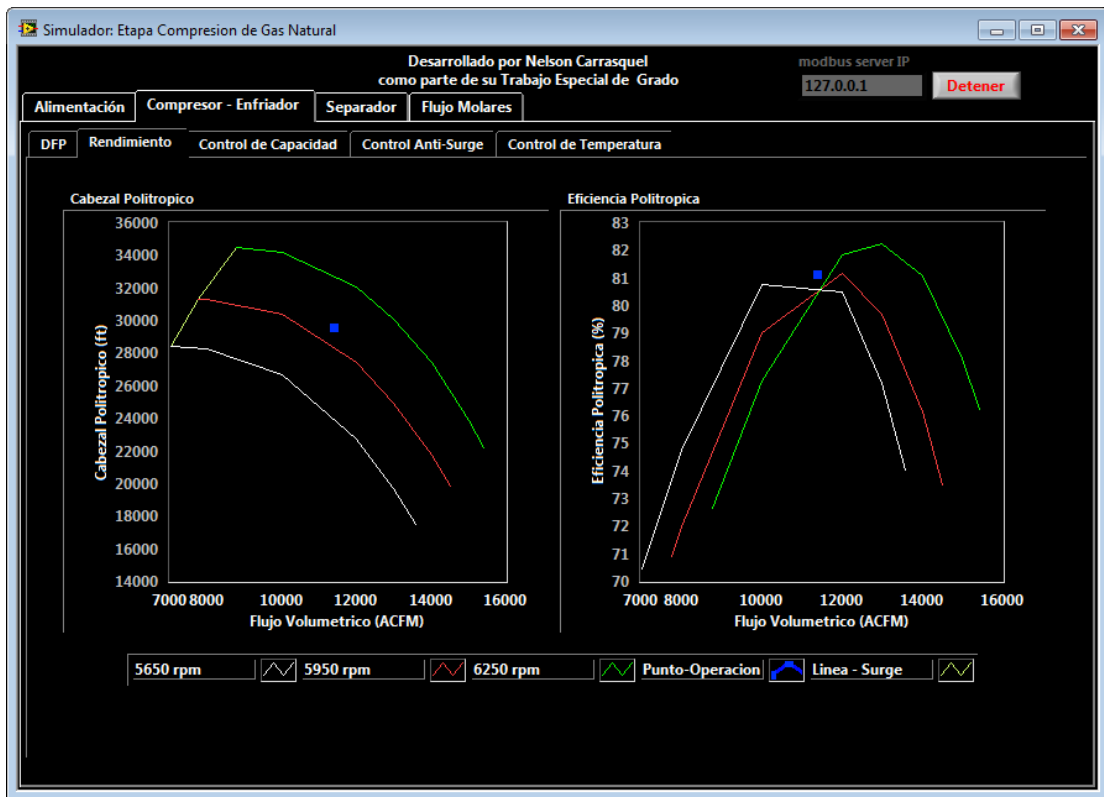
**Figura N° 21.** Pestaña “Alimentación” de la herramienta de simulación.

La pestaña “Compresor-Enfriador” a su vez e internamente posee un conjunto de pestañas en donde la pestaña “DFP” muestra un despliegue del compresor, el enfriador y la línea de recirculación con su válvula antisurge, como también se puede observar en la Figura N° 22.



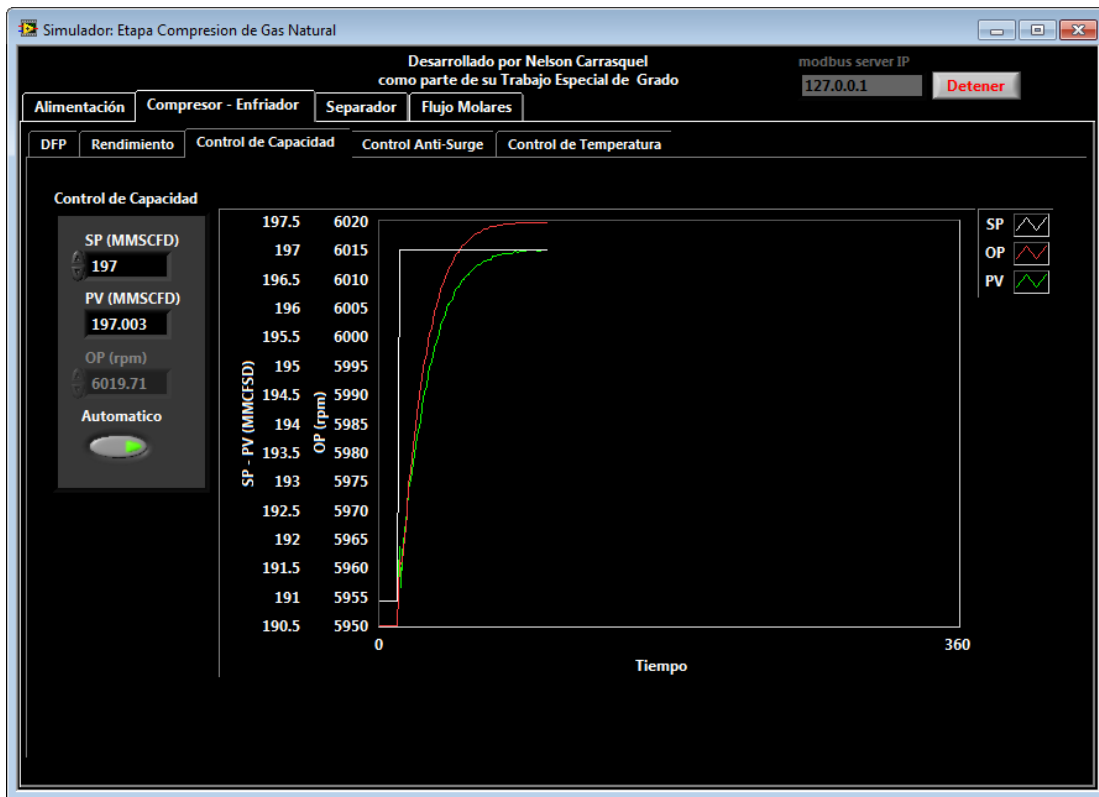
**Figura N° 22.** Pestaña “Compresor - Enfriador” en la herramienta de simulación.

La pestaña rendimiento muestra las curvas de rendimiento del compresor, una primera grafica para mostrar el cabezal politrópico en función del flujo volumétrico actual y una segunda grafica para mostrar el porcentaje de eficiencia del compresor en función del flujo volumétrico actual como se puede observar en la Figura N° 23.



**Figura N° 23.** Pestaña “Rendimiento” de la herramienta de simulación.

Las pestañas de “Control de Capacidad”, “Control Anti-Surge” y “Control de Temperatura” muestran elementos similares como se puede observar en la Figura N° 24, un agrupamiento para ajustar el control PID y mostrar las respuestas y variables de procesos, y adicionalmente una gráfica con dos escalas para mostrar el comportamiento transitorio de la variable de procesos, el punto de consigna y la salida del control.



**Figura N° 24.** Despliegue de un control de procesos en la herramienta de simulación.

Finalmente la pestaña “Separador” a su vez e internamente posee un conjunto de pestañas en donde la pestaña “DFP” muestra un despliegue del enfriador y el separador V-101 con sus respectivas válvulas para el control de presión y nivel del mismo como se puede apreciar en la Figura N° 25, similar a la pestaña “Compresor-Enfriador” existen pestañas adicionales para el ajuste y visualización grafica de los controles de presión y nivel.

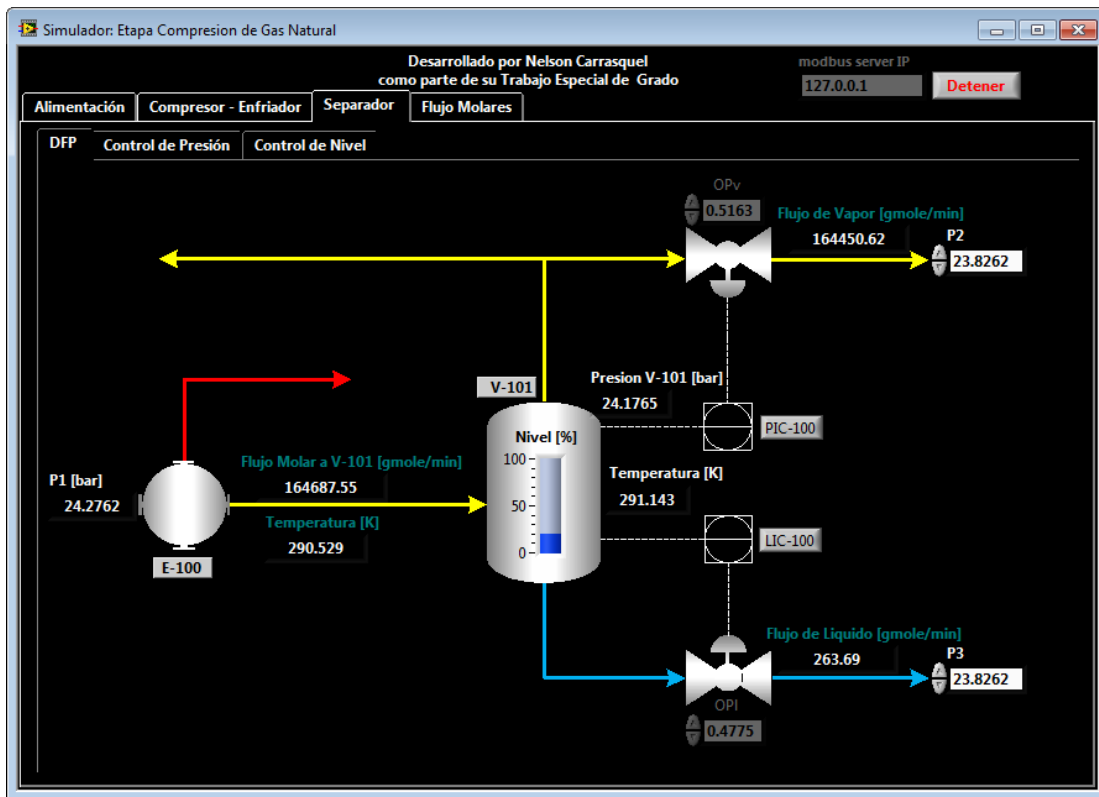


Figura N° 25. Pestaña “Separador” de la herramienta de simulación.



## CAPÍTULO VI

### CONCLUSIONES

1. La selección de una planta de compresión de gas natural permitió establecer el alcance del modelado estacionario y dinámico a partir de los equipos y operaciones unitarias presentes como también las estructuras y filosofías de control a desarrollar.
2. El análisis de los grados de libertad permitió identificar las variables de operación y verificar el máximo número de lazos de control, así como obtener una mejor comprensión del proceso a modelar y verificar la consistencia de cálculo y metodologías de resolución.
3. El modelado de las propiedades de los fluidos para unas condiciones y composiciones determinadas fue integrado en una clase de computación, que permitió mediante la creación de objetos de corriente, su uso para el modelado de las distintas operaciones unitarias.
4. El modelado en estado estacionario de cada equipo fue integrado en clases de computación donde la información que intercambian los equipos son objetos de corriente, haciendo que el desarrollo de estos fuera independiente de las características del fluido que procesaban, y permitiendo la construcción de un diagrama de flujo de procesos de forma secuencial modular.
5. La resolución secuencial modular de la simulación de estado estacionario de la planta de compresión resultó efectiva, obteniéndose buenas aproximaciones con desviaciones relativas bajas por debajo de 1% y tiempos de resolución de 0,5 segundos para la simulación estacionaria, concluyéndose que para propósitos de evaluación de operación y control el esquema metodológico empleado permite desarrollar herramientas de simulación con buena fidelidad termodinámica.
6. El desarrollo en estado dinámico de cada equipo fue representado con un modelo que permite determinar el flujo molar que procesa el equipo en base a

sus presiones de entrada y salida; en orden de que, pudiera ser utilizado por la red de flujo-presión para su resolución.

7. El modelado en estado dinámico del separador fue realizado asumiendo que la dinámica del mismo no era afectada por el equilibrio liquido-vapor, haciendo que los balances de masas se desarrollaran en cada fase respectivamente, sin intercambio o transferencia de masa.
8. La red de flujo-presión como metodología de cálculo resultó efectiva para lograr el modelado de estado dinámico de la planta de compresión, como también su resolución, la cual fue realizada con la función `fsolve` de la librería `scipy.optimize`, implementándose un paso de integración de 0,25 segundos con un factor de tiempo real igual a uno, concluyéndose que para propósitos de evaluación de operación y control la red de flujo-presión como metodología de resolución permite desarrollar herramientas de simulación dinámica con buena fidelidad fluidodinámica.
9. Se desarrolló un lazo de control PID para el control de la capacidad de compresión del compresor K-100, y un lazo de control PI antisurge para la prevención del fenómeno surge ante una caída en el flujo de alimentación del compresor K-100, adicionalmente se incorporó un algoritmo para anular la acción del control de capacidad cuando el control antisurge actúa para recircular flujo a la entrada del compresor.
10. En la validación de la respuesta en estado transitorio, se obtuvo para todos los casos de evaluación una tendencia de comportamiento transitorio correcta con respecto al simulador comercial, representando los tiempos para alcanzar las nuevas condiciones estacionarias y sus valores finales con buena fidelidad y precisión.
11. Se desarrolló una interfaz de operación cuya estructura y organización visual permite reconocer las distintas secciones de la planta, las variables de operación y control importantes, como también la manipulación de los controles presentes y la interpretación de las representaciones gráficas.

## RECOMENDACIONES

1. Seleccionar un proceso de compresión de múltiples etapas o de etapas en paralelo para el estudio de la interacción de sistemas de compresión más complejos.
2. Estudiar y analizar la incorporación de un motor termodinámico para el cálculo de las propiedades de los fluidos.
3. Evaluar el desarrollo de herramientas de simulación para otros procesos industriales con similares características o equipos de procesos como plantas de potencia de ciclo combinado.
4. Evaluar el desarrollo para plantas cuyas redes de flujo-presión tengan un mayor nivel de complejidad.
5. Desarrollar la incorporación del equilibrio líquido-vapor en estado dinámico de los separadores.
6. Evaluar la migración del desarrollo de la herramienta de simulación a lenguajes de programación de mayor rapidez de cálculo; de manera de estudiar una respuesta del control antisurge con pasos de integración menores a 50 ms.
7. Incorporar al modelo dinámico de la válvula, ecuaciones características de fabricantes de válvulas de control y válvulas antisurge, como también velocidades de los actuadores de posición de la válvula.
8. Estudiar distintos métodos de resolución numérica de sistemas de ecuaciones no lineales; en orden de, reducir el tiempo de resolución de la red de flujo-presión.
9. Desarrollar estrategias de control y secuencias de operación para sistemas de parada, parada de emergencia y arranque de plantas en la herramienta de simulación.
10. Incorporar algoritmos de entonamiento a los controles para la obtención de parámetros que se ajusten a distintas condiciones de operación.

## REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Anzola S., L. A. (2011). *MODELADO MATEMÁTICO ESTACIONARIO Y DINÁMICO DE UN TREN DE COMPRESIÓN MULTITAPAS Y DE LA TURBINA DE VAPOR ASOCIADA*. Caracas.
- Aspen Technology, Inc. (Marzo de 2011). *Aspen Hysys Customization Guide*. Recuperado el 11 de Junio de 2014, de AspenTech Customer Support: [http://support.aspentech.com/Public%5CDocuments%5CEngineering%5CHyprotech%5CV7.3/AspenHYSYSV7\\_3-Cust.pdf](http://support.aspentech.com/Public%5CDocuments%5CEngineering%5CHyprotech%5CV7.3/AspenHYSYSV7_3-Cust.pdf)
- Bøhagen, B. (2007). *Active surge control of centrifugal compression systems*.
- Boys, I. (2014). Rigorous Incorporation of Phase Equilibrium Calculations in Pressure Flow Networks for Plant Scale Dynamic Simulation. *8th International Conference on Foundations of Computer-Aided Process Design – FOCAPD 2014*, (págs. 681-686). Washington.
- Dimian, A. C., Bildea, C. S., & Kiss, A. A. (2014). *Integrated Design and Simulation of Chemical Processes* (Vol. 35). Elsevier Science.
- Gammiero M., A. J. (2005). *Evaluacion de diferentes algoritmos de sustituciones sucesivas para el calculo de equilibrio liquido-vapor con ecuaciones de estado*. Caracas.
- González Duque, R. (s.f.). *Python para todos*. Recuperado el 15 de Enero de 2014, de <http://mundogeek.net/tutorial-python/>
- Green, R. W. (1992). *Compresores, Selección, Uso y Mantenimiento*. Ciudad de México: McGRAW-HILL.
- GSE Systems, Inc. (2013). *GSE White Paper Simulation-Based Training*. Recuperado el 22 de Mayo de 2014, de GSE SYSTEMS: <http://www.gses.com/>

- Hansen, C. (2008). *Dynamic Simulation of Compressor Control Systems*. Esbjerg.
- Lajara Vizcaíno, J. R., & Plegrí Sebastián, J. (2007). *LabVIEW. Entorno gráfico de programación*. Barcelona: MARCOMBO, S.A.
- Luyben, W. L. (1996). Design and Control Degrees of Freedom. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 2204-2214.
- McWilliams. (1973). *Chem Engng*, 138.
- Mehta, B. R., & Reddy, Y. J. (2015). *Industrial Process Automation Systems Design and Implementation*. Oxford: Elsevier Inc.
- Modbus Organization. (26 de Abril de 2012). *MODBUS APPLICATION PROTOCOL SPECIFICATION V1.1b3*. Recuperado el 18 de Febrero de 2014, de Modbus:  
[http://www.modbus.org/docs/Modbus\\_Application\\_Protocol\\_V1\\_1b3.pdf](http://www.modbus.org/docs/Modbus_Application_Protocol_V1_1b3.pdf)
- Mohajer, M., Young, B. R., & Svrcek, W. (2008). Comparing Pressure Flow Solvers for Dynamic Process Simulation. *Chemical Product and Process Modeling*, 3(1), 1934-2659.
- Mokhatab, S., & Poe, W. (2012). *Handbook of Natural Gas Transmission and Processing*. Waltham: Elsevier Inc.
- Piedra, I., & Pesantez, H. (2009). *Digitalización de señales y visualización mediante el software de automatización LabVIEW*. Recuperado el 26 de Febrero de 2014, de Repositorio Digital-UPS:  
[dspace.ups.edu.ec/bitstream/123456789/102/8/Capitulo3.pdf](http://dspace.ups.edu.ec/bitstream/123456789/102/8/Capitulo3.pdf)
- Rebolledo C., J. L., & Gómez M., M. J. (2012). *SIMULACIÓN DE UN ALGORITMO DE CONTROL DE LOS FENÓMENOS DE SURGE Y STONEWALL EN UN COMPRESOR CENTRÍFUGO, UTILIZANDO LOS SOFTWARE MATLAB® E HYSYS®*. San Cristóbal.

SciPy community. (11 de Mayo de 2014). *SciPy Reference Guide*. Recuperado el 26 de Mayo de 2014, de SciPy.Org: <http://docs.scipy.org/doc/scipy/scipy-ref-0.14.0.pdf>

Smith, J., Van Ness, H., & Abbott, M. (2003). *INTRODUCCIÓN A LA TERMODINÁMICA EN INGENIERÍA QUÍMICA*. México, D.F.: McGraw-Hill Iiteramericana.

Varela V., J. D. (2013). *DESARROLLO DE UNA HERRAMIENTA DE SIMULACIÓN PARA ESTUDIAR Y EVALUAR LA OPERACIÓN Y CONTROL DE UNA UNIDAD DE DESTILACIÓN*. Caracas.

## APENDICE

### Apéndice N° 1. Modelos utilizados para las propiedades de componentes puros.

#### (a) Parámetro volumétrico $a$

El parámetro volumétrico  $a$  esta dado por la ecuación siguiente:

$$a = \frac{\psi \times (\alpha \times R \times T_C)^2}{P_C} \text{ Ecuación 20}$$

Donde,

$P_C$ : Presión crítica del componente puro (bar).

$T_C$ : Temperatura critica del componente puro (bar).

$R$ : Constante universal de los gases cuyo valor utilizado es 83,14472 (bar.cm<sup>3</sup>/mol.K).

$\psi$ : Parámetro del modelo de Peng-Robinson cuyo valor es 0,457235 (adimensional).

El término  $\alpha$  viene dado por la ecuación siguiente:

$$\alpha = 1 + (0,37464 + 1,54226 \times \omega - 0,26992 \times \omega^2) \times (1 - \sqrt{T/T_C}) \text{ Ecuación 21}$$

Donde,

$\omega$ : Factor acéntrico del componente puro (adimensional).

$T$ : Temperatura a evaluar (K).

#### (b) Parámetro volumétrico $b$

El parámetro volumétrico  $b$  está dado por la ecuación siguiente:

$$b = \frac{\Omega \times R \times T_C}{P_C} \text{ Ecuación 22}$$

Donde,

$\Omega$ : Parámetro del modelo de Peng-Robinson cuyo valor es 0,077796 (adimensional).

(c) La derivada del parámetro volumétrico  $a$  con respecto a la temperatura viene dado por la ecuación siguiente:

$$\frac{da}{dT} = -\frac{\psi \times R^2 \times T_C}{P_C} \times \frac{d\alpha}{dT} \text{ Ecuación 23}$$

Donde el término  $\frac{d\alpha}{dT}$  viene dado por la ecuación siguiente:

$$\frac{d\alpha}{dT} = (1 + k \times (1 - \sqrt{T/T_C})) \times \left( \frac{k}{\sqrt{T/T_C}} \right) \text{ Ecuación 24}$$

Donde el término  $k$  viene dado por la ecuación siguiente:

$$k = (0,37464 + 1,54226 \times \omega - 0,26992 \times \omega^2) \text{ Ecuación 25}$$

(d) Capacidad Calorífica.

La capacidad calorífica del vapor para un componente puro viene dada por la función siguiente:

$$cp(T) = cp_a + cp_b \times T + cp_c \times T^2 + cp_d \times T^3 + cp_e \times T^4 \text{ Ecuación 26}$$

Donde,

$cp_a$ ,  $cp_b$ ,  $cp_c$  y  $cp_d$ : Corresponden a los parámetros de correlación del modelo para cada componente puro los cuales pueden encontrarse en el Anexo N° 1.



(e) Entalpia del gas

La entalpia del gas ideal para un componente puro viene dada por la función siguiente:

$$H_g(T) = H_f + cp_a \times (T - T_0) + \frac{cp_b}{2} \times (T^2 - T_0^2) + \frac{cp_c}{3} \times (T^3 - T_0^3) + \frac{cp_d}{4} \times (T^4 - T_0^4) + \frac{cp_e}{5} \times (T^5 - T_0^5) \text{ Ecuación 27}$$

Donde,

$H_f$ : Entalpia de formación del componente puro (J/mol).

$T_0$ : Temperatura estándar de formación (K).

(f) Entropía del gas

La entropía del gas ideal para un componente puro viene dado por la función siguiente:

$$S_g(T) = \frac{H_f - G_f}{T_0} + cp_a \times (\log T - \log T_0) + cp_b \times (T - T_0) + \frac{cp_c}{2} \times (T^2 - T_0^2) + \frac{cp_d}{3} \times (T^3 - T_0^3) + \frac{cp_e}{4} \times (T^4 - T_0^4) + R \times \log\left(\frac{P}{P_0}\right) \text{ Ecuación 28}$$

Donde,

$G_f$ : Energía de formación de Gibbs para un componente puro (J/mol).

$P_0$ : Presión estándar de formación (bar).

(g) La estimación de la relación de equilibrio de un componente se determina por la correlación de McWilliams y está dado por la función siguiente:

$$K(T, P) = \frac{a_1}{T^2} + \frac{a_2}{T} + a_3 + b_1 \times \log P + \frac{b_2}{P^2} + \frac{b_3}{P} \text{ Ecuación 29}$$

Donde,

$a_1, a_2, a_3, b_1, b_2$  y  $b_3$ : Corresponden a los parámetros de correlación del modelo para cada componente puro los cuales pueden encontrarse en el Anexo N° 2.

**Apéndice N° 2.** Modelos utilizados para las propiedades de mezcla de una corriente de fluidos.

(a) Parámetro volumétrico  $a$

El parámetro volumétrico  $a$  para una corriente de fluidos viene dado por la ecuación siguiente:

$$a(T) = \sum_i^n \sum_j^n x_i \times x_j \times \sqrt{a_i \times a_j} \text{ Ecuación 30}$$

Donde,

$n$ : Número de componentes presentes en la mezcla.

$x$ : Composición del componente en la mezcla.

$a$ : Parámetro volumétrico del componente puro en la mezcla.

(b) Parámetro volumétrico  $b$

El parámetro volumétrico  $b$  para una corriente de fluidos viene dado por la ecuación siguiente:

$$b = \sum_i^n x_i \times b_i \text{ Ecuación 31}$$

Donde,

$b$ : Parámetro volumétrico del componente puro en la mezcla.

(c) La derivada del parámetro volumétrico  $a$  con respecto a la temperatura viene dado por la ecuación siguiente:

$$\frac{da}{dT} = \frac{1}{2} \times \sum_i^n \sum_j^n x_i \times x_j \times \sqrt{a_i \times a_j} \times \left( \frac{1}{a_i} \times \frac{da_i}{dT} + \frac{1}{a_j} \times \frac{da_j}{dT} \right) \text{Ecuación 32}$$

Donde,

$\frac{da_i}{dT}$ : Es la derivada del parámetro volumétrico  $a$  del componente puro en la mezcla.

(d) Entalpia residual

La entalpia residual de una mezcla en una corriente de fluidos viene dada por la ecuación siguiente:

$$H_R = R_2 \times T \times \left( Z - T \times I \times \frac{da}{dT} \times \frac{1}{b \times R \times T} \right) \text{Ecuación 33}$$

Donde,

$Z$ : Factor de compresibilidad de la mezcla (adimensional).

$R_2$ : Constante universal de los gases, expresado en unidades de energía cuyo valor es 8,314472 (J/mol.K).

El término  $I$  viene dado por la ecuación siguiente:

$$I = \frac{1}{\sigma - \varepsilon} \times \log \frac{Z + \sigma \times \beta}{Z + \varepsilon \times \beta} \text{Ecuación 34}$$

Donde,

$\sigma$ : Parámetro del modelo de Peng-Robinson cuyo valor es 2,414214 (adimensional).

$\varepsilon$ : Parámetro del modelo de Peng-Robinson cuyo valor es -0.414214 (adimensional).

El término beta viene dado por la ecuación siguiente:

$$\beta = \frac{b \times P}{R \times T} \text{Ecuación 35}$$

(e) Entropía residual

La entropía residual de una mezcla en una corriente de fluidos viene dada por la ecuación siguiente:

$$S_R = R_2 \times \left( I \times \left( \frac{a}{b \times R \times T} + T \times \frac{da}{dT} \times \frac{1}{b \times R \times T} \right) + \log(Z - \beta) \right) \text{ Ecuación 36}$$

(f) Entalpia de mezcla

La entalpia de mezcla de una corriente de fluidos de una fase viene dada por la ecuación siguiente:

$$H = \sum_i^n x_i \times H_g(T) + H_R \text{ Ecuación 37}$$

Si la corriente se encuentra en dos fases se utiliza la ecuación siguiente:

$$H = \varphi \times H_{gas} + (1 - \varphi) \times H_{liquido} \text{ Ecuación 38}$$

Donde,

$\varphi$ : Factor de vaporización de la mezcla (mol/mol).

$H_{gas}$  y  $H_{liquido}$ : Son las entalpias de la fase gas y la fase líquido respectivamente, cada una de estas es calculada usando las composiciones respectivas de cada fase mediante la ecuación de entalpia de mezcla de una fase.

(g) Entropía de Mezcla

La entropía de mezcla de una corriente de fluidos de una fase viene dada por la ecuación siguiente:

$$S = \sum_i^n x_i \times S_g(T) - R \times \sum_i^n x_i \times \log x_i + S_R \text{ Ecuación 39}$$

Si la corriente se encuentra en dos fases se utiliza la ecuación siguiente:

$$S = \varphi \times S_{gas} + (1 - \varphi) \times S_{liquido} \text{ Ecuación 40}$$

Donde,

$\varphi$ : Factor de vaporización de la mezcla (mol/mol).

$S_{gas}$  y  $S_{liquido}$ : Son las entropías de la fase gas y la fase líquido respectivamente, cada una de estas es calculada usando las composiciones respectivas de cada fase mediante la ecuación de entalpia de mezcla de una fase.

### **Apéndice N° 3.** Modelos y métodos utilizados para el cálculo del equilibrio termodinámico.

#### (a) Vaporización instantánea

La ecuación implementada para el cálculo de vaporización instantánea es la ecuación de Rachford-Rice la cual es la siguiente.

$$\sum_i^n \frac{z_i \times (K_i - 1)}{1 + \psi \times (K_i - 1)} = 0 \text{ Ecuación 41}$$

Donde,

$z_i$ : Corresponde a la composición global del componente  $i$  en la mezcla (mole/mole).

$K_i$ : Corresponde a la relación de equilibrio del componente  $i$  en la mezcla (adimensional) y viene dado por la ecuación siguiente:

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} \text{ Ecuación 42}$$

Esta ecuación de Rachford-Rice es resuelta mediante el método de Brent usándose como estimación inicial el rango [0-1] para la determinación del factor de vaporización.

(b) Algoritmo de sustitución sucesiva

Durante la ejecución del algoritmo de sustitución sucesiva para la actualización de las relaciones de equilibrio de los componentes presentes se aplica la ecuación siguiente en cada iteración:

$$K_i = K_{i,ant} \times \left( \frac{\theta_{i,l} \times x_i}{\theta_{i,v} \times y_i} \right) \text{ Ecuación 43}$$

Donde,

$K_{i,ant}$ : Relación de equilibrio del componente  $i$  en la mezcla para la iteración anterior.

$\theta_{i,l}$  y  $\theta_{i,v}$ : Corresponden a los coeficientes de fugacidad del componente  $i$  en la fase de líquido y la fase de vapor respectivamente.

$x_i$  y  $y_i$ : Corresponden a las composiciones del componente  $i$  en la fase de líquido y la fase de vapor respectivamente.

(c) Coeficiente de fugacidad

El coeficiente de fugacidad de un componente en una fase en condiciones de equilibrio viene dado por la ecuación siguiente:

$$\theta_i = e^{\left( \left( \frac{b_i}{b} \times (Z-1) \right) - (q_i \times I) - \log(Z-\beta) \right)} \text{ Ecuación 44}$$

Donde,

$b_i$ : Parámetro volumétrico  $b$  de componente puro del componente  $i$  en la fase.

$b$ : Parámetro volumétrico de mezcla la fase en la que está presente el componente  $i$ .

El término  $q_i$  viene dado por la ecuación siguiente:

$$q_i = q \times \left( \frac{2 \times \sum_j^n x_j \times \sqrt{a_i \times a_j}}{a} - \frac{b_i}{b} \right) \text{ Ecuación 45}$$

Donde,

$a$ : Parámetro volumétrico de mezcla la fase en la que está presente el componente  $i$ .

$x_j$ : Composiciones del componente  $j$  presente en la fase en la que está contenida el componente  $i$ .

El término  $q$  viene dado por la siguiente ecuación.

$$q = \frac{a}{b \times R \times T} \text{ Ecuación 46}$$

## ANEXOS

**Anexo N° 1.** Coeficientes del modelo de capacidades caloríficas de los componentes puros.

	a	b	c	d	e
Metano	37.9349	-0.0684	0.0003	-2.390E-07	6.906E-11
Etano	34.3669	-0.0195	0.0004	-4.081E-07	1.326E-10
Propano	17.4183	0.1865	0.0001	-1.177E-07	3.703E-11
i-Butano	8.9104	0.3063	0.0000	-1.692E-07	6.880E-11
n-Butano	0.4964	0.3809	-0.0002	4.107E-08	-1.860E-12
i-Pentano	-9.5094	0.5110	-0.0003	7.257E-08	-4.675E-12
n-Pentano	-0.8443	0.4786	-0.0003	5.762E-08	-3.126E-12
n-Hexano	-8.3331	0.5992	-0.0003	8.699E-08	-5.803E-12
n-Heptano	-9.7094	0.6960	-0.0004	1.025E-07	-6.900E-12
n-Octano	-30.8541	0.9135	-0.0007	2.846E-07	-5.358E-11
n-Nonano	-8.3740	0.8729	-0.0005	1.031E-07	-1.435E-20
n-Decano	-7.9130	0.9609	-0.0005	1.131E-07	-2.633E-20
N-C <sub>11</sub>	-8.3950	1.0540	-0.0006	1.237E-07	-1.632E-20
CO <sub>2</sub>	27.2041	0.0426	0.0000	4.032E-09	-3.016E-13
N <sub>2</sub>	27.5297	0.0054	0.0000	-4.096E-10	5.673E-14
H <sub>2</sub> O	34.4899	-0.0143	0.0000	-3.567E-08	9.354E-12
H <sub>2</sub> S	34.0249	-0.0126	0.0001	-4.330E-08	1.085E-11

Fuente: Aspen Hysys Dynamics.



**Anexo N° 2.** Coeficientes del modelo de estimación de las relaciones de equilibrio de los componentes puros.

i	a1	a2	a3	b1	b2	b3
Metano	-292860	0	8.2445	-0.8951	59.8465	0
Etano	-687248.25	0	7.90694	-0.886	49.02654	0
Propano	-970688.563	0	7.15059	-0.76984	0	6.90224
i-Butano	-1166846	0	7.72668	-0.92213	0	0
n-Butano	-1280557	0	7.94986	-0.96455	0	0
i-Pentano	-1481583	0	7.58071	-0.93159	0	0
n-Pentano	-1524891	0	7.33129	-0.89143	0	0

Fuente: (McWilliams, 1973).