

**UNIVERSIDAD DE LA LAGUNA**

**«Aplicación de la técnica de calibración PLS al control  
y modelado de procesos»**

**Autor: José J. Macías Hernández  
Director: Dr. D. Sebastián Delgado Díaz**

**Departamento de Ingeniería Química y Tecnología Farmacéutica**



**Dpto. de Ingeniería Química  
y Tecnología Farmacéutica**  
Universidad de La Laguna

**Sebastián Delgado Díaz**, Catedrático de Ingeniería Química de la Universidad de La Laguna,

**CERTIFICA:**

Que la presente memoria titulada:

**“APLICACIÓN DE LA TÉCNICA DE CALIBRACIÓN PLS AL CONTROL y MODELADO DE PROCESOS”**

se ha realizado bajo mi dirección, en el Departamento de Ingeniería Química y Tecnología Farmacéutica, por Don José Juan Macías Hernández, y autorizo su presentación.

Y para que así conste, firmo este certificado en La Laguna a 1 de Julio de 1998.

Fdo. Sebastián Delgado Díaz

La presente investigación ha sido realizada en colaboración con la Compañía Española de Petróleos S.A. (CEPSA) y utilizando las instalaciones que posee en la Refinería Tenerife. A cuantos en ella desarrollan su labor quiero agradecer desde aquí toda la ayuda que desinteresadamente me han prestado. Quiero expresar mi gratitud al Director de la Refinería, D. Javier Martín Carbajal, por las facilidades para llevar a cabo este trabajo, y al Director del Departamento de Fabricación, D. Alvaro García García, por sus sugerencias y apoyo en el desarrollo del mismo.

Especialmente, quisiera agradecer la colaboración de los compañeros Miguel Melián y Valeriano Weyler, quienes han creído desde el principio en el desarrollo de este trabajo. No es de olvidar igualmente a los Técnicos y Panelistas del TDC quienes han sufrido algunas veces los inoportunos cambios de las Aplicaciones de Control Avanzado.

También, al Director y a todos los miembros del Departamento de Ingeniería Química y Tecnología Farmacéutica de la Universidad de La Laguna.

Igualmente, al Dr. A. Barsamian y a P.N. Shah, actualmente en ABB Simcon por su ayuda en la definición inicial de este trabajo.

Gracias, asimismo, a todas aquellas personas que de alguna forma hayan prestado su ayuda y que involuntariamente haya omitido.

Julio de 1998

J. Macías

*A toda mi familia,  
sin cuya ayuda y paciencia no habría podido escribir estas líneas.*

## INDICE

### Capítulo 1

1. RESUMEN .....	27
------------------	----

### Capítulo 2

2. INTRODUCCIÓN .....	29
2.1. CONTROL DE PROCESOS .....	29
<i>Controladores</i> .....	29
<i>Sensores</i> .....	36
<i>Válvulas</i> .....	37
<i>Analizadores</i> .....	39
2.2. AVANCES EN TÉCNICAS DE CONTROL .....	39
<i>Control Predictivo Multivariable. Control Centralizado</i> .....	41
2.3. CONTROL DE LAS OPERACIONES UNITARIAS .....	44
2.4. TENDENCIAS EN CONTROL DE PROCESOS Y MODELADO .....	44
<i>Disponibilidad y fiabilidad de la Instrumentación de Procesos</i> .....	45
<i>Disponibilidad de modelos matemáticos dinámicos</i> .....	45
<i>Control de Procesos</i> .....	46
<i>Optimización por medio de modelos rigurosos de Planta</i> .....	47
<i>Control de Procesos por Inferencia de propiedades</i> .....	49
2.5. CÁLCULO DE INCENTIVOS .....	53

### Capítulo 3

3. OBJETIVOS DE LA PRESENTE INVESTIGACIÓN .....	56
<i>Desarrollar un programa que permita realizar calibración multivariante PLS..</i>	56
<i>Estudio de la capacidad de predicción de los Modelos PLS frente a las Redes Neuronales</i> .....	56
<i>Estudio del comportamiento de un modelo estacionario PLS en la utilización en lazo abierto y cerrado para el control de calidad</i> .....	56
<i>Estudio de la utilización de Modelos estacionarios PLS como complemento a los Modelos de Simulación Rigurosa de Planta</i> .....	57
<i>Estudio de la utilización de modelos de calibración PLS para la identificación</i>	

<i>de modelos dinámicos de procesos y su utilización en estrategias de Control Predictivo Multivariable</i> .....	57
---	----

## **Capítulo 4**

4. MODELADO Y CONTROL .....	59
4.1. INTRODUCCIÓN .....	59
4.2. PCA, ANÁLISIS DE COMPONENTES PRINCIPALES .....	62
<i>Centrado de las variables</i> .....	66
<i>«Loadings» o vectores, relación entre X y PC</i> .....	67
<i>«Scores», coordenadas de los datos en el espacio de componentes principales</i> .....	68
<i>Mapas de coordenadas «Score Plots»</i> .....	69
<i>Interpretación del diagrama de vectores (loadings)</i> .....	70
<i>Comparación entre los diagramas de vectores y de coordenadas</i> .....	72
<i>Construcción del modelo de componentes principales</i> .....	72
4.3. CALIBRACIÓN MULTIVARIANTE, LR, MLR, PCR, PLS .....	76
<i>Validación</i> .....	77
<i>Métodos de Regresión</i> .....	79
4.4. DISEÑO DE EXPERIMENTOS .....	88
<i>Introducción</i> .....	88
<i>Diseño factorial</i> .....	89
<i>Análisis de efectos</i> .....	91
4.5. REDES NEURONALES .....	92
4.6. RÉGIMEN ESTACIONARIO .....	96
4.7. RÉGIMEN NO ESTACIONARIO, RESPUESTA DINÁMICA .....	96
<i>Análisis de la respuesta. Identificación empírica de Modelos dinámicos</i> ..	96
<i>Control Predictivo Multivariable</i> .....	115

## **Capítulo 5**

5. TÉCNICA EXPERIMENTAL .....	129
5.1. INSTALACIÓN EXPERIMENTAL .....	129
<i>Diagrama de Fabricación Refinería</i> .....	133
<i>Sistemas de Información y Control</i> .....	159

5.2. SOPORTE INFORMÁTICO UTILIZADO .....	169
<i>Base de Datos de Planta</i> .....	169
<i>Sistema de Control Avanzado</i> .....	171
<i>Ordenador Personal</i> .....	172
<i>Aplicación para calibración multivariante</i> .....	173
<i>Redes Neuronales. Programa IPES</i> .....	206
<i>Modelado Dinámico, Modelos Multivariables. SMC Model</i> .....	209
<i>Simulación Rigurosa en estado estacionario. Programa PRO-II</i> .....	209

## **Capítulo 6**

6. APLICACIÓN EN RÉGIMEN ESTACIONARIO PARA PREDICCIÓN DE PROPIEDADES O DESARROLLO DE MODELOS .....	211
6.1. CÁLCULO POR INFERENCIA DE LA PRESIÓN DE VAPOR REID EN UNA TORRE DESPENTANIZADORA. DATOS SIMULACIÓN .....	211
<i>Procedimiento Experimental</i> .....	211
<i>Discusión</i> .....	247
6.2. CÁLCULO POR INFERENCIA DE LA TEMPERATURA DEL 5% DE DESTILACIÓN D86 EN EL PRODUCTO DE FONDO DE LA TORRE DESPENTANIZADORA. DATOS SIMULACIÓN .....	249
6.3. CÁLCULO POR INFERENCIA Y CONTROL DE LA PRESIÓN DE VAPOR REID DEL PRODUCTO DE CABEZA DE LA TORRE DESPENTANIZADORA Y DEL 5% D86 DEL PRODUCTO DE FONDO. DATOS REALES DE PLANTA .....	261
6.4. CÁLCULO POR INFERENCIA DE LA PENETRACIÓN DEL ASFALTO DE LA UNIDAD DE DESTILACIÓN A VACÍO, FOSTER2.....	285
6.5. ESTIMACIÓN DEL NÚMERO DE OCTANO DE LA NAFTA REFORMADA PARA SU SEGUIMIENTO Y CONTROL, ASÍ COMO EL DESARROLLO DE UN MODELO RIGUROSO DE SIMULACIÓN EN LÍNEA PARA LA OPTIMIZACIÓN DE UNA UNIDAD DE REFORMADO CATALÍTICO .....	297

## **Capítulo 7**

7. IDENTIFICACIÓN DE MODELOS DINÁMICOS DE PROCESO (RÉGIMEN NOESTACIONARIO) CON PLS PARA SU UTILIZACIÓN EN APLICACIONES DE CONTROL MULTIVARIABLE PREDICTIVO .....	333
7.1. IDENTIFICACIÓN MISO PARA UN SISTEMA CON CUATRO VARIABLES DE	

ENTRADA Y TRES DE SALIDA. DATOS DE SIMULACIÓN .....	333
<i>Procedimiento Experimental</i> .....	333
<i>Simulación</i> .....	333
<i>Resultados</i> .....	335
<i>Identificación</i> .....	336
7.2. IDENTIFICACIÓN DE MODELO DINÁMICO PARA EL CONTROL DE UNA COLUMNA DE ESTABILIZACIÓN DE NAFTA EN LA UNIDAD DE DESTILACIÓN DE CRUDO, CADU-2 .....	355
<i>Procedimiento Experimental</i> .....	355
<i>Resultados</i> .....	356
<i>Identificación</i> .....	357
8. CONCLUSIONES .....	367
9. BIBLIOGRAFÍA .....	371
10. APÉNDICE .....	383
10.1. LISTADOS PRO-II. ....	383
<i>Modelo Despentanizadora</i> .....	383
<i>Modelo Reformado Catalítico</i> .....	389
10.2. APLICACIÓN PLS EN MATLAB .....	397
<i>Instalación</i> .....	397
<i>Módulos Matlab</i> .....	398
11. INDICE ALFABÉTICO .....	383



## Índice de Figuras

Fig. 1. Esquema de un controlador neumático. (Lipták, 1985).	30
Fig. 2. Esquema de un controlador electrónico analógico.	32
Fig. 3. Panel de control con controladores analógicos. Foxboro, 1955.	33
Fig. 4. Consola de Control Distribuido Foxboro Spectrum.	34
Fig. 5. Transmisor de Presión Diferencial «Smart Transmitter», Honeywell.	37
Fig. 6. Válvula Camflex de Massoneilan.	38
Fig. 7. Estándar «FieldBus».	38
Fig. 8. Esquema de control descentralizado.	40
Fig. 9. Misma Unidad, con control centralizado, MPC.	42
Fig. 10. Matriz de ganancias relativas para destilación binaria.	44
Fig. 11. Histograma, y distribución normal para el punto de congelación del KNO. Proyecto Control Avanzado, Refinería Tenerife, 1987.	55
Fig. 12. Matrices X e Y, (Esbensen, 1996).	60
Fig. 13. Espacio de variables, 3 dimensiones. Tomado de Esbensen (1996).	63
Fig. 14. Cálculo del componente principal, por proyección.	64
Fig. 15. Sistema con tres variables y dos componentes principales.	65
Fig. 16. Cambio de coordenadas utilizando media y proyección de 2 componentes principales.	66
Fig. 17. Efecto del centrado con la media y escalado con el recíproco de la desviación estándar.	67
Fig. 18. Representación de «Scores» como coordenadas en espacio de componentes.	69
Fig. 19. Diagrama de coordenadas, «scores», en el espacio de componentes.	70
Fig. 20. Diagrama de pesos de las variables, «loadings», en el espacio de componentes.	71
Fig. 21. Descomposición de la matriz $\mathbf{X}$ .	73
Fig. 22. Diagrama de la descomposición de la Matriz de Datos o residuos en su componente.	74
Fig. 23. Variación del Error total frente al número de componente del modelo.	76
Fig. 24. Modelado y Predicción.	77
Fig. 25. Ejemplo de Colinealidad en el espacio de X.	81
Fig. 26. Representación geométrica de PCR.	82
Fig. 27. Representación geométrica de PLS.	83
Fig. 28. Diseño factorial para 3 variables, 2 niveles.	89
Fig. 29. Diseño completo para tres variables, dos niveles frente a diseño parcial con una fracción reducida. (negro y sombreado como efectos confundidos).	90

---

Fig. 30. Red Neuronal consistente en una capa de entrada, una oculta y una de salida .....	93
Fig. 31. Forma de la función sigmoide.....	94
Fig. 32. Elemento de proceso en una Red Neuronal y Función Sigmoide.....	95
Fig. 33. Procedimiento para generación de modelos dinámicos de proceso (Marlin, 1995). .....	99
Fig. 34. Curva de respuesta ante entrada en escalón y parámetros dinámicos para un sistema de primer orden más tiempo muerto. Smith, 1972.....	101
Fig. 35. Curva de respuesta ante entrada en escalón y parámetros dinámicos para un sistema de segundo orden más tiempo muerto. Smith, 1972.....	102
Fig. 36. Curva de respuesta ante entrada en escalón y parámetros dinámicos para un sistema no autoregulado (Smith, 1972).....	103
Fig. 37. Curva de respuesta ante entrada en escalón y parámetros dinámicos para un sistema autoregulado con respuesta inversa. SMCA, (Smith, 1972).....	104
Fig. 38. Curva de respuesta ante entrada en escalón y parámetros dinámicos para un sistema autoregulado con ganancia cero. SMCA, Training Manual, 1994.....	105
Fig. 39. Jerarquía de Control en una Instalacion Industrial. Control centralizado y Control Descentralizado forman parte de la estrategia global de la Planta.....	116
Fig. 40. Respuesta dinámica de la variable manipulada y de la variable controlada (con realimentación).....	119
Fig. 41. Efecto del parámetro $qq$ sobre la respuesta de la variable manipulada ..	121
Fig. 42. Cálculo del error y concepto de la Trayectoria de Referencia en IDCOM. ....	125
Fig. 43. Salidas de productos, año 1995. (CEPSA, 1996).....	130
Fig. 44. Balance de productos, mercado canario, (CEPSA, 1996). ....	130
Fig. 45. Plano de la Refinería Tenerife, (CEPSA, 1996). ....	134
Fig. 46. Diagrama de fabricación Refinería Tenerife, (CEPSA, 1996). ....	135
Fig. 47. Esquema simplificado del CADU-2, (CEPSA, 1996). ....	137
Fig. 48. Esquema simplificado de la Unidad Foster-2, (CEPSA, 1996). ....	138
Fig. 49. Esquema simplificado de la Unidad Visbreaker, (CEPSA, 1996). ....	140
Fig. 50. Esquema simplificado de la Unidad Hidro-1, (CEPSA, 1996). ....	142
Fig. 51. Esquema simplificado de la Unidad Hidro-2, (CEPSA, 1996). ....	143
Fig. 52. Esquema simplificado de la Unidad Amina-Recuperación LPG, (CEPSA, 1996). ....	145
Fig. 53. Esquema simplificado del proceso MEROX, (CEPSA, 1996). ....	146

---

---

Fig. 54. Esquema simplificado de la Unidad Despentanizadora, (CEPSA, 1996). .....	151
Fig. 55. Esquema simplificado de la Sección Unifining, (CEPSA, 1996). .....	152
Fig. 56. Esquema simplificado de la Sección Platforming, (CEPSA, 1996). .....	154
Fig. 57. Esquema simplificado de la Planta de LPG, (CEPSA, 1996). .....	155
Fig. 58. Esquema simplificado de la Central Térmica, (CEPSA, 1996). .....	157
Fig. 59. Esquema simplificado de la Planta de Aguas Residuales, (CEPSA, 1996). .....	158
Fig. 60. Esquema simplificado de la Cogeneración y Potabilización de agua, (CEPSA, 1996). .....	159
Fig. 61. Pirámide de Información y Control. ....	160
Fig. 62. Esquema general de los Sistemas de Información y Control Refinería Tenerife. ....	161
Fig. 63. Configuración de los equipos del Sistema TDC-2000. ....	163
Fig. 64. Configuración de los equipos del TDC-3000. ....	165
Fig. 65. Configuración del Sistema Centum-CS de Yokogawa. ....	166
Fig. 66. Estructura del RTPMS, bloques principales. ....	168
Fig. 67. Configuración de los equipos VAX que integran la Base de Datos de Planta. ....	169
Fig. 68. Estructura Informática de la Base de Datos de Planta. ....	170
Fig. 69. Mecanismo de generación de un informe BDP y transmisión a PC para el tratamiento de los datos. ....	171
Fig. 70. Estructura inicial y una vez modelado. ....	179
Fig. 71. Flujo de Información entre los datos originales y los resultados de la Aplicación. Modelos estacionarios. ....	180
Fig. 72. Diagrama de Flujo. Generación de modelos de estado estacionario. ....	181
Fig. 73. Sección Título y Comentarios, fichero de definición. ....	182
Fig. 74. Sección de definición de variables, fichero de definición. ....	183
Fig. 75. Sección de Selección de datos de calibración y datos de Validación. Fichero de definición. ....	185
Fig. 76. Sección de Proceso. Fichero de definición. ....	185
Fig. 77. Diagrama de Pesos para un solo componente. ....	186
Fig. 78. Gráfico de Pesos «loadings» para los componentes principales 1-2. ....	186
Fig. 79. Gráfico de pesos P, 1,2,3 en 3 dimensiones. ....	187
Fig. 80. Gráfico de coordenadas para el primer componente. ....	188
Fig. 81. Gráfico de Coordenadas, componentes 1 y 2. ....	188
Fig. 82. Gráfico de coordenadas, componentes 1,2 y 3. ....	189
Fig. 83. Gráfico de coordenadas T frente a U, para el primer componente. ....	190
Fig. 84. Gráfico de Errores de la matriz Y, PRESS. ....	190
Fig. 85. Gráfico de errores de la Matriz X, PRESS. ....	191
Fig. 86. Ejemplo de salida de los resultados( listado parcial). ....	192

---

---

Fig. 87. Programa de cálculo de modelo para su utilización en línea. ....	193
Fig. 88. Espacio de variables sin modelar y resultados. ....	195
Fig. 89 .Flujo de Información entre los datos originales y los resultados de la Aplicación. Modelos dinámicos. ....	195
Fig. 90. Diagrama de Flujo. Generación de modelos dinámicos. ....	196
Fig. 91 . Sección Título y Comentarios, fichero de definición. ....	198
Fig. 92. Sección de definición de variables, fichero de definición. ....	199
Fig. 93. Sección de Selección de datos de calibración y datos de Validación. Fichero de definición. ....	199
Fig. 94. Sección de Proceso, modelos dinámicos. ....	200
Fig. 95. Gráfico de respuesta en escalón. ....	201
Fig. 96. Gráfico de respuesta impulso. ....	201
Fig. 97. Gráfico de pesos o «loadings», un componente. ....	202
Fig. 98 . Gráfico de «loadings», dos componentes. ....	202
Fig. 99 . Gráfico de «loadings» tres componentes. ....	203
Fig. 100. Gráfico de coordenadas, componente 1. ....	204
Fig. 101. Gráfico de Errores de la matriz Y, PRESS. ....	205
Fig. 102 . Gráfico de errores de la Matriz X, PRESSX. ....	205
Fig. 103 . Fichero de Modelo de Impulso Finito. ....	206
Fig. 104. Hoja de datos de una fórmula calculada por IPES. ....	208
Fig. 105 . Pantalla inicial del entorno gráfico PROVISION y diagrama de simulación. ....	210
Fig. 106 . Diagrama de proceso de la Unidad Despentanizadora. Circuito de cabeza. ....	212
Fig. 107 . Diagrama de proceso de la Unidad Despentanizadora. Circuito de fondo. ....	213
Fig. 108 . Diagrama de Flujo de la Simulación de la Despentanizadora. ....	214
Fig. 109 . Gráfico de probabilidad para los efectos de la variable de respuesta PVR. ....	218
Fig. 110 . Gráfico de los residuos de PVR frente a número de componente. ....	223
Fig. 111 . Gráfico de los residuos de X frente al número de componente del modelo. ....	223
Fig. 112 . Gráfico de pesos «loadings» de dos componentes, 2 frente a 1. ....	226
Fig. 113 . Gráfico de pesos «loadings» de dos componentes, 3 frente a 1. ....	226
Fig. 114 . Gráfico de pesos «loadings W» Y de dos componentes, 2 frente a 1. ....	230
Fig. 115 . Gráfico de pesos «loadings W» Y de dos componentes, 3 frente a 1. ....	230
Fig. 116 . Gráfico de errores de la PVR frente al valor real de la variable. ....	236
Fig. 117 . Gráfico de errores de la PVR frente al tiempo. ....	236
Fig. 118 . Gráfico de la variable PVR calculada y Real. ....	237

---

---

Fig. 119 . Gráfico de errores de la PVR frente al valor real de la variable, MFACTO05.....	238
Fig. 120 . Gráfico de la variable PVR calculada y Real.....	239
Fig. 121 . Gráfico de errores de la PVR frente al valor real de la variable. ....	241
Fig. 122 . Gráfico de la variable PVR calculada y Real, nuevos datos.....	241
Fig. 123 . Gráfico de los valores encontrados y reales de PVR, FACTORTE....	246
Fig. 124 . Gráfico del error de PVR, FACTORTE. ....	246
Fig. 125 . Gráfico de los residuos del 5% D86 frente al número de componente.....	249
Fig. 126 . Gráfico de los residuos de X frente al número de componente del modelo. ....	250
Fig. 127 . Gráfico de errores de la D86, 5% frente al valor real de la variable, datos calibración. ....	252
Fig. 128 . Gráfico de errores de 5% D86 frente a la muestra, datos calibración.....	252
Fig. 129 . Gráfico de la variable 5% D86 calculada y Real, datos calibración.....	253
Fig. 130 . Gráfico de errores de la D86, 5% frente al valor real de la variable, datos comprobación.....	253
Fig. 131 . Gráfico de la variable 5% D86 calculada y Real, datos de comprobación.....	254
Fig. 132 . Gráfico de errores del 5% destilación D86, frente al valor real de la variable, datos de comprobación.....	255
Fig. 133 . Gráfico del 5% destilación D86 calculada y Real, datos de comprobación. ....	256
Fig. 134 .Gráfico de los valores previstos frente a reales, 5% D86, datos de comprobación. ....	257
Fig. 135 .Gráfico del error en la estimación de 5% D86, datos de comprobación. ....	257
Fig. 136 . Error absoluto entre el dato puntual de laboratorio y valor de la correlación, periodo 9-27/8/95. ....	265
Fig. 137 . Histograma de frecuencias de la PVR, periodo 1/4/95-10/7/95. Sin predicción.....	268
Fig. 138 . Histograma de frecuencias de la PVR, periodo 1/4/95-10/7/95. Cálculo en línea. ....	269
Fig. 139 . Evolución del Error (PVR calc- PVR Laboratorio), periodo 9-8-95/25-3-97.....	270
Fig. 140 . Evolución del Error (5%D86 calc- 5%D86 Laboratorio), periodo 9-8-95/25-3-97.....	271
Fig. 141 . Evolución del Error (5%D86 calc- 5%D86 Laboratorio), periodo 28-3-97/31-1-98.....	275

---

---

Fig. 142 . Análisis de Ganancias Relativas para el control de la Presión de Vapor Reid, cabeza Despentanizadora. ....	277
Fig. 143 . Estrategia de control propuesta. Presión de Vapor Reid. ....	278
Fig. 144 . Histograma de frecuencias de la PVR, periodo 1/4/95-10/7/95. Cálculo en línea.....	280
Fig. 145 . Gráfico de los residuos de Penetración frente a número de componente. ....	287
Fig. 146 . Gráfico de la Penetración calculada y real, datos de calibración.. ....	287
Fig. 147 . Gráfico de la Penetración calculada y real, datos de calibración. ....	288
Fig. 148 . Gráfico de errores de la Penetración calculada y real, datos de calibración.....	289
Fig. 149 . Gráfico de la Penetración calculada y real, datos de calibración. ....	290
Fig. 150 . Gráfico de errores de la Penetración calculada y real, datos de calibración.....	291
Fig. 151 . Gráfico de la Penetración calculada y real, datos de calibración. ....	292
Fig. 152 . Gráfico de errores de la Penetración calculada y real, datos de calibración.....	293
Fig. 153 . Gráfico de la Penetración calculada y real, datos de calibración. ....	293
Fig. 154 . Efecto de las distintas reacciones que ocurren en Platforming sobre el número de octano de la Nafta. ....	307
Fig. 155 . Error de predicción frente al número de octano. RUN 10. ....	311
Fig. 156 . Error de predicción frente al tiempo. RUN 10. ....	311
Fig. 157 . Valor previsto frente al Real, número de octano. RUN 10. ....	312
Fig. 158 . Error de predicción frente al número de octano. RUN 11. ....	312
Fig. 159 . Error de predicción frente al tiempo. RUN 11. ....	313
Fig. 160 . Valor previsto frente al Real, número de octano. RUN 11. ....	313
Fig. 161 . Error de predicción frente al número de octano. RUN 12. ....	314
Fig. 162 . Error de predicción frente al tiempo. RUN 12. ....	314
Fig. 163 . Valor previsto frente al Real, número de octano. RUN 12. ....	315
Fig. 164 . Error de predicción del número de octano.....	327
Fig. 165 . Evolución de la temperatura de desactivación calculada por el error de predicción de octano. ....	329
Fig. 166 . Evolución del rendimiento C5+wt ajustado por la simulación.....	330
Fig. 167 . Evolución de las variables empleadas en la simulación. S1DATA03.....	336
Fig. 168 . Matriz de modelos obtenidos mediante FIR, longitud 30, utilizando todos los datos y con el parámetro «SMOOTHING FACTOR» a cero. Datos S1DATA03. ....	337
Fig. 169 . Matriz de modelos obtenidos mediante FIR, longitud 30, utilizando todos los datos y con el parámetro «SMOOTHING FACTOR» a 2. Datos S1DATA03.....	338

---

---

Fig. 170 . Matriz de modelos obtenidos mediante ARX, longitud 3, utilizando todos los datos y con el parámetro «SMOOTHING FACTOR» a cero. Datos S1DATA03. ....	338
Fig. 171 . Matriz de modelos obtenidos mediante ARX, longitud 3, utilizando todos los datos y con el parámetro «SMOOTHING FACTOR» a 2. Datos S1DATA03. ....	339
Fig. 172 . Curvas de respuesta de escalón de la variable S1A001, 4 componentes, longitud inicial 15.....	341
Fig. 173 . PRESS frente al número de componente del modelo. Modelo dinámico de la Simulación. ....	341
Fig. 174 . Curvas de respuesta de escalón de la variable S1A001, 2 componentes, longitud inicial 15.....	342
Fig. 175 . Curvas de respuesta de escalón de la variable S1A001, 6 componentes, longitud inicial 15.....	343
Fig. 176 . Curvas de respuesta de escalón de la variable S1A001, 4 componentes, longitud inicial 5.....	346
Fig. 177 . Curvas de respuesta de escalón de la variable S1A002, 4 componentes, longitud inicial 15.....	347
Fig. 178 . Curvas de respuesta de escalón de la variable S1VC100, 4 componentes, longitud inicial 15.....	348
Fig. 179 . Curvas de respuesta de escalón de la variable S1A002, 4 componentes, longitud inicial 15.....	349
Fig. 180 . Curvas de respuesta de escalón de la variable S1VC100, 4 componentes, longitud inicial 15.....	350
Fig. 181 . Curvas de respuesta de escalón de la variable S1A002, 4 componentes, longitud 30. ....	352
Fig. 182 . . Evolución de las variables «test» estabilizadora, fichero C2EST02, muestreo 2 minutos. ....	357
Fig. 183 . Matriz de modelos obtenidos mediante FIR, longitud 30, utilizando todos los datos y con el parámetro «SMOOTHING FACTOR» a cero. Datos C2EST02.....	358
Fig. 184 . Matriz de modelos obtenidos mediante FIR, longitud 30, utilizando todos los datos y con el parámetro «SMOOTHING FACTOR» a 2. Datos C2EST02.....	358
Fig. 185 . Matriz de modelos obtenidos mediante ARX, longitud 2, utilizando todos los datos y con el parámetro «SMOOTHING FACTOR» a cero. Datos C2EST02.....	359
Fig. 186. Matriz de modelos obtenidos mediante ARX, longitud 2, utilizando todos los datos y con el parámetro «SMOOTHING FACTOR» a 2. Datos C2EST02.....	360

---

- Fig. 187 . Evolución de las variables «test» estabilizadora, fichero C2EST03.Muestreo 2 minutos. .... 361
- Fig. 188 . Matriz de modelos obtenidos mediante FIR, longitud 30, utilizando todos los datos y con el parámetro «SMOOTHING FACTOR» a cero. Datos C2EST03. .... 361
- Fig. 189 . Matriz de modelos obtenidos mediante FIR, longitud 30, utilizando todos los datos y con el parámetro «SMOOTHING FACTOR» a 2. Datos C2EST03. .... 362
- Fig. 190 . Matriz de modelos obtenidos mediante ARX, longitud 3, utilizando todos los datos y con el parámetro «SMOOTHING FACTOR» a cero. Datos C2EST03. .... 362
- Fig. 191. Matriz de modelos obtenidos mediante ARX, longitud 3, utilizando todos los datos y con el parámetro «SMOOTHING FACTOR» a 2. Datos C2EST03. .... 363
-



## Indice de Tablas.

<i>Tabla 1 . Variables de diseño y respuesta para ANOVA. ....</i>	<i>91</i>
<i>Tabla 2. Características comparativas de los métodos de entrada en escalón y método PRBS, (Marlin, 1995). ....</i>	<i>107</i>
<i>Tabla 3 . Lista parcial de las Compañías más importantes que comercializan programas de Control Predictivo Multivariable. Tomado y traducido de Qin y Badgwell, (1996). ....</i>	<i>126</i>
<i>Tabla 4 . Clasificación por proveedor e industria y número de aplicaciones de Control Predictivo Multivariable. Tomado y traducido de Qin y Badgwell, (1996). ....</i>	<i>127</i>
<i>Tabla 5. Distribución de productos en una refinería «hidroskimming» y otra de máxima gasolina, con crudo pesado (Maya). Traducido de Leffler (1984). ....</i>	<i>131</i>
<i>Tabla 6. Distribución de productos en una refinería «hidroskimming» y otra de máxima gasolina, con crudo ligero (Texas ácido). Traducido de Leffler (1984). ....</i>	<i>131</i>
<i>Tabla 7. Detalle de los crudos procesados durante 1995, (CEPSA, 1996). ....</i>	<i>132</i>
<i>Tabla 8. Datos más importantes sobre la Unidad CADU-2. ....</i>	<i>137</i>
<i>Tabla 9 . Características de control de la Unidad CADU-2. ....</i>	<i>137</i>
<i>Tabla 10. Datos más importantes sobre la Unidad Foster-2. ....</i>	<i>138</i>
<i>Tabla 11 . Características de control de la Unidad Foster-2. ....</i>	<i>138</i>
<i>Tabla 12. Datos más importantes sobre la Unidad Visbreaker. ....</i>	<i>140</i>
<i>Tabla 13 . Características de control de la Unidad Visbreaker. ....</i>	<i>140</i>
<i>Tabla 14. Datos más importantes sobre la Unidad Hidro-1. ....</i>	<i>142</i>
<i>Tabla 15 . Características de control de la Unidad Hidro-1. ....</i>	<i>142</i>
<i>Tabla 16. Datos más importantes sobre la Unidad Hidro-2. ....</i>	<i>143</i>
<i>Tabla 17 . Características de control de la Unidad Hidro-2. ....</i>	<i>143</i>
<i>Tabla 18. Datos más importantes sobre la Unidad Amina-Recuperación LPG. ....</i>	<i>144</i>
<i>Tabla 19 . Características e control de la Unidad Amina-Rec. LPG. ....</i>	<i>144</i>
<i>Tabla 20. Datos más importantes sobre proceso Merox. ....</i>	<i>145</i>
<i>Tabla 21 . Características de control de la Unidad Merox. ....</i>	<i>146</i>
<i>Tabla 22. Análisis PONA ejemplo de una carga y producto de la Unidad de Reformado catalítico. ....</i>	<i>147</i>
<i>Tabla 23. Reacciones básicas de Reformado Catalítico. ....</i>	<i>148</i>
<i>Tabla 24. Datos más importantes sobre la Unidad Despentanizadora. ....</i>	<i>151</i>
<i>Tabla 25 . Características de control de la Unidad Despentanizadora. ....</i>	<i>151</i>
<i>Tabla 26. Datos más importantes sobre la Sección Unifining. ....</i>	<i>152</i>
<i>Tabla 27 . Características de control de la Unidad Unifining. ....</i>	<i>152</i>
<i>Tabla 28. Datos más importantes sobre la Sección Platforming. ....</i>	<i>153</i>
<i>Tabla 29 . Características de control de la Unidad Platforming. ....</i>	<i>154</i>

---

Tabla 30. Datos más importantes sobre la Planta de LPG. ....	155
Tabla 31 . Características de control de la Unidad LPG. ....	155
Tabla 32. Datos más importantes sobre la Central Térmica. ....	157
Tabla 33. Datos más importantes sobre la Planta de Aguas Residuales. ....	157
Tabla 34. Datos más importantes sobre Cogeneración y Potabilización ....	159
Tabla 35 . Factores de variación en los datos de la simulación. ....	216
Tabla 36 . Diseño factorial reducido para 7 variables, 2 niveles, 64 casos. Respuesta de PVR, psia. ....	217
Tabla 37. Análisis de varianza para los 7 efectos. Efectos clasificados por orden de importancia, PVR en psia. ....	219
Tabla 38 . Base de datos de Instrumentos, Unidad Despentanizadora. ....	221
Tabla 39 . Criterios utilizados, Modelo: mfactoro Datos: factoror. ....	221
Tabla 40. Resultados obtenidos, Modelo: mfactoro Datos: factoror ....	222
Tabla 41 . Criterios utilizados, Modelo: mfacto01 Datos: factoror. ....	224
Tabla 42 . Resultados obtenidos, Modelo: mfacto01 Datos: factoror.....	225
Tabla 43 . Resultado del análisis de vecindad para el modelo MFACTO02.....	228
Tabla 44 . Criterios utilizados, Modelo: mfacto02 Datos: factoror. ....	231
Tabla 45 . Resultados obtenidos, Modelo: mfacto02 Datos: factoror.....	231
Tabla 46 . Criterios utilizados, Modelo: mfacto03 Datos: factoror. ....	232
Tabla 47 . Variables utilizados para modelar PLS, Modelo MFACTO03. ....	232
Tabla 48. Resultados obtenidos, Modelo: mfacto03 Datos: factoror.....	233
Tabla 49 . Criterios utilizados, Modelo: mfacto04 Datos: factoror. ....	234
Tabla 50 . Resultados obtenidos, Modelo: mfacto04 Datos: factoror.....	235
Tabla 51 . Criterios utilizados, Modelo: mfacto05 Datos: factoror. ....	237
Tabla 52 . Resultados obtenidos, Modelo: mfacto05 Datos: factoror.....	238
Tabla 53 . Valor asignado a cada factor en la generación de los datos de la Simulación. (FACTORTE). ....	240
Tabla 54 . Resultados de la Red Neuronal con 2 capas ocultas y tres variables de entrada. PLU873, PLF206, Rel. Reflujo. ....	242
Tabla 55 . Resultados de la Red Neuronal con 4 capas ocultas y tres variables de entrada. PLU873, PLF206, Rel. Reflujo.....	243
Tabla 56 . Resultados de la Red Neuronal con 2 capas ocultas y seis variables de entrada. PLU873, PLF208, PLP209, PLT196, PLF208, Rel. Reflujo.....	244
Tabla 57 . Resultados de la Red Neuronal con 4 capas ocultas y seis variables de entrada. PLU873, PLF208, PLP209, PLT196, PLF208, Rel. Reflujo.....	245
Tabla 58 . Criterios utilizados, Modelo: mfacto07 Datos: factoror. ....	250
Tabla 59. Resultados obtenidos, Modelo: mfacto07 Datos: factoror.....	251
Tabla 60. Criterios utilizados, Modelo: mfacto06 Datos: factoror. ....	254
Tabla 61. Resultados obtenidos, Modelo: mfacto06 Datos: factoror.....	255

---

---

Tabla 62 Resultados de la Red Neuronal para predicción de la Destilación D86. ....	258
Tabla 63 . Coeficientes de modelo PLS para la predicción de la PVR en el producto de cabeza y del 5%D86 de fondo Despentanizadora, Agosto 1995.....	262
Tabla 64 . Estudio del efecto dinámico de la recogida de toma de muestra y las medias horarias en la PVR (psia), del producto de cabeza de la Despentanizadora. ....	264
Tabla 65 . Estadísticos principales de la muestra de datos PVR (psia) en cabeza Despentanizadora, antes de correlación, para el periodo 1-4-95/10-7-95. ....	267
Tabla 66 . Estadísticos principales de la muestra de datos PVR en cabeza Despentanizadora, correlación en servicio, para el periodo 9-8-95/23-3-97. ....	268
Tabla 67 . Coeficientes de modelo PLS para la predicción de la PVR en el producto de cabeza Despentanizadora, Agosto marzo 1997. ....	273
Tabla 68 . Estadísticos principales de la muestra de datos PVR en cabeza Despentanizadora, aplicación en servicio, para el periodo 28-3-97/31-1-98. ....	279
Tabla 69 . Criterios utilizados, Modelo: mpenet01 Datos: isov-pe3. ....	286
Tabla 70 . Resultados obtenidos, Modelo: mpenet01 Datos: isov-pe3,.....	286
Tabla 71 . Criterios utilizados, Modelo: mpenet02 Datos: isov-pe3. ....	288
Tabla 72. Resultados obtenidos, Modelo: mpenet02 Datos: isov-pe3.....	289
Tabla 73. Criterios utilizados, Modelo: mpenet03 Datos: isov-pe3. ....	290
Tabla 74. Resultados obtenidos, Modelo: mpenet03 Datos: isov-pe3.....	291
Tabla 75 Resultados de la Red Neuronal para predicción de la Penetración a partir de la Densidad y de la temperatura de Isoviscosidad del asfalto. ....	294
Tabla 76 . Efecto de la variación de la calidad de la carga y condiciones de operación sobre las características principales de la Unidad de Reformado Catalítico Platforming, (Macías, 1995). ....	298
Tabla 77 . Nombre y descripción de las variables utilizadas inicialmente para el modelado.....	299
Tabla 78 . Hechos más relevantes RUN 8 a 12. ....	302
Tabla 79 . Predicción del número de Octano. Efecto del error de predicción frente al método de calibrado cuando se utilizan todas las variables. Datos: RUN10FUL, Modelo: Mplatf. ....	303
Tabla 80 . Efecto del criterio de participación y proximidad para la reduccion de la dimensión del modelo, Datos: RUN10FUL, Modelo: Mplatf.....	304
Tabla 81 . Criterios utilizados, Modelo: mplatf Datos: RUN10FUL .....	304
Tabla 82 . Resultados obtenidos, Modelo: mplatf Datos: RUN10FUL.....	305

---

---

Tabla 83 . Criterios utilizados, Modelo: mplatf01 Datos: RUN10FUL.....	309
Tabla 84 . Resultados obtenidos, Modelo: mplatf01 Datos: RUN10FUL.....	310
Tabla 85 . Variables utilizadas para la predicción de rendimientos y octano platformada.....	318
Tabla 86 . Predicción de rendimientos y número de octano. RUN 10, tomando incrementos y 6 componentes. Modelo: Mdes01, Datos: DESRUN10.....	319
Tabla 87 . Variables utilizadas para la predicción de incremento de temperatura reactores y producción de gas en separadores (*) y para predicción de rendimientos LPG y Platformada. Datos: RUN10FUL.....	321
Tabla 88 . Predicción de rendimientos y número de octano C6+. RUN 10, tomando genericamente incrementos y 6 componentes. Modelo: Mdes01, Datos: DESRUN10.....	322
Tabla 89 . Variables utilizadas para el ajuste de la composición de salida de reactores a partir de las condiciones operativas y los caudales de productos, y para la predicción del número de octano de la Platformada. Datos: RUN10FUL.....	325
Tabla 90 . Resultados de la simulación (tabla parcial) cuando se aplica a las condiciones de operación que existen en los días señalados, frente al número de octano y calidad de la alimentación analizadas por Laboratorio.....	327
Tabla 91. Base de datos de la Unidad de Simulación. ....	334
Tabla 92 . Matriz de interacción para las variables de la simulación, unidad de tiempo 5 minutos. Muestreo 5 minutos.....	335
Tabla 93. Criterios y resultados, para modelo FIR de datos Simulación Torre. Datos s1data03. Componentes 4. ....	340
Tabla 94 . Criterios y resultados, para modelo FIR de datos Simulación Torre. Datos s1data03. Componentes 2. ....	342
Tabla 95. Criterios y resultados, para modelo FIR de datos Simulación Torre. Datos s1data03. Componentes 6. ....	344
Tabla 96. Criterios y resultados, para modelo FIR de datos Simulación Torre. Datos s1data03. Componentes 6. ....	345
Tabla 97. Criterios y resultados, para modelo FIR de datos Simulación Torre. Datos s1data03. Componentes 4. ....	346
Tabla 98 . Criterios y resultados, para modelo FIR de datos Simulación Torre. Datos s1data03. Componentes 4. ....	347
Tabla 99. Criterios y resultados, para modelo FIR de datos Simulación Torre. Datos s1data03. Componentes 4. ....	349
Tabla 100. Criterios y resultados, para modelo FIR de datos Simulación Torre. Datos s1data03. Componentes 4. ....	350

---

<i>Tabla 101. Criterios y resultados, para modelo FIR de datos Simulación Torre. Datos s1data03. Componentes 4. ....</i>	<i>352</i>
<i>Tabla 102. Base de datos Estabilizadora de CADU-2. ....</i>	<i>356</i>
<i>Tabla 103. Resultados obtenidos en dos test, FIR con PLS, longitud inicial 5. Estabilizadora de CADU-2. ....</i>	<i>365</i>

---

**Capítulo 1**  
**RESUMEN**

## 1. Resumen

En el Control de Procesos Industriales la construcción de modelos constituye una de las principales actividades. La Memoria que se presenta reconoce este hecho y dedica especial atención a la generación de modelos en *estado estacionario* y en *estado no estacionario* para el control y seguimiento de los procesos industriales.

Este estudio analiza, en primer lugar y desde un punto de vista cronológico, las distintas soluciones que se han empleado para el control y seguimiento de los procesos, dependiendo en cada espacio y tiempo de la disponibilidad y desarrollo de los equipos de campo y máquinas de cálculo. En este sentido, la complejidad de los modelos de cálculo es indirectamente proporcional al factor de servicio o disponibilidad de las estrategias de control que se derivan de ellos.

Para realizar las representaciones de los diversos procesos se han analizado las distintas opciones disponibles, decantándose este trabajo por la aplicación de las técnicas de calibración multivariante lineal (PLS) para el desarrollo de los modelos. Como resultado de esta aplicación se ha elaborado un programa de calibración multivariante PLS que representa una aportación adicional a los que se encuentran en el mercado. En el caso de los modelos de *estado estacionario*, se propone un método automático de selección de variables. El entorno desarrollado se puede modificar --utilizando al efecto el resto de la infraestructura de la aplicación-- para acoger distintas versiones del algoritmo PLS (PLS no - lineal; PLS - dinámico; etc.). Finalmente, en cuanto a los modelos de *estado no estacionario*, se propone un método para la selección de la longitud óptima en modelos de impulso finito.

La técnica PLS ha permitido desarrollar modelos de *estado estacionario*, que se utilizan luego en el cálculo de la Presión de Vapor Reid y de la temperatura de destilación del 5% D86 de una torre despentanizadora. Esta aplicación se ha efectuado con datos generados mediante un simulador riguroso (PRO-II) y con datos reales de proceso. En este caso se añade una aplicación para el control de la presión de vapor Reid y se

---

realiza una evaluación económica de los resultados obtenidos. Además, esta misma técnica se ha empleado para estimar la Penetración del asfalto producido en una Unidad de Destilación a Vacío, y en todos estos casos se comparan los resultados con un programa comercial de ajuste mediante redes neuronales.

Por último, en cuanto a los modelos de *estado estacionario*, este estudio propone un método para el seguimiento **en línea** de la Unidad de Reformado Catalítico que utiliza un modelo que denominamos *híbrido*, constituido por una parte de simulación rigurosa y otra parte empírica generada con PLS. Este modelo permite, dentro de los errores de ajuste y sin necesidad de conocer la calidad de la carga a la Unidad de Reformado, obtener distintos parámetros, tales como número de octano, rendimientos, desactivación, etc.

La generación de modelos dinámicos de impulso finito se realiza a una Unidad de simulación y se comparan los resultados obtenidos con un programa comercial, tanto para la misma longitud de modelo en ambos casos como para la longitud óptima de modelo en caso PLS. Asimismo, este modelo se emplea para la confección de la aplicación de control multivariable de una torre de estabilización de Nafta. En este caso se evalúan los resultados de casi un año de funcionamiento.

---



**Capítulo 2**  
**INTRODUCCIÓN**

## **2. Introducción**

### **2.1. Control de Procesos**

El Control de Procesos es una actividad tan antigua como la propia existencia de la Industria. Recordemos los esfuerzos que en este sentido tuvieron como marco de aplicación el cambio técnico surgido con la segunda Revolución Industrial en los últimos treinta o cuarenta años del siglo XX. Así, de los clásicos Sistemas de Control Neumático de los años cuarenta o cincuenta se ha pasado a los actuales Sistemas de Control Distribuido. En este momento, con el advenimiento de los nuevos estándares para Sistemas de Control Abierto que están saliendo al mercado, es previsible una nueva revolución en la tecnología disponible para realizar el control industrial de procesos.

El camino no ha sido sencillo. Al contrario, ha requerido el esfuerzo de investigadores en nuevas tecnologías y de empresas dedicadas al desarrollo, suministro y puesta a punto de instrumentos, equipos y estrategias de control, que satisfagan las demandas de una Industria cada vez más sometida a presiones económicas, medioambientales y sociales.

El conocimiento de la historia de la tecnología en el control de procesos, considerando aspectos como sensores, controladores, actuadores, estrategias de control y elementos de interacción Operador - Planta, es importante para comprender las tendencias seguidas en este campo.

### **Controladores<sup>1</sup>**

La aparición de los relés neumáticos, aún en servicio en muchas instalaciones industriales, señala el punto de partida de este estudio.

---

<sup>1</sup> Controlador es el elemento del lazo de control que se encarga del cálculo de la acción deseada.

---

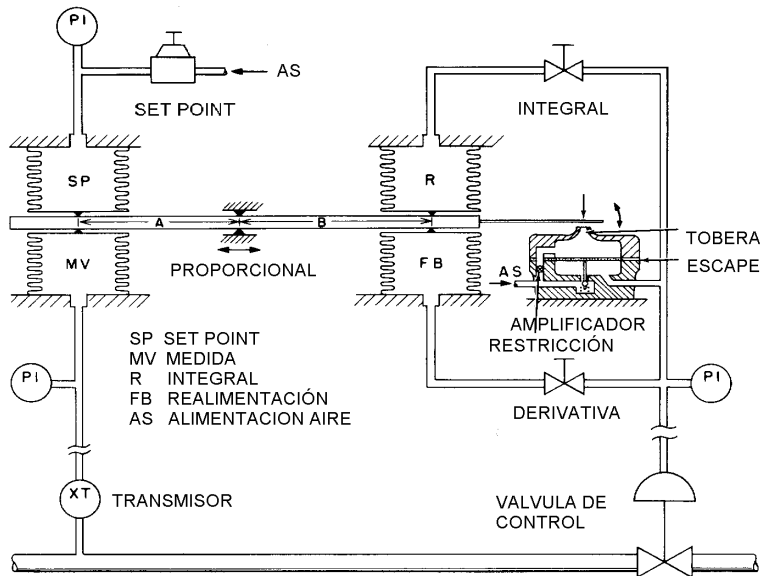


Fig. 1. Esquema de un controlador neumático. (Lipták, 1985).

El esquema básico de funcionamiento de un lazo de control neumático consiste en que la señal procedente del sensor (termopar, nivel, par de fuerzas, etc.) es transformada en señal neumática por medio de un transductor/transmisor para su posterior tratamiento. Esta señal y el valor deseado o punto de consigna, cuando se tratan con un juego de relés neumáticos, fuelles, válvulas y palancas, se transforman en la resolución de la ecuación de control más universalmente conocida: PID<sup>2</sup>. La salida neumática que se genera se envía al actuador<sup>3</sup>.

Los primeros controladores no disponían de las posibilidades que hoy

<sup>2</sup> El controlador PID (Proporcional, Integral y Derivativo) emite una señal cuya salida es la resolución matemática de la ecuación:

$$Salida = K_c \left( E + \frac{1}{T_i} \int E dt + T_d \frac{dE}{dt} \right)$$

donde E es el error entre el punto de consigna (valor deseado en el proceso) y la variable de proceso o medida,  $T_i$  corresponde al tiempo Integral y  $T_d$  al tiempo derivativo.

<sup>3</sup> Actuador, mecanismo de un lazo de control encargado de provocar el movimiento del elemento de control (pistón, membrana, etc.).

parecen evidentes («*Manual Override*»<sup>4</sup>, «*Set Point Tracking*»<sup>5</sup>, Sumadores<sup>6</sup>, Multiplicadores<sup>7</sup>, etc.). Es posible comprender la complejidad de estas operaciones matemáticas por medios totalmente mecánicos.

Cada controlador, instalado junto al actuador o bien en el panel gráfico situado en la sala de control de la Unidad, ejercía su función por sí sólo y sin interacción alguna por parte de los demás controladores. La aparición de la estructura en cascada, con la finalidad de aislar responsabilidades en la línea de control, supuso un importante avance tecnológico.

Los técnicos se esforzaban por simplificar las ecuaciones de comportamiento de las Operaciones Unitarias para abordar cada problema con la tecnología del momento. Esta actividad, incluso con los medios informáticos actuales, está plenamente justificada por las razones que se analizarán más adelante.

La aparición de la Instrumentación Analógica<sup>8</sup> representó un nuevo e importante avance tecnológico, no sólo por la simplicidad para la realización de los algoritmos básicos de control desarrollados hasta ese momento, sino por la integración de los instrumentos individuales. Los años sesenta marcaron este periodo.

La primera Unidad industrial con controladores electrónicos de la que se tiene referencia data de 1955 y se instaló en una Unidad de Reformado Catalítico de Richland Oil. Consistía en 16 controladores analógicos,

---

<sup>4</sup> Se conoce como *Manual Override* a la acción de escribir en la salida del controlador con un valor fijado manualmente.

<sup>5</sup> *Set point Tracking* denomina la acción de mantener el valor del *set point* o punto de consigna del controlador igual al valor de la variable de proceso. Se utiliza cuando el controlador está en manual o cuando se pasa a automático y asegura una transferencia entre ambos estados sin brusquedad en la salida. También se conoce como iniciación del controlador.

<sup>6</sup> Los Sumadores generan una señal que constituye la adición de dos o más señales individuales. Se utilizan en control en adelanto "*Feedforward*".

<sup>7</sup> Los Multiplicadores provocan una señal que es la multiplicación de dos señales, y se utiliza en Control de Relación "*Ratio Control*".

<sup>8</sup> La Instrumentación Analógica consistía en aparatos electrónicos no digitales que por medio de amplificadores operacionales realizaban todos los cálculos. Se redujo el tamaño, los costes de mantenimiento y número de componentes.

---

montados en un panel gráfico en la sala de control de la Unidad.

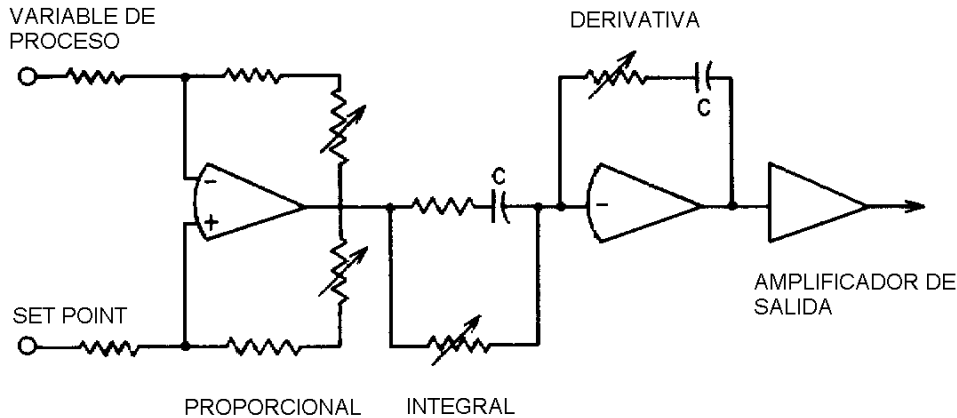


Fig. 2. Esquema de un controlador electrónico analógico.

El mercado de controladores creció de forma rápida y ya en 1965 la mitad de los instalados eran analógicos y la otra mitad neumáticos. Este proceso se vio interrumpido por la llegada de los ordenadores al control de procesos. Se identificó muy pronto que era más práctico conectar toda la instrumentación básica analógica (controladores, indicadores) a un ordenador centralizado, y que fuera éste el que realizase todas las funciones de cálculo para aquellas estrategias de control avanzado que empezaban a ser complejas, frente a intentar desarrollar esas aplicaciones mediante conexiones físicas entre instrumentos analógicos. La conexión de la instrumentación básica al sistema de control centralizado ejerce de puente entre la Planta y el Ordenador de Control.

La primera referencia sobre la utilización de un ordenador en el control de procesos data de 1957. Se trata del RW300, la primera máquina diseñada especialmente para esa tarea (Ledgerwood, 1984). No obstante, habían de pasar aún bastantes años hasta que la fiabilidad de estos equipos permitiera la responsabilidad directa en el control de procesos.

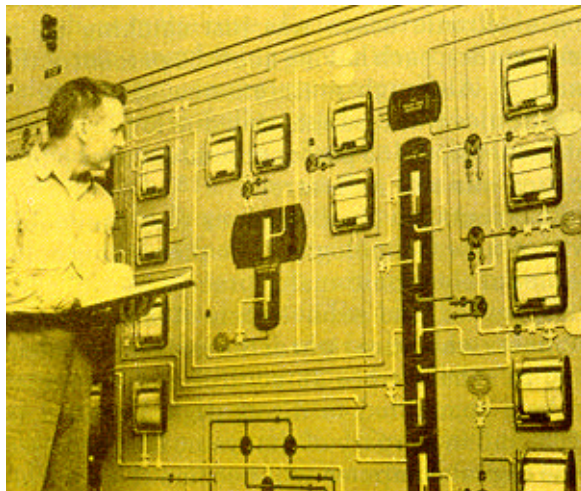
En 1965 ya se indicaba que los controladores digitales (que realizaban lo que en esos momentos se denominó *Control Digital Directo*<sup>9</sup>) serían los

<sup>9</sup> DDC, Control Digital Directo o cálculo de la salida a válvula por parte del ordenador.

---

que dominarían el mercado de la década siguiente. Sin embargo, no ocurrió así y los ordenadores tardarían algo más en dominar el control de procesos. Sólo gracias a los microprocesadores se consiguió realmente la fiabilidad y seguridad para sustituir los viejos controladores analógicos y los ancestrales controladores neumáticos.

En 1975 Honeywell presenta el TDC-2000, un Sistema de Control Distribuido que aún continúa dando servicio a cientos de instalaciones en todo el mundo (Blickley, 1984). Un Sistema de Control Distribuido consiste en una red de ordenadores dedicados al control de procesos. Cada uno de ellos posee capacidad para un número limitado de lazos de Control (TDC-2000, 8 lazos y 8 indicaciones), conectados directamente al proceso. La seguridad queda garantizada al tener redundantes la red de comunicación (red de control) y los propios ordenadores. El operador se comunica a través de la red de control para enviar y recibir información.



*Fig. 3. Panel de control con controladores analógicos. Foxboro, 1955.*

Este término, control distribuido, no representa nada nuevo para la vieja instrumentación convencional, que se basaba en controladores analógicos o neumáticos con la responsabilidad de una sola variable, y se antepone a la filosofía imperante hasta ese momento de los ordenadores digitales como centros de cálculo para toda la planta, recibiendo señales, aplicando algoritmos matemáticos y enviando salidas a válvula (DDC) o

---

puntos de consigna (SPC)<sup>10</sup>.



Fig. 4. Consola de Control Distribuido Foxboro Spectrum.

A esta generación pertenece como miembro destacado un Sistema de Control Centralizado diseñado por EXXON e IBM a finales de los años setenta (*ACS, Advanced Control System*)<sup>11</sup>. Basado en tecnología de ordenadores de gestión, se conectaba a la instrumentación analógica y tomaba la responsabilidad del control de la Planta en DDC o SPC. La seguridad continuaba residiendo en los controladores analógicos.

Como el incipiente ordenador de control distribuido no tenía la potencia de cálculo de los ordenadores de gestión que se usaban para control DDC y SPC, se concentraron los esfuerzos en la imitación de los algoritmos PID, sumadores, cascadas, etc., que ya existía en la instrumentación analógica.

Fue esta deficiencia la que permitió evolucionar al ordenador centralizado y conectarse de nuevo a la Instrumentación (Sistema de Control Distribuido). Pero no se trataba de sustituir su función sino de

---

<sup>10</sup> SPC, "*Set Point Control*", envío de puntos de consigna hacia la instrumentación básica.

<sup>11</sup> Al tratarse de una plataforma basada en potentes ordenadores de gestión, se mejoran las estrategias de control, se realiza optimización, etc..

---

complementarla. Nace entonces la Interfase ACS/TDC-2000.

Esta dualidad tenía como objetivo aportar capacidad de cálculo a un precio mucho más bajo que la que se podía obtener con los sistemas de control distribuido. Es entonces cuando se generalizan el Control Avanzado y la Optimización de Procesos.

El abaratamiento de la electrónica de microprocesadores (memoria, convertidores A/D y D/A, etc.), unido al aumento de la capacidad de cálculo de los nuevos Sistemas de Instrumentación y a la aparición de los estándares de intercambio de información en aplicaciones Windows (OLE, DDE, etc.), ha llevado a la migración de las estrategias de Control Avanzado a estos Sistemas de Instrumentación.

A los modernos Sistemas de Control Distribuido sería más correcto llamarlos Sistemas de Información y Control de Planta, ya que en su desarrollo intentan dominar todo el flujo de Información de la Planta, desde la generación de las señales de control hasta la integración de la Información para Gerencia.

Mientras que en los controladores digitales de la década de 1980 (TDC-2000 de Honeywell, Spectrum de Foxboro, etc.) el denominador común era la distribución de la responsabilidad del control en pequeños controladores de 8 y de 64 lazos por microprocesador, respectivamente, y la función de cálculo estaba centralizada en ordenadores de Gestión, en la siguiente década se instalan controladores con un gran número de lazos de control, mediana capacidad de cálculo y direcciones de entrada/salida programables. La función de cálculo está integrada en el Sistema a través de MÓDULOS DE APLICACIONES<sup>12</sup>.

La Industria demanda Sistemas Abiertos, con protocolos de comunicación cada vez más estandarizados y proveedores no sólo independientes de los programas sino también de los equipos. Esta estrategia permite a los usuarios protegerse ante la fuerte inversión que supone un Sistema de Instrumentación y la dependencia en que se

---

<sup>12</sup> La topología de los nuevos sistemas de Instrumentación y Control puede variar, pero básicamente siempre responden a ordenadores distribuidos en MÓDULOS DE APLICACIONES y MÓDULOS DE CONTROL y todo ello en RED LOCAL propietaria.

---



encuentran frente al suministrador.

Afortunadamente, frente al primer aspecto existen bastantes compañías de Ingeniería que suministran Aplicaciones multiplataforma para entornos abiertos, pero aún queda bastante por hacer en cuanto al segundo aspecto mencionado.

Si bien el controlador es una pieza fundamental del proceso de control, sensor y actuador son quizás más importantes, pues están en contacto con el proceso y pueden variar las condiciones operativas con fiabilidad y seguridad.

## **Sensores**

Mientras que el termopar continúa siendo el sensor más comúnmente extendido para la medida de Temperatura en los entornos industriales, el transductor de estado sólido para la medida de la presión ha mejorado notablemente en sensibilidad, fiabilidad y economía a los transmisores neumáticos por balance de fuerzas.

Los instrumentos modernos contienen un microprocesador que les facilita realizar oportunas correcciones por temperatura, linearización, etc. (Honeywell, «*Smart Transmitter*», 1983). Estos aparatos pueden operar mediante transmisión analógica y digital simultáneamente. La transmisión digital de la información mejora la calidad de la señal y permite protocolos de diagnóstico como HART<sup>13</sup>.

La presión diferencial como medida indirecta del caudal se ha sustituido por toda una gama de medidores de flujo que utilizan otros fenómenos físicos para la medida directa de la masa.

---

<sup>13</sup> HART, Protocolo de comunicación digital con instrumentos que se superpone a la señal de 4-20mA y permite cambiar algunos parámetros en el transmisor.

---



Fig. 5. Transmisor de Presión Diferencial «Smart Transmitter», Honeywell.

## Válvulas

Las válvulas de control, actuadores y posicionadores han conocido también cambios tecnológicos de importancia. Un primer salto cualitativo fue la aparición de las válvulas *cage guide* y *rotary*; la primera de ellas se debe a Honeywell (1963) y la segunda a Jamesbury Corp. (1960). Estas innovaciones, sin embargo, no adquirieron relevancia sino a partir de 1968, cuando Massoneilan introdujo las válvulas *Camflex*.

Hoy día estamos asistiendo a una nueva gama de válvulas de control inteligentes, a posicionadores que a fallo de señal mantienen la apertura, etc.



Fig. 6. Válvula Camflex de Massoneilan

Con la llegada del estándar *FieldBus* aparece un nuevo concepto; integra la instrumentación, reduce los costes de cableado y, en definitiva, fija las bases de una instrumentación inteligente y totalmente abierta, que reportará grandes beneficios a la Industria.

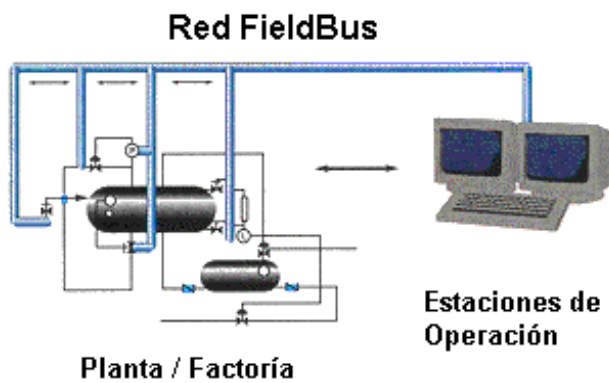


Fig. 7. Estándar «FieldBus»

## **Analizadores**

Los Analizadores en el control de procesos requieren sistemas complejos de acondicionamiento de muestra, y a este objeto se instalaban equipos estándar de laboratorio en casetas preparadas al efecto en la propia planta. Ahora bien, la complejidad de su mantenimiento y elevado coste ha determinado que se utilicen sólo cuando están económicamente justificados.

De ahí que se cuente en la actualidad con analizadores cada vez más sencillos, con costes más ajustados y con una tecnología que en algunos casos no necesita de recintos especiales clasificados ni de sistemas de acondicionamiento de muestra, pudiendo ser instalados en el área de proceso (densímetros, viscosímetros, etc.). Asimismo, se están desarrollando analizadores basados en tecnología NIR, que utilizan técnicas estadísticas como las empleadas en este trabajo para indirectamente analizar la corriente de proceso.

## **2.2. Avances en Técnicas de Control**

Las características del control de procesos han estado lógicamente ligadas a la disponibilidad de Sistemas capaces de resolver los algoritmos. Desde los primeros controladores PID que utilizaban relés neumáticos hasta los modernos ordenadores con una enorme capacidad de cálculo existe una extensa gama de técnicas de control adaptadas a cada uno de ellos.

La Industria de Petróleos y Petroquímica, debido a la complejidad de sus procesos y a las oportunidades de mejora, constituye un escenario industrial adecuado para que proliferen no sólo nuevos algoritmos sino que éstos se combinen en estrategias cada vez más complejas. A esta forma de operar se le llama *control descentralizado* y con ella el Ingeniero de Control de Planta abordaba los problemas en la década de 1970, empleando al efecto algoritmos PID en sus distintas versiones, compensadores de tiempo muerto, algoritmos de adelanto, selectores, etc. Existía, por tanto, modularidad en la concepción de la estrategia de control, y el diseño consistía en determinar las interacciones más

---

importantes mediante *test* de planta, en elegir las variables que debían ser controladas y manipuladas y en construir la Aplicación de Control.

Sin embargo, en la citada década, aunque se habían desarrollado las técnicas de control óptimo, en la práctica no tuvieron suficiente alcance, fundamentalmente por considerarse inapropiadas para la selección de la estrategia de control y por los efectos que ese diseño tenía en la operatividad de las unidades. Además, la carencia de modelos perfectos, el elevado orden del controlador, la no tolerancia a fallos, etc., también contribuyeron a que todos estos avances no se trasladaran con éxito a la Industria.

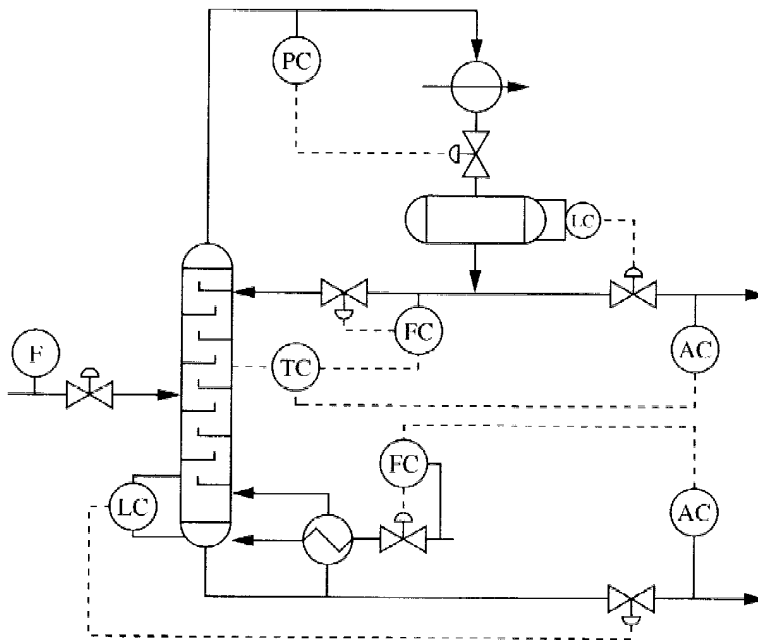


Fig. 8. Esquema de control descentralizado.

Esta situación explica la escasa participación de esta temática en los foros de Control Industrial. Así, a la Conferencia de Control Automático, celebrada en Denver en 1979, asistieron sólo 200 participantes, mientras que a la reunión anual de la AIChE un año antes se presentaron únicamente seis comunicaciones (Morari, 1988). Estas perspectivas cambiaron en la siguiente década, pues a la Conferencia Americana de

Control de 1988 se presentaron 800 trabajos, y a la reunión anual de AIChE 80 comunicaciones. Una de las razones de tal inusitado interés se encuentra en la aparición de las técnicas de Control Predictivo Multivariable.

### **Control Predictivo Multivariable. Control Centralizado**

El control predictivo multivariable (MPC<sup>14</sup>) hace su aparición en la Industria a mediados de los años ochenta y crece muy rápidamente. Aunque las características de esta técnica y sus bases teóricas se discuten más adelante, se debe adelantar que ha significado el avance más importante en el apartado de la aplicación práctica de las estrategias de Control por varias razones:

- 1.-) Describe las relaciones entre las variables de forma sencilla y fácilmente interpretable. Se representan los modelos de comportamiento de la planta de forma lineal entre las variables.
2. -) El cálculo de los puntos de consigna de las variables manipuladas se aborda de una manera centralizada.
3. -) Se atienden a las restricciones de proceso y a la matriz de interacciones mediante una formulación óptima, minimizando así los errores de las variables controladas frente a sus puntos de consigna en el horizonte de control. La formulación de la matriz de control es dinámica y por lo tanto se analiza en cada ejecución los grados de libertad remanentes en el proceso.
4. -) Al formular la matriz de control en cada ejecución, el algoritmo se puede configurar para presentar una cierta tolerancia a fallos.
5. -) El ajuste de la aplicación se realiza mediante parámetros sencillos, tales como la trayectoria de cada variable controlada y el peso que cada una tiene con respecto a las demás.

La mayoría de estas particularidades, muy familiares en los entornos de control convencional, determinaron que se extendiera rápidamente y

---

<sup>14</sup> MPC, "Multivariable Predictive Control".

---

aún hoy es una tecnología en auge.

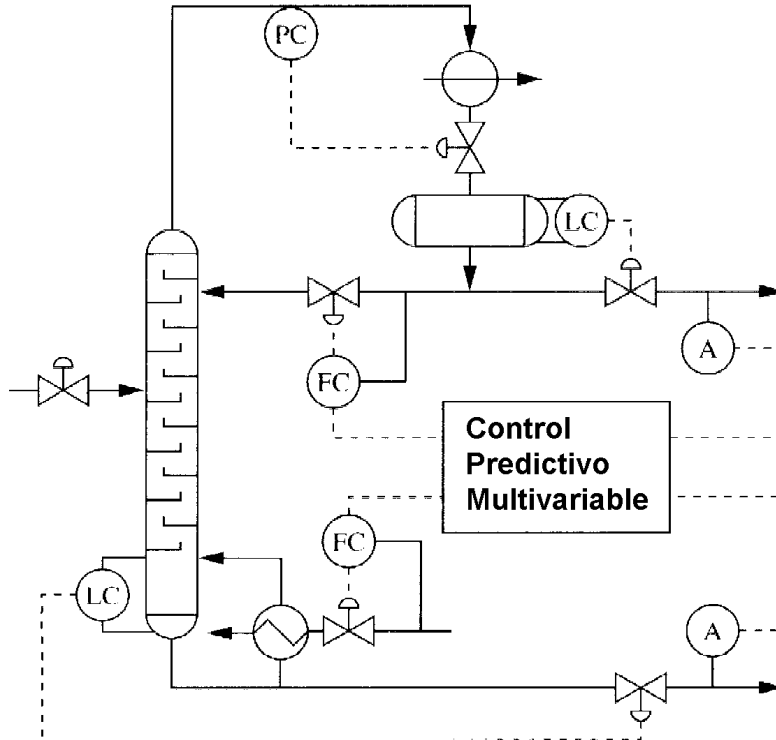


Fig. 9. Misma Unidad, con control centralizado, MPC

### Control Robusto

Quedan, sin embargo, áreas todavía no exploradas suficientemente, mientras que otras necesitan implantarse en la Industria. Por ejemplo, ¿en qué medida afecta la inexactitud de los modelos desarrollados a la eficacia del control predictivo multivariable? ¿Es posible el ajuste adaptativo de los modelos dinámicos multivariables y, en ese caso, bajo que circunstancias? ¿La inexactitud de los modelos lineales debe resolverse mediante el diseño de algoritmos de control predictivo multivariable no lineales?. La bibliografía que trata de responder a estas cuestiones es abundante, aunque todavía son pocos los programas comerciales disponibles.

### ***Selección de la Estructura de Control***

Desde los años setenta no se conoce otra técnica más intuitiva, eficiente y práctica que la MATRIZ DE GANANCIA RELATIVA<sup>15</sup>, que se utiliza en la selección de las parejas más adecuadas entre las variables controladas y manipuladas (Shinsky, 1979).

No existen reglas generales para la elección de la estrategia global de Optimización y Control de un Proceso o Unidad. Sólo la selección inicial de las variables manipuladas es directa (en general, tantas como válvulas o accionadores tenga la Unidad o Sección). El resto del diseño (elección de las variables controladas, cálculo de los grados de libertad del Proceso, definición de las parejas de variables manipuladas y controladas en control descentralizado o definición de la matriz de control en control predictivo multivariable) está íntimamente relacionado con los objetivos de control de calidad, rentabilidad, seguridad y conveniencia del operador. Stephanopoulos (1984) presenta una sistemática para la selección inicial de los controladores.

---

<sup>15</sup> RGA, Matriz de ganancias Relativas. Se conoce con este nombre al cociente entre la ganancia de cada variable manipulada/controlada cuando el resto de los lazos están en Manual y cuando están en automático. Define por lo tanto, la interacción del resto de los lazos de control en el lazo que se está evaluando.

---



$$\lambda_{yD}(\Lambda_{DV}) = \frac{\frac{\partial y}{\partial D} \Big|_{v, a, b, p}}{\frac{\partial y}{\partial D} \Big|_{x, a, b, p}}$$

Fig. 10. Matriz de ganancias relativas para destilación binaria.

### 2.3. Control de las Operaciones Unitarias

Entre las operaciones Unitarias más importantes de la Industria de Petróleo y Petroquímica se pueden citar, por orden de importancia, Destilación, Intercambio de calor y Reacción. Existen numerosos artículos que describen las estrategias típicas en esas operaciones, y la mayoría de ellos se ubican en el ámbito del Control Descentralizado. En cuanto a los métodos más usados para columnas de Destilación, Chapat y Depeyre (1993) presentan un resumen cronológico de la evolución de las técnicas de control.

### 2.4. Tendencias en Control de Procesos y Modelado

El control de procesos es obviamente una de las principales actividades para operar una unidad de forma eficiente y segura. Está relacionado y ejerce de plataforma para el resto de actividades de toda

Industria, como son, además de la Operación, la Seguridad, Protección al Medio Ambiente, Control de Calidad, Reconciliación de datos y Optimización.

En todos estos campos existen importantes avances gracias a la incorporación de nuevos métodos matemáticos y de ordenadores de Control de Procesos de mayor capacidad. No obstante, algunos autores todavía identifican las mayores limitaciones en la *disponibilidad y fiabilidad de la Instrumentación* y en la dificultad de tener buenos *modelos dinámicos* (Morari, 1991). De ahí que las demandas de la Industria en el control de procesos traten también estos aspectos.

### **Disponibilidad y fiabilidad de la Instrumentación de Procesos**

A partir de la aparición de los Analizadores en línea para el control de procesos, cuyo desarrollo ha sido espectacular en los últimos veinte años; la disponibilidad de medidas relativas a la calidad de los productos finales ha aumentado considerablemente. El Control de Procesos se ha convertido también en Control de Calidad y Optimización. Ahora bien, a pesar de ello, no existen analizadores automáticos para todas las medidas que se precisan y, además, la fiabilidad de estos equipos está aún muy lejos de la que posee la instrumentación convencional.

Si no existe en el mercado un determinado tipo de analizador automático o la medida del que opera carece de suficiente fiabilidad, entonces se puede inferir la medida deseada mediante dos métodos fundamentales: a) *Utilizando un método empírico*, es decir, aplicando métodos estadísticos a la información del proceso (instrumentación, datos carga, etc.); y b) *Derivando un modelo riguroso del proceso (dinámico)* a partir de información sobre calidad de la alimentación, condiciones de operación y ecuaciones fundamentales de ingeniería de las Operaciones Unitarias.

### **Disponibilidad de modelos matemáticos dinámicos**

Ahora bien, esta segunda opción no es adecuada en la mayoría de los casos porque la abundante información que requiere no siempre está

---

disponible. Así, los trabajos de Schuler y Schmidt (1993) muestran la aplicación de un modelo cinético riguroso para predecir la actividad y conversión de un reactor tubular con datos de calidad de alimentación y múltiples datos de operación.

En una aplicación industrial como el Refino de Petróleos no es frecuente tener información analítica suficiente acerca de la composición de la alimentación, y ésta tampoco suele ser constante debido a la presencia de estratificaciones en los tanques de carga. El trabajo de Visigalli, Simola y Tarzia (1993) revela que es necesario contar con una perfecta identificación del crudo de carga a la Unidad de Destilación si se desea predecir las características del Gasoil producido. Los estudios de Anchieta-Juárez y Aguilar-Rodríguez (1994) abundan en lo anterior y predicen la composición de Reformado catalítico por medio del modelo de reacciones catalíticas de Krane (1960).

En resumen, ambos aspectos --disponibilidad de la instrumentación y modelos dinámicos-- están lógicamente relacionados y responden a la manera en que se han abordado los problemas de modelado en la Industria.

## **Control de Procesos**

En los últimos años se asiste al diseño y construcción de aplicaciones industriales basadas en técnicas de inteligencia artificial, como son los Sistemas Expertos, Lógica difusa y Redes Neuronales. Las herramientas matemáticas más utilizadas son las siguientes.

### ***Redes Neuronales:***

La capacidad de las redes neuronales para abordar problemas no lineales es indudablemente superior a cualquier otra técnica matemática desarrollada hasta el momento.

### ***Logica Difusa:***

La aplicación de técnicas de lógica difusa goza de un creciente interés, si bien no existe una metodología adecuada para identificar y evaluar el

---

apartado fundamental de esta técnica, la pertenencia a cada categoría. De ahí que el diseño y ajuste del algoritmo sea complejo y tedioso (Hartmann, 1997), aunque Lin y Lee (1996) proponen una solución a esta problemática mediante la aplicación de redes neuronales.

### ***Sistemas Expertos***

Se están utilizando Sistemas Expertos para aquellas aplicaciones que implican una toma de decisiones. Recientemente se han presentado algunos ejemplos comerciales aplicados a la Industria de Petróleos (estrategia de aprovisionamiento de crudo, RASPA, Refinería Algeciras, 1998). Los sistemas expertos tienen mucho interés en áreas como seguridad, detección de fallos, puesta en marcha / parada de unidades, ayuda Operador, etc.

### **Optimización por medio de modelos rigurosos de Planta**

La optimización de procesos ha estado vinculada de manera estrecha al control. Tradicionalmente se realiza por medio de algoritmos conectados con la estrategia de control. Se emplea una gama de métodos, desde el de búsqueda<sup>16</sup> o de gradiente para sistemas no lineales hasta la programación lineal para sistemas lineales.

Ahora bien, la disponibilidad de simuladores rigurosos de planta ha permitido desarrollar estrategias que utilizan esos modelos para determinar las condiciones óptimas del proceso y posteriormente enviar los valores de consigna al Sistema de Control.

Si se conoce la composición de la carga a la Unidad, las especificaciones de los productos a obtener, las restricciones de proceso y el criterio de búsqueda, el problema se reduce a la resolución matemática del modelo riguroso. No obstante, existen dos aspectos que necesitan aún un mejor desarrollo.

---

<sup>16</sup> EVOP, “*EVolutionary OPTimization*”, el más popular de los métodos de búsqueda.

---

### **Disponibilidad de información para ejecutar el Simulador de Proceso**

Para poder ejecutar una simulación rigurosa de proceso es imprescindible tener una imagen exacta de la composición de la carga a la Planta y la instrumentación que permita el cálculo automático. Pero no siempre esto es posible, ya porque no existen analizadores en línea disponibles en el mercado o bien porque no se justifica económicamente su instalación. A este respecto, se identifica igualmente la necesidad de medidas calculadas por inferencia a partir de información disponible en la Planta.

La información que recibe el Simulador debe ser coherente, es decir, se han de cumplir los balances de materia y energía. Por lo tanto, el primer paso que se ha de realizar antes de aplicar el modelo de optimización del proceso es reconciliar<sup>17</sup> las medidas obtenidas. Posteriormente, y una vez que el simulador haya generado las condiciones de operación que a su juicio corresponden al óptimo, es necesario compensar el error encontrado en la instrumentación para que los puntos de consigna generados sean coherentes con el proceso. Existen programas comerciales que ejecutan estas tareas, pero no está resuelta la tolerancia a fallos de la instrumentación ni los intervalos de fiabilidad (ROM, de Simulation Sciences)<sup>18</sup>. En este sentido, es preciso aplicar aquellos métodos de diagnóstico que permiten determinar cuando una señal de instrumentación no es incluso apta para ser reconciliada, (Tay, 1996) y (May, Payne, 1992).

### **Optimización en régimen estacionario, frente a optimización en régimen no estacionario**

Aunque algunos programas comerciales desarrollan modelos dinámicos rigurosos que hacen posible la optimización, la tecnología más

---

<sup>17</sup> Reconciliación es la actividad de corregir los valores procedentes de la instrumentación como caudales y composiciones (balance de materia) e inclusive temperaturas y presiones (balance de energía). Normalmente, se aplica sólo reconciliación de balance de materia y las herramientas matemáticas que se emplean dependen en cada caso, pero pueden ser o resolución analítica de los sistemas de ecuaciones o utilización de programación lineal para minimizar el error.

<sup>18</sup> ROM, "*Rigorous On-line Modeling*". Simulador riguroso de estado estacionario. Existen otros proveedores que realizan parecidas funciones como Aspen+ de ASPEN y HySys de HYPROTECH.

---

empleada para la optimización a corto plazo es el Control Predictivo Multivariable<sup>19</sup>, mientras que para optimizar a largo plazo se utilizan los programas de simulación rigurosa en *estado estacionario*. Esta optimización en dos etapas es en cualquier caso la más extendida.

## Control de Procesos por Inferencia de propiedades

Lo expuesto hasta aquí sugiere la necesidad de contar con medidas inferenciales para abordar cualquiera de los aspectos de Control de Procesos y Optimización. Sugiere también que el cálculo de una medida por medio de un método matemático riguroso requiere más información que la que normalmente está disponible. Esta inadecuación de los métodos rigurosos para estimar medidas inferenciales ha determinado que estas medidas se obtengan por métodos estadísticos.

Los primeros trabajos que sustituían variables primarias por medidas indirectas o variables secundarias utilizaban correlaciones lineales en *estado estacionario* (Weber, Brosilow, 1972). En este trabajo, el número de medidas secundarias linealmente independientes que se empleaban para el desarrollo de la relación debía ser al menos el mismo que el número de variables a calcular. Posteriores estudios (Babu y Brosilow, 1978), (Brosilow y Tong, 1978) y (Babu y Brosilow, 1978) desarrollaron esta metodología para una desbutanizadora simulada. En el segundo artículo se discute la compensación dinámica de las variables independientes y en el tercero se diseña un estimador dinámico óptimo.

Por su parte, Lee y Morari (1992) presentaron el diseño de un algoritmo de control inferencial para aplicaciones de control con variables de baja frecuencia de ejecución. Esta técnica, potente para analizadores discontinuos (cromatógrafos, destiladores, etc.), se basa en mantener la acción de control activa a partir de un modelo simplificado del proceso mientras no exista un nuevo valor de la variable. Se tienen en cuenta aspectos como tolerancia a fallos de la instrumentación primaria (DFT, «*Decentralized Failure Tolerance*»), incertidumbre del modelo, restricciones

---

<sup>19</sup> La Aplicación multivariable se configura para hacer optimización utilizando restricciones dinámicas y tomando una variable como función objetivo. Esta variable puede ser calculada o existir en la Planta.

---

de las variables, etc.

En el *control descentralizado*, esta dualidad de la estructura de cascada fue previamente (Luyben, 1973) enunciada como Control en Cascadas Paralelas («*Parallel Cascade Control*», PCC). En caso de fallo de algún instrumento, el operador podía eliminar las medidas primarias recurriendo a las medidas secundarias. Sin embargo, y al igual que ocurre en las estrategias de control descentralizado, la flexibilidad y el manejo de restricciones no es tan potente como en los sistemas de control centralizado (MPC). La aportación de Lee y Morari a estos aspectos se conoce como GIC (*Generic Inferential Control*). Existen otras contribuciones más recientes al control con cascada en paralelo, como la *Non-linear Inferential Parallel Cascade Control* (NIPCC) (McAvoy y otros, 1996).

En todos los algoritmos anteriores, el empleo de medidas secundarias no ha tenido por objeto sustituir las medidas primarias sino mejorar la respuesta del controlador a través de modelos internos para admitir una cierta tolerancia a fallos. Desde este punto de vista, la información inferencial no se usa en uno de los predicados ya enunciados, es decir, en la ausencia de medida en línea de la propiedad.

Determinadas aplicaciones industriales se basan en modelos carentes de analizador en línea, y ejemplos al respecto son la predicción de los puntos de Flash<sup>20</sup> y Congelación del KNO<sup>21</sup> y la temperatura destilación 90% ASTM D86<sup>22</sup> para el Gasoil (San, Landells y Mackay, 1994). El estimador en este caso ha sido un software específico (Infer) desarrollado por BP<sup>23</sup>.

La predicción de propiedades por métodos indirectos es un campo de

---

<sup>20</sup> Temperatura de *Flash*. Característica de inflamabilidad de un combustible, depende de su principio de destilación.

<sup>21</sup> Punto de Congelación o "*Freezing Point*". Indica la temperatura a la que comienza la cristalización de parte del producto. Depende principalmente del contenido en parafinas de la muestra.

<sup>22</sup> El ASTM D86 es un ensayo estándar de destilación, en unas determinadas condiciones y mediante el aparato descrito en la propia documentación. El valor 90% corresponde a la temperatura a la que destila el 90% en volumen de la muestra original.

<sup>23</sup> BP, British Petroleum.

---

importancia estratégica para las empresas, como lo demuestra el hecho de que no se encuentren muchas referencias que describan la metodología aplicada en toda su extensión.

### ***Métodos matemáticos empleados***

#### **Regresión Lineal**

Una vez esbozado la forma que debe tener un modelo, ya sea de origen teórico<sup>24</sup> o empírico, es necesario ajustar los datos obtenidos a los parámetros de ese modelo. Se puede emplear la regresión lineal si el modelo responde a este supuesto o bien se puede transformar a este supuesto. La operación consiste en minimizar el error entre los datos experimentales (variables dependientes) y los que se derivan de aplicar esa ecuación al resto de las variables utilizadas como indicadores de aquella (variables independientes).

Por lo tanto, si se asume que:

$$Y_c = a + b X \quad [ 1 ]$$

se trata de encontrar a y b de forma que minimice el error de predicción:

$$E = Y_r - (a + b X) \quad [ 2 ]$$

donde  $Y_r$  es el valor real e  $Y_c$  es el valor calculado. Minimizando,

$$b = \frac{\sum xy}{\sum y^2} \quad [ 3 ]$$

y la ordenada en origen,

$$a = \bar{y} - b\bar{x} \quad [ 4 ]$$

La precisión y fiabilidad de los parámetros obtenidos depende, por un

---

<sup>24</sup> Llamaremos modelo teórico al desarrollado a partir de la formulación de las ecuaciones fundamentales sobre el comportamiento de un Sistema. Modelo empírico es aquel que sin bases teóricas, supone un comportamiento determinado y ajusta una serie de variables a ese modelo.

---



lado, de que efectivamente la relación entre la variable dependiente y las variables independientes sea lineal y, por otro, que éstas últimas sean efectivamente independientes unas de otras.

Existen muchos procesos donde la formulación de las ecuaciones fundamentales de comportamiento conduce a sistemas no lineales. En estos casos es posible hacer un tratamiento lineal por tramos o ajustar los datos mediante regresión no lineal. No obstante, la interdependencia entre variables supuestamente independientes es un problema no resuelto con este método de regresión (colinear).

## Redes Neuronales

La formulación teórica de las redes neuronales comienza en la década de 1950 como resultado del intento de modelar el comportamiento del cerebro humano. La red neuronal más simple está compuesta por una capa externa de entrada, otra interna y una capa externa de salida. Cada elemento de la red o neurona cumple una función determinada<sup>25</sup> y las asociaciones entre ellas están constituidas por unos valores numéricos o pesos que definen el comportamiento de la red. Para que esta estructura funcione es necesario «entrenar» a la red neuronal. Existen diversas formas de hacerlo, siendo la más común el cálculo de los pesos de forma iterativa a partir de la salida de la red (*Backpropagation*).

Las redes neuronales están teniendo un auge importante en el campo del control, aunque no existen aún muchas aplicaciones en las áreas de Refino y Petroquímica (Barsamian y Macías, 1998).

Entre las aplicaciones industriales de las redes neuronales para la predicción de propiedades podemos citar el trabajo de Baratti (1995), referido a la predicción de composiciones de torres de destilación en la Refinería de SARAS en Italia, o la predicción del punto de corte de

---

<sup>25</sup> Normalmente se emplea la ecuación sigmoide:

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$$

---

destilación de Nafta en una torre de crudo en la Refinería de Abu Dhabi (Wadi, 1996).

### **Métodos de calibración Multivariante, PCA, PCR, PLS**

Estos métodos constituyen una de las herramientas estadísticas fundamentales en la química analítica moderna. Sin embargo, no se han encontrado muchas referencias en cuanto a la utilización de estos métodos en el control inferencial de procesos en la industria petroquímica. Las características propias de estas técnicas matemáticas en cuanto a la inmunidad a la colinearidad, la interpretación de resultados, formulación matemática y la generación de modelos lineales, sugieren una mayor utilidad de estas técnicas en el control inferencial de procesos y en otras áreas relacionadas con el modelado de sistemas lineales. De ahí que se hayan elegido estas técnicas matemáticas como herramienta básica para abordar los distintos problemas que se presentan en este trabajo.

## **2.5. Cálculo de Incentivos**

Cualquier proyecto industrial exige un estudio de viabilidad, tanto desde el punto de vista técnico como económico. En este sentido, un proyecto de Control Avanzado no constituye una excepción. Un proyecto de control, utilizando la tecnología disponible en cada momento, debe recoger la viabilidad técnica de las propuestas (aplicaciones, equipos, nueva instrumentación) y, además, un estudio de los incentivos económicos que justifican su implantación.

El cálculo de los incentivos económicos de un Proyecto de Control puede ser complejo y se necesita alguna experiencia para encontrar aquellas oportunidades de mejora que fundamentan su realización. Estas oportunidades pueden ser tan variadas como la implantación de un *Sistema de Gestión Medioambiental* para el control de vertidos o el *Control y Optimización de una planta industrial*. En el primer caso el proyecto debe contemplar aspectos legislativos y en el segundo la obtención de beneficios vía reducción de los costes unitarios.

---

La instalación de un sistema de control disminuye la variabilidad de los principales parámetros. Normalmente, la medida de esta variabilidad se realiza en términos de desviación estándar, asumiendo al efecto que la dispersión de las medidas responde a una distribución normal.

La reducción en la variabilidad tiene que ser estimada (ya que en el momento del estudio aún no existen Aplicaciones implementadas), para lo cual existe en la bibliografía alguna información al respecto. Y dado que un sistema de control se apoya en distintos eslabones, se debe conocer qué parte de la reducción corresponde a cada nivel.

Con respecto al primer aspecto, el trabajo de Martin, Turpin y Cline (1991) sugiere cinco reglas para estimar los beneficios que se derivan por reducción en la desviación estándar de una medida. Con respecto al segundo aspecto, sería necesario conocer el efecto aislado de la instrumentación adicional (si existiese) y de cada tipo de tecnología que se aplique (Control básico, Control Estadístico de Procesos, Técnicas Inferenciales, Control Avanzado, Multivariable, Optimización, etc.). Además, cada proceso posee características especiales, inherentes a su propio diseño; véase, por ejemplo, algunos trabajos que relacionan el diseño de los equipos con la facilidad de controlarlos (Fruehauf, 1994).

Todo proyecto contiene los aspectos antes mencionados, de modo que es difícil separar sus componentes y tampoco existe abundante información al respecto; además, esta información suele tipificarse como estratégica por parte de las empresas. Ahora bien, a pesar de estos inconvenientes, diversas publicaciones recogen de forma general los resultados obtenidos en proyectos de Control Avanzado y Optimización<sup>26</sup>. Se ha encontrado asimismo varias formas de estimar la reducción en la variabilidad, si bien la mayoría de los autores la considera una fracción de la desviación estándar<sup>27</sup>.

---

<sup>26</sup> En cuanto a proyectos con la incorporación de medidas de control Inferencial, (Bullerdiel y Hoobs, 1995). Sobre Sistemas de Información y Control para refinerías, (Haskins, 1993). Sobre los beneficios en la aplicación de control estadístico de procesos y control de procesos, con especial énfasis a la determinación del beneficio a partir de la sensibilidad del precio a las especificaciones del producto final, (Latour, 1992).

<sup>27</sup> Los valores oscilan entre la mitad o la tercera parte del valor inicial.

---

En el Estudio de Incentivos del Proyecto de Control Avanzado de Refinería Tenerife se utilizó un caso interesante para analizar estos supuestos. Se asumió que la desviación estándar de los datos después de las Aplicaciones de Control sería la que correspondería al mejor 25% de una muestra de datos en control manual. O, lo que es lo mismo, se estimó que las Aplicaciones de Control Avanzado serían capaces de realizar durante el 100% del tiempo lo que con control manual se consigue en un 25% solamente (Shah, Macías, 1987). En la Fig. 11 se muestra gráficamente esta suposición para una muestra de datos reales de planta referente al punto de congelación del KNO.

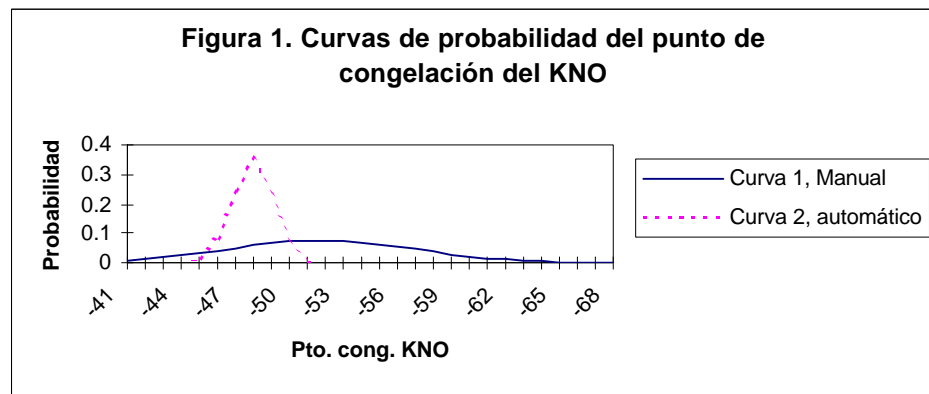


Fig. 11. Histograma, y distribución normal para el punto de congelación del KNO. Proyecto Control Avanzado, Refinería Tenerife, 1987.

**Capítulo 3**  
**OBJETIVOS DE LA PRESENTE**  
**INVESTIGACIÓN**

### 3. Objetivos de la Presente Investigación

Los objetivos que se pretenden en esta investigación se pueden agrupar en los siguientes apartados:

#### ***Desarrollar un programa que permita realizar calibración Multivariante PLS***

Este programa deberá permitir la generación de modelos a partir de distintos formatos de datos, en especial los que procedan de la Base de Datos de Planta y del Sistema de Control Avanzado de la Refinería Tenerife. Se desarrollarán los módulos necesarios para la recogida de datos en los ordenadores de Control y Gestión, y los programas que se precisen en el Ordenador Personal.

#### ***Estudio de la capacidad de predicción de los Modelos PLS frente a las Redes Neuronales***

Este objetivo se realiza en dos fases: primero, se estudia la capacidad de predicción de los modelos PLS y las Redes Neuronales con datos generados por medio de simulación; y, segundo, se realiza el mismo estudio esta vez con datos reales de Planta.

#### ***Estudio del comportamiento de un modelo estacionario PLS en la utilización en lazo abierto y cerrado para el control de calidad***

Estudio de la participación de un modelo por inferencia en una estrategia de control de calidad y los resultados económicos que se obtienen.

---

### ***Estudio de la utilización de Modelos estacionarios PLS como complemento a los Modelos de Simulación Rigurosa de Planta***

Se estudia la capacidad de predicción de modelos PLS como ayuda para el diseño de un modelo de Simulación Rigurosa de Planta, tanto respecto a la utilización *fuera de línea* como *en línea*.

### ***Estudio de la utilización de modelos de calibración PLS para la identificación de modelos dinámicos de procesos y su utilización en estrategias de Control Predictivo Multivariable***

Este estudio pretende evaluar la capacidad de la técnica de calibración Multivariante PLS para la identificación de procesos. Servirá de referencia otro programa comercial de identificación, utilizando tanto datos simulados como datos reales de Planta. Los modelos obtenidos se utilizarán en una aplicación de Control Multivariable Predictivo.

---

**Capítulo 4**  
**MODELADO Y CONTROL**



## 4. Modelado y Control

### 4.1. Introducción

La construcción de Modelos y el Control están en íntima relación. En toda Aplicación de control se puede encontrar de manera explícita o implícita un modelo de comportamiento del Sistema. Precisamente, el conocimiento de ese modelo es el que permite realizar su Control.

Esta actividad puede considerarse como una de las más importantes de la Ingeniería Química, pues permite la generalización del comportamiento de los Procesos y, por lo tanto, su Optimización y Control. En este trabajo nos centraremos en el modelado de modelos empíricos a partir de un grupo de variables de Proceso. Estos modelos se utilizarán para la determinación en línea de propiedades y su posterior uso para Control (Control por Inferencia), conexión de modelos rigurosos a Planta (predicción de rendimientos) y la construcción de sistemas lineales para Control Multivariable.

Las técnicas matemáticas que vamos a describir a continuación para la elaboración de los modelos se conocen como Calibración Multivariante. Constituyen una de las herramientas matemáticas de amplio uso en Química Analítica. En este trabajo abordaremos su aplicabilidad en aspectos de la Ingeniería Química Industrial, en especial a la predicción de propiedades y modelado dinámico.

Para que un grupo de datos pueda ser utilizado en la predicción de cualquier otra medida debe contener información útil sobre esa propiedad. Por lo tanto, debe existir una determinada correlación entre ambas propiedades.

---

## Términos estadísticos básicos utilizados

### Varianza y desviación estándar

Para un grupo de variables **x** y un grupo de variables **y** organizadas en las matrices **X** e **Y**, **X** será la matriz de variables cuyos valores servirán para predecir el comportamiento de las variables **Y**.

	X-variables				p
Muestras	X <sub>11</sub>	X <sub>12</sub>	...	...	X <sub>1p</sub>
	X <sub>21</sub>	X <sub>22</sub>	...	...	
	.	.	<b>X</b>	.	.
	.			.	.
	.			.	.
	.			.	.
n	X <sub>n1</sub>	...		...	X <sub>np</sub>

	Y-variables		q
	X <sub>11</sub>	...	X <sub>1p</sub>
	X <sub>21</sub>	...	
	.	<b>Y</b>	.
	.		.
	.		.
	.		.
n	X <sub>n1</sub>		X <sub>np</sub>

Fig. 12. Matrices X e Y, (Esbensen, 1996).

Se conoce como *varianza* a la medida de la extensión de los valores de una variable, o sea, a una medida del rango. La raíz cuadrada de la varianza se conoce como *desviación estándar*.

$$s^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})}{n - 1} \quad [ 5 ]$$

$$s = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n-1}} \quad [ 6]$$

Tanto la varianza como la desviación estándar se miden en las propias unidades de la variable a la que se refiere.

Se define como la *covarianza* entre dos variables  $\mathbf{x}_1$  y  $\mathbf{x}_2$  a la medida de su asociación lineal. Si los valores de  $\mathbf{x}_1$  aumentan y ocurre que los de  $\mathbf{x}_2$  aumentan o disminuyen, se dice que las variables  $\mathbf{x}_1$  e  $\mathbf{x}_2$  covarían positiva o negativamente. Esta dependencia será mayor cuanto mayor sea este número.

$$\text{cov}(x, y) = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{n-1} \quad [ 7]$$

y el *coeficiente de regresión*,  $\mathbf{r}$ , se calcula al dividir la covarianza entre la desviación estándar de cada variable. Al variar entre -1 y +1 se puede interpretar más fácilmente.

$$r = \frac{\text{cov}(x, y)}{s_x s_y} \quad [ 8]$$

$\mathbf{r}^2$  se conoce como la fracción de la varianza total que puede explicarse por medio de esa asociación.

Correlación es un concepto estadístico de una relación lineal. Por lo tanto no debe confundirse el que exista correlación entre valores y de verdad exista una relación causa - efecto entre ambas. Correlación y casualidad a veces se confunde.

Cuando se pretende determinar una variable en función de otras, obviamente debe existir algún tipo de relación entre ambas. Normalmente varias variables contribuyen de alguna manera a la definición de esa propiedad. Sólo en algunos casos esta propiedad dependerá de una sola variable.

Todas las variables de una muestra de datos puede que no aporten información relevante para la medida que se desea inferir. Más aún,

dentro de las variables que se correlacionan se ha de distinguir las estructuras de datos, es decir, las verdaderas relaciones entre las variables y el resto de información o ruido.

Según este punto de vista, se considera como Ruido toda aquella información que no explique directamente los resultados experimentales por la variable que se desea predecir.

$$Medida = Estructura + Ruido \quad [ 9]$$

El análisis multivariante se utiliza para separar ambas partes, «Estructura» y «Ruido». Dentro de este campo se puede diferenciar entre *estadística multivariante*, que está interesada en la parte no explicada de las regresiones o ruido, y el *análisis de datos multivariante*, interesado en la parte estructural de los datos. En este trabajo estudiaremos los métodos de análisis de datos multivariante, ya que el principal propósito del estudio es la predicción de variables basándose en la «estructura» de los datos.

En las páginas que siguen se introducirán los métodos de Análisis de Componentes Principales (PCA), Mínimos Cuadrados Parciales (PLS) y Regresión de Componentes Principales (PCR), que servirán de base matemática a buena parte de todo lo que en este trabajo se desarrolla. Los métodos de proyección PCA, PCR, y PLS se conocen con el nombre de métodos bilineales o métodos multivariantes.

## **4.2. PCA, análisis de componentes principales**

Sea una matriz de datos  $\mathbf{X}$  compuesta por  $\mathbf{n}$  objetos y  $\mathbf{p}$  variables, por lo tanto  $\mathbf{n} \times \mathbf{p}$ , que llamaremos matriz de datos o simplemente *datos*, Fig. 12. Los objetos  $\mathbf{n}$  pueden ser observaciones, muestras, experimentos, etc., mientras que las variables  $\mathbf{p}$  pueden ser determinaciones, instrumentos, atributos, etc. El propósito del Análisis de Componentes es descomponer las muestras de datos para detectar los fenómenos que a primera vista no parecen evidentes.

Una de las suposiciones fundamentales en el análisis de datos multivariante es que las direcciones de máxima varianza están

---

---

directamente relacionadas con las estructuras latentes o grados de libertad entre las variables estudiadas.

Los datos se pueden representar en un eje cartesiano (por lo tanto ortogonal) de  $p$  dimensiones. El espacio dimensional expresado anteriormente se conoce como **espacio de variables** y por lo tanto posee  $p$  dimensiones (Fig. 13. ).

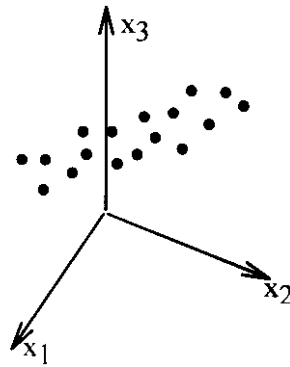


Fig. 13. Espacio de variables, 3 dimensiones. Tomado de Esbensen (1996).

Suponiendo que existan 3 variables, es posible representar tres ejes de coordenadas. En el ejemplo de la Fig. 13, se puede observar que existe una dirección de máxima varianza a lo largo de un eje imaginario que ordena la nube de puntos. Esta dirección posee la máxima varianza de los datos y representa el *primer componente*. Por lo tanto, el *primer componente principal* se expresa por la dirección de máxima varianza de la serie de datos.

---

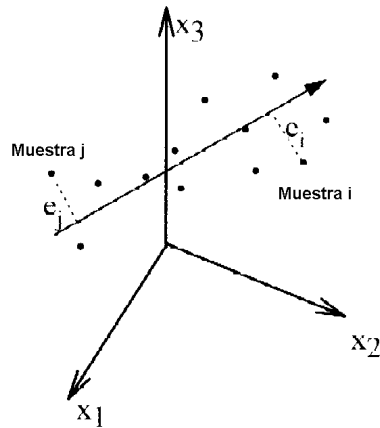


Fig. 14. Cálculo del componente principal, por proyección.

Desde un punto de vista matemático, el eje de máxima varianza o primer componente principal se obtiene a partir de ajuste por mínimos cuadrados de las distancias de los puntos al eje (Fig. 14). Se proyecta cada punto perpendicularmente hacia esta línea imaginaria. La distancia perpendicular de ese punto u objeto se llama residuo  $e_i$ . Se pretende encontrar la línea que minimiza la suma de los cuadrados de esas distancias ( $\sum e_i^2$ ). En realidad, los dos criterios para encontrar esta línea significan lo mismo.

Suponiendo que los datos no son tan simples como se han representado en la Fig. 13, puede existir, después de haber obtenido el primer componente principal, alguna otra dirección perpendicular a la anterior o anteriores donde la varianza sea máxima. Este procedimiento se puede repetir obteniendo nuevos componentes, que serán ortogonales entre sí y todos en la dirección de máxima varianza de cada uno de los residuos obtenidos.

Finalmente, el sistema dispondrá de una nueva serie de coordenadas, ortogonales entre sí y que por lo tanto no estarán correlacionadas (linealmente independientes). Este serie de coordenadas se conoce como el *espacio de componentes principales*.

La principal propiedad que posee este sistema de nuevas coordenadas es que las variables no covarían y puede sustituirse el espacio de variables

por el espacio de componentes. Se trata, pues, de un sistema intrínsecamente desacoplado<sup>28</sup>.

Un modelo de componentes principales define aquella aproximación a una matriz  $\mathbf{X}$  de datos que puede sustituirla y cuyas variables entre sí no covarían.

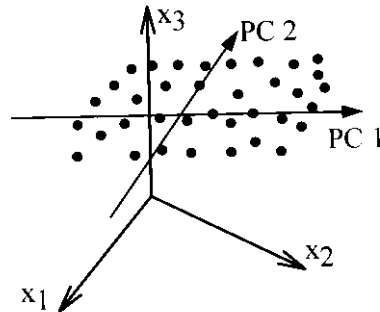


Fig. 15. Sistema con tres variables y dos componentes principales.

En la Fig. 15 se muestra un ejemplo con tres variables y los datos que en ella se representan poseen sólo dos componentes principales. El grupo de datos que parece estar distribuido en tres dimensiones es en realidad un plano con dos ejes. Existen, según esta aproximación, sólo dos grados de libertad en ese Sistema.

Se podía continuar encontrando nuevas direcciones de máxima varianza, aunque probablemente en ese caso sólo se modela el ruido de los datos y no su estructura. Por lo tanto, existe un número **óptimo** de componentes para representar toda la variabilidad de los datos y aislar el ruido de la estructura.

El número máximo de componentes principales puede derivarse del tamaño de la matriz de datos  $\mathbf{X}$ . El número máximo será el menor de  $n$  (número de muestras) o  $p$  (número de variables). Desde un punto de vista matemático, se trata de pasar de un sistema espacial de dimensión  $p$  a un sistema de componentes principales  $PC$ .

<sup>28</sup> El desacoplo que intrínsecamente tiene un espacio de componentes principales se ha usado por algunos autores para el modelado dinámico y creación de sistemas de control desacoplados, (Kaspar, 1993).

Como los componentes se obtienen a partir de direcciones de máxima varianza en el residuo que queda después de cada componente, el primero de ellos representa la estructura de datos más importante y los sucesivos tienen varianzas cada vez más pequeñas, mientras que el último componente tendrá mucha menos información de la estructura de los datos y mucho más del ruido.

### **Tratamiento de los datos**

#### **Centrado de las variables**

En calibración Multivariante se elige como origen del cual parten las direcciones de máxima variación o componentes arbitrariamente la media de los datos de la Muestra (Fig. 16).

$$(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_3, \dots, \bar{x}_n) \quad [ 10 ]$$

donde

$$\bar{x}_i = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n} \quad [ 11 ]$$

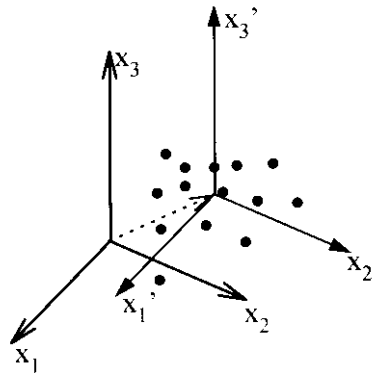


Fig. 16. Cambio de coordenadas utilizando media y proyección de 2 componentes principales.

El nuevo origen del espacio de los componentes principales es una traslación del origen en el espacio de las variables hacia el centro de la nube de puntos.



## Escalado o estandarización

Se conoce como la operación de asignar numéricamente una serie de pesos a cada variable para que al minimizar los errores de las proyecciones de cada objeto sobre los componentes tengan el mismo valor estadístico.

Por ejemplo, si la temperatura de cabeza de una columna de destilación varía cinco grados, se pueda hacer coincidir con la variación de 400kg/h del calentador de fondo de la Torre. En definitiva, se trata de asignar el escalado (cambio de unidades) y el peso de cada variable en la construcción del modelo. Esta operación afecta indudablemente a la calidad del modelo obtenido.

Normalmente, en la mayoría de los análisis el escalado se realiza con relación a la desviación estándar de la muestra de datos.

$$x_{ik}^{scaled} = x_{ik} \frac{1}{s_k} \quad [ 12]$$

De esta manera, todas las variables contienen la misma varianza y el mismo peso estadístico en la correlación.

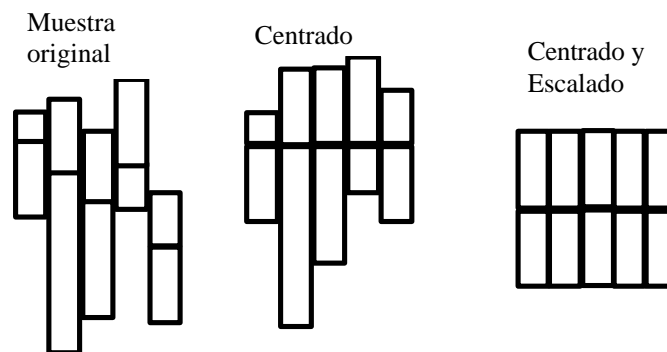


Fig. 17. Efecto del centrado con la media y escalado con el recíproco de la desviación estándar.

## «Loadings» o vectores, relación entre X y PC

Debido al método de cálculo, los componentes principales son

vectores escalados a varianza unidad en el espacio de las variables. Esto significa que se pueden representar como una combinación lineal de  $p$  vectores del espacio de las variables (vectores a lo largo de cada eje en el espacio de las variables). La combinación de cada componente contendrá  $p$  coeficientes, uno por cada variable.

Se nombran como  $p_{ia}$ , donde  $i$  es el índice de la variable en el espacio de  $p$  variables y  $a$  es el número de componente principal. Por lo tanto, el coeficiente  $p_{23}$  representa el vector perteneciente a la segunda variable y al tercer componente.

Estos coeficientes se llaman *loadings* y existe un total de  $p \times a$  valores ( $p$  variables y  $a$  componentes). El conjunto de todos ellos constituye la matriz  $P$ , que indica la relación existente entre la matriz original de valores y la representación en el espacio de componentes principales.

### **«Scores», coordenadas de los datos en el espacio de componentes principales**

Los componentes principales son el resultado de las proyecciones de cada objeto sobre el vector de máxima varianza. A cada una de estas proyecciones, distancias desde el objeto al componente principal, se conoce con el nombre de «scores» o coordenadas. El «score»  $t_{ia}$  es la coordenada que representa al objeto  $i$  en el componente  $a$ . De esta manera, existirá para una muestra de  $n$  objetos,  $n \times a$  coordenadas. El conjunto de todos estos vectores constituye la matriz  $T$ , que también es ortogonal.

---

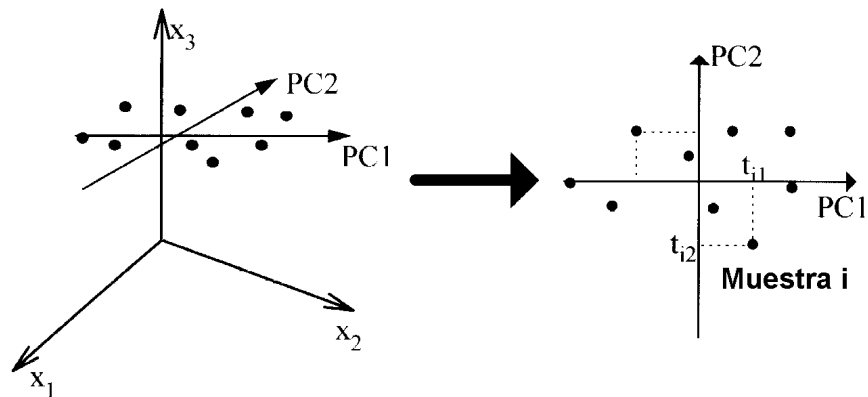


Fig. 18. Representación de «Scores» como coordenadas en espacio de componentes.

El objetivo de PCA es la sustitución de la representación de los objetos en el espacio de variables de dimensión  $\mathbf{p}$  por la de componentes principales de dimensión  $\mathbf{a}$ .

### **Residuos de cada muestra**

En la sustitución del espacio de las variables por el espacio de los componentes principales se minimizaban los residuos de cada muestra (distancias  $e_i$ ). Los valores que quedan después de la construcción de todos los componentes representan Ruido o Información perdida. Si estos valores son altos en relación con los originales, la representación en el espacio de componentes principales no es adecuada.

### **Mapas de coordenadas «Score Plots»**

Una de las representaciones más importantes de los métodos basados en componentes principales son los diagramas de coordenadas («scores»). Se realizan simplemente representando los valores de las coordenadas de cada componente entre sí.

Aunque el espacio de componentes es multidimensional no es posible representar más de 2 o 3 componentes cada vez.

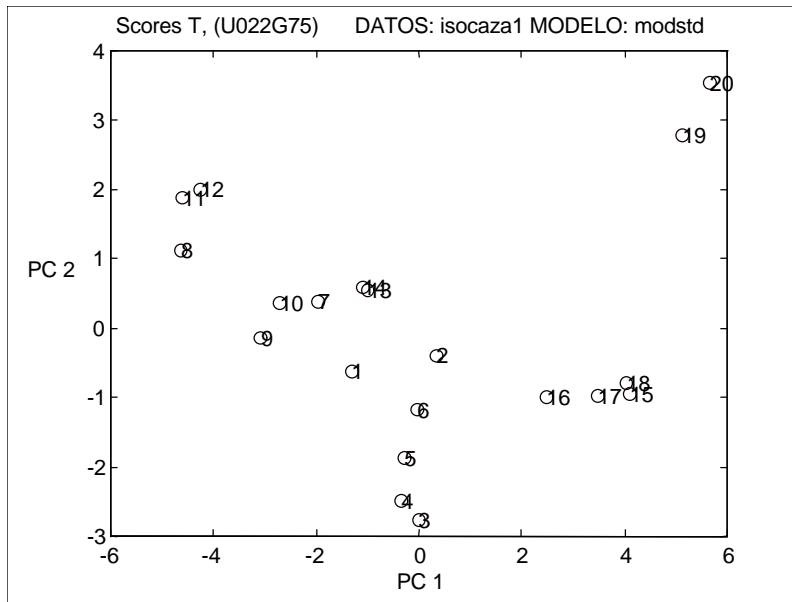


Fig. 19. Diagrama de coordenadas, «scores», en el espacio de componentes.

Teniendo en cuenta que el espacio de estado ha sido construido a partir de las direcciones de máxima varianza en los datos, los primeros componentes serán los más importantes. Se suele representar la familia de componentes que explica la mayor parte de la varianza de la muestra.

### **Interpretación del diagrama de coordenadas en el espacio de componentes («score plot»)**

La posición que ocupan las muestras en el diagrama de coordenadas respecto al resto es una indicación de la pertenencia o no de esa muestra al resto de los valores. Sugiere además la importancia que esa muestra tiene con respecto a cada componente.

En el eje de abscisas se colocará el componente que manifiesta la máxima relevancia frente al problema estudiado (cuando la matriz  $\mathbf{Y}$  contiene una sola variable, siempre es **PC1**) y sucesivamente se representa en las ordenadas el resto de los componentes.

### **Interpretación del diagrama de vectores (*loadings*)**

El diagrama de vectores o *loadings* corresponde a la relación entre el

espacio de las variables iniciales y el espacio de los componentes principales. Al igual que ocurre en el caso del diagrama de coordenadas, se utilizan las mismas reglas para la elección de la abscisa y las ordenadas. En este caso no se representan muestras u objetos sino variables o, mejor dicho, los pesos de esas variables en el espacio de componentes principales.

El mapa de vectores o pesos indica qué parte de una variable contribuye a cada componente principal. Cada peso es el coeficiente de la combinación lineal de las variables para generar cada componente; por lo tanto, una variable lógicamente puede contribuir a más de un componente.

Cuando el número de variables es muy extenso y representan la medida de una misma magnitud, es preferible construir el diagrama de vectores en una sola dimensión. Por ejemplo, en cromatografía, espectrofotometría infrarroja, perfiles de temperatura en torres de destilación, etc.

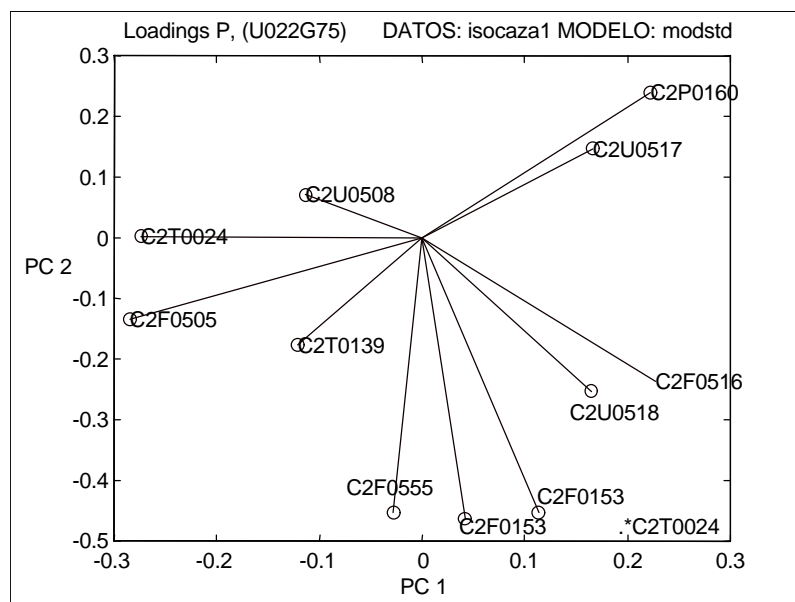


Fig. 20. Diagrama de pesos de las variables, «loadings», en el espacio de componentes.

## Comparación entre los diagramas de vectores y de coordenadas

*Variables y objetos situados en la misma región en los diagramas de vectores y coordenadas representan la misma información.* Esto permite seleccionar el número de objetos y variables que explican mejor una determinada estructura (Fig. 19 y Fig. 20).

## Construcción del modelo de componentes principales

### **Modelo de componentes**

El conjunto de datos se descompone en el modelo de componentes principales o estructura de los datos y en la parte no explicada de los mismos, denominada *residuo, error o ruido*.

$$X = T P' + E = \mathbf{Estructura} + \mathbf{Ruido} \quad [ 13]$$

El modelo de componentes principales es el resultado del producto de los vectores o pesos  $\mathbf{P}$  de cada variable en el espacio de componentes por las proyecciones de los distintos datos sobre esos componentes  $\mathbf{T}$ .

### **Algoritmo de construcción del modelo. NIPALS**

Existen dos métodos para obtener los componentes principales: el método NIPALS (Mínimos cuadrados iterativos no lineales) y el SAO (ortogonalización media sucesiva). El primero de ellos es el más utilizado y el que se emplea en este trabajo. El segundo es más rápido, pero menos frecuente.

NIPALS descompone de forma iterativa la matriz de datos en una serie de vectores y coordenadas,

---

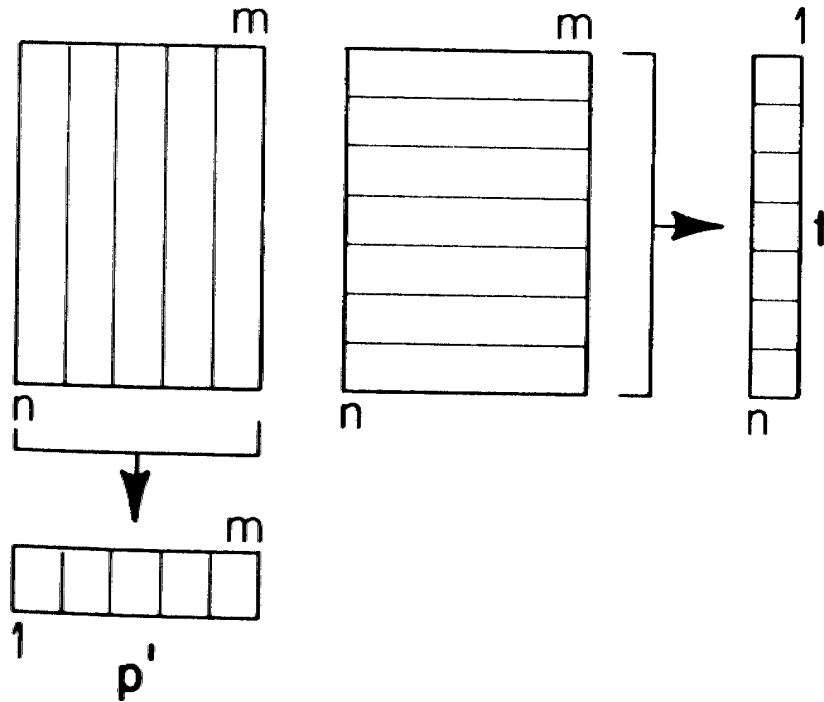


Fig. 21. Descomposición de la matriz  $\mathbf{X}$ .

1. - Se selecciona una columna de  $\mathbf{X}$ , la primera vez de forma arbitraria (primer componente) y el resto de ocasiones la que tenga el máximo error  $\mathbf{E}$  ( $\sum e_i^2$ ). Siendo  $h$  el número de componente a extraer.
2. - Se estima el vector  $p_h$ .

$$p_h = \frac{t'_h X}{t'_h t_h} \quad [ 14]$$

3. - Se normaliza  $p_h$  a 1.

$$p_{h,new} = \frac{p_{h,old}}{\|p_{h,old}\|} \quad [ 15]$$

4. - Se calcula las coordenadas para ese componente, a partir de los vectores  $\mathbf{p}$ .

$$t_h = \frac{X p t_h}{p'_h p_h} \quad [ 16]$$

5. - Se compara las coordenadas utilizadas en el paso número 2 con las que se obtiene en el paso número 4. Si son las mismas, el componente está calculado; en caso contrario, se debe volver al paso 2.

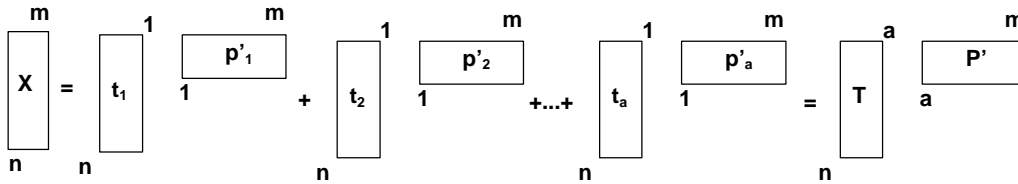


Fig. 22. Diagrama de la descomposición de la Matriz de Datos o residuos en su componente.

6. - Para calcular el siguiente componente, se calcula el residuo que queda y se vuelve al paso número 1.

$$E_h = E_{h-1} - t_h p'_h \quad [ 17]$$

### **Número de componentes.**

Previamente se dijo que el máximo número de componentes que podía tener un modelo era el mínimo del número de valores o de variables. Normalmente, éste no es el valor óptimo, ya que las variables suelen tener cierta covarianza entre ellas<sup>29</sup>, motivo por lo cual este número debe ser necesariamente menor.

La determinación del número óptimo de componentes constituye la diferenciación entre la estructura de los datos y el ruido. El estudio de la matriz de los residuos obtenidos cada vez que se calcula un nuevo componente sirve para la determinación de ese número.

Los residuos se estudian en dos direcciones. Por un lado se calcula *el residuo de cada muestra*,

<sup>29</sup> Este precisamente es el motivo principal por el que se usan estos métodos.



$$e_i^2 = \sum_{k=1}^p e_{ik}^2 \quad [ 18]$$

y el *residuo total de muestras*

$$e_{total}^2 = \sum_{i=1}^n e_i^2 \quad [ 19]$$

Por otro, el *residuo de cada variable*,

$$e_k^2 = \sum_{i=1}^n e_{ik}^2 \quad [ 20]$$

y el *residuo total de las variables*,

$$e_{total,v}^2 = \sum_{k=1}^p e_k^2 \quad [ 21]$$

Residuo total de muestras y Residuo total de variables debe coincidir.

El *residuo de cada muestra* se emplea para la detección de valores erróneos y el *residuo de cada variable* para determinar qué variables contribuyen menos al modelo. El *residuo total* indicará el número de componentes a utilizar.

Si se representan los residuos totales frente al número de componentes del modelo se observa una variación como la Fig. 23. El número de componentes deberá ser el primer punto de inflexión en la representación de los residuos totales. Si se utilizan más componentes no se reduce sensiblemente la varianza; por el contrario, se corre el riesgo de modelizar el error. En el ejemplo de la Fig. 24 con un componente la varianza se redujo 58%, el segundo componente redujo un 11% adicional y el tercer componente lo hizo sólo un 6%.

---

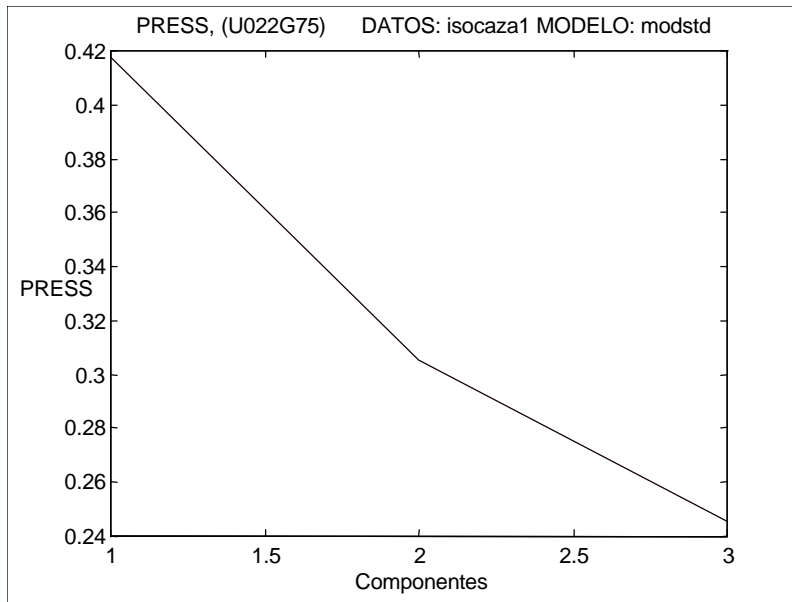


Fig. 23. Variación del Error total frente al número de componente del modelo.

### 4.3. Calibración Multivariante, LR, MLR, PCR, PLS

El objetivo de los métodos de calibración multivariante es realizar predicciones basadas en una serie de datos  $\mathbf{X}$  para calcular los valores esperados  $\mathbf{Y}$ . En PCA el objetivo era conocer las estructuras internas que relacionaban los datos de una muestra  $\mathbf{X}$ . El modelo de estas relaciones se expresaba en términos de vectores o pesos  $\mathbf{p}$  y de coordenadas  $\mathbf{t}$ .

En la calibración multivariante existen dos matrices,  $\mathbf{X}$  e  $\mathbf{Y}$ . Esta última se conoce como la matriz de variables dependientes y  $\mathbf{X}$  como la de variables independientes. Un modelo multivariante es la regresión entre los valores empíricos  $\mathbf{X}$  e  $\mathbf{Y}$ .

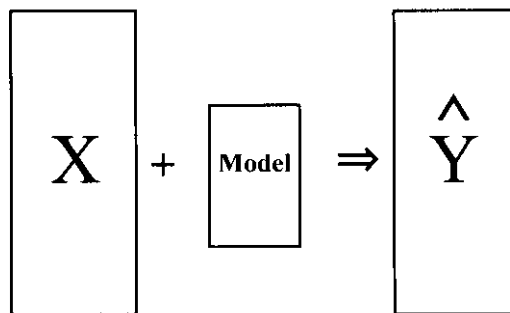
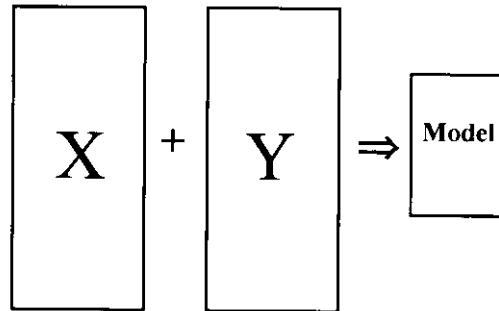


Fig. 24. Modelado y Predicción.

Una vez obtenido el modelo, a partir de nuevos valores  $X$  es posible realizar predicciones sobre  $Y$ . La calidad del modelo obtenido es de vital importancia para predecir el comportamiento esperado de los valores calculados, frente a los que realmente tiene las nuevas muestras. Esta determinación se realiza mediante *validación* en la propia construcción del modelo.

## Validación

Consiste en someter parte de los datos para los que se conoce el valor de  $Y$  a las predicciones del modelo. Estos datos no se han utilizado en la construcción del modelo original. De ahí que de la muestra de datos original se separen dos grupos de datos, uno para modelar y otro para validar. Atendiendo a la forma elegir el grupo de datos de validación se distingue:

---

## Validación cruzada

Esta técnica selecciona todos los datos menos uno o un grupo reducido de ellos, luego calibra y calcula el error encontrado entre los datos de validación. Se intercambia el o los datos de validación por otro grupo de ellos y se repite el procedimiento tantas veces como sea necesario, hasta que todos los datos hayan pasado por validación.

**Validación cruzada completa.** En una muestra de datos, por ejemplo, de 150 valores, si se toma de **uno en uno**, sería necesario realizar 149 modelizaciones para cubrir todo el espectro de datos.

**Validación cruzada parcial.** Una forma de disminuir el número de modelizaciones es dividir la muestra de datos en grupos de un porcentaje determinado cada uno y aplicar la misma mecánica expresada anteriormente. El número de veces que es necesario calibrar dependerá del porcentaje elegido.

Si tenemos en cuenta que en la validación cruzada el error de predicción se ha calculado a partir del grupo de datos de validación, que es un subconjunto de los datos originales, el error que se minimiza es la varianza del modelo. El comportamiento de estas predicciones en otras condiciones puede no ser el esperado.

## Validación con un nuevo grupo de datos, X e Y

En este caso se trata de utilizar un nuevo grupo de datos, obtenidos en distinto momento pero de iguales características al grupo utilizado para el modelado. Si tienen idénticas características, la única variación es la introducida por el momento del muestreo y, por lo tanto, será la situación más parecida al comportamiento real del modelo. Sin embargo, no siempre es fácil encontrar dos grupos de datos de idénticas características. En esos casos, se puede utilizar la validación cruzada.

## Corrección por «Nivelación»

Si se utiliza el mismo grupo de datos para modelizar que para validar, se obtienen valores muy optimistas, ya que el ruido puede quedar

---

incorporado al modelo. Esto es básicamente lo que se hace en este método, con la salvedad que el valor de la varianza obtenida se penaliza con un factor «leverage», que es función de las características de la muestra de datos.

Se calcula la distancia de cada objeto al centro del modelo,

$$h_i = \frac{1}{n} + \sum_{a=1}^A \frac{t_{ia}^2}{t_a^T t_a} \quad [ 22]$$

y se corrige cada residuo según la distancia a la que se encuentre del centro del modelo, ponderando de forma negativa los cercanos y positivamente los más alejados.

$$f_{ij}^{corregido} = \frac{f_{ij}}{1 - h_i} \quad [ 23]$$

Esta validación se puede emplear como método inicial, pero no es aconsejable cuando se desean obtener valores fiables, que se deben validar con un nuevo grupo de datos.

## Métodos de Regresión

### *Regresión Linear, LR. Regresión Univariante*

Regresión lineal simple (véase pág. 51) y regresión univariante es lo mismo.

### *Regresión linear Múltiple, MLR*

Este es el método clásico para combinar una serie de variables  $\mathbf{X}$  en una expresión lineal que se correlacionan con  $\mathbf{Y}$ . En *MLR* el tratamiento matemático es una extensión de *LR* para múltiples variables  $\mathbf{X}$  e  $\mathbf{Y}$ .

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \dots + b_n x_n + f \quad [ 24]$$

o bien en notación matricial

$$y = \mathbf{X}b + f \quad [ 25]$$

y la minimización del término de error  $\mathbf{f}$  para calcular los coeficientes  $\mathbf{b}$  lleva a la expresión

$$\hat{\mathbf{b}} = \frac{\mathbf{X}'\mathbf{y}}{\mathbf{X}'\mathbf{X}_h} \quad [ 26]$$

El método MLR puede fallar si en los datos se presenta:

1. - Colinearidad
2. - Errores en X o ruido
3. - Más variables que muestras
4. - Interferencia

### **Colinearidad**

Colinearidad implica que las variables X están interrelacionadas, por ejemplo,  $x_1 = f(x_2, x_3, \dots, x_n)$ .

Si existe colinearidad entre  $x_1$  y  $x_2$ , la variación en el plano  $X_1, X_2$  puede ser mayor que con respecto a la variable y; por lo tanto, es difícil estimar como varía Y para pequeñas variaciones de X (Fig. 25). La solución, de obtenerse, es inestable y dependerá fuertemente de las características de otro grupo de datos.

---

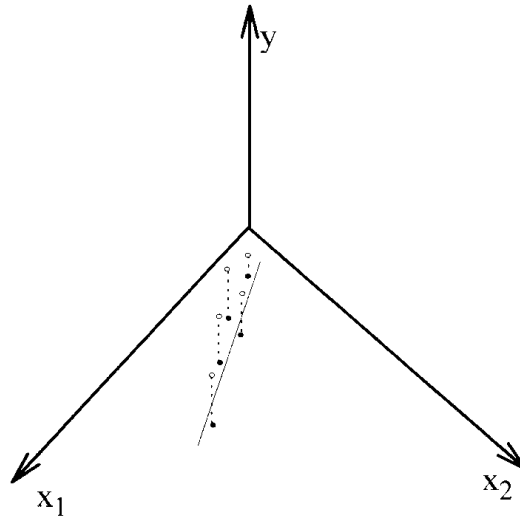


Fig. 25. Ejemplo de Colinealidad en el espacio de  $X$ .

Los métodos de calibración multivariante (Métodos bilineales) precisamente utilizan esta información para obtener una solución estable.

### **Regresión de componentes principales, PCR**

Básicamente **PCR** se basa en la realización de un modelado PCA en las variables  $\mathbf{X}$ , es decir  $X = T P' + E$ .

A partir de la solución de coordenadas en el espacio de estado se realiza una *MLR* con las variables  $\mathbf{y}$ .

$$y = T b + e \quad [ 27 ]$$

la solución ahora es estable y el valor de  $\mathbf{y}$  se puede poner en función de  $\mathbf{X}$  a partir de los vectores  $\mathbf{P}$  del espacio de componentes.

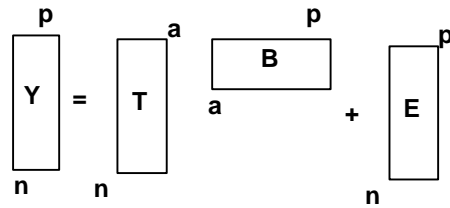


Fig. 26. Representación geométrica de PCR

Aunque **PCR** está formado por dos técnicas muy establecidas, tiene serias limitaciones. Al ser un proceso en dos etapas (primero la construcción del modelo **PCA** y luego la **MLR** entre las coordenadas en el espacio de componentes y las variables **y**), no hay conexión entre la elección del número óptimo de componentes para **PCA** y la predicción de **y**. Es decir, se asume que los datos y los componentes elegidos son válidos para la predicción de **y**, y esto no siempre ha de cumplirse.

Las estructuras obtenidas en **PCA** (a partir de máxima varianza) no han de coincidir necesariamente con la máxima varianza en la predicción de **y**. Esta estructura puede no ser relevante para el cálculo de **y**. Si para garantizar que aparecen estructuras relacionadas con **y** se aumenta el número de componentes se corre el riesgo de ajustar el ruido de la matriz **X** y, por lo tanto, **PCR** deja de tener una solución estable.

### **Regresión por mínimos cuadrados parciales o proyección de estructuras latentes, PLS**

La principal contribución de **PLS** radica en la participación de las estructuras latentes en **y** para el cálculo del modelo, que precisamente era una de las limitaciones en **PCR**.



$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{ccc}
 \begin{array}{|c|} \hline \mathbf{X} \\ \hline \end{array} & = & \begin{array}{|c|} \hline \mathbf{T} \\ \hline \end{array} \\
 \begin{array}{c} m \\ n \end{array} & & \begin{array}{c} a \\ n \end{array}
 \end{array}
 + \begin{array}{ccc}
 \begin{array}{|c|} \hline \mathbf{P}' \\ \hline \end{array} & & \begin{array}{|c|} \hline \mathbf{E} \\ \hline \end{array} \\
 \begin{array}{c} m \\ a \end{array} & & \begin{array}{c} p \\ n \end{array}
 \end{array}
 \end{array}$$
  

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{ccc}
 \begin{array}{|c|} \hline \mathbf{Y} \\ \hline \end{array} & = & \begin{array}{|c|} \hline \mathbf{U} \\ \hline \end{array} \\
 \begin{array}{c} p \\ n \end{array} & & \begin{array}{c} a \\ n \end{array}
 \end{array}
 + \begin{array}{ccc}
 \begin{array}{|c|} \hline \mathbf{Q}' \\ \hline \end{array} & & \begin{array}{|c|} \hline \mathbf{F} \\ \hline \end{array} \\
 \begin{array}{c} p \\ a \end{array} & & \begin{array}{c} p \\ n \end{array}
 \end{array}
 \end{array}$$

Fig. 27. Representación geométrica de PLS

**PLS** utiliza la estructura de datos y la varianza de  $\mathbf{y}$  como la fuerza impulsora de la regresión. Se puede considerar que **PLS** está constituido por dos relaciones exteriores **PCA** (vectores  $\mathbf{W}$ ,  $\mathbf{P}$  y coordenadas  $\mathbf{T}$  para  $\mathbf{X}$  y vectores  $\mathbf{Q}$  y coordenadas  $\mathbf{U}$  para  $\mathbf{Y}$ ).

$\mathbf{P}$  y  $\mathbf{Q}$  son los vectores y  $\mathbf{T}$  y  $\mathbf{U}$  son las coordenadas estudiadas en **PCA**. **PLS** conecta ambas relaciones exteriores con una relación interior entre las coordenadas  $\mathbf{U}$  y  $\mathbf{T}$ .

La mecánica de obtención de los coeficientes, plasmados en el algoritmo que se describe a continuación, asegura que las estructuras identificadas contienen la máxima varianza con respecto a  $\mathbf{Y}$ ; por lo tanto, no tiene las limitaciones identificadas en el epígrafe sobre **PCR**.

### Algoritmo PLS

Se asume que las matrices  $\mathbf{X}$  e  $\mathbf{Y}$  han sido centradas y escaladas convenientemente.

1. - Se inicia el valor de  $\mathbf{u}$  de forma arbitraria con alguna columna de  $\mathbf{Y}$ .

2. - Bloque X, se calcula el valor de  $\mathbf{w}$

$$w' = \frac{u' X}{u' u} \quad [ 28]$$

3. - Se normaliza  $w_h$  a 1.

$$w_{h,new} = \frac{w_{h,old}}{\|w_{h,old}\|} \quad [ 29]$$

4. - Se calcula las coordenadas para  $\mathbf{X}$ .

$$t_h = \frac{X w_h}{w'_h w_h} \quad [ 30]$$

5. - Bloque Y, se calcula el vector  $q_h$ .

$$q_h = \frac{t'_h Y}{t'_h t_h} \quad [ 31]$$

6. - Se normaliza  $q_h$  a 1.

$$q_{h,new} = \frac{q_{h,old}}{\|q_{h,old}\|} \quad [ 32]$$

7. - Se calcula el nuevo valor de  $\mathbf{u}$  a partir de los valores obtenidos para  $\mathbf{q}$ .

$$u_h = \frac{Y q_h}{q'_h q_h} \quad [ 33]$$

8. - Comprobación de convergencia. Se compara las coordenadas utilizadas en el paso número 4 con las que se obtuvieron en la iteración anterior. Si son las mismas se puede continuar; en caso contrario, se debe volver al paso 2.

9. - Se calcula el vector  $p_h$ .

$$p_h = \frac{t'_h X}{t'_h t_h} \quad [ 34]$$

---

10. - Se normaliza  $p_h$  a 1.

$$p_{h,new} = \frac{p_{h,old}}{\|p_{h,old}\|} \quad [ 35]$$

11. - Se calcula las coordenadas para ese componente, a partir de los vectores  $\mathbf{p}$ .

$$t_h = \frac{t_{old,h}}{\|p_{old,h}\|} \quad [ 36]$$

12. - Se calcula el valor de  $w_h$ .

$$w_{h,new} = \frac{w_{h,old}}{\|w_{h,old}\|} \quad [ 37]$$

13. - Los coeficientes de regresión  $b$  serán

$$b_h = \frac{u'_h t_h}{t'_h t_h} \quad [ 38]$$

14. - Cálculo de los Residuos para iniciar el cálculo del siguiente componente. Tomando para  $E_0 = X$

$$E_h = E_{h-1} - t_h p'_h \quad [ 39]$$

$$F_h = F_{h-1} - b_h t_h q'_h \quad [ 40]$$

15. - Vuelta al paso número 1 para calcular los siguientes componentes. Después del primer componente, se sustituye tanto  $\mathbf{X}$  por el residuo  $\mathbf{E}$ , como  $\mathbf{Y}$  por  $\mathbf{F}$ , obtenidos en el paso 14.

Aunque con este algoritmo se pueden ajustar varias variables  $\mathbf{Y}$  simultáneamente<sup>30</sup>, cuando en la matriz  $\mathbf{Y}$  existe una sola variable se simplifican los pasos anteriores<sup>31</sup>, ya que siempre  $\mathbf{q} = 1$ .

<sup>30</sup> Este algoritmo se conoce como *PLS2*.

<sup>31</sup> Se conoce como *PLS1*

## Interpretación

Los modelos *PLS* se interpretan de la misma manera que se hace en *PCA*. En este caso el interés está principalmente en la varianza de *Y*, ya que ésta ha sido la fuerza impulsora del algoritmo.

Existen dos clases de vectores en *PLS* para *X*, los vectores *P* y *W*. Los primeros tienen el mismo significado que en *PCA*; representan la relación entre la matriz de datos *X* y sus coordenadas *T*. La diferencia entre ambos vectores estriba en que se han calculado por *PLS* y por lo tanto los valores no han de seguir las mismas pautas de varianza de *PCA*.

La matriz *W* manifiesta la relación efectiva o peso entre *X* e *Y*. Con respecto a *P*, pueden tener distintos valores y direcciones o signos.

La interpretación de *W* servirá para estudiar la influencia de cada variable en la construcción de la relación entre *X* e *Y*, al igual que se hacía en la matriz *P* para *PCA*.

Una vez obtenido los coeficientes, es posible componer todas las matrices de vectores para obtener una relación de la forma  $Y = BX$  que permita calcular más fácilmente valores de *Y* a partir de *X*. Esto simplifica enormemente la construcción de los modelos. El vector *B* se calcularía de la manera siguiente:

$$B = W (P^T W)^{-1} Q^T \quad [ 41]$$

## Medidas de error

A continuación se describen las medidas que se utilizan para evaluar la parte no modelizada del grupo de datos, tanto para calibración como para validación.

### Varianza de Calibración

Se calcula como la varianza de los errores de modelado, siendo  $\hat{y}_{cal}$  la predicción para el conjunto de datos  $x_{cal}$ , e  $y_{cal}$  los valores originales.

---

$$s_{cal}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_{cal} - y_{cal})^2}{n} \quad [ 42]$$

y la raíz cuadrada de este valor viene a ser la desviación estándar de los errores de calibración<sup>32</sup>.

$$RMSEC = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_{cal} - y_{cal})^2}{n}} \quad [ 43]$$

### Varianza de Validación.

Se calcula como la varianza de los errores de modelado, siendo  $\hat{y}_{val}$  la predicción para el conjunto de datos  $x_{val}$ , e  $y_{val}$  los valores originales.

$$s_{val}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_{val} - y_{val})^2}{n} \quad [ 44]$$

y la raíz cuadrada de este valor viene a ser la desviación estándar de los errores de validación<sup>33</sup>.

$$RMSEP = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_{val} - y_{val})^2}{n}} \quad [ 45]$$

### BIAS

**BIAS** es la diferencia media entre las predicciones y las medidas reales de Y para el grupo de Validación. Se puede utilizar también como una medida de la exactitud del modelo. Hay que tener en cuenta que si **BIAS** es distinto de cero, implica que hay una diferencia sistemática entre los datos utilizados en la construcción del modelo (calibración) y los que se utilizan en la validación<sup>34</sup>.

<sup>32</sup> RMSEC, "Root Mean Square Error of Calibration".

<sup>33</sup> RMSEP, "Root Mean Square Error of Prediction".

<sup>34</sup> Obviamente, el BIAS calculado para los datos de calibración por propia definición, es cero.

$$BIAS = \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_{val} - y_{val})}{n} \quad [ 46]$$

**SEP<sup>35</sup>**

La desviación estándar del error esperado en los nuevos datos (**SEP**) se calcula teniendo en cuenta la desviación estándar de validación y la corrección por la media en los datos (**BIAS**).

$$SEP = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_{val} - y_{val} - BIAS)^2}{n}} \quad [ 47]$$

**PRESS**

El cuadrado de la suma de los errores se calcula como

$$PRESS = \sum_{i=1}^n (\hat{y}_{cal} - y_{cal})^2 \quad [ 48]$$

## 4.4. Diseño de experimentos

### Introducción

Para obtener buenos resultados en la construcción de modelos, es necesario disponer de datos representativos del comportamiento del sistema. En muchos casos no es posible intervenir en la generación de estos datos, bien por imposibilidad de variar el comportamiento de las variables o porque ya fueron obtenidos, como por ejemplo en la calibración de datos históricos procedentes de las bases de datos de los Sistemas de Información.

No obstante, en algunos casos es posible intervenir en esa generación. En **diseño de experimentos** se aborda el estudio de los factores que afectan a una determinada variable y la clasificación de las interacciones que ocurren entre ellas.

---

<sup>35</sup> SEP, "Standard Error of Prediction".

---

## Diseño factorial

Es la estrategia para encontrar las variables  $X$  (factores, variables de diseño) que tienen influencia en la variable  $Y$  (respuesta). En diseño factorial de experimentos se evalúa la variable  $Y$  a distintos niveles de las variables de diseño  $X$ .

Si se desea hacer diseño factorial completo de experimentos a dos niveles de tres variables de diseño, se han de realizar  $2^3$  experimentos (Fig. 28).

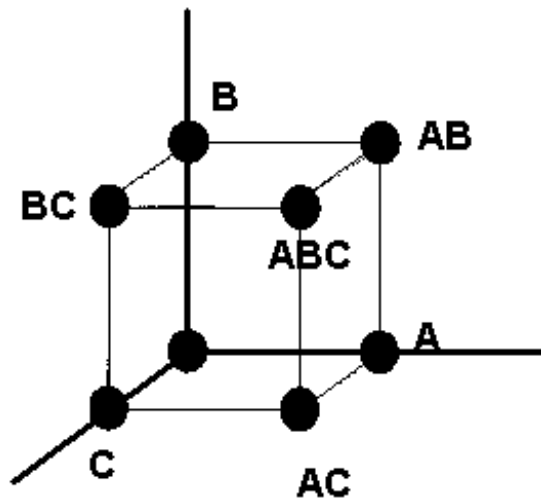


Fig. 28. Diseño factorial para 3 variables, 2 niveles

En este caso los efectos que se evalúan serían los efectos principales  $A$ ,  $B$ ,  $C$ , y los efectos de interacción  $AB$ ,  $AC$ ,  $BC$ , y  $ABC$ . En resumen, el diseño factorial completo obliga a la evaluación de  $r^k$  valores, tomando  $r$  niveles y  $k$  variables.

### Diseño Factorial Parcial

Cuando el número de variables es alto, el número total de experimentos es muy elevado. De ahí que en estos casos se utilice un subconjunto del diseño. El diseño factorial parcial simplifica de  $r^k$  a  $r^{(k-p)}$  experimentos, donde  $p$  es el tamaño de la fracción reducida. Por ejemplo,

un diseño completo de 3 variables en 2 niveles necesitaría  $2^3=8$  experimentos, mientras que si se toma sólo una fracción se tendrá  $2^{(3-1)}=4$ .

## Definiciones

### Efecto Medio

Se define como efecto medio a la media de los valores de la variable de respuesta  $Y$ .

### Efectos Principales

El **efecto principal** de la variable de diseño  $X$  se conoce como la diferencia media observada entre los valores de la variable de respuesta  $Y$  cuando  $X_i$  varía en todo su rango.

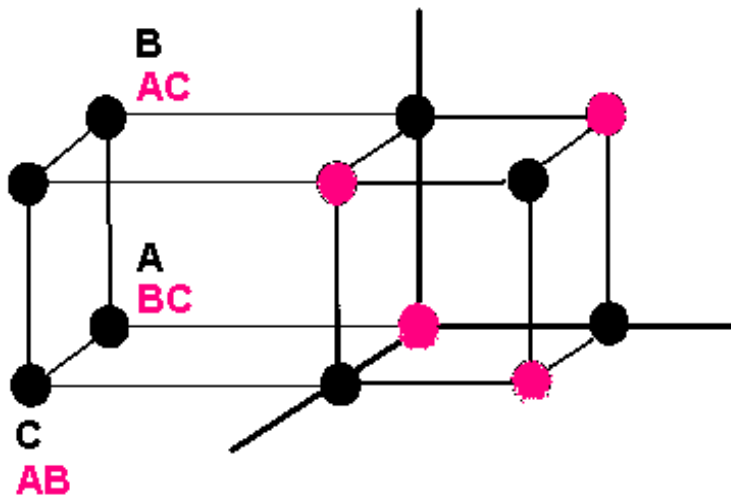


Fig. 29. Diseño completo para tres variables, dos niveles frente a diseño parcial con una fracción reducida. (negro y sombreado como efectos confundidos).

### Interacciones

El **efecto de interacción** de las variables  $X_i X_j$  es la influencia de cada variable de diseño  $X_i$  o  $X_j$  sobre la variable de respuesta  $Y$  cuando



depende del nivel que tenga la otra variable de diseño por separado.

### Efectos confundidos

En el diseño parcial de experimentos se conoce como efectos confundidos aquellos cuyo efecto se une a otros en el efecto total que posee la variable de respuesta y, por lo tanto, no se conoce la participación de cada uno de ellos.

### Análisis de efectos

El cálculo de los efectos se puede realizar utilizando ANOVA (**Análisis de la Varianza**) o bien realizando regresión lineal sobre los efectos principales y de interacción.

### ANOVA

Básicamente, se trata de determinar la respuesta media de las variables al nivel alto y restar el valor de la respuesta media con las variables de diseño al nivel bajo. En la Tabla 1 se muestra un ejemplo de cálculo.

Tabla 1 . Variables de diseño y respuesta para ANOVA.

A	B	C	AB	AC	BC	ABC	RESPUESTA
-	-	-	+	+	+	-	121.7
+	-	-	-	-	+	+	123.5
-	+	-	-	+	-	+	125.2
+	+	-	+	-	-	-	122.8
-	-	+	+	-	-	+	124.5
+	-	+	-	+	-	-	122.1
-	+	+	-	-	+	-	127.2
+	+	+	+	+	+	+	124.8

El efecto de A es:  $[(+123.5+122.8+122.1+124.8)/4]-[(+121.7+125.2+124.5+127.2)/4]=-1.35$

Cuando el número de niveles es mayor de 2, el Análisis de Varianza se complica al aumentar mucho el número de interacciones.

### ***Efectos por Regresión***

Los efectos también pueden conocerse mediante la ejecución de una regresión lineal con los efectos principales y los de interacción como variables independientes y la variable dependiente  $Y$ .

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_4 x_1 x_2 + b_5 x_1 x_3 + b_6 x_2 x_3 + b_7 x_1 x_2 x_3 \quad [49]$$

Los valores de los efectos principales serán el doble de los coeficientes  $b_1$ ,  $b_2$  y  $b_3$ . Los efectos de interacción serán el doble de  $b_4$ ,  $b_5$ ,  $b_6$  y  $b_7$ . Por último el efecto medio será  $2b_0$ .

Debido a que existe covarianza entre las variables que entran en la regresión por la propia consideración de variables independientes, se puede utilizar PLS para obtener resultados más fiables. En este trabajo, el análisis de efectos para el cálculo de la presión de vapor de la cabeza de una Torre Despentanizadora se ha realizado empleando PLS.

## ***4.5. Redes Neuronales***

«Las Redes Neuronales son una nueva generación de sistemas de proceso de información que deliberadamente ha sido desarrollada para el modelado del cerebro humano y la evolución genética» (Lin, 1996). En esta definición se enmarca toda la potencia de las redes neuronales en relación con su capacidad de adaptarse, «aprender», y generalizar a partir de una serie de datos.

Estas técnicas hacen su aparición en la Industria a principios de los años noventa. Sin embargo, el origen de las redes neuronales es muy anterior, y quizás se encuentren en los trabajos del psicólogo americano William James (1890). En el desarrollo de las redes neuronales hay dos hitos importantes que explican el desarrollo que se está teniendo en este campo. Por un lado, el algoritmo de Hopfield, tanto en la versión discreta como en la continua, y, por otro, el algoritmo de «backpropagation», que se ha convertido en el más popular.

---

Las redes neuronales están constituidas por un número de elementos conectados (*nodos*); operan en paralelo y están configuradas según arquitecturas determinadas. Las redes neuronales se caracterizan atendiendo al tipo de modelo de cada elemento de proceso, a la topología de la red y a las reglas de aprendizaje.

Cada *nodo* en una red neuronal utiliza la información que procede de los miembros de la etapa anterior y produce una única salida, definida por una ecuación matemática o modelo concreto --normalmente la función sigmoide (Fig. 32). La red neuronal más sencilla consistirá por tanto en una capa externa con las entradas, una capa oculta de procesamiento y una capa externa para generar la salida (Fig. 30).

La información que se procesa en un *nodo* se realiza en dos etapas; por un lado, el *operador* combina la información procedente de todos los nodos anteriores y, por otro, la función que genera la salida. Cada una de las conexiones que existen entre los *nodos* están controladas por unos factores o pesos que modifican el efecto (negativo o positivo) de un *nodo* sobre otro.

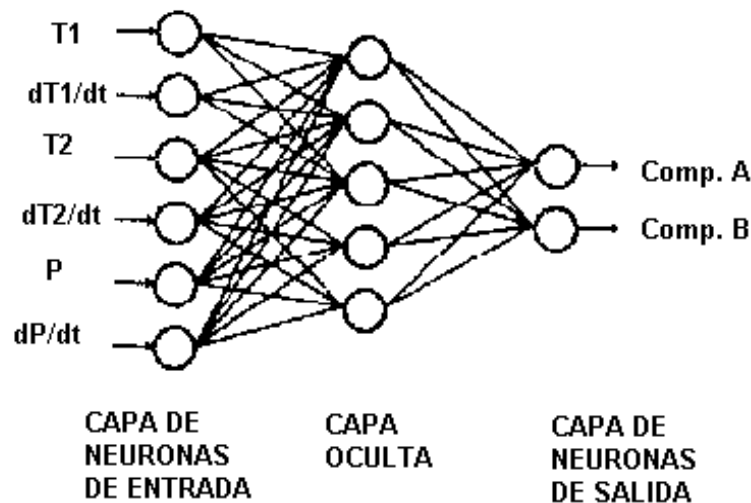


Fig. 30. Red Neuronal consistente en una capa de entrada, una oculta y una de salida

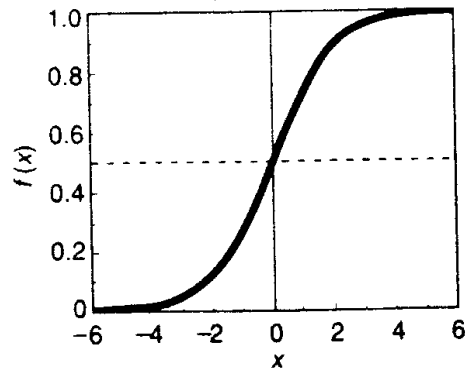


Fig. 31. Forma de la función sigmoide.

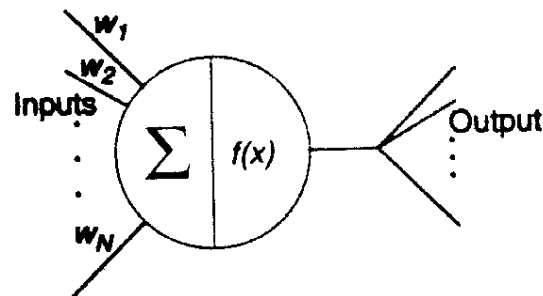
Una red definida como en la Fig. 30, en el que la salida de una capa de *nodos* no se dirige a una capa anterior, se conoce como *feedforward network*, y si existen esas conexiones de una capa a alguna de las anteriores se conoce como *feedback network*.

Una vez definido el tipo de función de la red neuronal y la topología de la red (número de capas y conectividad), es necesario definir el método de aprendizaje. El aprendizaje puede afectar a los pesos o parámetros de la red o bien a la topología (número de *nodos*). Además, la forma en que se desarrolla este aprendizaje permite hablar de método supervisado, no supervisado o de refuerzo<sup>36</sup>.

---

<sup>36</sup> “Supervised Learning”, “Unsupervised Learning” y “Reinforcement Learning”.

---



$$\text{Output} = f\left(\sum_{i=1}^N w_i \times \text{input}_i\right)$$

Discrete  
Hopfield:  $f(x) = \begin{cases} 1 & \text{if } x \geq 0 \\ 0 & \text{if } x < 0 \end{cases}$

Back propagation or  
continuous Hopfield:  $f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$

Fig. 32. Elemento de proceso en una Red Neuronal y Función Sigmoide

El algoritmo de aprendizaje de la red neuronal por *backpropagation* fue establecido por Rumelhart, Hinton y Williams (1986). Esta red neuronal y su algoritmo de aprendizaje se basa en propagar el error de modelado en la capa de salida hacia las capas anteriores para minimizar el error de predicción.

La red neuronal por propia definición es capaz de modelizar procesos no lineales como reactores químicos. Las redes neuronales no son el objetivo central de este trabajo. No obstante, y teniendo en cuenta que se están aplicando ampliamente en el modelado de procesos industriales y en la predicción de propiedades, es interesante incluir predicciones basadas en esta tecnología, de manera que su comparación con los métodos de calibración multivariante en los que se centra este trabajo permitan identificar ventajas y limitaciones de ambas tecnologías, cuando se aplican a la calibración de sistemas de información de planta en la Industria de Refino.

## **4.6. Régimen Estacionario**

Cuando los modelos no tienen dependencia con el tiempo son de estado estacionario. Esto implica que los datos que se han utilizado para la calibración multivariante deben haberse generado cuando la Unidad estaba en condiciones de estado estacionario. Ahora bien, no es fácil encontrar esta condición en una instalación industrial que recibe una alimentación variada tanto en cantidad y como en calidad. Por otro lado, los sistemas de control continuamente modifican ciertas variables operativas para mantener los puntos de consigna en el valor deseado. Mas aún, el operador recibe instrucciones a cualquier hora del día sobre variaciones en los objetivos de calidad y cantidad de los productos que están en proceso, lo que le obligan a actuar sobre las condiciones de este proceso.

En el Sistema de Información de Planta se encuentra, para toda la instrumentación, información relativa a los valores medios horarios tomados cada seis minutos (1 hora, media de 10 valores puntuales). Las muestras de laboratorio para realizar los ensayos de rutina, se obtienen con una toma puntual en un momento no concreto alrededor de la hora programada de toma de muestra. La muestra de laboratorio tiene una naturaleza distinta de la de los valores que se localizan en la Instrumentación. Sobre este particular se discutirá al describir el Sistema de Información de Planta y sus características.

## **4.7. Régimen no estacionario, respuesta dinámica**

Los estudios que se han llevado a cabo en este trabajo han implicado en algunas ocasiones la suposición de estado estacionario o bien no estacionaria cuando se trata de desarrollar un análisis dinámico del proceso. Ahora bien, en ambos casos se han aplicado técnicas de regresión multivariante.

### **Análisis de la respuesta. Identificación empírica de Modelos dinámicos**

La identificación empírica de modelos dinámicos (Marlin, 1995) y de

---

modelos en línea (Smith, 1972), el desarrollo de modelos estadísticos de proceso, o el procesamiento digital de señales (Hen Hu, 1996), etc., corresponden todos al mismo proceso. Se plantea en el terreno del conocimiento del comportamiento de sistemas digitales con el objetivo de identificar el modelo de comportamiento dinámico de un proceso.

El modelado de procesos industriales a partir de las ecuaciones fundamentales que rigen su comportamiento, es una tarea ingrata que conduce en muchos casos al abandono, debido a la complejidad de las variables de diseño y de las ecuaciones de comportamiento del sistema, más aún cuando el tiempo actúa como una variable adicional. Desde un punto de vista práctico, esta opción es por el momento inviable.

No obstante, los simuladores de estado no-estacionario (dinámicos) se están empleando cada vez con más frecuencia en la Industria. De ahí que se encuentren aplicaciones que utilizan el simulador para modelizar el proceso<sup>37</sup> y obtener matemáticamente los parámetros dinámicos.

La utilización de modelos de proceso riguroso requiere la siguiente puntualización. Estos programas no se están empleando para la síntesis de algoritmos de control integrados<sup>38</sup> (estrategias de control), sino para generar las respuestas que se esperarían en la Unidad si se provocaran esas perturbaciones. En realidad, se tratan estos simuladores como generadores de datos, es decir, para obtener los parámetros dinámicos del proceso. Ahora bien, en cualquier caso, tanto si los datos proceden de simulación o son de proceso, es evidente que se continúa utilizando los métodos tradicionales para obtener los parámetros dinámicos del proceso.

Aunque los procesos son generalmente no lineales, en el intervalo de control se pueden considerar lineales. Cuando esta simplificación no es adecuada, la simple transformación lineal de esa propiedad es suficiente (control de la viscosidad, por ejemplo).

En general, la experiencia industrial se ha caracterizado por considerar los procesos como lineales (o susceptibles de transformarse en

---

<sup>37</sup> Ya hemos citado como simulador dinámico el Speed-up de ASPEN Technology.

<sup>38</sup> No se emplean bajo el concepto de Control Optimo.

---

lineal) y además como invariantes (los parámetros dinámicos no cambian con el tiempo). Estas dos suposiciones se han mantenido en este trabajo al tratar de la Identificación de Procesos, pues la consideración de los sistemas como lineales simplifica la construcción de las Aplicaciones con la tecnología disponible de Control Predictivo Multivariable.

Los controladores Multivariables (MPC) utilizan modelos de respuesta en escalón o modelos de impulso finito truncados. La identificación directa de estos modelos genera muchos problemas, derivados del número de parámetros que deben ajustarse, de la naturaleza de los datos y de las relaciones entre las variables, entre otros considerandos.

Es posible realizar la identificación de procesos basándose en otro modelo y luego, a partir de este resultado, generar el modelo de impulso o escalón necesario según la tecnología de Control Multivariable que se emplee.

### ***Aspectos sobre la generación de modelos***

Algunos textos consultados y la propia experiencia en la aplicación Industrial de técnicas de Control coinciden en una metodología para la construcción de modelos que se muestra resumida en el diagrama de flujo de la Fig. 33.

Los datos para la identificación proceden de perturbaciones o «*test*» generados en la Unidad o por simulación. Las perturbaciones se deben planificar con el máximo cuidado con el fin de obtener en el menor tiempo posible la mayor información sobre el comportamiento del proceso.

### **Planificación. Diseño experimental**

En esta etapa se ha de cuidar la selección de las variables, el método para producir las perturbaciones, la magnitud y duración de los cambios, así como evitar que estos cambios puedan producir desviaciones no permitidas del proceso que afecten a la calidad de los productos, la seguridad de las instalaciones y la confianza de los Supervisores y

---



## Operadores de la Planta<sup>39</sup>.

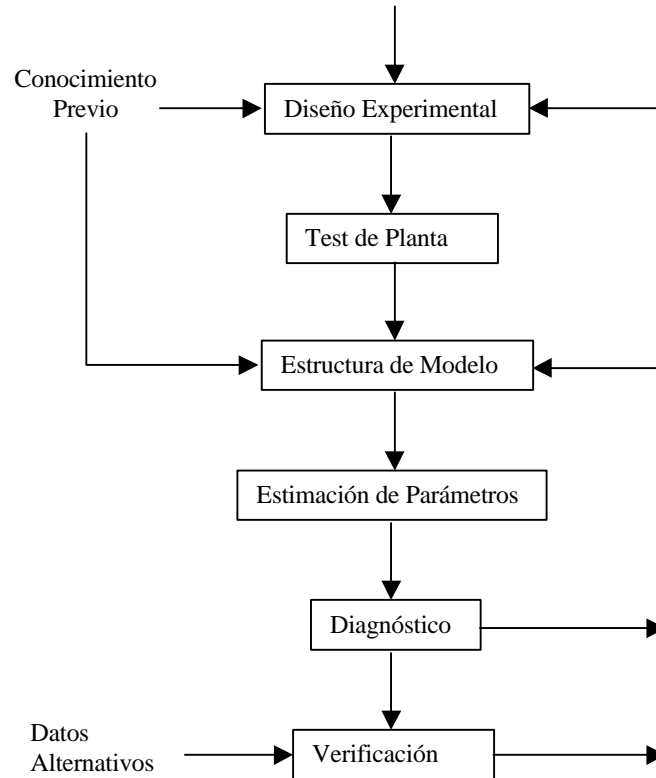


Fig. 33. Procedimiento para generación de modelos dinámicos de proceso (Marlin, 1995).

### Realización del «Test»

Dependiendo del tipo de Sistema que se pretenda modelar (características dinámicas que *a priori* se conozcan) y el objetivo de la identificación, se ha de decidir el método de perturbación. Esto puede entenderse como un proceso iterativo<sup>40</sup>, pero en la práctica se puede

<sup>39</sup> Este aspecto no suele prestársele mucha importancia, sin embargo, creemos que el éxito de una estrategia de control se debe en gran parte a la confianza, entrenamiento y predisposición de los Operadores o panelistas.

<sup>40</sup> Se supone unas características dinámicas, se perturba, se calcula una nueva dinámica y si no es consistente se perturba, (McFarlane, Rivera, 1992).

aproximar bastante con la experiencia que se posee de los datos históricos de la Unidad. Aunque existen varios métodos, en los Procesos de Ingeniería Química los más empleados son la generación de *entrada en escalón* y el método *PRBS*.

### **Método de entrada en Escalón**

Este método es el más usado, sencillo y en muchos casos más fiable de todos. El procedimiento es el siguiente:

- 1.- Con el Proceso en estado estacionario se provoca una perturbación en la variable manipulada.
- 2.- Se registra la variable que se pretende modelar hasta que se alcance de nuevo el estado estacionario.
- 3.- Se representan los resultados y se obtienen gráficamente los parámetros del Sistema. Para obtener los parámetros es necesario fijar el orden del sistema, y normalmente se emplea el primero o el segundo orden con tiempo muerto.
- 4.- En las figuras siguientes se indica los cálculos que se han de realizar y la representación gráfica de esos parámetros para las clases de procesos más comunes, autoregulados de primero (Fig. 34) y segundo orden (Fig. 35) y no autoregulado (Fig. 36), respuesta inversa (Fig. 37) y ganancia nula (Fig. 38).

En un sistema de primer orden, el tiempo muerto  $\theta$  se lee directamente, y la constante de primer orden se puede evaluar por diferentes métodos, aunque se suele preferir el tiempo para el 63.2% del cambio total de la señal.

$$G(s) = \frac{ke^{-Js}}{ts + 1} \quad [ 50]$$

---

## Respuesta

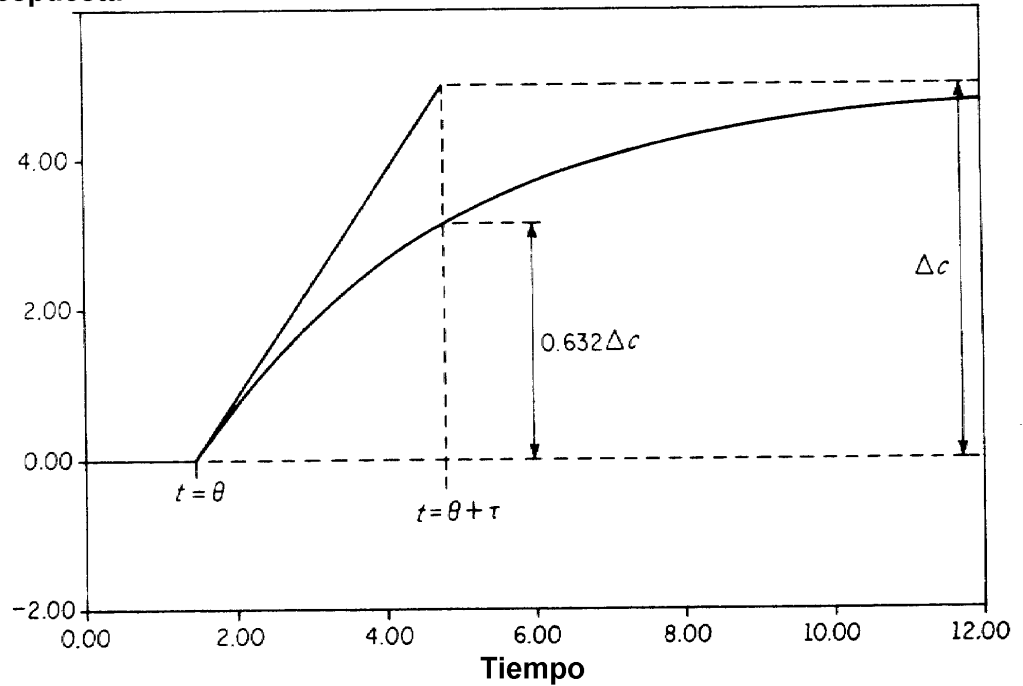


Fig. 34. Curva de respuesta ante entrada en escalón y parámetros dinámicos para un sistema de primer orden más tiempo muerto. Smith, 1972

Para un sistema de segundo orden el cálculo es ligeramente más complicado, utilizando la relación entre las dos constantes, dado por la relación  $T_c/T_a$  y  $T_b/T_a$ , según las ecuaciones:

$$\frac{T_C}{T_A} = (1+x)x^{x/(1-x)} \quad [ 51 ]$$

$$\frac{T_B}{T_A} = -0.4729 \frac{T_C}{T_A} + 0.4512 \quad [ 52 ]$$

donde  $x$  es  $\tau_1/\tau_2$  y  $T_C = \tau_1 + \tau_2$ .

$$J = t_l + T_C - T_A - T_B \quad [ 53 ]$$

$$G(s) = \frac{ke^{-Js}}{(t_1s+1)(t_2s+1)} \quad [ 54 ]$$

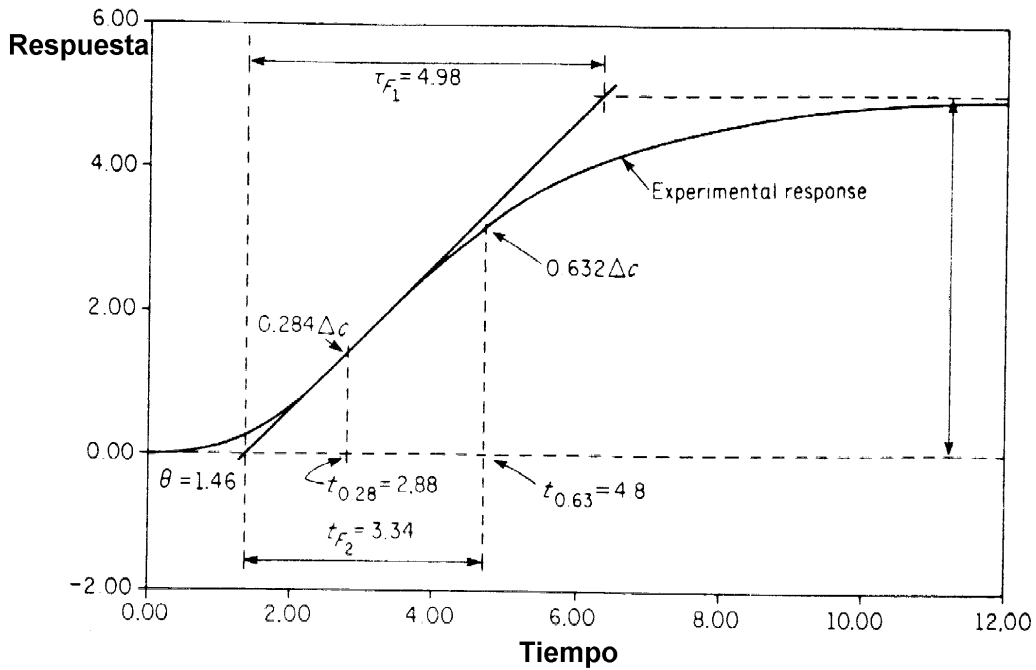


Fig. 35. Curva de respuesta ante entrada en escalón y parámetros dinámicos para un sistema de segundo orden más tiempo muerto. Smith, 1972

En un sistema no autoregulado los parámetros que se calculan están relacionados con la primera derivada de la señal, y se pueden asociar al modelo de la forma siguiente:

$$G(s) = \frac{ke^{-Js}}{s} \quad [ 55 ]$$

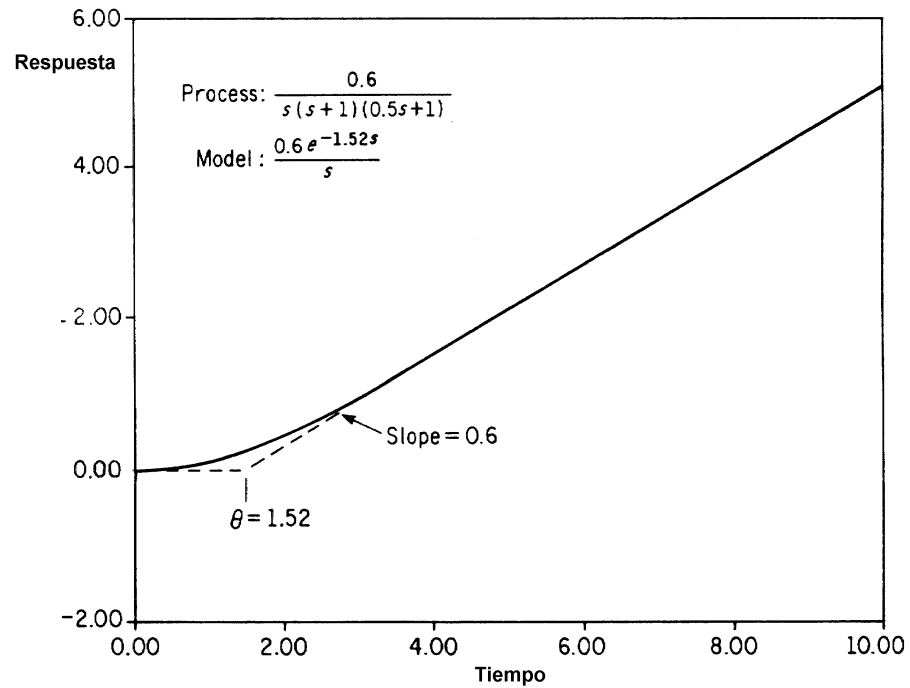


Fig. 36. Curva de respuesta ante entrada en escalón y parámetros dinámicos para un sistema no autoregulado (Smith, 1972).

Con respuesta inversa, el cálculo se realiza con una función de transferencia que incorpora una función de adelanto que afecta al numerador. De esta manera se consigue la disminución inicial de la señal. En cualquier caso, normalmente se intenta asociar a modelos de primero y segundo orden. Es posible obtener un modelo de respuesta inversa con la suma de dos modelos de primer orden, uno de ellos rápido y con poca ganancia y el otro modelo lento y con mayor ganancia.

$$G(s) = e^{-Js} \left( \frac{k_1}{t_1 + 1} + \frac{k_2}{t_2 + 1} \right) \quad [ 56 ]$$

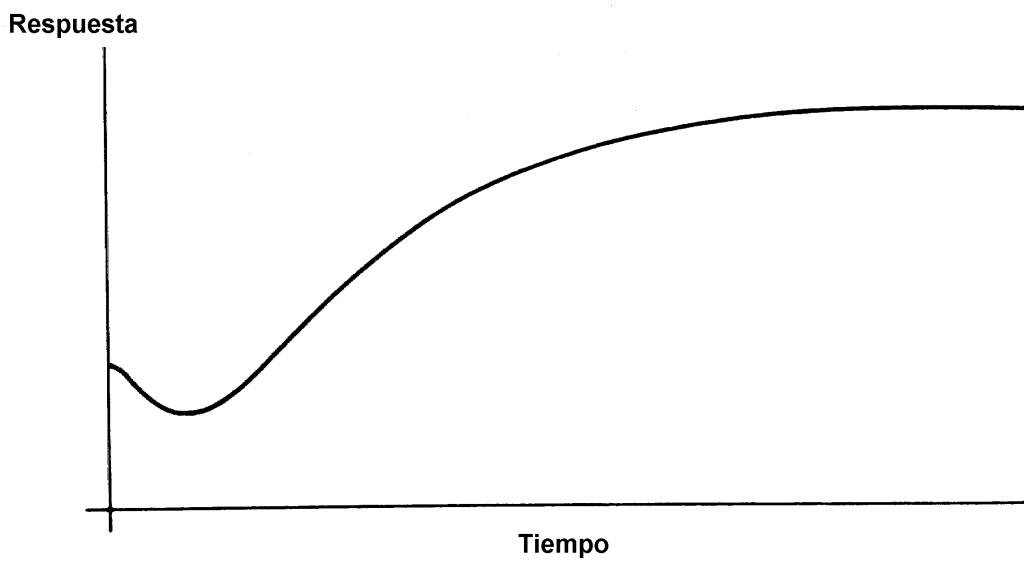


Fig. 37. Curva de respuesta ante entrada en escalón y parámetros dinámicos para un sistema autoregulado con respuesta inversa. SMCA, (Smith, 1972).

Un sistema de ganancia nula se consigue con la suma de dos funciones de transferencia; por ejemplo, de primer orden con ganancias iguales y de distinto signo.

$$G(s) = e^{-Js} k \left( \frac{1}{t_1+1} - \frac{1}{t_2+1} \right) \quad [ 57 ]$$

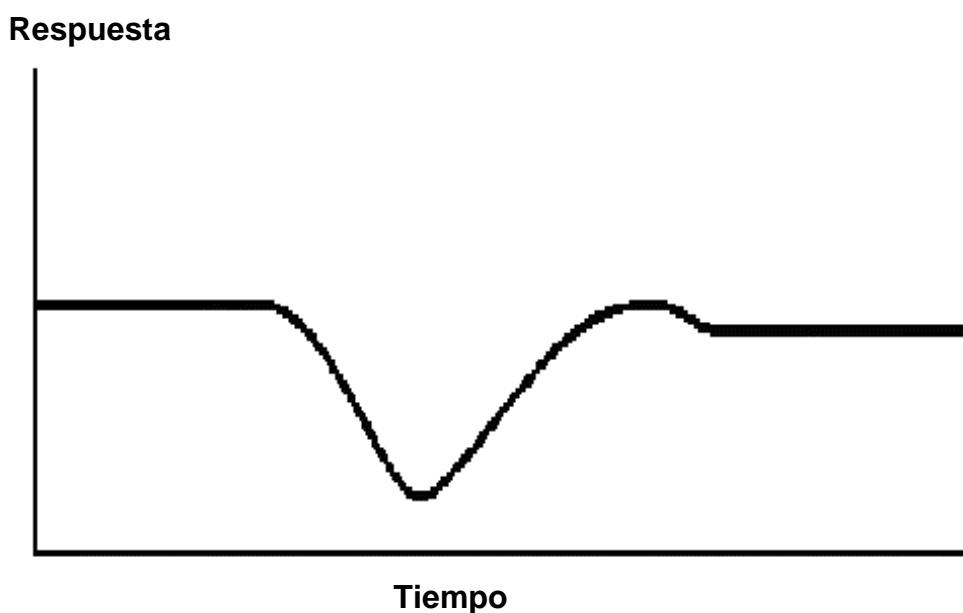


Fig. 38. Curva de respuesta ante entrada en escalón y parámetros dinámicos para un sistema autoregulado con ganancia cero. SMCA, Training Manual, 1994.

El método de respuesta en escalón destaca por su sencillez, sobre todo para los sistemas de primer orden con tiempo muerto o sistemas que se pueden asimilar a estos tipos. Existen, sin embargo, varios aspectos que hacen que este método comience a estar en desuso toda vez que existen métodos estadísticos de identificación bastante potentes, que expondremos más adelante.

La perturbación que se requiere para poder identificar la Planta debe ser instantánea y no debe transmitirse gradualmente al proceso, como ocurriría en la identificación de composición por medio de analizadores, estructuras de cascada, etc., que aportan al proceso una serie de elementos de retraso que hacen que éste no observe en todo momento la magnitud del cambio. Las constantes obtenidas por medio de este sistema no responden a la verdadera dinámica del proceso. Este es el caso, por ejemplo, de la identificación del comportamiento de la composición de fondo de una torre con la temperatura del calentador<sup>41</sup>. La magnitud del

<sup>41</sup> Ante un cambio de punto de consigna del controlador de temperatura del calentador de fondo, el sistema responde con una dinámica que refleja el comportamiento de la temperatura de

cambio que debe introducirse para producir en la señal de salida una relación señal/ruido es al menos de cinco veces<sup>42</sup>.

Teniendo en cuenta que la ganancia del proceso se calcula a partir del momento en que se alcanza el régimen estacionario, el tiempo necesario para conseguir un test es como mínimo  $q + 4t$ <sup>43</sup>, donde  $q$  y  $t$  son el tiempo muerto y la constante de primer orden. Por ejemplo, si un cromatógrafo tiene 10 minutos de ciclo de análisis, y el proceso un tiempo muerto de 3 minutos y una constante de 40 minutos, sería preciso realizar un *test* de unas tres horas de duración. Para comprobar la validez de los parámetros obtenidos es deseable repetirlo en varias ocasiones y en distintos sentidos<sup>44</sup>.

Por último, si durante la duración del experimento se producen perturbaciones e incluso si éstas se conocen, no es posible diferenciar la respuesta global frente a la producida por cada perturbación. La Tabla 2 recoge las características más importantes que posee este método.

---

fondo, no de su punto de consigna. La identificación por ese método identificaría el sistema como si desde el principio el proceso hubiera “visto” el punto de consigna de la temperatura.

<sup>42</sup> Esto implica que la incertidumbre en la identificación sea pequeña (Marlin, 1995).

<sup>43</sup> 4 veces la constante de tiempo, el valor de proceso alcanzaría el 98% del estado estacionario.

<sup>44</sup> Para observar que la dinámica es constante y que no existe ninguna clase de histéresis.

---



Tabla 2. Características comparativas de los métodos de entrada en escalón y método PRBS, (Marlin, 1995).

CARACTERÍSTICA	MÉTODO ENTRADA ESCALÓN	PRBS
Magnitud cambio necesario en la salida	Suficiente para señal/ruido > 5	Suficiente para señal/ruido > 5
Duración	$q + 4t$	Al menos $t$
Entrada Escalón	perfecta	Cualquier forma.
Estructura del Modelo	Previamente definida	Dependiendo del método de cálculo, cualquier forma.
Exactitud	Degradada por presencia de disturbios	Degradada por presencia de disturbios.
Validación	Modelo frente a datos	Modelo frente a datos y residuos frente al tiempo.
Calculos	Sencillo	Programas estadísticos.

### Método PRBS<sup>45</sup>

Este método de perturbación se basa en provocar una señal en forma de onda cuadrada, caracterizada por dos parámetros:  $n$ , número de etapas para la secuencia de cambio de nivel y  $T_{cl}$ , periodo de tiempo mínimo entre ellos, que es además múltiplo del tiempo de muestreo  $T_s$ . La señal repite a  $T = N T_{cl}$ , donde  $N = 2^n - 1$ .

La utilización de **PRBS** requiere tener en cuenta los parámetros anteriores para poder obtener una serie de datos que reproduzca fielmente el comportamiento del Proceso.

El rango de frecuencia  $\omega$  útil para excitación en esta función sería.

$$\frac{2p}{T} \leq \omega \leq \frac{2.8}{T_{cl}} \text{ rad / s} \quad [58]$$

Si se conoce *a priori* el valor aproximado del tiempo muerto  $t_d$  y de la

<sup>45</sup> PRBS, "Pseudo Random Binary Step".

constante de tiempo dominante<sup>46</sup>  $t_{dom}$ , entonces

$$\frac{1}{b \left( t_{dom} + t_d/2 \right)} \leq w \leq \frac{a}{\left( t_{dom} + t_d/2 \right)} \quad [59]$$

el parámetro  $a$  se ajusta para recoger el máximo de alta frecuencia de la señal, que está relacionado de la manera en que se comporta en lazo cerrado  $t_{cl}$  frente a lazo abierto  $t_{ol}$ .

$$t_{cl} = \frac{t_{ol}}{a} \quad [60]$$

Por lo tanto, cuanto más alto sea  $a$ , tanto más fuerte será el ajuste que utilizará el controlador  $y$ , por lo tanto, se demandará más información en alta frecuencia.

El parámetro  $b$  se emplea para describir la cantidad de información en baja frecuencia; cuanto mayor sea la magnitud de  $b$ , más precisión se obtendrá sobre el estado estacionario. Por ejemplo,  $b = 3$  suministra información para el 95% del tiempo de estabilización, y  $b = 4$  para el 98% (McFarlane, Rivera, 1992).

Cuando el método no se aplica a una perturbación (identificación SISO) sino a varias señales y se registran las salidas (MIMO), el tratamiento matemático se complica. Y, en este supuesto, se han de dar ciertas condiciones, como se indica en Eykhoff (1974), para permitir la identificación en un sistema multivariable. Es más frecuente que en estos casos se utilice **PRBS** en secuencia y no simultáneamente<sup>47</sup>.

Esta manera de realizar la identificación además de simplificar el tratamiento y la generación de los datos, es mejor desde el punto de vista de Operación, ya que los movimientos que se producen en el Proceso están siempre limitados a una variación cada vez, y la posible intervención del Operador no produce excesivas perturbaciones.

<sup>46</sup> Constante de Tiempo Dominante: la más importante de las que pueda tener el Sistema a identificar.

<sup>47</sup> Se mueve una variable cada vez manteniendo todas las variables restantes en automático.

El sistema de obtención de datos utilizado en este trabajo es **PRBS**, realizado de forma secuencial sobre todo el espectro de variables a identificar.

### Estructura de Modelo

Para una formulación general de un modelo dinámico lineal e invariante se tiene

$$y(t) = G_0(q) u(t) + H_0(q) e(t) \quad [61]$$

donde  $y(t)$  es la salida del sistema representado por la función de transferencia  $G_0(q)$  cuando es excitada por las variables manipuladas o disturbios conocidos  $u(t)$  y sometida a las perturbaciones no identificadas o error.  $H_0(q) e(t)$

Si el sistema es multivariable, la ecuación anterior se puede expresar como combinación lineal de  $k$  salidas con  $m$  entradas.

$$y_i(t) = G_{i1}(q) u_1(t) + G_{i2}(q) u_2(t) + \dots + G_{im}(q) u_m(t) + H_i(q) e_i(t) \quad [62]$$

para  $i= 1,2,\dots,k$

La selección de una estructura determinada para la ecuación anterior llevará a distintas formulaciones matemáticas, tales como modelos **ARX**, **BJ**, **OE**, **FIR**, etc.

En una primera clasificación se puede diferenciar entre métodos no paramétricos y métodos paramétricos. Los primeros no asumen una forma explícita de modelo para evaluar la dinámica del proceso y sirven para elegir según las características encontradas los métodos paramétricos más adecuados, que sí tienen una forma explícita.

### Modelos no-paramétricos

#### Análisis de correlación

Se utiliza para obtener los valores iniciales de la respuesta impulso de un sistema. Teniendo en cuenta (Box y Jenkins, 1976) que si  $u_k$  es el

parámetro de impulso y

$$\mathbf{u}_k = \frac{c_{uy}(k)}{\mathbf{s}_u^2} \quad [63]$$

y donde

$$c_{uy}(k) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N-k} u'(i)y'(i+k) \quad [64]$$

para  $k = 0, N-1$

$$\mathbf{s}_u^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N u'(i)^2 \quad [65]$$

$N$  es el número de observaciones, y la marca ' significa que se han realizado operaciones de *detrending and whitening* (Box y Jenkins, 1976).

La desviación estándar del coeficiente  $\mathbf{u}_k$  se calcula como

$$\mathbf{s}_v(k) = \frac{\mathbf{s}_y}{\mathbf{s}_x} \frac{1}{\sqrt{N-k}} \quad [66]$$

y se utiliza para determinar los intervalos de confianza del 95%.

## **Análisis del Espectro**

La respuesta en frecuencia de un proceso o sistema es la transformada de Fourier de su respuesta en impulso. Se utiliza para obtener información sobre la constante de tiempo dominante y el orden de magnitud de la función de transferencia.

## **Modelos paramétricos**

### **Estructuras de error de predicción**

La forma general de un modelo dinámico se puede escribir utilizando una representación polinómica para el operador de desplazamiento  $\mathbf{q}^{-1}$ , definido como  $\mathbf{q}^{-k} x(t) = x(t-k)$ .

---

$$A(q) y(t) = \frac{B(q)}{F(q)} u(t-n_k) + \frac{C(q)}{D(q)} e(t) \quad [67]$$

donde **A**, **B**, **C**, **D** Y **F** son polinomios en  $q^{-1}$ .

$$A(q) = 1 + a_1 q^{-1} + a_2 q^{-2} + \dots + a_{na} q^{-na} \quad [68]$$

$$B(q) = b_1 + b_2 q^{-1} + \dots + b_{nb} q^{-nb+1} \quad [69]$$

$$C(q) = 1 + c_1 q^{-1} + c_2 q^{-2} + \dots + c_{nc} q^{-nc} \quad [70]$$

$$D(q) = 1 + d_1 q^{-1} + d_2 q^{-2} + \dots + a_{nd} q^{-nd} \quad [71]$$

$$F(q) = 1 + f_1 q^{-1} + f_2 q^{-2} + \dots + f_{nf} q^{-nf} \quad [72]$$

**A** es polinomio **AutoRegresivo**, ya que calcula el valor de **y** en función de su historia. **B** se asocia con la fuente **eXterna** de perturbación. **C** expresa el polinomio que incluye la media móvil (**MA**). **D** describe el modelo que define los disturbios de proceso y  $n_k$  es el tiempo muerto.

Para modelizar múltiples entradas el polinomio **B** y **F** se repite para cada una de las entradas  $u_j$ .

A partir de las ecuaciones anteriores, y dependiendo de los polinomios que se pretenden modelizar se pueden clasificar en:

### **ARMAX**

Como su nombre indica, es un modelo auto regresivo con entrada exterior de perturbación y término de media móvil.

En ese caso tendría la forma siguiente

$$A(q) y(t) = B(q) u(t-n_k) + C(q) e(t) \quad [73]$$

### **ARX**

Auto regresivo con entrada exterior.

$$A(q)y(t) = B(q)u(t-n_k) + e(t) \quad [74]$$

Tanto ARX como ARMAX pueden tener muchos parámetros de ajuste en el modelado, que implican que el orden del sistema es alto. Igualmente, un número elevado del término auto regresivo implica un ajuste muy fuerte en el rango de las frecuencias altas, que, sin embargo, no se presenta en los procesos de ingeniería química.

### **FIR**

Este modelo se basa solamente en la entrada externa. Por lo tanto, la forma matemática sería,

$$y(t) = B(q)u(t-n_k) + e(t) \quad [75]$$

Teniendo en cuenta que muchos controladores industriales de tipo predictivo emplean modelos de este tipo o bien utilizan la integral de estos coeficientes (respuesta en escalón), resulta muy conveniente esta formulación de modelo.

Cuando  $u$  y  $e$ , o sea, las variables y el error entre sí no están correlacionadas, incluso aún dando un número elevado de coeficientes, las predicciones son muy buenas. Sin embargo, estas premisas no se suelen cumplir, ya que los procesos de ingeniería química están altamente correlacionados.

En este trabajo se utiliza la identificación directa de modelos de impulso finito para sistemas correlacionados, utilizando al efecto métodos de calibración multivariante tal como PLS. De esta forma, la correlación entre las variables que podrían afectar al modelo queda aislada y los coeficientes tienen menor varianza.

### **Box-Jenkins**

Box y Jenkins (1976) proponen el modelo de la forma

$$y(t) = \frac{B(q)}{F(q)}u(t-n_k) + \frac{C(q)}{D(q)}e(t) \quad [76]$$

---

y tiene como característica no utilizar la salida dentro del modelo, (auto regresivo). Sin embargo, se necesita fijar una estructura predefinida para el polinomio que define los disturbios.

### **Error de Salida, OE**

Este modelo es una simplificación del anterior,

$$y(t) = \frac{B(q)}{F(q)} u(t-n_k) + e(t) \quad [77]$$

y no es necesario especificar ninguna estructura para los disturbios.

### **Estimación de parámetros**

Para la estimación de parámetros en estos modelos se emplea el criterio de minimizar la suma del cuadrado de los errores,

$$V = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} (y(t) - \hat{y}(t))^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} e_p^2(t) \quad [78]$$

lo cual implica que  $\hat{y}$  para el modelo ARX,

$$\hat{y}(t) = B(q)u(t) + (1 - A(q))y(t) \quad [79]$$

y en el caso de un modelo FIR,

$$\hat{y}(t) = B(q)u(t) \quad [80]$$

En los modelos ARMAX, Box-Jenkins y OE, la regresión no es lineal. En estos casos la resolución se puede hacer por métodos como Newton-Raphson, Leverberg-Marquardt, Gauss-Newton (Ljung, 1987).

En el caso de ARMAX, por ejemplo,

$$\hat{y}(t) = B(q)u(t) + (1 - A(q))y(t) + (C(q) - 1)(\hat{y}(t) - y(t)) \quad [81]$$

Cuando se utiliza la regresión lineal para ajustar los modelos ARX y FIR se encuentran problemas derivados de la dependencia entre variables

(colinealidad), que llevan a que la resolución matricial directa por mínimos cuadrados sea muy sensible a las variaciones en las muestras de datos. Para abordar este problema, que ocurre en la inversión de la matriz de coeficientes, se han empleado otras técnicas de ajuste.

Una de ellas es la regresión en cresta *Ridge Regression* (Draper y Smith, 1966) o bien PLS (Ricker, 1988)<sup>48</sup>. En este último caso la regresión para obtener los coeficientes se realiza en términos de las variables latentes. De esta manera, el número de coeficientes necesario es mucho menor que en el caso de que la regresión sea directamente sobre las variables  $\mathbf{X}$ .

Uno de los objetivos fundamentales de este trabajo es el diseño de modelos para los programas comerciales de control predictivo multivariable: Esta tecnología utiliza modelos de impulso finito (**FIR**) y la identificación se realiza con PLS. Sin embargo, aunque en algunas referencias bibliográficas se utiliza los **FIR** sobre las variables latentes, en este estudio, aún a riesgo de obtener modelos más largos, se calculan los parámetros dinámicos directamente sobre la historia de las variables de proceso.

Esta manera de abordar el problema hace transparente al usuario la existencia de las variables latentes y no requiere ningún cálculo intermedio para obtener los coeficientes del modelo de impulso.

## Implantación

La identificación, como se dijo al principio de este tema, no está separada de la construcción de la estrategia de control y forma una parte importante, si no la más importante del conjunto. El método que se sigue en la identificación, que incluye el diseño de las perturbaciones que se deben realizar, la recolección de datos, la estructura de modelo y el método de ajuste de los parámetros, se ha de enfocar directamente al tipo de controlador y a la estructura de control que se quiera implementar.

Si se pretende una instalación basada en **control descentralizado** a través de cascadas de controladores PID, restricciones y control en

---

<sup>48</sup> Véase la sección sobre **PLS** a partir de la página 79 para una explicación del método.

---



---

adelanto, o si se desee emplear compensadores de tiempo muerto, suele ser más adecuado e intuitivo que los modelos sean de tipo Laplace de primero o segundo orden. Además, conviene realizar el diseño por partes y elegir las parejas de variables manipuladas y controladas con independencia del resto de interacciones. La incertidumbre de los modelos no suele ser muy crítica, ya que el ajuste normalmente se completa según como se desee que respondan unas variables frente a otras. Es frecuente suavizar mucho aquellas variables de menor importancia mientras se intensifica el control de las variables principales. En estos casos es suficiente los métodos gráficos de la página 100. A partir de las constantes dinámicas obtenidas se puede realizar un ajuste preliminar basado en multitud de criterios, que se pueden encontrar fácilmente en la bibliografía, Ziegler y Nichols, Cohen y Coon, ITAE<sup>49</sup>, ISE<sup>50</sup>, etc.

Utilizando la formulación del modelo, las características de la respuesta que se desee y un programa de simulación, es posible localizar los parámetros de ajuste del controlador por medio de algún criterio que haga mínimo el error. No obstante, si la implantación se realiza mediante alguna forma de **control centralizado**, como por ejemplo Control Predictivo Multivariable, entonces es más sencillo que los modelos se generen para ser empleados de forma directa por el controlador (normalmente, modelos FIR o entrada en escalón).

La transformación entre modelos es posible y depende de la estructura del polinomio de ajuste en los modelos estadísticos descritos anteriormente.

## Control Predictivo Multivariable

Esta tecnología corresponde a los controladores basados en un modelo dinámico del proceso y que son capaces de calcular el movimiento futuro de las variables manipuladas para que los errores entre los valores

---

<sup>49</sup> ITAE, “*Integral of product of Time and the Absolute value of Error*”, Acumulado del producto del tiempo transcurrido y el valor absoluto del error entre punto de consigna y variable controlada.

<sup>50</sup> ISE, “*Integral Error Squares*”, Suma de cuadrado de los errores entre punto de consigna y variable controlada.

---

deseados (puntos de consigna) de las variables y el valor alcanzado en cada momento sean mínimos. Todo ello sujeto a restricciones, tanto de las variables manipuladas como de las controladas.

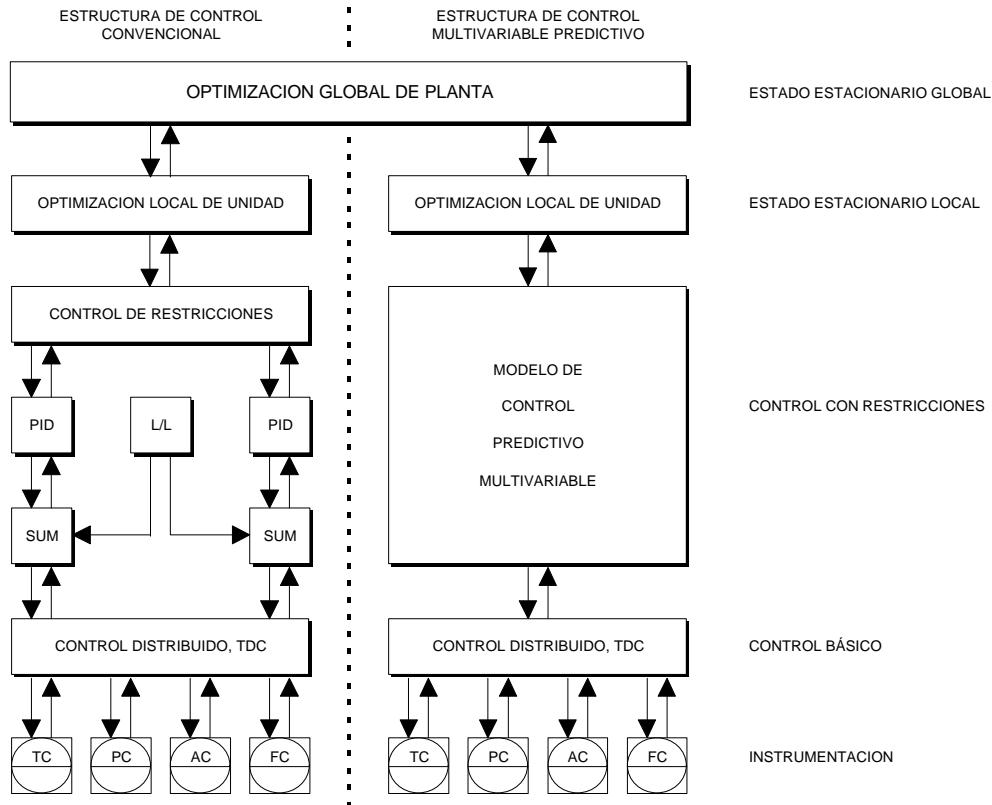


Fig. 39. Jerarquía de Control en una Instalación Industrial. Control centralizado y Control Descentralizado forman parte de la estrategia global de la Planta.

Esta definición no puede interpretarse como una simple extrapolación de los criterios de ajuste que hacen mínimo el error ITAE, ISA u otros, como se demostrará en los párrafos siguientes. La principal diferencia entre los controladores de este tipo y cualquier otro controlador convencional tipo PID, se fundamenta en la existencia de un modelo que participa activamente en el cálculo de la salida (modelo) y que se extrapola el comportamiento en el futuro (predictivo). En la Fig. 39 se puede observar la sustitución de elementos de control que realiza el control Centralizado y cómo se enmarca dentro de una estrategia global para la planta.

Sin entrar en detalles del origen de las teorías que conformaron el control predictivo tal y como hoy se le conoce, a continuación se describe el algoritmo matemático que le ha convertido en la herramienta de control industrial más importante de los últimos años.

### **DMC**

DMC o «Dynamic Matrix Control» fue desarrollado por Cutler (Cutler y Ramaker, 1979) en su versión original y posteriormente mejorado gracias a los trabajos de Prett y Gillette (1979) y García y Morshedi (1989). La principal ventaja de este método de control es que no requiere la inversión de la Matriz del Proceso para calcular el controlador. Por lo tanto, es un método extremadamente simple y potente.

Para entender el funcionamiento de DMC consideremos la respuesta en escalón de un sistema lineal e invariante. Por ejemplo, en un sistema de primer orden más tiempo muerto, la transformada de Laplace tendría la siguiente forma,

$$Y(s) = \frac{K_p e^{-Js}}{1 + ts} X(s) = \frac{K_p e^{-Js}}{(1 + ts)s} \quad [82]$$

teniendo en cuenta que  $X(s) = \Delta X / s = 1/s$  para una entrada escalón unitario.

La función en el tiempo que esta ecuación representa es

$$y(t) = K_p (1 - e^{-(t-q)}) \quad [83]$$

si la frecuencia del controlador es  $\Delta t$ ,

$$y_k = K_p \left( 1 - e^{-\left( \left( k - \frac{q}{\Delta t} \right) \frac{q}{t} \right)} \right) \Delta X \quad [84]$$

donde  $y_k=0$  para  $k \leq q/\Delta t$ .

si se llama  $a_k$  al término

$$K_p \left( 1 - e^{-\left( \left( k - \frac{q}{\Delta t} \right) \frac{q}{t} \right)} \right) \quad [ 85]$$

entonces el valor que toma  $y$  en cualquier momento se puede calcular como

$$y_{k+1} = y_0 + \sum_{j=1}^{k+1} a_j \Delta X_{k-j+1} \quad [86]$$

A partir de un determinado coeficiente  $j$ , el proceso puede considerarse en estado estacionario. De esta manera, si se considera un número de términos equivalente a

$$q + 4t / \Delta t \quad [ 87]$$

se habrá considerado el 98% de la respuesta de la variable controlada a todos los movimientos de la variable manipulada.

Al valor que indica el número de parámetros que se guardan y, por lo tanto, a la historia de las variables manipuladas que se tienen en cuenta se le llamará longitud de Modelo  $L$ , que puede o no coincidir con el valor anterior, dependiendo de la precisión que se desee.

Considérese la Fig. 40; en ella se aprecia la evolución de la variable controlada  $CV$  frente a los movimientos de la variable manipulada  $MV$ .

La variable manipulada ha realizado movimientos tendentes a reducir el error entre la variable controlada y su punto de consigna. Precisamente es el criterio para calcular los valores que ha de tener en el futuro la variable manipulada.

El valor que tendrá la variable controlada en el futuro estará de acuerdo con las ecuaciones anteriores y, además, teniendo en cuenta la diferencia entre el valor de la variable controlada y calculada por el modelo en el momento  $i$  y el valor real que posee

$$CV_i^f = CV_k + BIAS_k + \sum_{j=1}^L a_{j+1} \Delta MV_{K-j} \quad [88]$$

donde  $BIAS_{ik} = CV_{ik}^{medido} - CV_k$ .

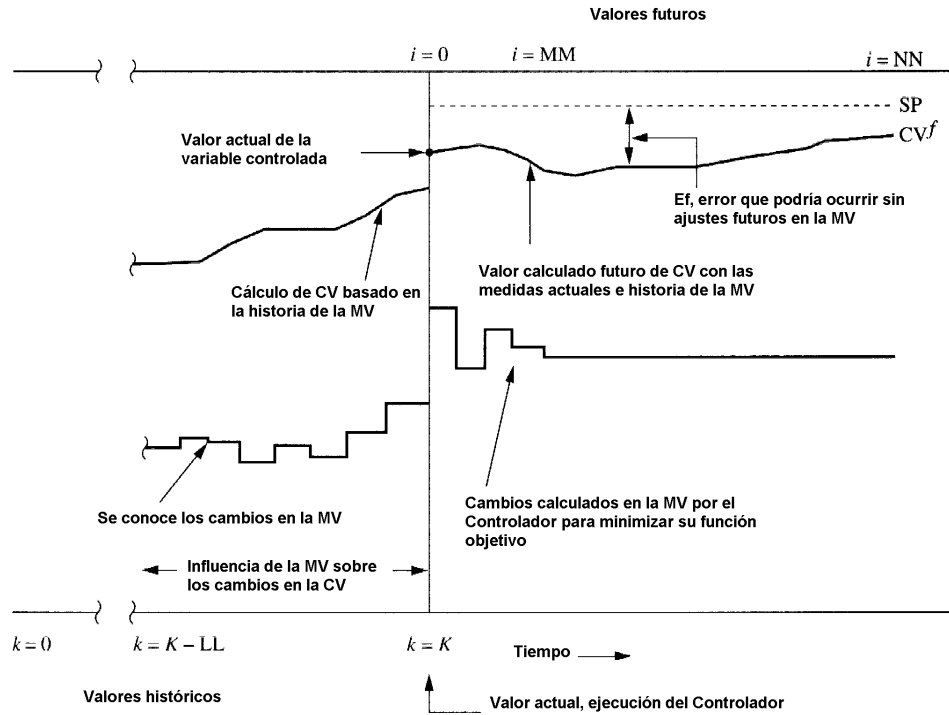


Fig. 40. Respuesta dinámica de la variable manipulada y de la variable controlada (con realimentación).

Para estimar la salida se ha de definir el intervalo futuro que se pretende considerar, el Horizonte de Control  $NN$  y la función objetivo a minimizar, que es el cuadrado de la diferencia entre el valor calculado de la variable controlada y su punto de consigna.

$$OBJ = \sum_{i=1}^{NN} (E_i^f - CV_i^c)^2 \quad [89]$$

donde  $E_i^f = SP_i - CV_i^f$ .

$SP_i$  es el punto de consigna y  $CV_i^f$  es el valor futuro de la variable controlada si no se realizase ningún movimiento en la variable manipulada. Es decir, es el efecto de los valores pasados de la variable manipulada.

$$CV_{i+1}^c = \sum_{j=1}^{i+1} a_j \Delta MV_{i-j+1}^c \quad [90]$$

**DMV** son los valores calculados de la variable manipulada. Éstos no se calculan para todo el horizonte de control sino que se define un grupo más corto, llamado *horizonte de entrada*.

Expresado de forma matricial,

$$\begin{bmatrix} a_1 & 0 & \cdots & 0 \\ a_2 & a_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{NN} & a_{NN+1} & \cdots & a_{NN-MM+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta MV_0^c \\ \Delta MV_1^c \\ \vdots \\ \Delta MV_{MM-1}^c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} CV_1^c \\ CV_2^c \\ \vdots \\ CV_{NN}^c \end{bmatrix} \quad [91]$$

La primera matriz se conoce como la **matriz dinámica A**, y la solución por mínimos cuadrados de la función de minimización resulta en la matriz dinámica del controlador,  $K_{DMC}$ .

$$K_{DMC} = (A' A)^{-1} A' \quad [92]$$

y los valores que han de tener la variable manipulada en el futuro son

$$[\Delta MV^c] = K_{DMC} E^f \quad [93]$$

En realidad, esta formulación motivaría un comportamiento demasiado agresivo por parte del controlador. Para mejorar el comportamiento en lazo cerrado ante la imprecisión de los modelos o disminuir el movimiento de la variable manipulada, se utilizan dos parámetros de ajuste, **qq** y **ww**, que pueden tomar cualquier valor mayor que cero llamados *factores de supresión de movimiento (move suppression factors)*. En el supuesto particular de que **qq** fuera cero, estamos en presencia de la primera función objetivo.

**qq** penalizará en la función objetivo los movimientos de la variable manipulada y **ww** la diferencia entre el valor del punto de consigna y la variable controlada.

$$OBJ_{DMC} = \sum_{i=1}^{NN} ww (E_i^f - CV_i^c)^2 + \sum_{i=1}^{MM} qq (\Delta MV^c)^2 \quad [94]$$

y la matriz del controlador será,

$$K_{DMC} = (A^T [WW] A + [QQ])^{-1} A^T [WW] \quad [95]$$

siendo **WW** y **QQ** las matrices diagonales de los coeficientes **ww** y **qq**.



Fig. 41. Efecto del parámetro qq sobre la respuesta de la variable manipulada

La extensión de los conceptos anteriores al caso multivariable otorga el mayor significado a DMC. La función objetivo quedaría en este caso como

$$OBJ_{DMC} = \sum_{nc=1}^{NC} ww_{nc} \sum_{i=1}^{NN} (E_i^f - CV_i^c)^2 + \sum_{nm=1}^{NM} qq_{nm} \sum_{i=1}^{MM} qq (\Delta MV^c)^2 \quad [96]$$

donde NM es el número de variables manipuladas y NC el de variables controladas.

La matriz de control se calcula de la misma forma, salvo que en este caso los miembros de la ecuación estarían compuestos de elementos individuales,

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1nm} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2nm} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{nc1} & A_{12} & \cdots & A_{ncnm} \end{bmatrix} \quad [97]$$

$$[WW] = \begin{bmatrix} [WW]_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & [WW]_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & [WW]_{nc} \end{bmatrix} \quad [98]$$

$$[QQ] = \begin{bmatrix} [QQ]_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & [QQ]_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & [QQ]_{nm} \end{bmatrix} \quad [99]$$

### **Extensiones del Algoritmo**

DMC tal y como se ha expuesto admite un número diferente de variables manipuladas frente al de controladas. En la resolución llevaría a que si los grados de libertad no son suficientes no se alcanza algún punto de consigna, y si sobran grados de libertad, es posible utilizar otras variables manipuladas libremente para conseguir otros objetivos (reducción de consumos energéticos, por ejemplo).

Dos mejoras importantes se han introducido en la formulación anterior. Por un lado, la adición de señal en adelante para aquellas variables que sólo se deseen como disturbios. Por otro, el manejo de restricciones lleva a una formulación de la función objetivo cuya minimización se realiza mediante programación cuadrática.

### **IDCOM**

Richalet *et al.* (1976) realizaron la primera descripción de una



aplicación de control multivariable, a la que llamaron *Model Predictive Heuristic Control (MPHC)*, más conocida en su versión comercial por **IDCOM**.

**IDCOM** utiliza modelos de impulso finito para la representación del proceso.

$$y_{p(k+n)} = b_k + \sum_{i=1}^N h_i u_{k+n-i} \quad [100]$$

$$b_k = y_{m(k)} - \sum_{i=1}^N h_i u_{k-i} \quad [101]$$

y como en el caso de **DMC**, el sumatorio se trunca cuando prácticamente el efecto de los términos restantes sea despreciable.

En **IDCOM** el ajuste del controlador que en **DMC** se realizaba para la variable controlada con el *factor de supresión de movimiento*, en esta ocasión se realiza especificando la trayectoria deseada de la variable controlada, normalmente a partir de un modelo de primer orden más tiempo muerto.

En la Fig. 42 se muestran algunas curvas de respuesta de la variable controlada y el tratamiento que realiza el controlador IDCOM según el tipo de control y el concepto de trayectoria de referencia.

IDCOM también permite el manejo de sistemas no cuadrados (diferente número de variables manipuladas que de controladas) y la formulación de restricciones.

Una modificación del modelo original de IDCOM llevó a la formulación de dos funciones objetivo para definir el ajuste del controlador y el cálculo de las variables manipuladas (IDCOM-M) (Grosdidier et al. 1988).

De una parte, se minimiza una primera función objetivo cuadrática, formulada para las salidas de la Planta (variables controladas) y sus restricciones. Cada variable se calcula en las predicciones no para toda la trayectoria sino para un subconjunto de ellas, llamado *puntos de coincidencia*.

Si quedan grados de libertad en el cálculo de las variables

manipuladas, entonces entra en juego una segunda función objetivo cuadrática, que sin violar los valores de las variables controladas lleva a las manipuladas restantes a su *valores de descanso (Ideal Resting Values, IRV)* previamente definidos. Estos valores son los que normalmente se utilizan para minimizar consumos energéticos, maximizar rendimientos o caudales de alimentación, etc.

---

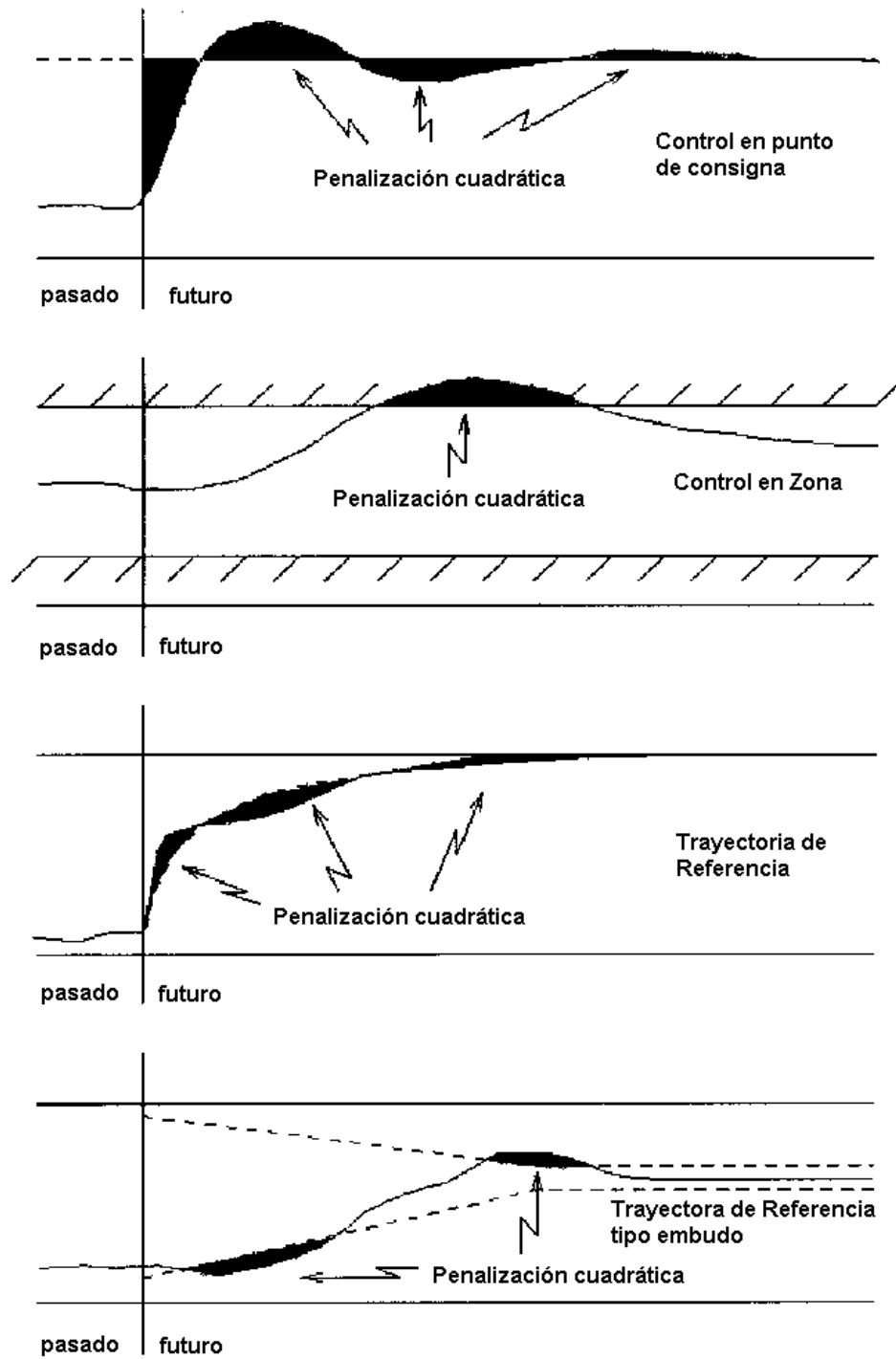


Fig. 42. Cálculo del error y concepto de la Trayectoria de Referencia en IDCOM.

Más información sobre otros aspectos del control multivariable, como estabilidad de la matriz de control, función objetivo, formulación de restricciones, trayectorias, etc., se pueden encontrar en otros textos, como en Qin y Badgwell, (1996).

En este trabajo se ha utilizado el algoritmo IDCOM-M para el control de diversas aplicaciones con modelos de impulso finito generados con técnicas de calibración multivariante.

En la siguiente tabla se aprecian las referencias de distintas compañías que suministran control multivariable y el tipo de tecnología que aplican.

*Tabla 3 . Lista parcial de las Compañías más importantes que comercializan programas de Control Predictivo Multivariable. Tomado y traducido de Qin y Badgwell, (1996).*

COMPAÑÍA	ACRÓNIMO	NOMBRE PRODUCTO (TRADUCIDO)
Adersa	HIECON	Control Jerarquizado con Restricciones
	PFC	Control Predictivo Funcional
	GLIDE	Paquete de identificación
DMC Corp. (ahora ASPEN)	DMC	Control Matriz Dinámica
	DMI	Identificador
Honeywell-Profimatics, ahora Honeywell-Hispec	RMPCT PCT	Control Predictivo Multivariable Robusto Control Predictivo
Setpoint Inc., (ahora ASPEN)	SMCA	Arquitectura de control Multivariable de Setpoint
	SMC-Idcom	Constructor de modelos
	SMC-Build	Identificador
	SMC-Model	
Treiber Controls	OPC	Control Predictivo óptimo

Como puede observarse en la Tabla 4, las aplicaciones de control multivariable están muy extendidas, principalmente en el área de Refino y petroquímica.

*Tabla 4 . Clasificación por proveedor e industria y número de aplicaciones de Control Predictivo Multivariable. Tomado y traducido de Qin y Badgwell, (1996).*

INDUSTRIA	DMC	SETPOINT	HONEYWELL	ADERSA	TREIBER	TOTAL
Refino	360	320	290	280	250	1500
Petroquímica	210	40	40			290
Química	10	20	10	3	150	193
Papel	10		30		5	45
Gas			5			5
Servicios			2			2
Separación Aire					5	5
Minas/ metalurgia		2		7	6	15
Alimentación				41		41
Hornos				42		42
Defensa				13		13
Automoción				7		7
Otros	10	20		45		75
Total	600	402	377	438	416	2233
Primera aplicación	DMC:1985	IDCOM-M:1987 SMCA: 1993	PCT: 1984 RMPCT: 1991	IDCOM:1973 HIECON:1986	OP	
Mayor Aplicación	603x283	35x28	28x20		24x19	

**Capítulo 5**  
**TÉCNICA EXPERIMENTAL**

---

## 5. Técnica experimental

### 5.1. Instalación experimental

Este trabajo de investigación se ha realizado en las instalaciones que la compañía CEPSA posee en la Refinería Tenerife. Se trata de la refinería más antigua del país; comenzó su actividad en 1930 y con una capacidad de 250.000 Tm/año de crudo. Estaba constituida por una Unidad de Destilación de Crudo, un *Visbreaker* y una Central de producción de Electricidad y Vapor.

Durante los 68 años de actividad ha sufrido ampliaciones de capacidad, instalación de nuevas unidades y modernización de la Organización. En estos momentos, la complejidad de la Refinería se enmarca dentro del grupo llamado *hidroskimming*, concretamente *hidroskimming-visbreaking*<sup>51</sup>. La capacidad actual de la Refinería es de 4.5 Mt/año. La estructura de la producción está adaptada al mercado canario, completando la demanda con la importación de fracciones de crudo como Naftas, Keroseno y Fuel.

La complejidad de una Refinería es directamente proporcional al número y tipo de unidades que la forman. Esta complejidad en el número de procesos se refleja en los rendimientos que se producen para un mismo crudo. Mientras en una Refinería de tipo *hidroskimming* los rendimientos en *fuel*<sup>52</sup> dependen claramente del tipo de alimentación, el incremento de la complejidad de la Refinería mediante la incorporación de unidades de transformación aumenta el valor neto del crudo. Por ejemplo, en una refinería de máxima gasolina, los gasóleos se transforman a gasolina en unidades de FCC<sup>53</sup>.

---

<sup>51</sup> La palabra “*hidroskimming*” procede del proceso de destilar directamente el crudo “*skimming*” y posteriormente someter a tratamiento con Hidrógeno “*Hidro*” las fracciones más ligeras para de este modo eliminar el azufre procedente del crudo, (proceso de hidrodesulfuración). “*Visbreaking*” procede de la operación de obtener a partir de *fuel*, productos más ligeros por rotura “*BREAKING*” de las moléculas mayores y reducir la viscosidad “*VIScosity*”.

<sup>52</sup> Fuel, fracción pesada que se obtiene por destilación atmosférica del crudo.

<sup>53</sup> FCC, “*Fluid Catalytic Cracking*”, unidad de craqueo catalítico en lecho fluidizado.

---

L.P.G. y GAS	3,2
NAFTAS	1,2
GASOLINAS	12,1

**TOTAL LIGEROS 16,5**

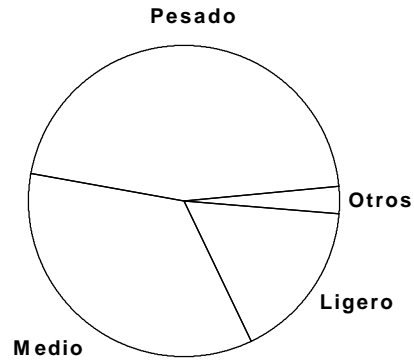
KEROSENO	13,1
GASÓLEOS	21,7

**TOTAL MEDIOS 34,8**

FUELES	40,9
ASFALTOS	4,9

**TOTAL PESADOS 45,8**

**OTROS (AZUFRE,CARGA FCC,LCO) 2,9**



**TOTAL : 4.248.900 Tm/Año**

Fig. 43. Salidas de productos, año 1995. (CEPSA, 1996)

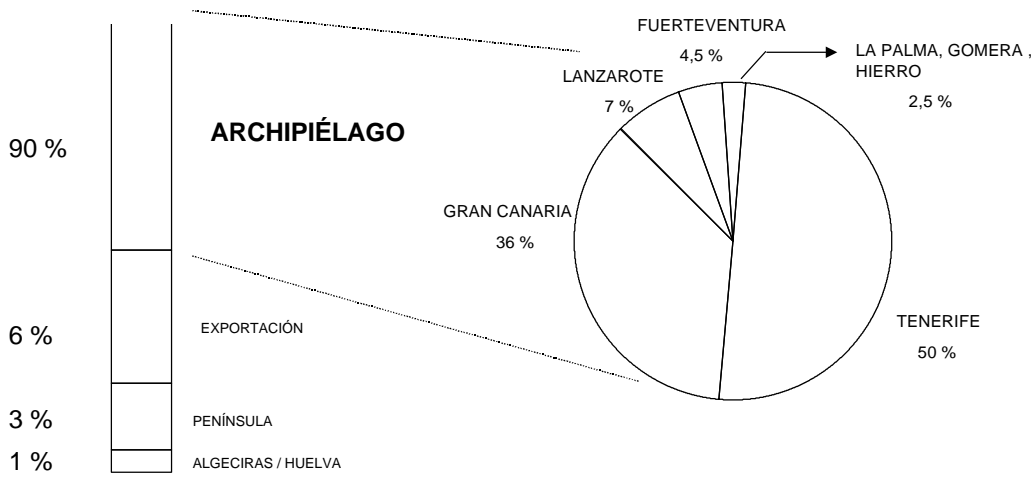


Fig. 44. Balance de productos, mercado canario, (CEPSA, 1996).



*Tabla 5. Distribución de productos en una refinería «hidroskimming» y otra de máxima gasolina, con crudo pesado (Maya). Traducido de Leffler (1984).*

	Refinería «Hidroskimming»			Refinería máxima Gasolina		
	% Volumen	Costo Unitario, \$	Total parcial, \$	% Volumen	Costo Unitario, \$	Total parcial, \$
Crudo Maya	100	26	26	100	26	26
Gasolina	10	32	3.2	25	32	8
Keroseno	5	32	1.6	5	32	1.6
Gasoil	20	31	6.2	25	31	7.75
Fuel	60	27	16.2	45	27	12.15
Cambio Volumen, %	-5			10		
Total Producido	100		27.2	90		29.5
Costos Operativos, \$/bbl	100	1	1	100	3	3
Margen Operación, \$/bbl	100		<b>0.2</b>	100		<b>0.5</b>

*Tabla 6. Distribución de productos en una refinería «hidroskinning» y otra de máxima gasolina, con crudo ligero (Texas ácido). Traducido de Leffler (1984).*

	Refinería «Hidroskimming»			Refinería máxima Gasolina		
	% Volumen	Costo Unitario, \$	Total parcial, \$	% Volumen	Costo Unitario, \$	Total parcial, \$
Crudo Texas ácido	100	28	28	100	28	28
Gasolina	30	32	9.6	50	32	16
Keroseno	10	32	3.2	19	32	6.08
Gasoil	20	31	6.2	17	31	5.27
Fuel	35	27	9.45	20	27	5.4
Cambio Volumen, %	5			-6		
Total Producido	90		28.45	112		32.75
Costos Operativos, \$/bbl	100	1	1	100	3	3
Margen Operación, \$/bbl	100		<b>-0.55</b>	100		<b>1.75</b>

Como se puede observar en los rendimientos, la REALIZACIÓN<sup>54</sup> de una

<sup>54</sup> Realización, Beneficio de una refinería por unidad de crudo procesado. Normalmente se expresa en \$/bbl (dólares por barril). 1 m<sup>3</sup> equivale a 6.3 bbl.

Refinería reside en su complejidad y del crudo que destile. En líneas generales, los crudos pesados favorecen a las Refinerías poco complejas o *Hidroskimming*, y los crudos ligeros a las refinerías más complejas (Leffler, 1984).

La procedencia de los crudos que se tratan en la Refinería es muy variada y depende de muchos factores, como oportunidades de mercado, distribución de productos, demanda y características de las unidades de fabricación.

Tabla 7. Detalle de los crudos procesados durante 1995, (CEPSA, 1996).

	ZONA	CRUDO	PAÍS	AZUFRE	% TOTAL
25 %	• CARIBE / GOLFO MÉJICO	Maya	Méjico	3,35	15
		Merey	Venezuela	2,71	9
		Bachaquero	Venezuela		
18 %	• EUROPA	Ural Pesado	C. E. I.	1,51	17
		Flotta	Mar Norte (R.U.)	1,19	
		Oseberg	Mar Norte (Nor.)	0,28	
3 %	• GOLFO PÉRSICO	Irán Lig. y Pes.	Irán	1,4/1,7	3
54 %	• AFRICA OCCIDENTAL	Cabinda	Angola	0,17	22
		Kole	Camerún	0,32	19
		Bonnys Lig./Med.	Nigeria	0,1/0,2	4
		Mandji	Gabón	1,16	3
		Escravos	Nigeria	0,14	
		Forcados	Nigeria	0,19	
		Brass River	Nigeria	0,09	
		Lion	Costa Marfil	0,08	
		Djeno	Congo	0,30	

## Diagrama de Fabricación Refinería

La Refinería Tenerife se enmarca dentro de una parcela de aproximadamente 500.000m<sup>2</sup>, en Santa Cruz de Tenerife. Los tanques de alimentación están en la parte más alta del terreno, permitiendo el suministro de las unidades por gravedad.

El esquema de fabricación de la Refinería muestra un grado de complejidad pequeño, propio de la categoría *hidroskimming visbreaking* en la cual se enmarca.

No obstante, frente a otras disposiciones de plantas en las que la energía eléctrica se importa, la Refinería produce su propia energía eléctrica y vapor. Además, tiene en sociedad con UNELCO una planta de Cogeneración de energía eléctrica que produce 38 MW, que se vierten íntegramente a la red. En esta planta existe una Unidad de Potabilización de Agua de Mar de múltiple efecto, que suministra agua de calidad para la posterior generación de vapor de alta presión.

A continuación se describirán someramente las unidades de que dispone la Refinería. Se indican aquellos parámetros que son necesarios para el control de las unidades desde el punto de vista de rendimientos y calidades. Es posible utilizar en estos casos las técnicas estadísticas y la metodología que se propone en este trabajo.

### **Unidades de Destilación**

La Unidad de Destilación es la encargada de realizar la separación de las fracciones presentes en un crudo, dependiendo ésta del intervalo de puntos de ebullición. En la Refinería existen dos unidades de destilación, CADU-2<sup>55</sup> y FOSTER-2<sup>56</sup>. CADU-2 realiza una destilación atmosférica y FOSTER-2 una primera etapa atmosférica y una segunda etapa a vacío.

---

<sup>55</sup> CADU-2, "Crude Distillation Atmospheric Unit".

<sup>56</sup> FOSTER, El nombre procede de la empresa que diseñó la unidad, Foster-Wheeler.

---

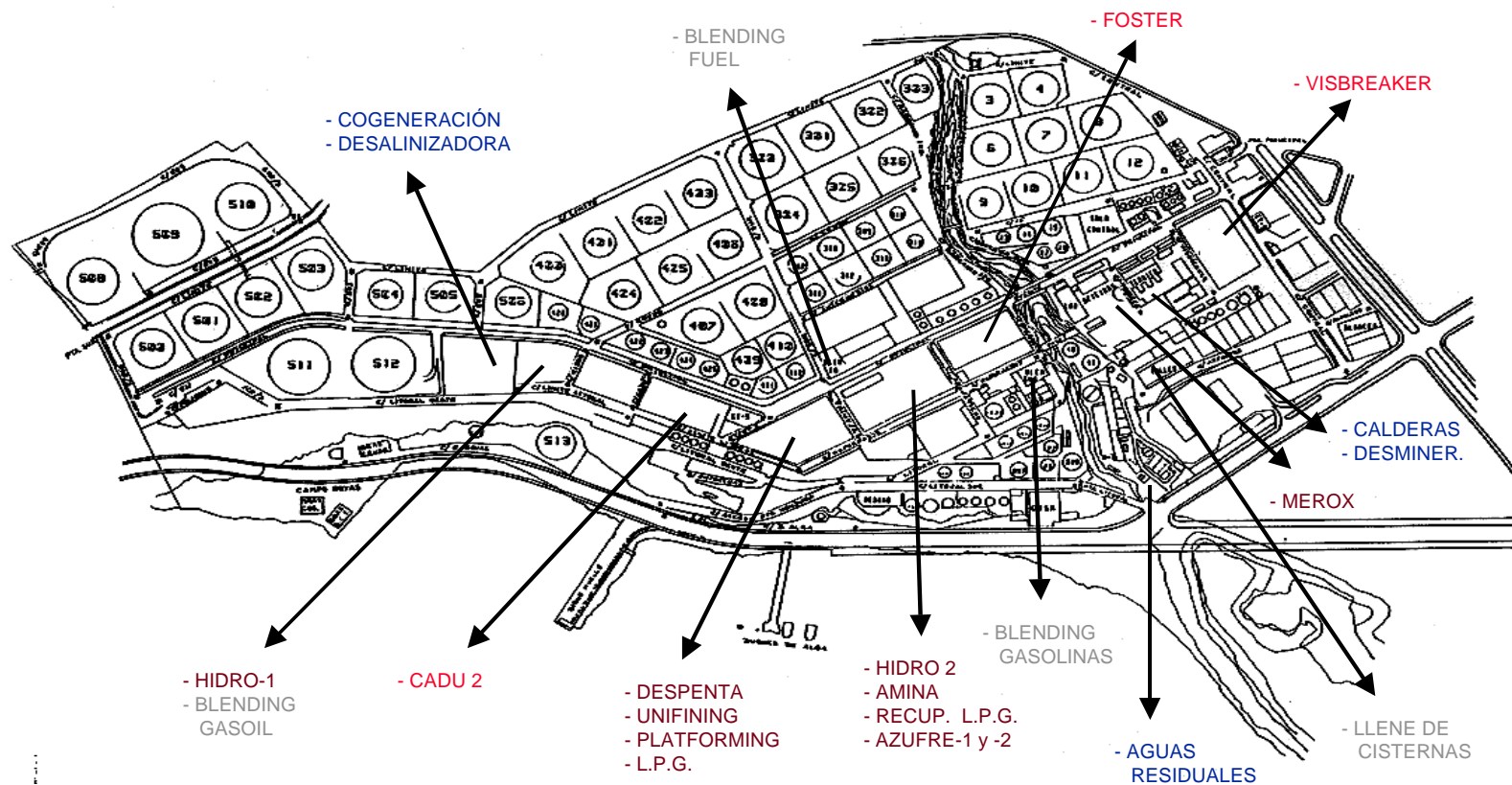


Fig. 45. Plano de la Refinería Tenerife, (CEPSA, 1996).

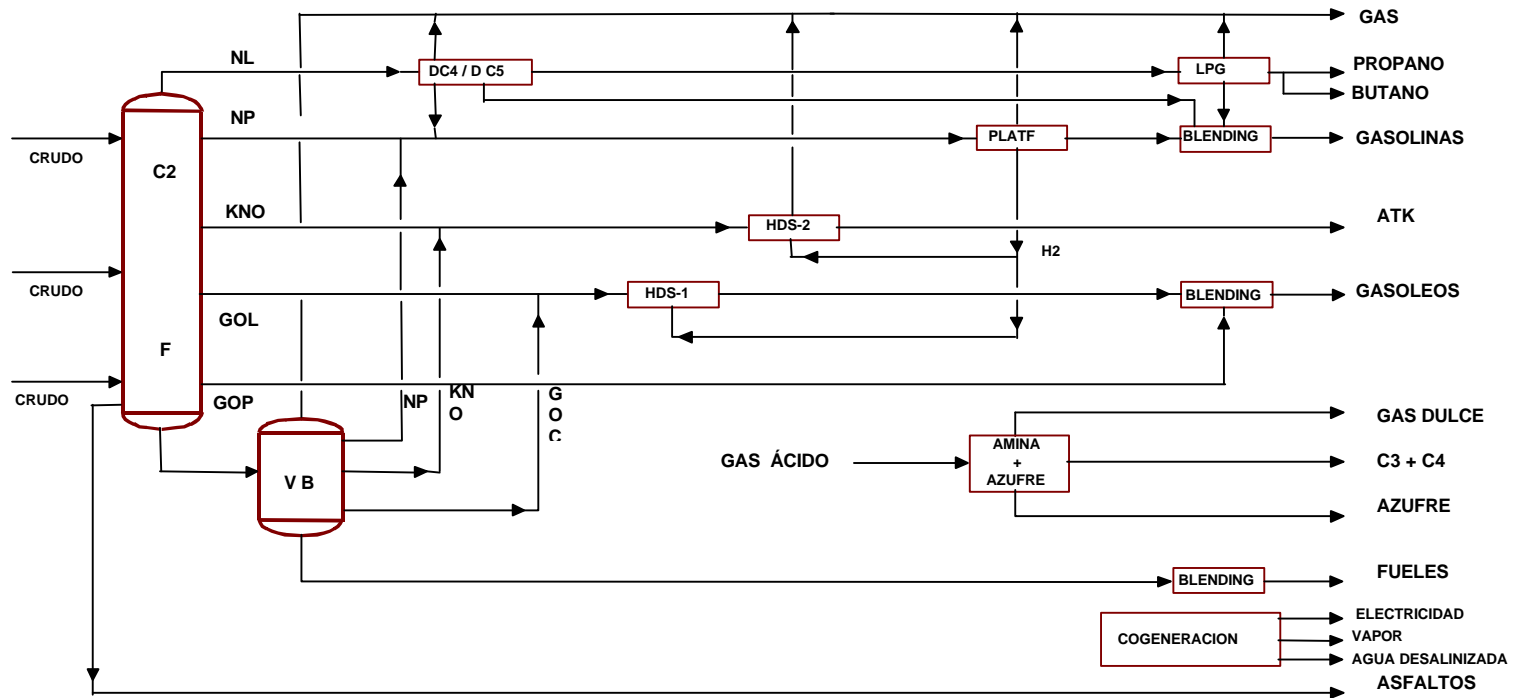


Fig. 46. Diagrama de fabricación Refinería Tenerife, (CEPSA, 1996).

En una Unidad de Destilación, el crudo es precalentado en un tren de intercambio con los productos producidos en la Unidad teniendo en cuenta su gradiente de temperaturas. Una vez precalentado el crudo, se realiza la operación de desalado, que consiste en la adición de agua, aditivos y en someter el crudo a alta tensión. De esta manera, las sales que acompañan al crudo se separan con el agua y se decantan. El crudo así desalado se envía de nuevo a precalentamiento y de ahí al Horno atmosférico. En el Horno se alcanza una temperatura de alrededor de 350-360°C antes de entrar en la columna de destilación fraccionada.

Además del producto de cabeza, nafta sin estabilizar y gases, la columna principal posee distintas extracciones laterales según el intervalo de puntos de ebullición y número de productos deseados. Normalmente, estas extracciones son, por orden de puntos de ebullición, nafta pesada, keroseno (KNO), gasoil ligero (GOL), gasoil medio (GOM) y gasoil pesado (GOP).

Para equilibrar el tráfico de líquido vapor en toda la columna, se extrae líquido de ciertos platos y se devuelven más fríos a la torre, aumentando a voluntad la carga de líquido en cada zona de la torre (reciclo).

Las extracciones laterales, antes de enviarse a su respectivo tanque, intercambian calor con el crudo de carga para ceder el máximo de su energía y luego se someten a refrigeración con agua.

La nafta sin estabilizar, procedente de la cabeza de la torre principal, se envía a una torre de estabilización para separar el LPG disuelto, que es enviado a la Planta de LPG. El fondo de esta torre (nafta estabilizada) se envía a la Despentanizadora..

La extracción de nafta pesada se envía a la Unidad de Reformado Catalítico para mejorar su número de octano.

Las unidades Hidro-2 e Hidro-1 desulfuran, respectivamente, el keroseno y el gasoil ligero.

---

## CADU-2

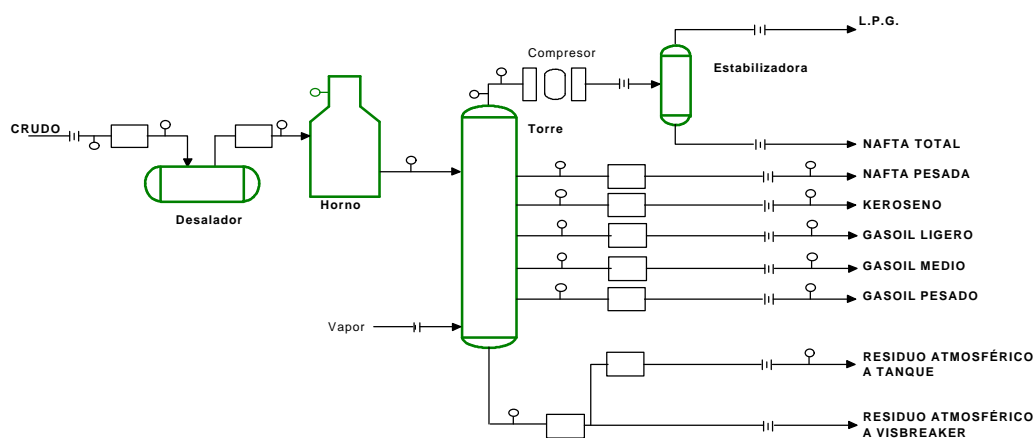
Los datos más sobresalientes de esta Unidad son:

*Tabla 8. Datos más importantes sobre la Unidad CADU-2*

FINALIDAD	Separación de fracciones de petróleo
CAPACIDAD	3.800.000 Tm/Año (78.000 B/D)

*Tabla 9. Características de control de la Unidad CADU-2.*

Corriente	Análisis o característica	Analizador
Nafta Total	Final Destilación	SI
Nafta Pesada	Final Destilación	SI
KNO	Freezing Point	SI
GOL	Punto de Nube	SI
	85% D86	SI
	95% D86	
GOM	Color	SI



*Fig. 47. Esquema simplificado del CADU-2, (CEPSA, 1996).*

## FOSTER-2

Tabla 10. Datos más importantes sobre la Unidad Foster-2

FINALIDAD	SEPARACIÓN DE FRACCIONES DE PETRÓLEO. OBTENCIÓN ASFALTOS
CAPACIDAD	700.000 Tm/Año (16.000 B/D)

Tabla 11 . Características de control de la Unidad Foster-2.

Corriente	Análisis o característica	Analizador
Nafta Total	Final Destilación	NO
KNO	Freezing Point	NO
GOL	Punto de Nube	NO
	85% D86	NO
	95% D86	NO
Residuo vacío	Penetración	NO
	T. Isoviscosidad	SI

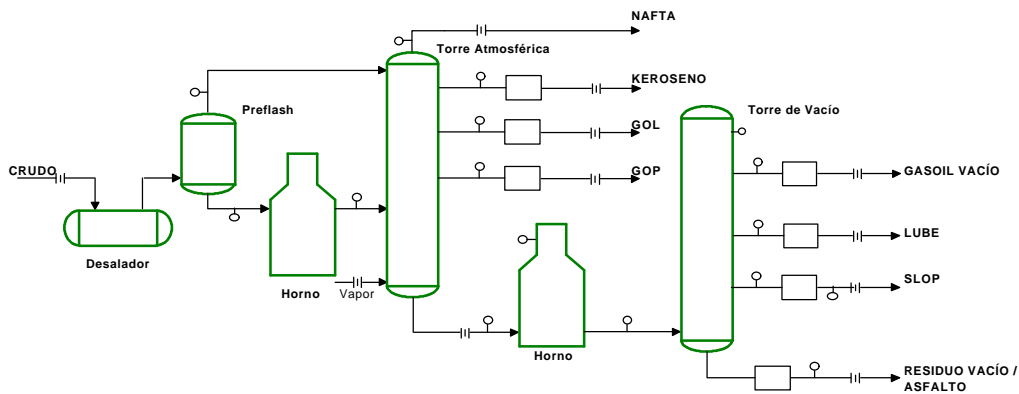


Fig. 48. Esquema simplificado de la Unidad Foster-2, (CEPSA, 1996).



### **Unidades de Conversión**

En estas unidades de proceso se efectúan transformaciones a las fracciones de petróleo para obtener otras de mayor valor añadido.

#### **VISBREAKER**

El Visbreaker es la Unidad responsable de efectuar una reducción de la viscosidad del residuo atmosférico mediante craqueo térmico. Con este proceso se consigue la rotura de las moléculas de alto número de átomos de carbono en otras cadenas más cortas. Como estas reacciones ocurren con defecto de hidrógeno, se producen compuestos olefinicos<sup>57</sup>.

Existen dos tipos fundamentales de Visbreaker. En el tipo *Coil* la carga reacciona en el propio Horno de calentamiento, y en el de tipo *Soaker* en un recipiente a la salida del Horno. La misión del *Soaker* es la de aumentar el tiempo de residencia para favorecer la extensión de la reacción.

El Visbreaker de Tenerife es de tipo *Soaker*. La alimentación de la Unidad (residuo atmosférico) procede de CADU-2, se precalienta y se envía al Horno para subir su temperatura a alrededor de 430 grados y desde aquí se conduce a la cámara de reacción *Soaker*. Se reduce luego la presión y se enfría el efluente del *Soaker* para parar la reacción de craqueo térmico, y se fracciona en una torre de destilación. En esta sección se separan los productos formados (gas, nafta, keroseno y gasoil) del residuo que no ha reaccionado.

La nafta se somete a estabilización para eliminar el LPG, que se envía a la planta de LPG.

---

<sup>57</sup> Las Olefinas generan multitud de problemas en los tratamientos posteriores como consumo excesivo de hidrógeno, formación de gomas, pérdida de carga en reactores, etc.

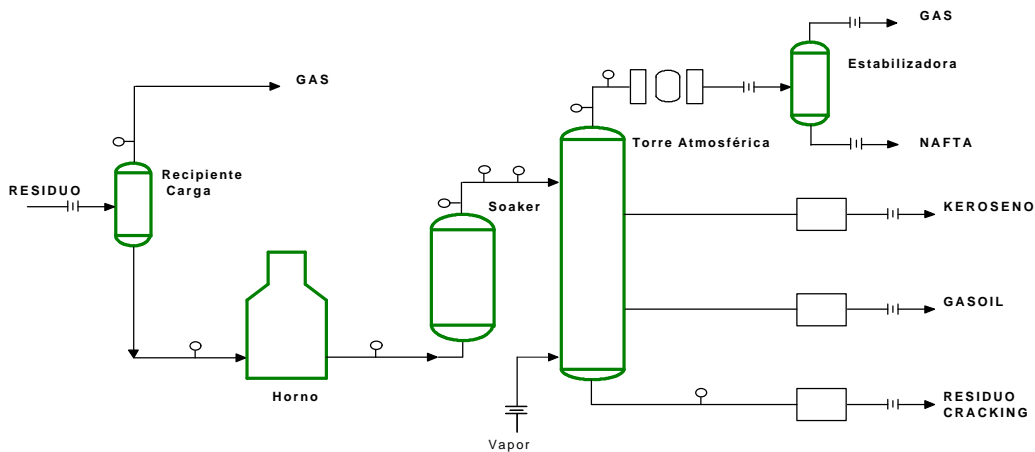
---

*Tabla 12. Datos más importantes sobre la Unidad Visbreaker.*

FINALIDAD	Conversión de residuos en fracciones de menor viscosidad
CAPACIDAD	2.000.000 Tm/Año (40.000 B/D)

*Tabla 13. Características de control de la Unidad Visbreaker.*

Corriente	Análisis o característica	Analizador
Nafta Total	Final Destilación	NO
Nafta Pesada	Final Destilación	NO
KNO	Freezing Point	NO
GOL	95% D86	NO
RESIDUO	Compatibilidad Móvil	NO



*Fig. 49. Esquema simplificado de la Unidad Visbreaker, (CEPSA, 1996).*

### **Unidades de Tratamiento**

Dentro de este apartado se indican aquellas unidades que alteran la composición química de la carga para obtener un producto de mejor valor añadido y que puede utilizarse directamente en la fabricación de los productos comerciales.

Básicamente se realizan dos procesos: por un lado, la eliminación de

azufre de las fracciones de LPG, nafta, keroseno, gasoil y gas de combustión y, por otro, reformado catalítico de las naftas.

### **Eliminación de azufre**

#### **Hidrodesulfuración.**

El proceso de Hidrotratamiento se emplea para eliminar los compuestos de azufre que acompañan a la nafta y al gasoil. Consiste en someter la carga a temperaturas entre 280 y 370 (dependiendo de la Unidad y tipo de carga), con hidrógeno y en presencia de un catalizador a base de Alúmina, Co y Mo o Alúmina, Ni y Mo. Las reacciones que ocurren son:

- 1.- Eliminación del azufre de los compuestos azufrados presentes en la carga (mercaptanos, disulfuros, tiofenos, etc.), formándose sulfhídrico.
- 2.- Eliminación de los compuestos de nitrógeno mediante su transformación en amoníaco.
- 3.- Eliminación de Oxígeno generando agua.
- 4.- Saturación de Olefinas.
- 5.- Eliminación de Metales, que se depositan sobre la superficie del catalizador.
- 6.- Eliminación de Haluros orgánicos.

El efluente del reactor, una vez enfriado, pasa a un recipiente para separar la alimentación desulfurada del hidrógeno sin reaccionar (se inyecta una cantidad superior a la demanda química para prevenir la deposición de coke), H<sub>2</sub>S, hidrógeno, y C1 a C4 procedentes de cracking. El líquido se envía a una torre de destilación para separar todo el sulfhídrico y productos ligeros que pudiera contener.

El hidrógeno que requiere la Unidad de Hidrodesulfuración procede de los gases obtenidos en el separador de la Unidad de Reformado Catalítico. La composición de estos gases depende no sólo de la

---

composición de la carga y de la severidad del tratamiento, sino también de la presión a la que se somete la separación en esa Unidad.

## HIDRO-1

La Unidad Hidro-1 realiza una desulfuración a alta presión del Gasoil procedente de la torre atmosférica de destilación (CADU-2 y FOSTER-2), así como del gasoil de *cracking* de la Unidad Visbreaker.

Tabla 14. Datos más importantes sobre la Unidad Hidro-1.

FINALIDAD	Desulfuración de destilados medios (Gasoil)
CAPACIDAD	570.000 Tm/Año (12.000 B/D)

Tabla 15. Características de control de la Unidad Hidro-1.

Corriente	Análisis o característica	Analizador
GOL	%p azufre	SI

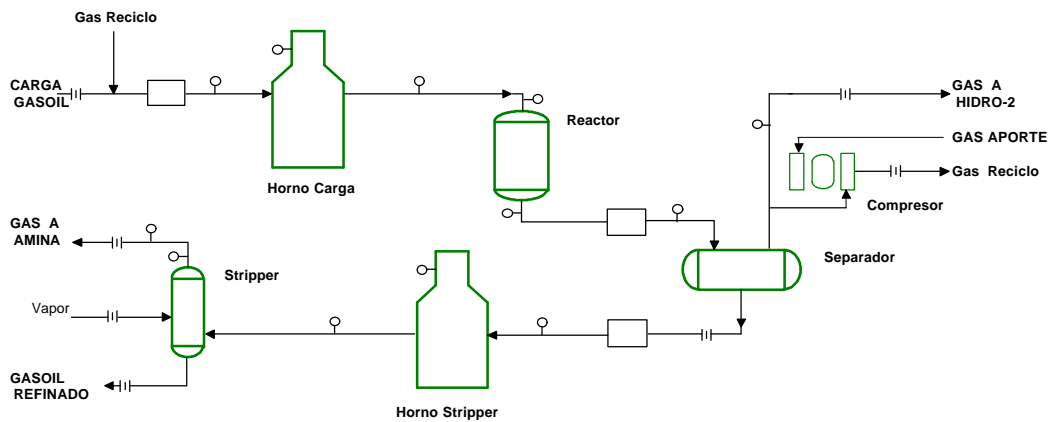


Fig. 50. Esquema simplificado de la Unidad Hidro-1, (CEPSA, 1996).

## HIDRO-2

Esta Unidad realiza la desulfuración a media presión del keroseno procedente de las Unidades CADU-2, Foster-2 y Visbreaker.

Tabla 16. Datos más importantes sobre la Unidad Hidro-2.

FINALIDAD	Desulfuración de destilados medios (Keroseno)
CAPACIDAD	580.000 Tm/Año (13.000 B/D)

Tabla 17. Características de control de la Unidad Hidro-2.

Corriente	Análisis o característica	Analizador
KNO	Corrosión a la Plata	NO

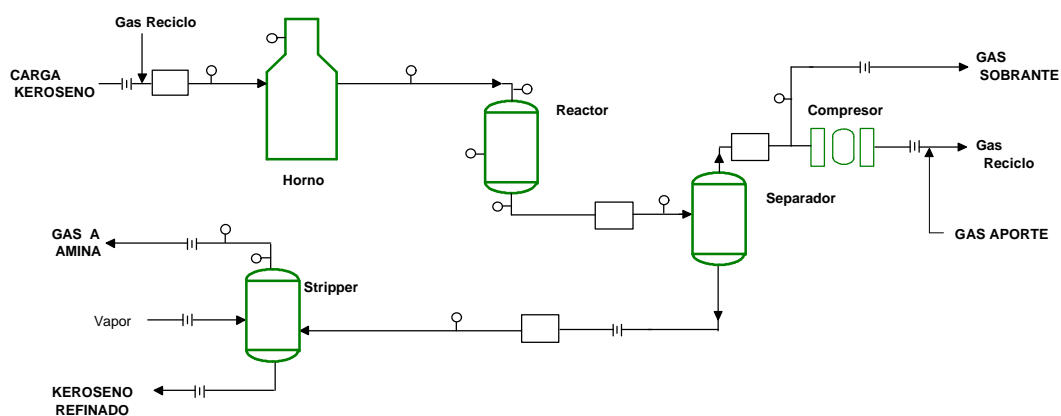


Fig. 51. Esquema simplificado de la Unidad Hidro-2, (CEPSA, 1996).

## Tratamiento de Gases

### AMINA-RLPG

El gas procedente de las unidades de hidrodesulfuración contiene importantes cantidades de  $H_2S$ , además de otros gases de alto valor económico (C1 a C4).

El tratamiento de estos gases para eliminar el  $H_2S$  y recuperar los productos más valiosos del resto se realiza en la *Planta de Amina* y luego en la *sección de recuperación LPG*. El gas  $H_2S$  separado se lleva a la *Planta de azufre* para convertirse en azufre elemental mediante el proceso Claus.

La Planta de amina consiste en una absorción selectiva del  $SH_2$  en una

torre mediante DEA (dietanolamina) y la posterior desorción por calor en otra torre. La amina empobrecida<sup>58</sup> regresa a la primera torre.

El gas exento de H<sub>2</sub>S entra en una torre para realizar la absorción de los compuestos de peso molecular más alto (C3 y C4) con nafta. El resto de gases (C1, C2 y C3 no retenido) se envía a la red de fábrica para su consumo en Hornos y en la Planta de Cogeneración.

La nafta rica en C3 y C4 pasa a otra torre para separar el LPG de la nafta original, que regresa al absorbedor.

*Tabla 18. Datos más importantes sobre la Unidad Amina-Recuperación LPG.*

FINALIDAD	Desulfuración (SH <sub>2</sub> ) y Recuperación L.P.G. del Gas de Refinería
CAPACIDAD	70.000 Tm/Año

*Tabla 19. Características e control de la Unidad Amina-Rec. LPG.*

Corriente	Análisis o característica	Analizador
Gas Dulce	Propano en gas de fábrica	SI

<sup>58</sup> Amina Pobre, "Lean Amine", Amina con poco contenido en SH<sub>2</sub>. Amina Rica, "Rich Amine", Amina con alto contenido en SH<sub>2</sub>.

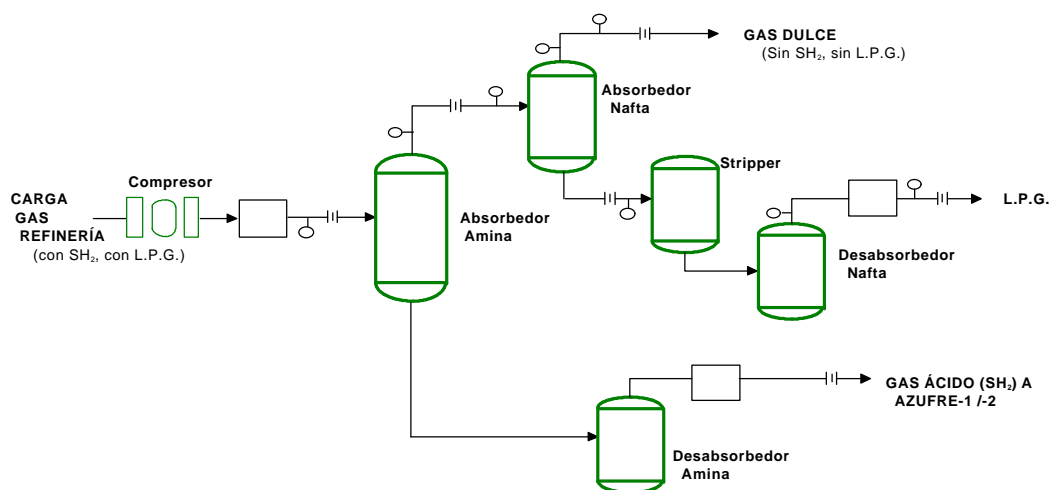


Fig. 52. Esquema simplificado de la Unidad Amina-Recuperación LPG, (CEPSA, 1996).

## PROCESO MEROX

El proceso Merox, original de UOP<sup>59</sup>, consiste en la transformación de los compuestos de azufre (Mercaptanos) por oxidación con Oxígeno en presencia de un catalizador líquido a disulfuros. El catalizador se regenera con sosa caústica.

Estos compuestos ya no tienen capacidad corrosiva y no necesitan separarse del producto final. No obstante, si además de la especificación de corrosión se ha de cumplir la de azufre, es necesario separar disulfuros en un decantador.

Tabla 20. Datos más importantes sobre proceso Merox.

FINALIDAD	Anulación carácter corrosivo en L.P.G. y Naftas
CAPACIDAD	L.P.G. : 6.000 B/D; Naftas : 5.000 y 7.000 B/D

<sup>59</sup> UOP, Universal Oil Products Company.

Tabla 21 . Características de control de la Unidad Merox.

Corriente	Análisis o característica	Analizador
Nafta Ligera y LPG	Corrosión Cu	NO

Merox-endulzamiento : los Disulfuros acompañan al refinado

Merox-extracción : con extracción de Disulfuros

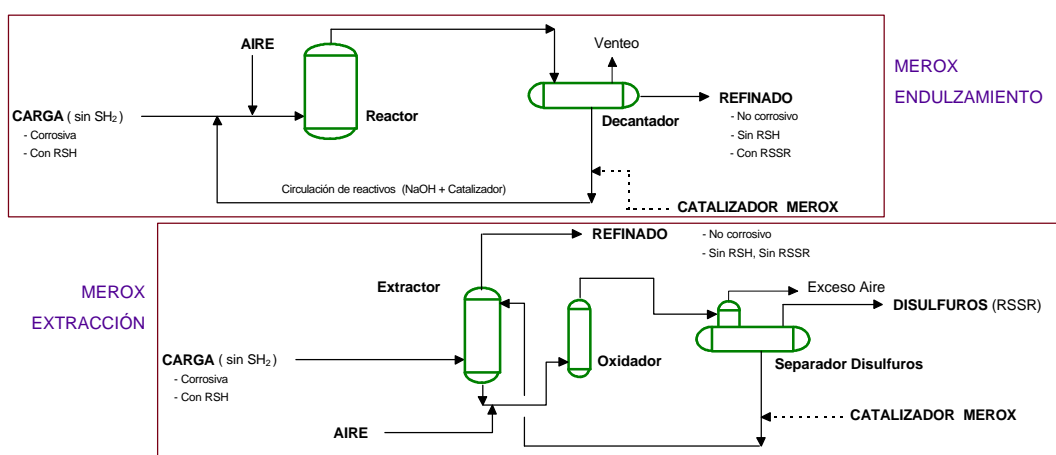


Fig. 53. Esquema simplificado del proceso MEROX, (CEPSA, 1996).

Dependiendo del producto que se desea endulzar, se definen en este caso distintos tipos de proceso MEROX.

### MEROX Gasolina

La nafta ligera se hace pasar por el proceso MEROX, pero no es necesario la separación de los sulfuros formados.

### MEROX LPG

En este caso se separan los disulfuros en un decantador. En la Refinería el MEROX LPG está situado después del tratamiento del LPG con amina y antes de la Despropanizadora (véase Producción de LPG).



## Reformado Catalítico

El proceso de Reformado catalítico se aplica a las naftas. Las distintas reacciones dan lugar a un producto con mayor contenido aromático que la nafta original.

La composición de la carga y el efluente de un reactor de Reformado Catalítico pueden verse en la Tabla 22. Las parafinas y los naftenos han disminuido y se han transformado en Aromáticos. Además también ocurren reacciones de isomerización y de *cracking* de las parafinas.

Aunque en la nafta original existan olefinas (más en naftas de cracking térmico que en las atmosféricas), debido a que antes del Reformado se coloca una Unidad de Desulfuración para prevenir la contaminación por azufre (veneno del catalizador de Reformado), en esa Unidad se generan reacciones de saturación.

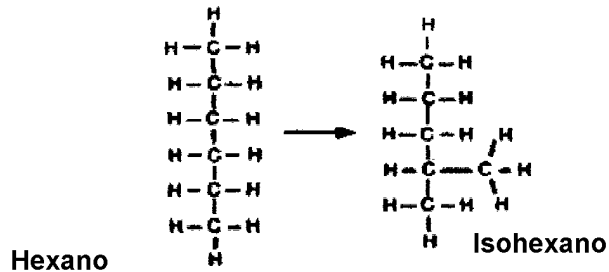
Tabla 22. Análisis PONA<sup>60</sup> ejemplo de una carga y producto de la Unidad de Reformado catalítico.

	ALIMENTACIÓN, % VOL.	REFORMADO, % VOL.
Parafinas	50	35
Olefinas	0	0
Naftenos	40	10
Aromáticos	10	55

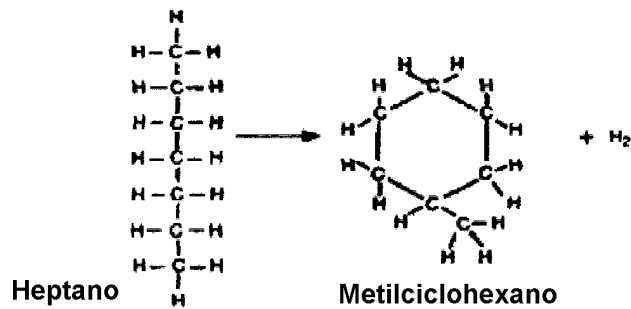
En resumen, las reacciones que ocurren en la Unidad de Reformado Catalítico se pueden ver en la Tabla 23

<sup>60</sup> P.O.N.A. Análisis del contenido en Parafinas, Olefinas, Naftenos y Aromáticos de una fracción de hidrocarburos.

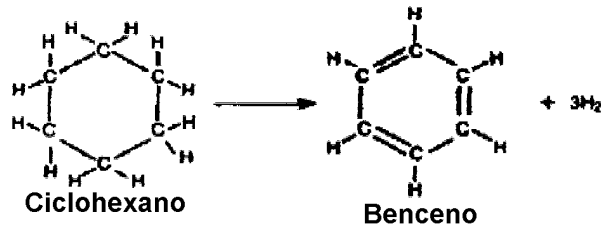
Tabla 23. Reacciones básicas de Reformado Catalítico.



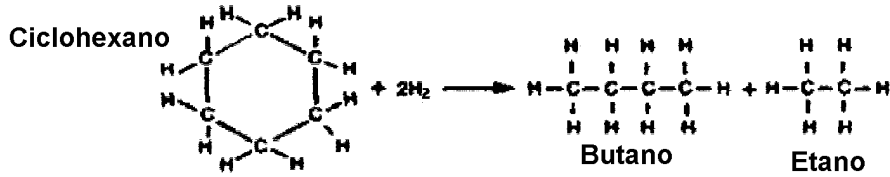
Parafinas a Isoparafinas



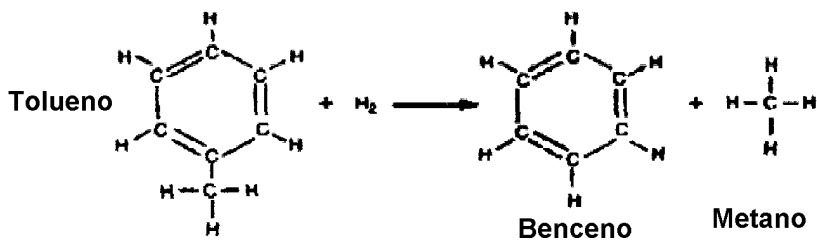
Parafinas a Naftenos



Naftenos a Aromaticos



Naftenos craquean a LPG



Cadenas laterales a Arom. y lig.

---

En las Unidades de Reformado se produce gas y LPG como resultado del *hidrocracking*<sup>61</sup>, que se destina al autoconsumo y a la Planta de LPG, respectivamente.

El aumento del contenido aromático y de isoparafinas afecta notablemente al número de octano, por lo que es una pieza clave en la fabricación de las gasolinas. También se utiliza el Reformado Catalítico para la obtención de aromáticos con destino a la petroquímica y para la producción de LPG.

Es posible, dependiendo del tipo de carga, de las condiciones operativas y del tipo de catalizador, modificar la extensión de las reacciones que ocurren en la planta, atendiendo en este caso al destino y a la demanda de la producción.

El catalizador de Reforming se desactiva irreversiblemente si se enfrenta a metales. Por el contrario, la desactivación es reversible frente a azufre y depósitos de coque. Existen distintos diseños, según se regenere de forma discontinua (*Semiregenerative*<sup>62</sup>) o de forma continua (CCR<sup>63</sup>).

Además del tipo de carga, las variables que controlan una Unidad de Reformado son:

- 1.- La presión de la reacción, controlada por el Separador, favorece las reacciones de hidrocracking y actúa en contra de las reacciones de deshidrogenación.
- 2.- La temperatura de reacción acelera casi todas las reacciones y marca la severidad de la operación.

---

<sup>61</sup> “*Hidrocracking*”, rotura, “*Cracking*” de moléculas de hidrocarburo en presencia de hidrógeno, “*Hidro*”.

<sup>62</sup> Reforming Semiregenerativo, el catalizador se encuentra en lecho fijo, y se regenera cuando las condiciones de producción lo aconsejan, parando la Unidad, regenerando y volviendo a circular producto hasta que el catalizador se vuelva a agotar. Las condiciones operativas no son muy severas en comparación con un CCR y pueden pasar meses entre regeneraciones.

<sup>63</sup> CCR, “Continuous Catalytic Reforming”, el catalizador se encuentra en circulación entre el Reactor y el Regenerador. Las condiciones de operación son más severas y la desactivación es mucho más rápida (minutos a horas).

---

- 3.- La disminución del volumen de carga a la Unidad conlleva un aumento del Tiempo de Residencia y, por lo tanto, de la severidad.
- 4.- El equilibrio entre el cloro y el agua en el gas de reciclo afecta de manera directa al contenido en Cloro del catalizador y al carácter ácido del soporte, siendo ambos responsables de buena parte de las reacciones.
- 5.- Otras variables inciden sobre el equilibrio de separación líquido-vapor (nafta reformada frente a LPG y gases) y determinan la composición química y, por tanto, el número de octano de la *platformada*. Entre estas variables se pueden citar la presión del separador y el fraccionamiento de la torre de separación de LPG.

En la Refinería Tenerife existe una Unidad de Reformado Catalítico llamada Platforming, diseñada por UOP.

### **PLATFORMING**

La Unidad de Reformado catalítico semiregenerativo Platforming está constituida por tres secciones: Despentanizadora, Unifining y Platforming.

#### **Despentanizadora**

La Despentanizadora es la Unidad encargada de la separación de pentanos de la nafta ligera procedente de la torre estabilizadora del CADU-2.

En la Refinería Tenerife no existe un proceso que pueda mejorar (planta de Isomerización) el número de octano de los pentanos procedentes de la cabeza de la torre despentanizadora y por ello se exportan casi en su totalidad. Ahora bien, debido a los requerimientos para la exportación, el coste de los fletes, la demanda del mercado, etc., la separación en la despentanizadora se realiza incluyendo algo de hexanos para obtener un producto en la cabeza de la torre con especificación de

---

13.5psig de PVR<sup>64</sup>.

El fondo de la Despentanizadora se envía a Unifining-Platforming.

Tabla 24. Datos más importantes sobre la Unidad Despentanizadora.

FINALIDAD	: Separación de pentanos en nafta de carga
CAPACIDAD	: 450.000 Tm/Año (12.000 B/D)

Tabla 25 . Características de control de la Unidad Despentanizadora.

Corriente	Análisis o característica	Analizador
Nafta Ligera	P.V.Reid	NO
Nafta Pesada	5%D86	NO

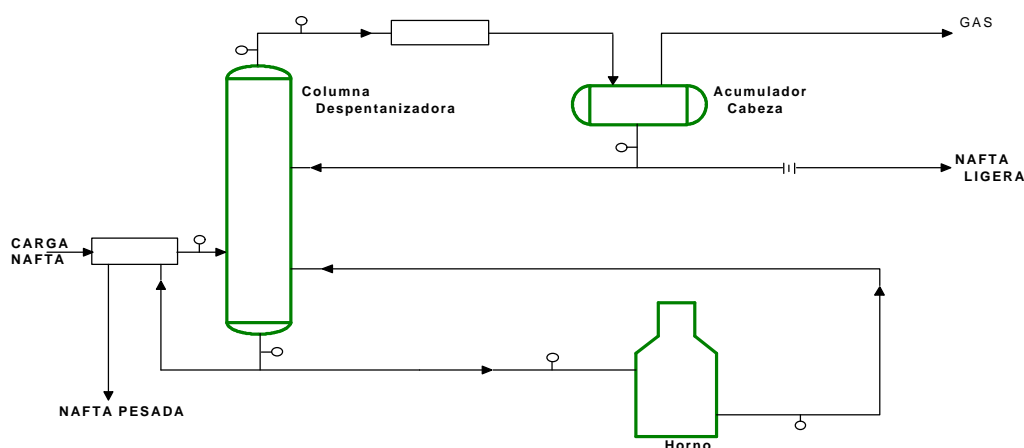


Fig. 54. Esquema simplificado de la Unidad Despentanizadora, (CEPSA, 1996).

## Unifining

Como se indicó anteriormente, la sección de Unifining es la encargada de eliminar el azufre presente en las naftas y evitar la desactivación en el catalizador de reforming.

<sup>64</sup> PVR, Presión de Vapor Reid. Estándar para la medida de la presión de vapor de un hidrocarburo que corresponde a la presión de vapor que posee el hidrocarburo a 100°F, 37°C.

Además de la eliminación del azufre, se producen aquí las mismas reacciones que en el resto de los catalizadores de hidrodesulfuración (véase la sección Hidrodesulfuración.).

El Unifining consta de Horno, Reactor, Separador y Stripper<sup>65</sup>. La nafta desulfurada y exenta de agua del fondo del Stripper pasa a la sección de Reforming para su tratamiento.

Tabla 26. Datos más importantes sobre la Sección Unifining.

FINALIDAD	Desulfuración de naftas
CAPACIDAD	600.000 Tm/Año (16.000 B/D)

Tabla 27. Características de control de la Unidad Unifining.

Corriente	Análisis o característica	Analizador
Nafta Desulfurada	Azufre, ppm	SI

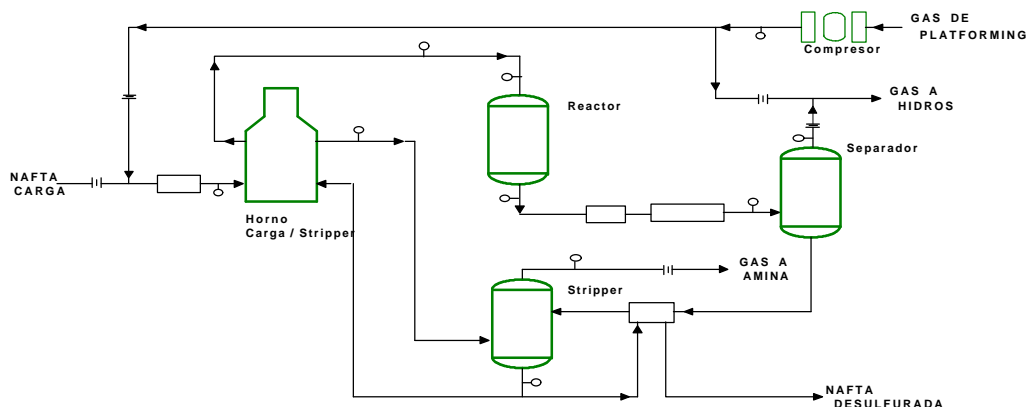


Fig. 55. Esquema simplificado de la Sección Unifining, (CEPSA, 1996).

<sup>65</sup> Torre encargada de la separación del H<sub>2</sub>S y del agua que proceda con la carga y de la que se haya formado en la reacción.

---

### **Platforming.**

Una vez precalentada la carga en los cambiadores carga efluente<sup>66</sup> de los reactores, pasa a la sección de reacción. Esta sección consta de tres reactores, dotados cada uno con un horno de carga. Con este diseño se consigue mantener un perfil de temperatura adecuado, dado el carácter fuertemente endotérmico de la mayoría de las reacciones, exceptuando *hidrocracking*.

Las reacciones de *hidrocracking* son más importantes en el tercer reactor y, por lo tanto, la disminución de la temperatura es mucho menor o puede incluso invertirse.

Esta disminución de temperatura es más importante en el primer reactor debido a que los naftenos se convierten casi en su totalidad en este reactor y su reacción es fuertemente endotérmica.

*Tabla 28. Datos más importantes sobre la Sección Platforming.*

FINALIDAD	Aumento del Número de Octano de la Nafta
CAPACIDAD	600.000 Tm/Año (16.000 B/D)

---

<sup>66</sup> Carga-efluente, Equipo de intercambio térmico entre la salida y la entrada de una Operación Unitaria (destilación, reacción).

---

Tabla 29. Características de control de la Unidad Platforming.

Corriente	Análisis o característica	Analizador
Nafta Reformada	RON	NO

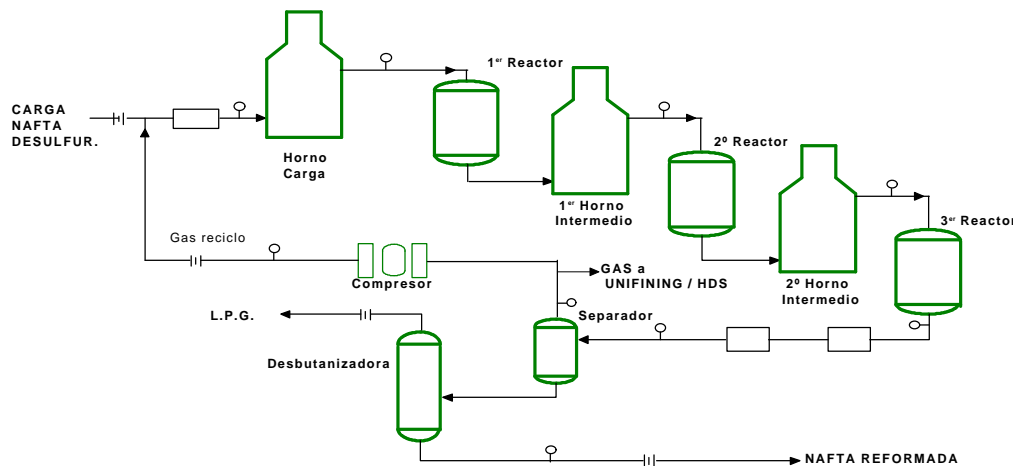


Fig. 56. Esquema simplificado de la Sección Platforming, (CEPSA, 1996).

El producto reformado sale del último reactor y después de intercambiar calor en los cambiadores E5 y refrigerarse, se separa de los gases en el separador y en el recipiente de expansión.

La nafta sin estabilizar pasa a una torre para separar el LPG producido y enviarlo a la Planta de LPG. La nafta reformada se extrae por el fondo de esta torre y constituye el principal componente de la gasolina que produce la Refinería.

### Producción de LPG

La Planta LPG, encargada de la producción de propano y butano, recibe su alimentación principalmente de la Unidad de Destilación CADU-2, del Platforming y en menor cantidad de la planta de Recuperación LPG. La planta consta de varias torres conectadas en serie y cada una de ellas realiza una función diferente.



La primera torre es la Desetanizadora, que se encarga de la separación del etano del resto de la alimentación. El fondo de esta torre pasa a la sección de AMINA (cuyo funcionamiento es análogo a la sección AMINA de la planta de recuperación de LPG) y a la sección MEROX (ya descrito).

El producto exento de mercaptanos y formado por C3, C4 y C5+ pasa a la torre despropanizadora para separar el propano y a la torre desbutanizadora para separar el butano de los pentanos. El propano y butano se envía a almacenamiento y los pentanos (en su mayor parte isopentanos) engrosa la producción de gasolinas.

Tabla 30. Datos más importantes sobre la Planta de LPG.

FINALIDAD	: Separación y tratamiento de Propano y Butano
CAPACIDAD	: 220.000 Tm/Año (6.000 B/D)

Tabla 31 . Características de control de la Unidad LPG.

Corriente	Análisis o característica	Analizador
Propano	%vol C2	SI
Butano	%vol C5	SI

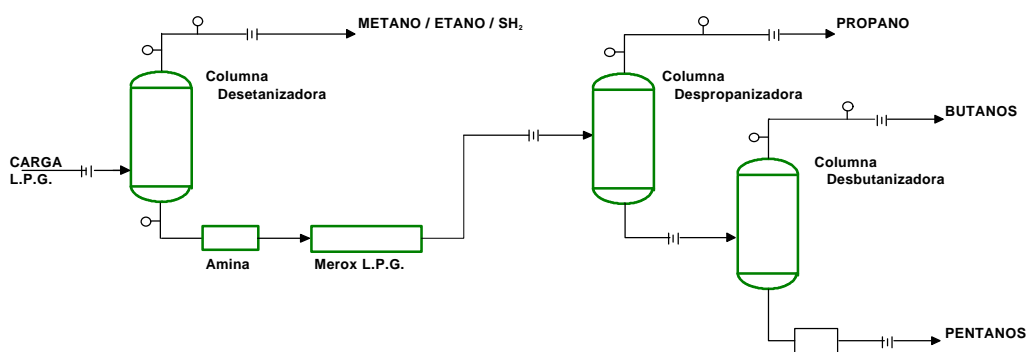


Fig. 57. Esquema simplificado de la Planta de LPG, (CEPSA, 1996).

## **Movimiento de Productos y Servicios**

Hasta ahora se ha descrito brevemente las unidades de producción. Sin embargo, una refinería necesita el apoyo de un sistema de movimiento de productos y servicios, como vapor y electricidad, sin los cuales no sería posible nada de lo anterior.

El área de movimiento es la encargada del suministro y distribución de los productos. Es responsable además de la preparación de los productos comerciales a partir de los anteriormente descritos. Esta área se conoce como «*Blending* de productos». Así tenemos los «*blending*» de gasolinas, gasoil, fuel, asfaltos, etc.

Aunque debido a las características especiales de esta área la automatización es difícil (extensión, número de válvulas, etc.), se han hecho importantes esfuerzos en este campo y son muy altos los beneficios potenciales derivados de la optimización de los procesos de mezcla.

### **Servicios Auxiliares**

En esta sección hemos de destacar la producción de electricidad, vapor y agua destilada.

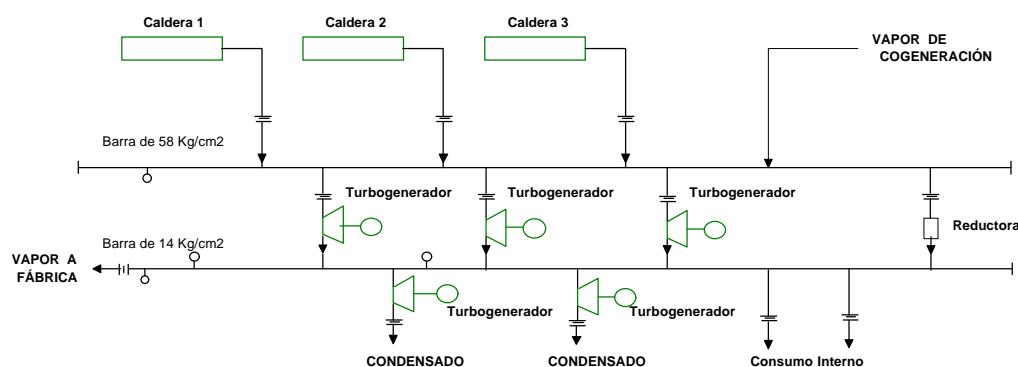
### **Central Térmica**

Tres calderas de producción de vapor de alta presión forman la central térmica de la refinería, que alimentan tres líneas de turbinas a contrapresión (media presión, 13kg/cm<sup>2</sup>) y una línea de turbinas a condensación. El vapor de media presión se utiliza en la fábrica para mover turbinas en las unidades de las que se obtiene un vapor de baja presión (3.5 kg/cm<sup>2</sup>) que se utiliza como vapor de «stripping» en las torres de destilación.

---

*Tabla 32. Datos más importantes sobre la Central Térmica.*

FINALIDAD	Producción de energía (Vapor y Electricidad) para el Centro
CAPACIDAD	165 Tm/hora Vapor 58 Kg/cm <sup>2</sup> y 24 Mw Electricidad 60 ciclos



*Fig. 58. Esquema simplificado de la Central Térmica, (CEPSA, 1996).*

### Desmineralizadora

La Planta desmineralizadora está constituida por líneas de tratamiento con resinas de intercambio iónico, y suministran agua tratada para las calderas de producción de vapor.

### Planta de Aguas Residuales

El tratamiento de los efluentes líquidos de la Refinería se realiza en la Planta de Aguas Residuales, constituida básicamente por separadores API, decantadores y reactores biológicos.

*Tabla 33. Datos más importantes sobre la Planta de Aguas Residuales.*

FINALIDAD	Depuración de aguas procedentes de procesos y deslastres
CAPACIDAD	600 m <sup>3</sup> /hora

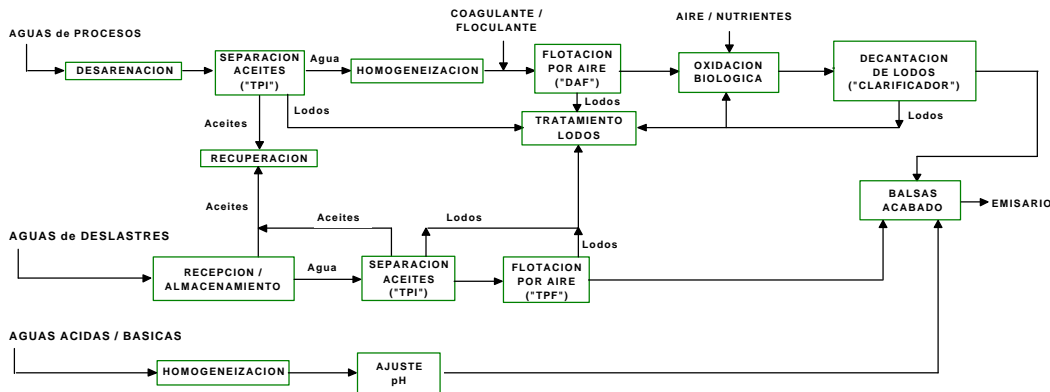


Fig.59. Esquema simplificado de la Planta de Aguas Residuales, (CEPSA, 1996).

## Cogeneración con Potabilización de agua de mar

La planta de cogeneración, perteneciente a una empresa participada por CEPSA y UNELCO, produce electricidad a partir de gas de fábrica (efluente de la planta de recuperación de LPG y excedente de gas de Platforming), que se quema en una turbina. La electricidad se exporta a la red de Tenerife.

Los gases de escape de la turbina (con alta concentración de oxígeno) se llevan a una caldera de pos-combustión para producir vapor de alta presión y enviarlo a las turbinas de generación de electricidad en la Refinería.

La planta de cogeneración posee una planta de potabilización de agua de mar de múltiple efecto, que utiliza como fuente térmica el calor procedente del vapor de escape.

El agua destilada se envía a través de la planta desmineralizadora a la Central Térmica para producir vapor.

Tabla 34. Datos más importantes sobre Cogeneración y Potabilización

FINALIDAD :	Producción de energía (Vapor Refinería; Electricidad red local) Producción de agua desalinizada
CAPACIDAD :	72 Tm/hora Vapor 58 y 20 Kg/cm <sup>2</sup> . 38 Mw Electricidad 50 ciclos - 3.600 m <sup>3</sup> /día agua desalinizada

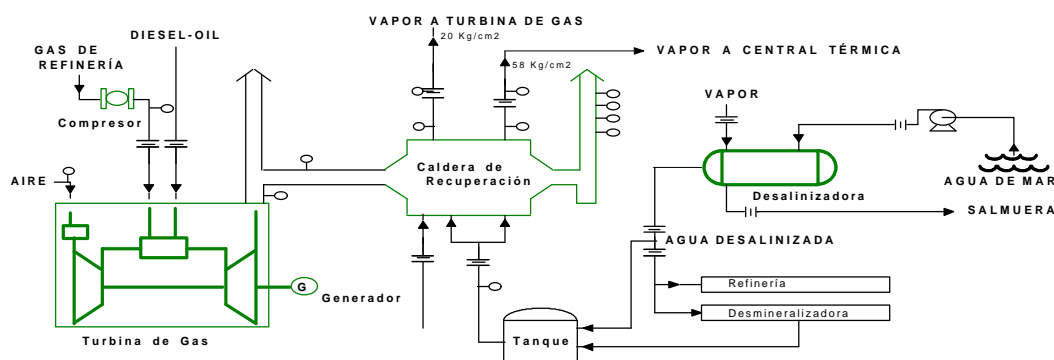


Fig. 60. Esquema simplificado de la Cogeneración y Potabilización de agua, (CEPSA, 1996).

## Sistemas de Información y Control

La Refinería necesita de un Sistema de Información para que todos sus departamentos (Fabricación, Planificación, Administración, etc.) puedan disponer de una fuente de información única para realizar el seguimiento, la programación y la gestión de toda la Planta.

En el proceso de modernización de la refinería, iniciado en 1986, se optó por una configuración de **sala de control centralizada** que produjo importantes beneficios en la gestión, control y seguridad de las instalaciones.

La pirámide clásica de Información (Fig. 61) está constituida en la Refinería por distintos Sistemas, totalmente integrados. Cada uno de estos sistemas está implementado según la topología representada en la Fig. 62.

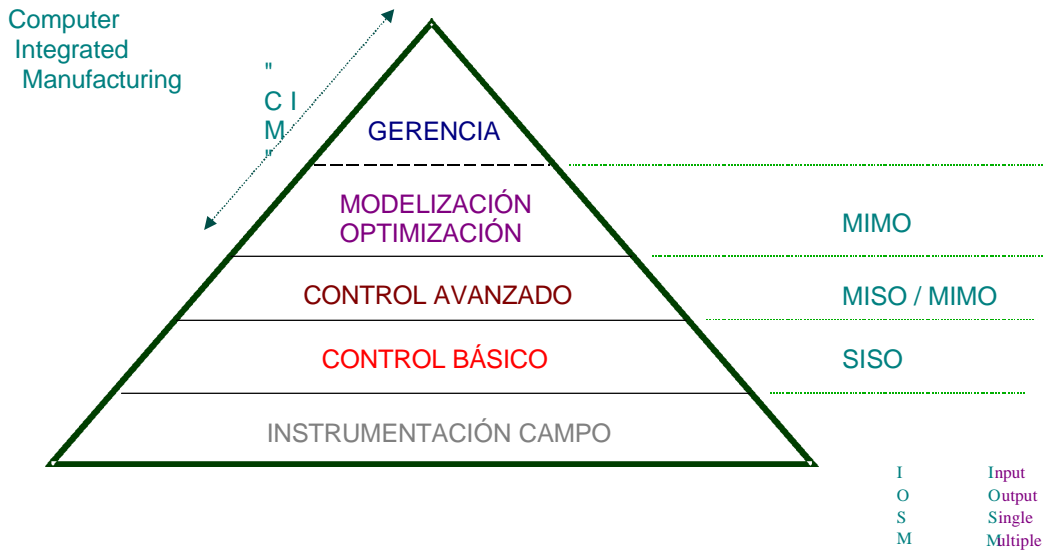


Fig. 61. Pirámide de Información y Control

### **Sistema de Control BÁSICO e Instrumentación**

El Control Básico se realiza en la Refinería por los sistemas de TDC-2000 y TDC-3000 de Honeywell en el área de Fabricación, y Centum CS de Yokogawa y Enraf-microlect en el área de Movimiento.

### **Instrumentación**

Los sensores, transmisores, válvulas y actuadores, al igual que los analizadores de proceso, proceden de distintos suministradores.

**Presión.** Medidores electrónicos, configurados en transmisión analógica 4-20mA. La exactitud garantizada es de 2% del rango.

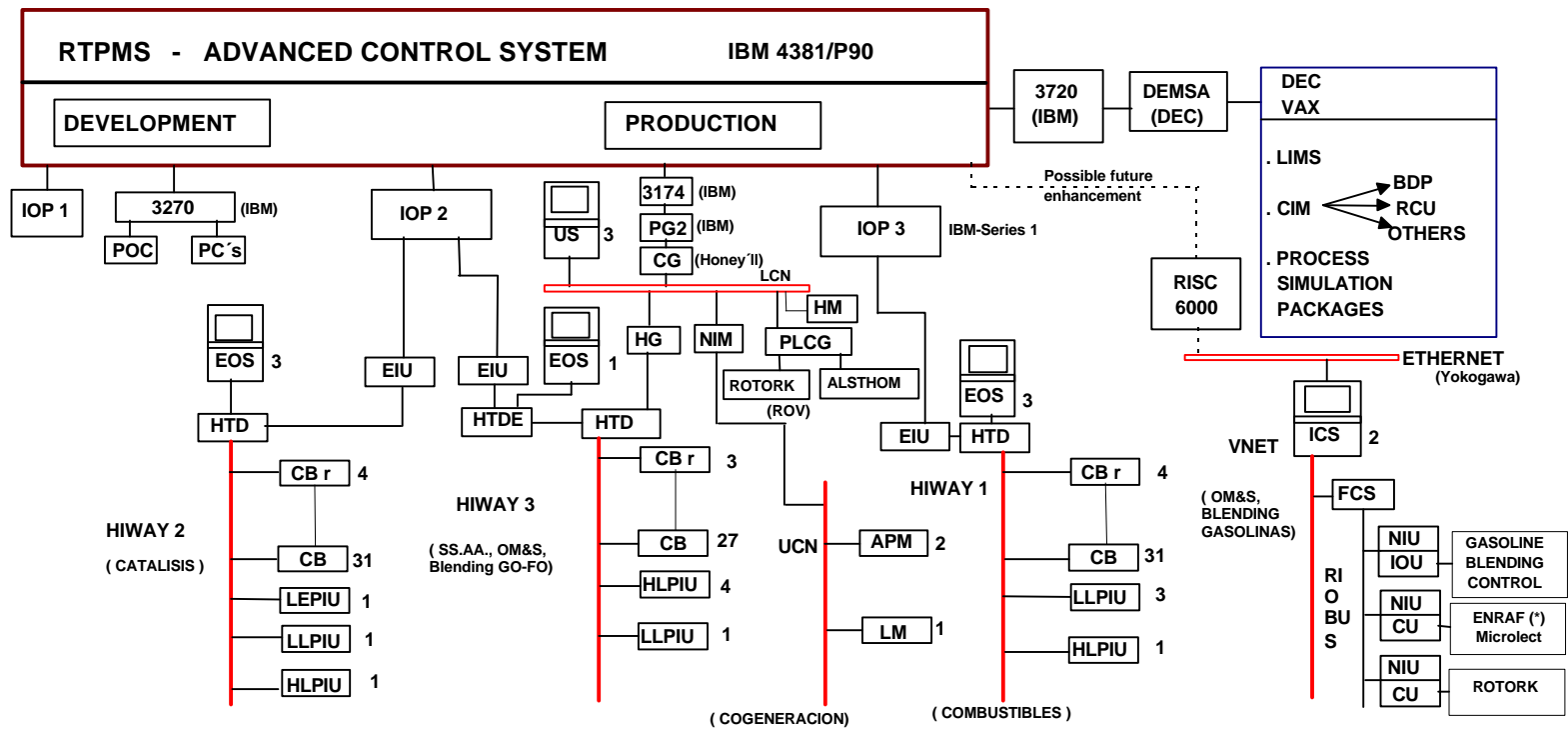


Fig. 62. Esquema general de los Sistemas de Información y Control Refinería Tenerife.

**Caudal.** En el área de proceso básicamente se utilizan las placas de orificio o medidores de diafragma, equipados con transmisores electrónicos de presión diferencial con exactitud 0.5% del rango. Los servicios de productos pesados también cuentan con medidores máxicos de efecto coriolis, aunque en menor número. El área de movimiento dispone también de contadores para realizar suministros.

**Temperatura.** Básicamente se utilizan termopares. Dependiendo del servicio, se pueden encontrar termopares tipo J o K, que pueden estar equipados con convertidores de mV/A o bien leerse directamente en mV. La exactitud garantizada es del 4% del rango

**Nivel.** Se emplean en su mayoría en el área de proceso medidores de tipo barra de torsión con transmisión electrónica 4-20mA. En el área de movimiento se localizan medidores de presión diferencial (esferas) y palpadores.

**Analizadores.** Existen diversos tipos (cromatógrafos, analizadores de oxígeno, hidrocarburos, azufre, densímetros, viscosímetros, destiladores continuos, etc.), conectados a panel en señal de 4-20mA y equipados con señales digitales de error y calibración.

## TDC-2000

El sistema TDC-2000 se utiliza para el control básico de las unidades del área de proceso. Consiste en dos redes de control, Hiway<sup>67</sup> de Combustibles y Hiway de Catálisis. En el primero están las Unidades de Destilación (CADU-2 y FOSTER-2) y el Visbreaker, y en el segundo el resto de las Unidades (Platforming, Amina-RLPG, Hidro-1, Hidro-2, y recuperación de azufre).

Esta red de comunicaciones conecta los controladores básicos (que realizan la función de control básico) entre si con las estaciones de

---

<sup>67</sup> Se conoce por Hiway a la red de control del TDC-2000.

---



Operador en la Sala de Control. Asimismo, los controladores están unidos al sistema de control Avanzado por medio de la interfase de comunicaciones IOP2<sup>68</sup> e IOP3. Las funciones que pueden realizar los controladores básicos son muy limitadas y están relacionadas con la construcción de reguladores PID en sus distintas versiones, cascadas y relación.

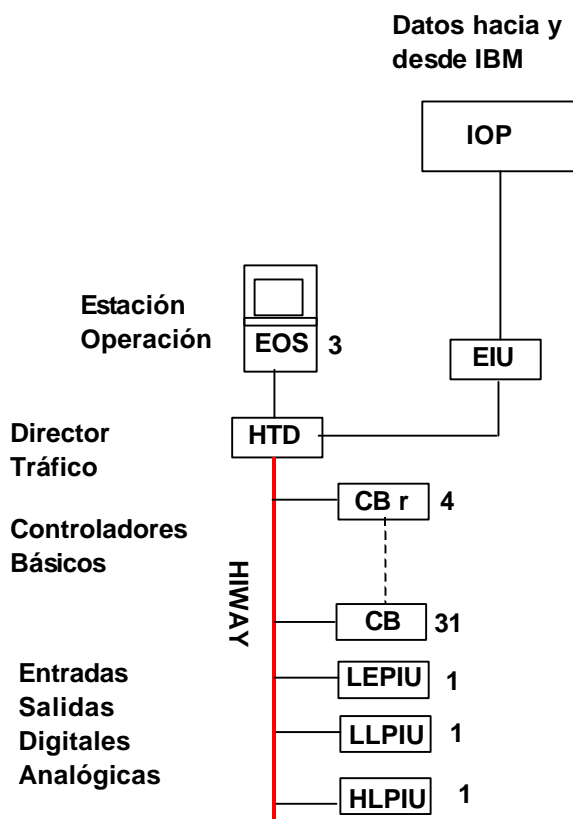


Fig. 63. Configuración de los equipos del Sistema TDC-2000.

## TDC-3000

El TDC-3000 corresponde a una evolución del TDC-2000 con la incorporación de dos nuevas redes. Una red adicional de control, llamada

<sup>68</sup> IOP, "Input Output Processor", es el nombre por el que se conoce el conjunto de interfases que conectan los sistemas de instrumentación al ordenador de control supervisorio, IBM.

UCN<sup>69</sup>, y una red de información llamada LCN<sup>70</sup>.

Las estaciones de Operación se conectan ahora a la LCN y esta red puede integrar diversos *Hiway* y UCN, con lo cual el Operador tiene acceso a mayor cantidad de información.

La Red LCN soporta la conexión de ordenadores de aplicaciones (Módulos de Aplicaciones) para realizar control avanzado. También permite la conexión a otros ordenadores para adquisición de datos y control a baja frecuencia. Este último es un importante aspecto, pues a juzgar por la evolución de los últimos años marca probablemente el final de los sistemas de Control Supervisado, aunque en el supuesto de que soporten el ímpetu de los sistemas de Instrumentación pueden ser una solución a la dependencia de un único proveedor. El estándar *FieldBus* representa un paso adelante en la estandarización de los sistemas abiertos y podría permitir la continuidad del ordenador de supervisión.

---

<sup>69</sup> UCN, "Universal Control Network".

<sup>70</sup> LCN, "Local Control Network".

---

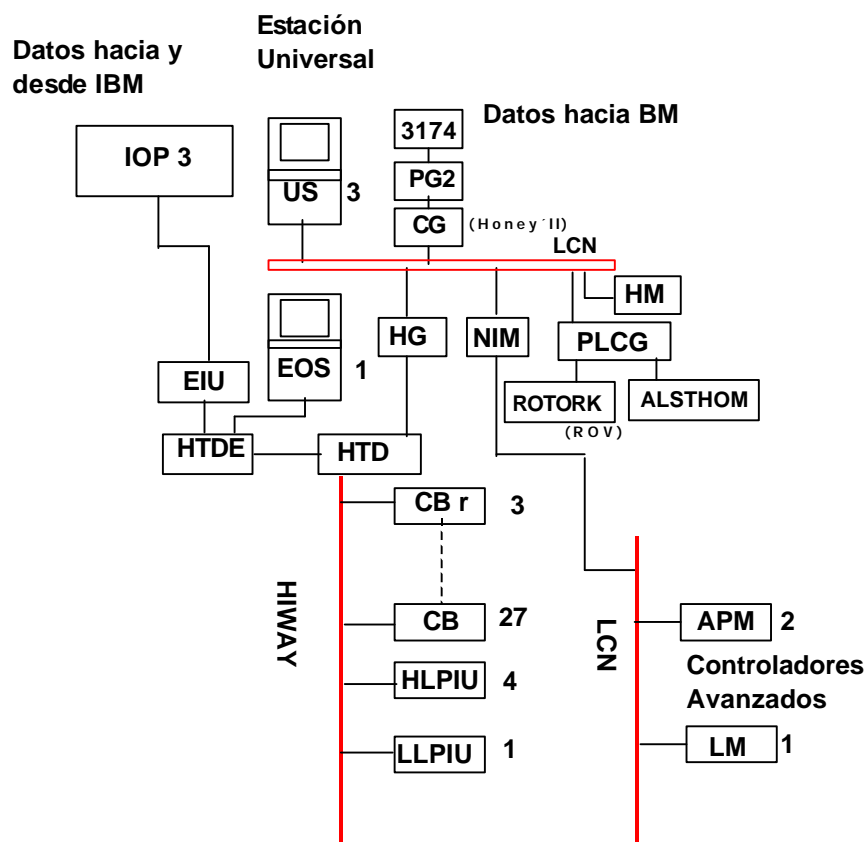


Fig. 64. Configuración de los equipos del TDC-3000.

## YOKOGAWA

El Yokogawa se utiliza en Refinería en el control del área de Movimiento.

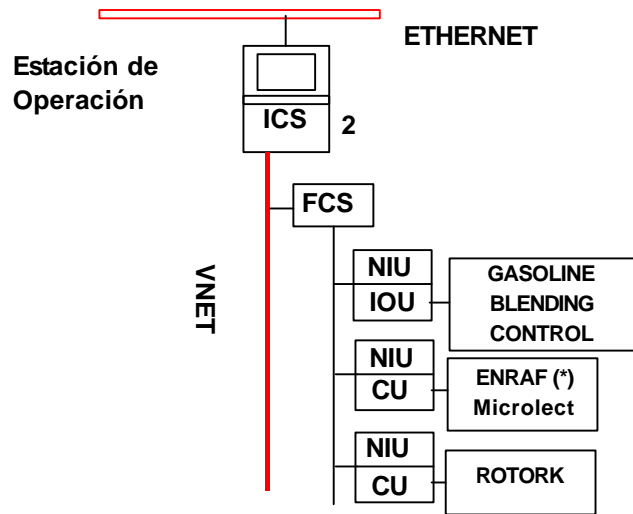


Fig. 65. Configuración del Sistema Centum-CS de Yokogawa.

## ENRAF

El Enraf-microlect es el ordenador encargado de la lectura de los medidores de tanques. Está conectado por medio de interfase serie al equipo de Instrumentación Yokogawa.

### ***Sistema de Control AVANZADO y Sistemas de Información***

Un ordenador IBM ejecuta en solitario un programa de control supervisado llamado RTPMS<sup>71</sup>, que dirige el área de control Avanzado. El Sistema de Información que engloba la Base de Datos de Refinería y que es la plataforma única de todos los programas de gestión ha sido realizado por los servicios informáticos de CEPESA, utilizando al efecto una base de datos comercial y ordenadores VAX de Digital.

## IBM-RTPMS

El Sistema de Control Avanzado RTPMS fue desarrollado inicialmente

<sup>71</sup> RTPMS, "Real Time Plant Management System".

por IBM y EXXON Corp. en los años 70 para realizar control y supervisión a partir del empleo de la instrumentación local analógica. Desde entonces ha sufrido diversas mejoras e incorporado nuevos programas de conexión a otros sistemas. La versión que está instalada en la Refinería Tenerife es la RTPMS v3.1.

El Sistema RTPMS o también conocido como ACS se compone de dos núcleos principales (Fig. 66). El núcleo principal o *MASTER* ejecuta los controladores a la frecuencia y fase previamente configuradas. El núcleo de programas *SLAVE* ejecuta programas en Fortran o PL-1 a cada frecuencia preestablecida. *MASTER* y *SLAVE* comparten una base de datos centralizada que contiene la configuración y los datos de toda la instrumentación, así como los controladores definidos en el Sistema, denominados *Tags*<sup>72</sup>, cuyos tipos atienden las características de la información que representan. En la Base de Datos también se almacenan esquemáticos para acceder de manera organizada a la información.

Llamaremos Aplicación o Estrategia de Control al conjunto de *Tags*, programas y esquemáticos que permiten realizar un determinado objetivo.

A la Aplicación que contiene solamente controladores PID, algoritmos clásicos de control como relación, selectores, retardos, etc., se conoce como Aplicación de Control Descentralizado. Si a estos algoritmos agrega la aplicación un programa de control predictivo, entonces se denominará Aplicación de Control Centralizado o Control Predictivo Multivariable.

---

<sup>72</sup> “*Tags*” se conoce como el nombre que identifica al conjunto de información que define una variable en el ordenador de control. Puede representar una variable de proceso o ser el resultado de un cálculo.

---

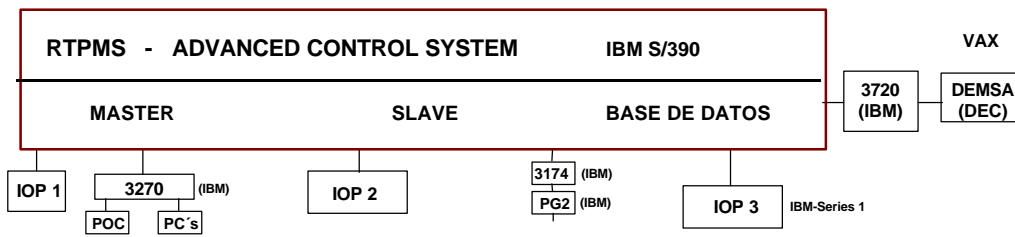


Fig. 66. Estructura del RTPMS, bloques principales.

El sistema de control se comunica con la instrumentación (TDC2000) por medio de ordenadores Serie-1 de IBM (IOP's).

La base de datos de ACS contiene varios tipos de información histórica: valores puntuales tomados cada seis minutos y se almacena un máximo de cuatro días; medias horarias, también durante cuatro días; medias de turnos y medias diarias hasta treinta días. Se almacena el valor de la variable de proceso, el punto de consigna y la salida de cada controlador para todos y cada uno de los controladores.

## VAX

Los ordenadores Digital son la plataforma de gestión estándar de la Organización. La información que suministra el ACS o RTPMS procedente de la Instrumentación se envía a los ordenadores VAX de Digital a través de comunicación serie 3720 y DEMSA.

En los ordenadores Digital se encuentra otra base de datos, destinada a almacenar el historial de varios años, la información de laboratorio, las tablas de referencia, datos de reconciliación de Unidades, etc. La gestión de la Refinería, los planes de producción, los estudios de simulación y el resto de las funciones de un sistema de gestión se realizan en esta base de datos.

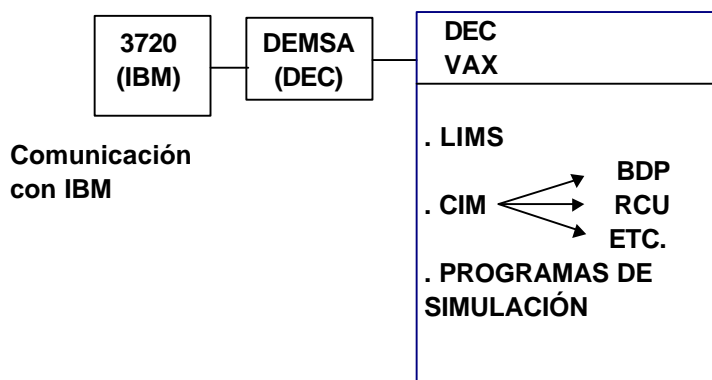


Fig. 67. Configuración de los equipos VAX que integran la Base de Datos de Planta.

La información que transmite el Sistema RTPMS representa medias horarias para todos los *tags* y valores puntuales, con una frecuencia de dos minutos, para un subconjunto predefinido. Las medias horarias se guardan durante varios años y los valores puntuales durante 15 días.

## 5.2. Soporte informático utilizado

### Base de Datos de Planta

Constituye el soporte de la gestión de la Refinería. La Base de Datos contiene prácticamente sólo medias horarias procedentes de la Instrumentación, con lo que el desarrollo de modelos debe tener en cuenta este factor.

Los datos se envían por medio de la base de datos del Sistema de Control Avanzado RTPMS. Existe un desfase entre la marca de tiempo que posee la media horaria en RTPMS y la Base de Datos de Planta. Mientras en RTPMS la media horaria se conoce con el nombre de la hora de cierre, para la Base de Datos de VAX la media horaria tiene la hora de comienzo del periodo.

Otro aspecto importante corresponde a la hora de toma de muestra. Su extracción no coincide exactamente con la hora que aparece en la

programación. Por ejemplo, las muestras de las 5:00a.m. se extraen en cualquier momento a partir de las 3:30a.m. aproximadamente. Este factor se ha estudiado, encontrándose que la estabilidad que posee la Unidad alrededor de la hora de toma de muestra afecta a los resultados.

En la Fig. 68 se puede observar la estructura de la Base de Datos de Planta en su relación con las aplicaciones que la integran.

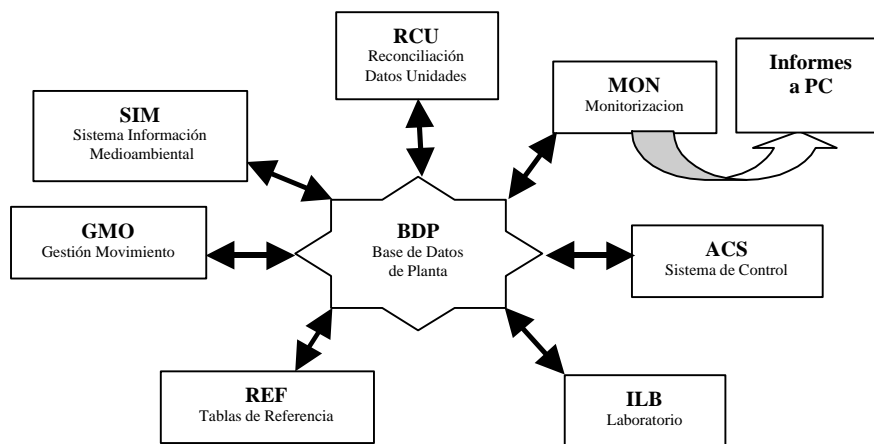


Fig. 68 . Estructura Informática de la Base de Datos de Planta.

### **Monitorización**

La Monitorización es una aplicación informática de la Base de Datos de Planta y genera informes a partir de los datos de Instrumentación y de Laboratorio.

### **Informes de Base de Datos de Planta**

Para el desarrollo de este trabajo se confeccionaron informes que recogían, además de las características de Laboratorio, datos de Instrumentación alrededor de la hora de toma de muestra. La Fig. 69 muestra el mecanismo que debe seguirse para la generación de datos a través de modelos de Monitorización.



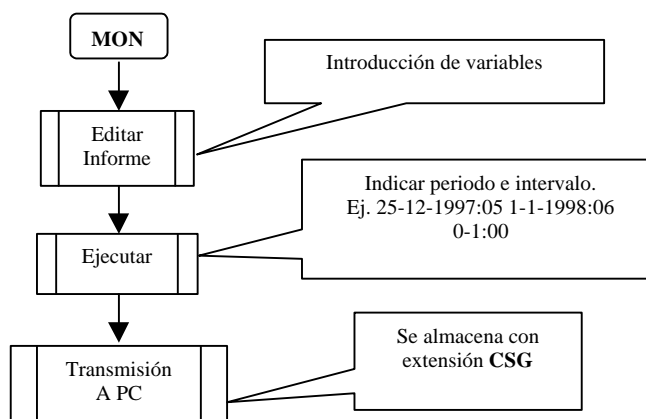


Fig. 69. Mecanismo de generación de un informe BDP y transmisión a PC para el tratamiento de los datos.

## Sistema de Control Avanzado

En el Sistema de Control RTPMS se construyeron aplicaciones para poner en práctica los modelos obtenidos, tanto en lazo abierto como en lazo cerrado. Estos programas, como se verá más adelante, se generan automáticamente a partir de un programa escrito en MATLAB y una vez depurado el modelo.

Las correlaciones desarrolladas se emplearon tanto en el cálculo de las características de laboratorio (**modelos de estado estacionario**), así como para la configuración de los modelos dinámicos de control Multivariable, (**modelos dinámicos de Planta**). Los modelos dinámicos que se generan automáticamente se incorporan a las aplicaciones de control multivariable **smca**.

### **Programa de seguimiento del error**

También se configuró en Fortran un programa para el seguimiento automático de los cálculos. Este programa comprueba cada media hora la existencia de resultados de Laboratorio y en caso afirmativo rescata la media horaria correspondiente a la hora que figura en la muestra.

Con esta estructura se consiguen dos objetivos fundamentales: por un

lado, el seguimiento gráfico de las diferencias entre el valor calculado y el resultado de laboratorio y, por otro, disponer de esa diferencia para incorporarla si se desea al propio modelo.

### ***Captura de datos puntuales para modelos dinámicos.***

Los datos que han servido de base a la creación de los modelos dinámicos han sido generados por un programa de captura en **Fortran** (**SPL50301**).

Cada vez que se ejecuta el programa rescata de la base de datos la información que se pide en una lista de variables o *tags* y de características o *items*, y escribe los resultados en un fichero para su posterior envío al PC.

### ***Test dinámico de Planta***

El test dinámico de planta se puede realizar de manera manual (es decir, cambiando cada vez la variable o variables que se desee, y esperando la respuesta de la variable a evaluar) o de forma automática por medio de un programa (**SPL17501**), que realiza una secuencia de **PRBS** a cada una de las variables seleccionadas).

## **Ordenador Personal**

Se ha utilizado un ordenador personal para desarrollar los principales programas de este trabajo. Básicamente, las características del ordenador no son importantes salvo que permitan ejecutar los programas que configuran este entorno de trabajo. En este caso es un ordenador Pentium con 32 Mb de memoria, 1.2Gb de disco y una tarjeta de comunicaciones de red *ethernet* para la comunicación con los sistemas VAX e IBM. En este ordenador personal se realizó todo el análisis de datos, modelado, simulación de comportamiento y la transferencia de resultados al entorno de control avanzado.

---

## Aplicación para calibración multivariante

Existen productos informáticos en el mercado que permiten el análisis multivariante de datos; entre otros, UNSCRAMBLER, SIMCA, PIRUETTE, PLS Toolbox, etc. Se estudiaron dos opciones en la elección del programa multivariante. La primera fue la compra de un producto estándar y el diseño posterior de las comunicaciones para la entrada automática de datos, seguimiento, instalación de los modelos, etc.; todo ello representa una carga importante de trabajo frente a los beneficios de la utilización de un programa genérico. La segunda opción era realizar la programación de los algoritmos PLS y PCA, además del diseño de todas las comunicaciones y programas de conversión.

El análisis eligió esta última opción, que permite incorporar otros algoritmos de control multivariante aún no comerciales y profundizar en su aplicación a este trabajo (por ejemplo, PLS no lineal, PLS con redes neuronales, etc.), dando como resultado una herramienta de trabajo más potente y eficaz. Además, se puede diseñar, mediante la incorporación en el propio algoritmo, un método automático de selección de variables para la construcción asistida de los modelos. Por último, tampoco se conoce la existencia de productos comerciales para el desarrollo de modelos dinámicos con PLS.

Para ejecutar todas las funciones se ha realizado la programación utilizando varios lenguajes y entornos de trabajo. El análisis de datos y la construcción de modelos emplea **MATLAB**, mientras que el resto de los programas de captura y conversión de datos se han desarrollado en **BASIC** y en **Fortran**.

### ***Especificación funcional de la Aplicación***

#### **Adquisición de datos**

Existen dos tipos de datos, cuyas características varían según su procedencia. Para la generación de modelos de tipo estacionario, los datos proceden de la Base de Datos de Planta -**VAX**-, y para la generación de los modelos dinámicos del entorno de Control Avanzado -**IBM**-.

---

**Datos para modelos estacionarios.** Se utiliza el programa **Reflexion 2** para enviar los ficheros de informes de datos de la **BDP** al ordenador personal.

**Datos para modelos dinámicos.** El fichero de datos capturado por el programa **SPL50301** se recibe desde el ordenador **IBM**. Este programa realiza la lectura de las variables o «tags» previstos en el fichero ACS31.PROD.SP.TAGLIST(DATA3). La frecuencia de ejecución –múltiplo de minuto- será por lo tanto la frecuencia de adquisición de datos.

### Importación de datos

Se ha desarrollado varios métodos para traer datos al entorno **MATLAB**: mediante un programa **BASIC**, **Fortran** o mediante Hoja de Cálculo **EXCEL**. Cada uno de esos métodos está orientado a un determinado tipo de datos.

Programa **BASIC** de lectura de Informes BDP. El programa **ENTRA.BAS** permite leer el fichero de informe de la Base de Datos de Planta –con extensión CSG- y transformar los datos a formato **MATLAB \*.M**. Posteriormente, se ejecuta el módulo **MATLAB IMPDATOS** para que los datos se almacenen en formato \*.MAT.

Lectura desde Hoja de Cálculo. Con una hoja de cálculo abierta de **EXCEL** con datos que se desea importar se ejecuta un programa **MATLAB**, -**DDE\_XLS** -, que controla un canal de intercambio **DDE**<sup>73</sup> entre ambos programas y copia las celdas de la hoja de cálculo en un fichero de datos de **MATLAB**, \*.MAT. También con un fichero delimitado y el módulo **IMPDATOS** es posible adquirir datos hacia la Aplicación.

Programa **Fortran**. Se utiliza para leer los datos puntuales procedentes del Sistema de Control RTPMS que se necesitan para generar los modelos dinámicos de Planta –**SPLIT2**-. De nuevo, para obtener el formato \*.MAT desde Matlab se importa la información utilizando el módulo **MATLAB IMPDATOS**.

---

<sup>73</sup> DDE, “Dynamic Data Exchange”: Intercambio de información entre aplicaciones Windows activas.

---

## **Tratamiento inicial de datos**

El tratamiento inicial de datos consiste en el cálculo de estadísticas preliminares sobre la variación típica de cada una de las variables, para decidir en primera instancia si se someten a tratamiento. Se generan también histogramas y representaciones en el tiempo que permiten identificar los periodos más adecuados para cada una de las variables estudiadas.

## **Desarrollo de modelos**

### **Modelos de estado estacionario**

Está previsto que los programas de calibración multivariante se apliquen tanto a las variables X como a las variables X e Y.

### **Modelos PLS**

Es la técnica principal para la construcción de modelos de este trabajo. Se han previsto distintas formas de implementar el algoritmo.

#### ***Modelos absolutos***

Los datos participan en la construcción de los modelos de manera absoluta.

#### ***Modelo en incrementos***

Los datos participan en el modelo después de calcular la primera derivada. Por lo tanto, el resultado es un modelo de desviación que, sin embargo, puede fácilmente transformarse en un modelo absoluto utilizando la media de los datos.

#### ***Lineal***

Como se ha explicado en el apartado referente a PLS, la relación interior entre las variables T y U es de tipo lineal. Esta suposición puede no ser cierta y en estos casos se ha de utilizar un modelo no lineal de la relación interior, no prevista en esta versión.

---

## Modelos dinámicos de impulso finito

Si las muestras se retrasan en el tiempo tantas veces como coeficientes del modelo de impulso finito y a esa matriz se opera como variables X, el resultado es un ajuste dinámico con PLS.

Se puede fijar manualmente la longitud del modelo de impulso finito o bien se puede dejar al programa que optimice el orden para cada una de las variables. El resultado es un problema de optimización que en este caso se ha resuelto por el método de Hooke y Jeeves.

## Interpretación automática de modelos

Teniendo en cuenta el número de variables que entra en juego, y la interpretación que se puede realizar de los modelos multivariantes, parece interesante desarrollar un sistema automático de selección de variables y de determinación de posibles muestras inválidas que ayuden en la generación de los modelos.

En cuanto a los **modelos estacionarios**, la aplicación utiliza un algoritmo que iterativamente selecciona el modelo con el número mínimo de variables (las que con más peso participan en el modelo).

Para los modelos de **impulso finito**, el programa optimiza el número de coeficientes de cada variable de entrada (tanto sea manipulada como de perturbación), frente a la variable modelada, para obtener la mejor relación entre ambas. La optimización se realiza mediante el algoritmo de Hooke y Jeeves con incrementos discretos (incremento mínimo 1 coeficiente).

## Visualización de Resultados

Se ha previsto dos métodos para obtener los resultados de los modelos: la visualización de gráficos y la impresión de tablas.

## Generación de gráficos

Existen distintos tipos de gráficos, cada uno de los cuales permite la

---

visualización de determinados datos de la Aplicación para su diagnóstico. Los gráficos principales son los diagramas de pesos y de coordenadas en el espacio de componentes y los gráficos de las relaciones interiores T frente a U.

También se utiliza los gráficos de variación del error de validación frente al número de componentes del modelo para la determinación del número más adecuado de componentes principales. La selección de muestras erróneas se puede realizar utilizando los gráficos anteriores y marcando con el ratón las muestras a eliminar.

### **Impresión de resultados**

Los resultados de cada modelo se expresan en forma de tabla y se almacenan en un fichero con el mismo nombre que el fichero original y extensión TXT.

### **Exportación de modelos**

#### **Modelos de estado estacionario**

Los modelos generados en el Sistema de Control han de escribirse en su propio lenguaje de programación. Típicamente, estos modelos tienen bastantes coeficientes, que han de actualizarse cada vez que se realice una calibración del modelo. Parece adecuado generar los programas de cálculo de manera automática. Con este objeto, se ha desarrollado un módulo de MATLAB – **GABUILD** - para construir los programas **GA**<sup>74</sup> a partir del modelo PLS. El programa extrae los nombres de las variables, los coeficientes, las operaciones matemáticas y escribe el código necesario en lenguaje de **GA**. Posteriormente es necesario compilar el programa en **GA** y dejarlo en el Sistema de Control de IBM, RTPMS.

#### **Modelos dinámicos**

En el caso de los modelos dinámicos, el número de coeficientes es mayor (*número de variables por su longitud*) y también se justifica un

---

<sup>74</sup> GA, es el lenguaje de programación para control del Sistema RTPMS.

---

programa para generar el fichero de modelo con toda la información necesaria para el programa de control multivariable **SMCA**, módulo **MATLAB**, **SAVE\_MDF**.

### **Descripción de los módulos principales**

A continuación se describen las características fundamentales de los programas desarrollados y su utilización.

#### **Modelos de estado estacionario**

##### **Base de datos**

Se consideran dos estructuras de datos diferentes, según se hayan modelado o no.

##### **Estructura de los datos iniciales**

Los datos de cada variable se agrupan en torno a matrices que corresponden con el nombre de cada variable o *tag* - **VAR**S es la lista total. Existe también la fecha de toma de datos o índice (**FECHA**), que se empleará para seleccionar los periodos de tratamiento. El formato de fecha es el número de días transcurridos desde 1900 - estándar de Hoja de cálculo.

**DATO1** es el nombre del fichero de datos, que se utilizará como control cada vez que se almacenen o carguen datos. Un ejemplo de esta estructura se puede ver en la Fig. 70.

---



```

Your variables are:
C2F0153      C2F0554      C2T0020      C2U0518      U029G7H
C2F0505      C2F0555      C2T0022      C2U0550      data1
C2F0516      C2JC0047     C2T0024      FECHA        vars
C2F0519      C2P0117      C2T0139      U022G75
C2F0549      C2P0160      C2U0508      U022G7H
C2F0550      C2P0180      C2U0517      U029G75

```

```

Your variables are:
A           MY           U           j           plsalgo
B           OUTLIER     W           m           porcen
BIAS        P           X           n           q
C           PERIODO     XRAW        num         r
D           PERTEST    XTEST       outf        red
DATOS       PRESS       Y           p           sig
DIAS        PRESX       YCALC       pc1         t
DIFX        Q           YRAW        pc2         u
DIFY        R           YTEST       pc3         v
DX          RMSEC       a           pcax        w
DY          RMSEP       alim        pcay        xraw
E           SEP         ans         perl        yraw
EXCEL       SEX         b           per2
F           SEY         bor         permues1
H           SX          d           permues2
M           SY          i           pertest1
MX         T           increm      pertest2

```

Fig. 70. Estructura inicial y una vez modelado.

### ***Estructura de los resultados del Modelo.***

Una vez que se han capturado los datos y se ha modelado con PLS, los datos y los resultados se encuentran en la memoria de entorno de MATLAB; a este conjunto de información llamaremos Base de datos del Modelo (Fig. 71).

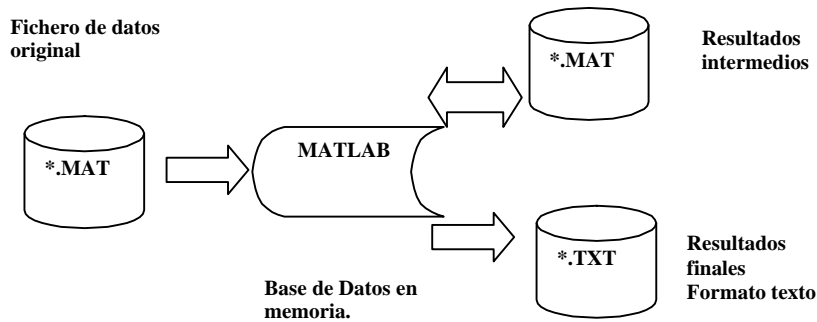


Fig. 71 . Flujo de Información entre los datos originales y los resultados de la Aplicación. Modelos estacionarios.

En el diagrama de flujo de la Fig. 72 se muestra la secuencia de etapas en la creación de Modelos de estado estacionario.

### Fichero de definición

Aunque se pueden ejecutar todos los pasos de manera manual, se consideró interesante disponer de un fichero de definición de propósito general con todas las opciones (**MODSTD**). De esta manera, la observación del fichero de definición y del de resultados permitirá conocer todas las opciones vigentes y reproducir los resultados. Esto también es de interés para volver a calibrar los modelos obtenidos.

El fichero de definición consta de distintas partes, que intervienen en cada una de las operaciones.

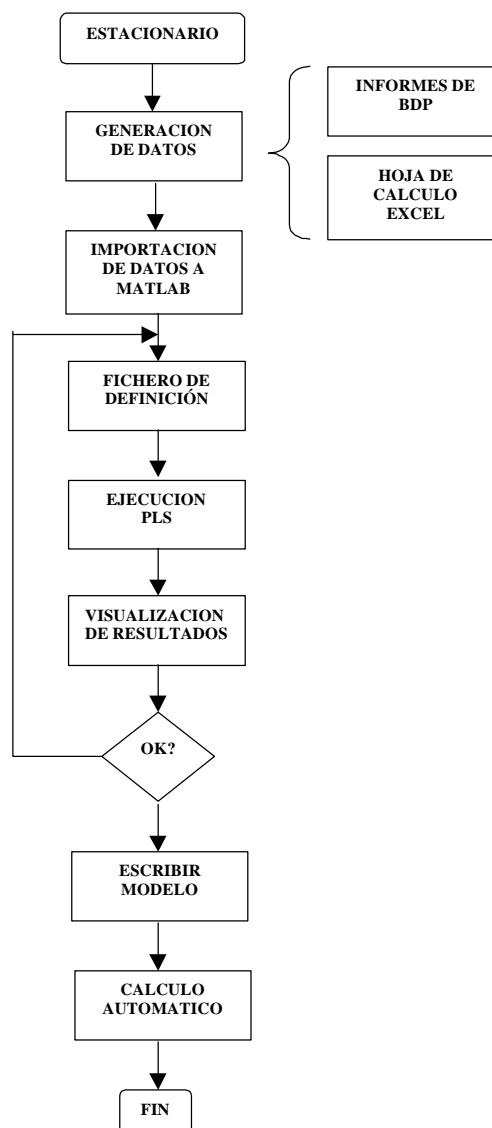


Fig. 72 . Diagrama de Flujo. Generación de modelos de estado estacionario.

### Sección Título y Comentarios

Además de algunas líneas de comentario sobre el propósito de este modelo, periodo de los datos, etc., se ha de consignar el nombre de fichero de datos (sin la extensión), que deberá estar en formato de datos de MATLAB, *\*.mat*. (Ej. *penta01*), y el nombre de fichero de modelo (sin la extensión), en el que se realizará la escritura de resultados (Ej. *mpenta03*).

```

%
*****
% COPYRIGHT : JOSE MACIAS, 1997          FICHERO   : MODSTD.M
% Version 1.0
% Toolbox para Modelado Multivariante
% *****          SECCION DE TITULO Y COMENTARIOS          *****
%
% OBJETIVO :
%           FICHERO DE DEFINICION PARA CREACION DE MODELOS ESTACIONARIOS
%
% INSTRUCCIONES : Sustituir los valores en todas aquellas posiciones
%                 donde se muestre el simbolo <=====
%
% VARIABLES DE ENTORNO
% EXCEL          : fichero de modelo
% DATOS          : fichero de datos
% sig            : número de veces la desviación estándar para detección de
%                 valores inválidos
% increm        : indicador de hacer incrementos o no
% desc           : indicador de estadística descriptiva
% pcax           : indicador de PCA a las variables X
% pcay           : indicador de PCA a las variables Y
% plsalgo        : indicador de calculo PLS desactivar 0 / plslin 1 / plsml 2
% red            : indicador para la reducción automática de variables por
%                 alineamiento /0, desactivado/1, P/2, W
% v              : variables sobre las que seleccionar, para PCAX o PLS tomar
%                 xraw, v = 1 / PCAY, tomar yraw, v = 2
% d              : ángulo en grados para determinar proximidad
% alim           : número máximo de componentes para diagnosticar variables
% a              : número de componentes a estudiar, máximo 10
% xraw           : matrix de nombres de variables X
% yraw           : matrix de nombres de variables Y
% bor            : indicador para eliminación automática de muestras erróneas
%
%
*****
% HISTORY      POR      DESCRIPCION
% 1997         JMH      ORIGINAL
%
%
*****
%
clear
%
% PERIODO:
% DETERMINACION:
% UNIDAD:
% *****          PARAMETROS GENERALES          *****
%
EXCEL = 'modstd'          ;%<===== NOMBRE DE FICHERO DE MODELO
DATOS = 'isocazal'       ;%<===== NOMBRE DE FICHERO DE DATOS
%
% *****
%           Carga de datos
%
eval(['load ',DATOS])    ;
%

```

Fig. 73. Sección Título y Comentarios, fichero de definición.

```

% *****          SECCION DE DEFINICION DE VARIABLES          *****
%
% PREFILTRADO DE VARIABLES
%
% ACOTACION
%
% Si se desea acotar el intervalo de variación de unas muestras, se elimina
% el carácter de comentario y se especifica la variable a acotar y el
% intervalo mínimo y máximo.
%     variable     es la variable a acotar.
%     ll, hl      mínimo y máximo valor permitido.
%
% [variable] = rango(variable,ll,hl)           ;%<=====
[U029G7H] = rango(U029G7H,5,98);% <=====
%
% DEFINICION DE VARIABLES X
%
% Respetar el número de caracteres de cada variable
% (distancia entre comillas).
%
%                                     ;%<===== principio
xraw=[
'C2F0153          '
'C2T0024          '
'C2F0505          '
'C2T0020          '
'C2JC0047          '
'C2U0517          '
'C2T0022          '
'C2F0516          '
'C2F0519          '
'C2U0518          '
'C2F0554          '
'C2U0508          '
'C2F0550          '
'C2P0180          '
'C2T0139          '
'C2P0160          '
'C2F0555          '
%'C2F0549          '
'C2P0117          '
'C2U0550          '
];
%                                     ;%<===== final
% DEFINICION DE VARIABLES Y
%                                     ;%<===== principio
%
yraw=[
'(U022G75)      '
];
%                                     ;%<===== final
%     analisis factorial
%     fac = 0           ;%<===== 1, activado / 0, desactivado
%     var1 = 2         ;%<===== primera variable
%     var2 = 2         ;%<===== segunda variable
%     exp  = 2         ;%<===== nivel
%     periodo de analisis
%     perl = 0;
%     per2 = 10000000;

```

Fig. 74. Sección de definición de variables, fichero de definición.

## Sección Definición de Variables

Se consignan los nombres de las variables **X** e **Y**, dentro de las matrices **xraw** e **yraw**. El efecto de las variables entre sí puede realizarse mediante operaciones descritas en la propia línea que define cada variable o bien se puede utilizar una transformación de la matriz de las variables (método factorial). En este caso, la operación se realiza activando la rutina **factor**, que ejecuta la multiplicación de las variables entre sí para que el programa las trate como una matriz de variables individuales. De esta manera se puede conocer el efecto combinado de ellas sin necesidad de escribir todos y cada uno de los factores.

## Sección para la Selección de datos de calibración y datos de Validación

Se eliminan los datos inválidos o que muestran una variación superior al intervalo de confianza  $-\text{sig} * \text{desv.std.}$  También en esta sección se eliminan las variables que se hayan marcado como inválidas, tanto de forma manual (seleccionando gráficamente) como automática (entre sucesivas ejecuciones del modelo).

Antes de proceder al modelado es necesario construir la matriz de variables con todos los datos que deben utilizarse y separarlos según el periodo de calibrado y validado. Dos opciones permiten la selección del periodo de validación:

**Periodo de validación por fechas o grupo de muestras**, que lógicamente no deben coincidir. En este caso, como se explicó cuando se habló de validación, los datos están sujetos a un componente de varianza distinto, derivado de las modificaciones del proceso entre ambos periodos.

**Periodo de validación como porcentaje del total de los datos**. Con esta forma de operar, el espacio temporal es el mismo y no se manifiesta el efecto indicado anteriormente.

---

```

% ***** SECCION DE SELECCION DATOS CALIBRACION Y VALIDACION *
%
%   sig = 3           ;%<===== múltiplo de la desv. std. Para
%                   ;%                   detectar muestras erróneas
%
%   Indicador para borrar automáticamente muestras erróneas
%   bor = 0           ;%<===== 1, activado / 0, desactivado
%   Muestras para borrar específicamente antes de modelar
%   ELIMINA = [];
%
%   porcen = 25       ;%<===== porcentaje para validacion parcial
%                   ;%                   >0 activado/ 0 desactivado
%   pertest1 = 0       ;%<===== comienzo para validar
%   pertest2 = 1000000 ;%<===== final para validar
%   permues1 = 0       ;%<===== comienzo para calibrar
%   permues2 = 1000000 ;%<===== final para calibrar

```

Fig. 75. Sección de Selección de datos de calibración y datos de Validación. Fichero de definición.

## Sección de Proceso

Se pueden especificar distintos algoritmos de proceso, *PLS* y *PLS con incrementos*. Ahora bien, en ambos casos se requiere indicar el número de componentes que se aplican y si el cálculo se realiza en forma de incrementos (primera derivada). También es posible utilizar la selección automática de variables por orden de importancia, señalando el criterio de proximidad en el gráfico P, W o participación global B.

```

% ***** SECCION DE PROCESO *****
%
%   increm = 0         ;%<===== activar 1 / desactivar 0
%   desc = 0           ;%<===== activar 1 / desactivar 0
%   pcax = 0           ;%<===== activar 1 / desactivar 0
%   pcay = 0           ;%<===== activar 1 / desactivar 0
%   plsalgo = 1        ;%<===== desactivar 0 / plslin 1 / plslnl 2
%   a = 3              ;%<=====
%
%   red = 1            ;%<===== 0, desactivado/1, P/2, W
%   v = 1              ;%<===== 1, xraw/ 2, yraw
%   d = 5              ;%<===== ángulo en grados para proximidad
%   alim = 2           ;%<===== número máximo de componentes para
%                   ;%                   analizar variables a eliminar
%
%   estacion

```

Fig. 76. Sección de Proceso. Fichero de definición.

## Gráficos de pesos, «loadings».

Una vez que se ha ejecutado el fichero de definición, el espacio de variables de MATLAB contiene los resultados de aplicar PLS a los datos.

Llamando al programa **LOADINGS** desde **MATLAB** podemos seleccionar cada componente.

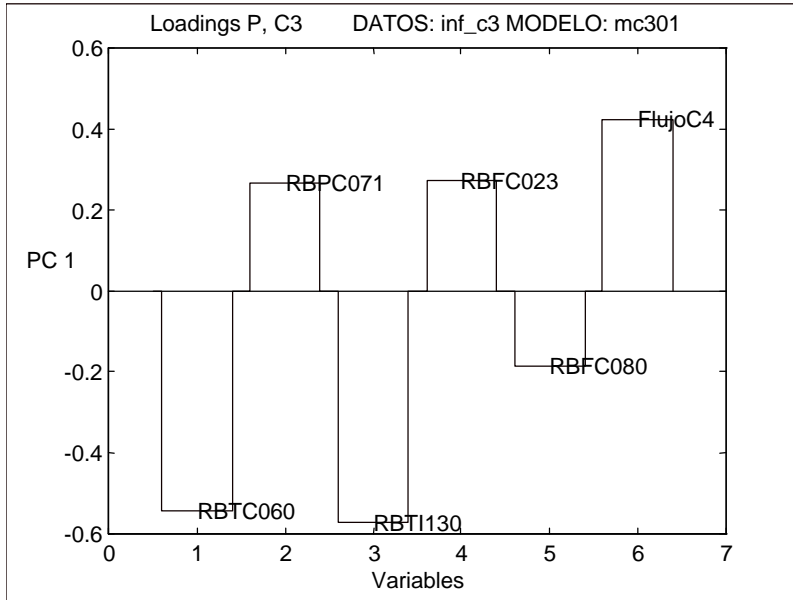


Fig. 77. Diagrama de Pesos para un solo componente.

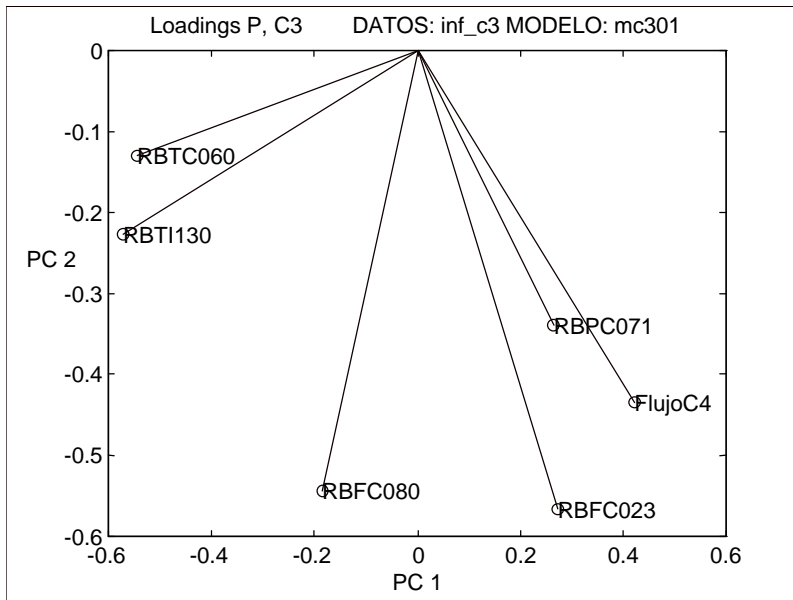


Fig. 78. Gráfico de Pesos «loadings» para los componentes principales 1-2.



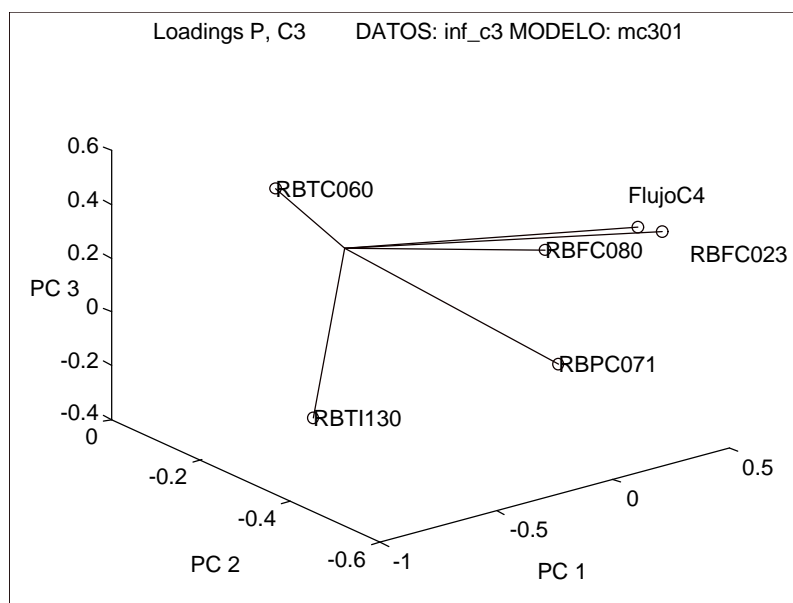


Fig. 79. Gráfico de pesos P, 1,2,3 en 3 dimensiones.

### Gráficos de coordenadas en el espacio de componentes

Al igual que en el caso anterior, es necesario disponer de los resultados del modelo. El programa **SCORES**, ejecutado desde **MATLAB**, facilita la selección de los componentes.

Cuando se selecciona el gráfico con un solo componente en las coordenadas T, es posible marcar con el ratón las muestras que se desean eliminar del cálculo en una próxima ejecución del fichero de definición. De esta manera se mantiene siempre un registro de aquellos valores que se han descartado para el cálculo del modelo.

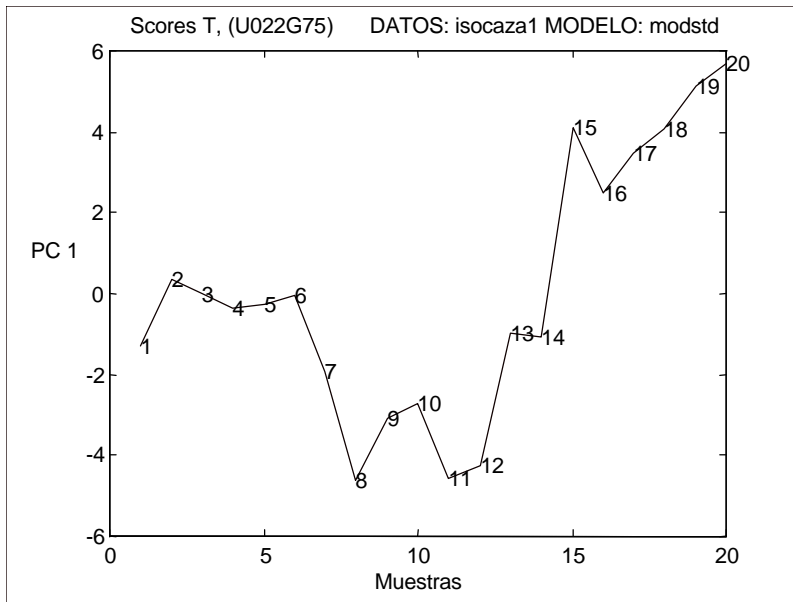


Fig. 80. Gráfico de coordenadas para el primer componente.

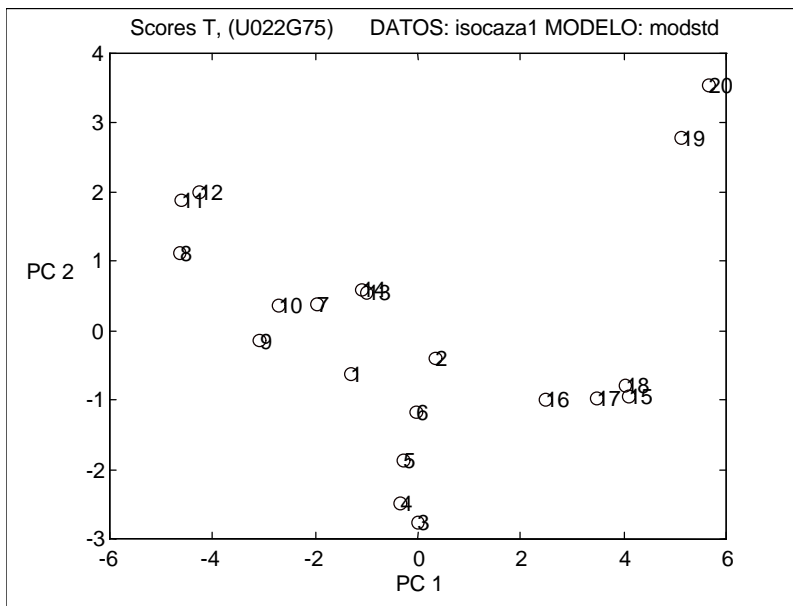


Fig. 81 . Gráfico de Coordenadas, componentes 1 y 2

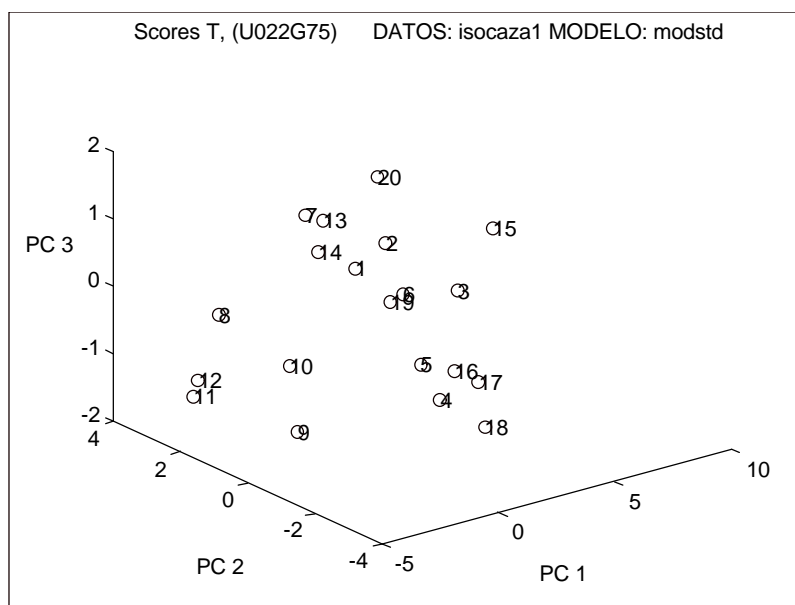


Fig. 82 . Gráfico de coordenadas, componentes 1,2 y 3.

### Gráficos de T frente a U

Este tipo de gráfico (programa **TVU**) permite visualizar la relación interior entre **X** e **Y**; por lo tanto, se utiliza sólo en el caso de utilizar modelos PLS. El aspecto que presenta el gráfico sugiere la presencia de datos inválidos y si el modelo elegido para la relación interior es adecuado (lineal, no lineal). También en este caso se puede elegir con el ratón las muestras que se han de eliminar en la próxima ejecución del fichero de definición.

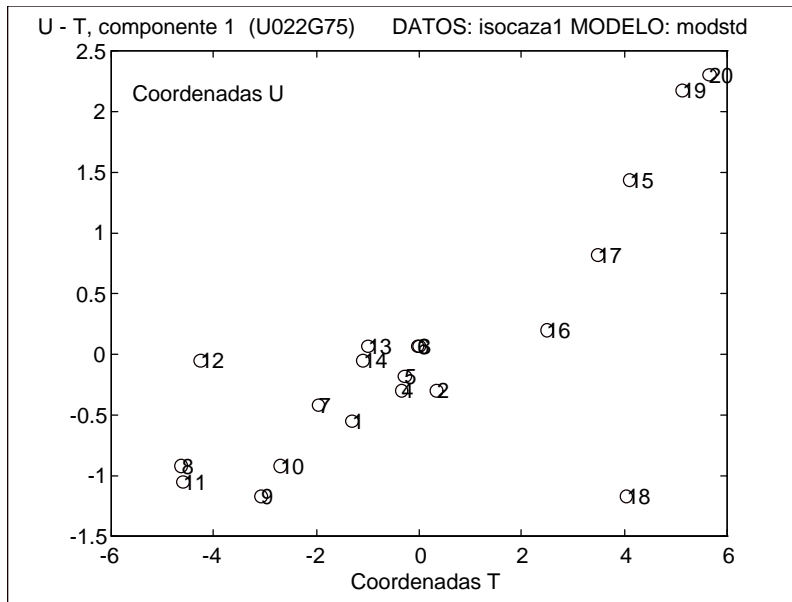


Fig. 83. Gráfico de coordenadas T frente a U, para el primer componente.

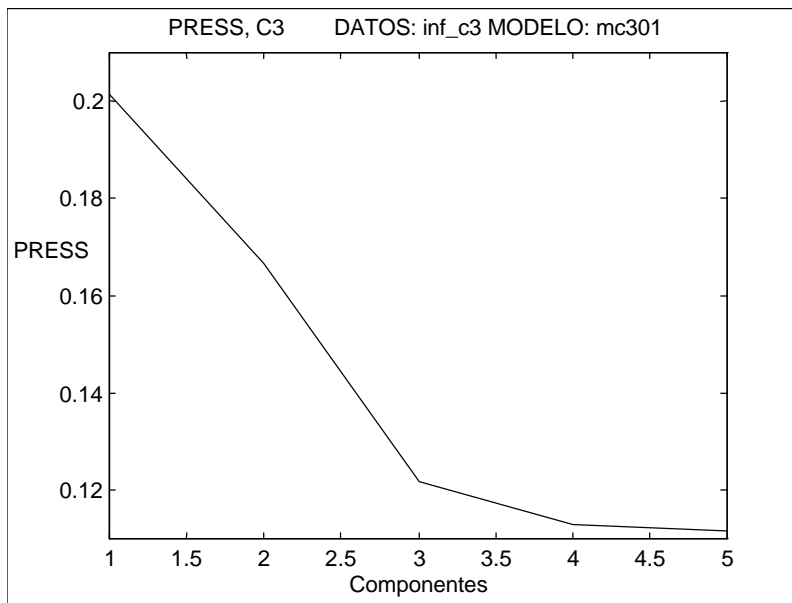


Fig. 84. Gráfico de Errores de la matriz Y, PRESS.

### Gráfico de Errores residuales para X y para Y

El gráfico de errores de la variable Y (PRESS) se utiliza en PLS para

determinar el número óptimo de componentes que se debe emplear. Los errores de la matriz X (PRESX) permiten identificar su participación sobre la explicación de la matriz Y cuando se modela con PLS, módulo **MATLAB GPRESS**.

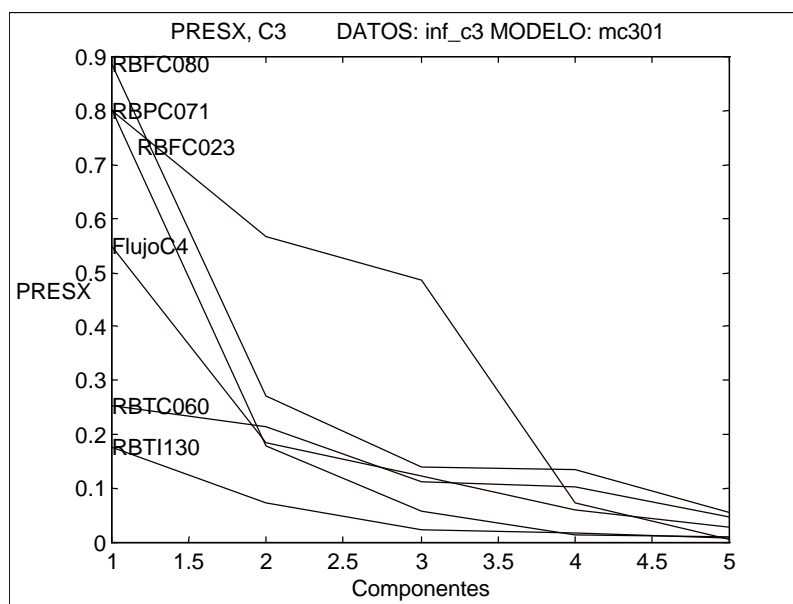


Fig. 85 . Gráfico de errores de la Matriz X, PRESX.

## Resultados

Una vez obtenido el modelo, se puede imprimir un informe de resultados con el módulo **MATLAB TABLAX**, que se guarda con el nombre del modelo y la extensión TXT.

```

ANALISIS DE RESULTADOS METODO PLS
Periodo de calibración, comienzo - final
PERIODO =
  1 1 0 0 0 0
 22 10 0 0 0 0
Periodo de validación, comienzo - final
PERTEST =
  1 1 0 0 0 0
 22 10 0 0 0 0
FICHERO MODELO: mc301
FICHERO DATOS : inf_c3
Número de componentes :5
Muestras eliminadas del conjunto inicial:
OUTLIER =
 36
Número de datos para calibración :234
Número de datos para Validación :59
Valores de la Correlacion PLS
W
-----
ans =
-0.5223  0.2069  0.5660  0.1830  -0.0340
 0.2138  -0.3249  0.0672  0.7122  -0.5672
-----
P
-----
P =
-0.5440  -0.1301  0.4482  0.0974  -0.0870
 0.2659  -0.3402  -0.2308  0.8714  -0.3961
-----
Q
-----
Q =
 1 1 1 1 1
-----
cabel =
Estadística de las variables INDEPENDIENTES
cabe2 =
  VARIABLES      MX      SX      DIFX      PRESX      SEX
-----
table =
RBTC060 !      52.5!      6.04! 95.3!  0.2542!  1.9975
RBFC071 !      14.8!      0.271! 99.5!  0.2145!  0.0211
ans =
-----
cabel =
Estadística de las variables DEPENDIENTES
cabe2 =
  VARIABLES      MY      SY      DIFY      PRESS      SEY
-----
table =
C3 !      8.02!      5.95! 88.8!  0.1114!  2.0222
ans =
-----
cabel =
V. dep.:C3      Part. %: 88.81  E.Std: 2.0222  O.O.: 62.2818
cabe2 =
VARIABLES - + IMPORTANCIA      %Part. Coef.Std. Coef.Modelo Err.Std. IMP.
-----
cabe3 =
V. Calibración: 1.9848 V. Predicción: 2.0882 BIAS: -0.1878 SEP: 2.0122
ans =
-----
table =
RBTC060 ! 95.3 0.0115!      0.0104 1.9975 0.0626
RBFC080 ! 94.5 -0.0381!      -0.125 0.6381 -0.2205
ans =
-----
ans =
C3
ans =
Variables por orden de importancia (- +) en coeficientes C y C.*SX
ans =
ans =

```

Fig. 86. Ejemplo de salida de los resultados (listado parcial).

## Creación del programa de cálculo en GA.

A partir de los resultados obtenidos se puede generar el fichero de programa **GA** para que en el sistema de control se ejecute el modelo automáticamente (**GABUILD**).

```

% *****;
% JOSE MACIAS 97 ;
% ;
% MODELO DE CALCULO DE VARIABLES ;
% INFORMACION RELATIVA A LA CONSTRUCCION DEL MODELO ;
% PARA LA VARIABLE :(U022G7H) ;
% ;
% GA CONSTRUIDA 1997-12- 1:10: 9;
% ;
% ;
% FICHERO DE DATOS : penta2;
% FICHERO DE MODELO : mpenta12;
% PERIODO EJECUCION, DEL 13-10-97:13:59:60;
% AL 29-11-97:13:59:60;
% ERROR DE CALIBRACION, RMSEC : 2.45724;
% ERROR DE PREDICCION, RMSEP : 1.48202;
% NUMERO DE COMPONENTES, A : 3;
% PORCENTAJE EXPLICACION VARIABLE Y, DIFY : 17.0417;
% PORCENTAJE EXPLICACION VARIABLE X, DIFX : 99.895;
% PORCENTAJE EXPLICACION VARIABLE X, DIFX : 80.962;
% PORCENTAJE EXPLICACION VARIABLE X, DIFX : 96.728;
% PORCENTAJE EXPLICACION VARIABLE X, DIFX : 77.3265;
% ;
% ;
% ESTA GA ES LA GA-1 DE UN TAG CUYA PV SERA EL RESULTADO DE ESE
% CALCULO.
% ;
% PROGRAM GA8462;
% ;
% *****;
% DECLARE FVV Ñ;
% DECLARE FVV C2F0153 ,
% C2JC0047 ,
% C2U0517 ,
% C2P0160 ;
% DECLARE REAL COEF( 4);
% DECLARE REAL TOTAL,OO;
% INICIACION DE LOS COEFICIENTES DEL MODELO ;
% ;
% COEF( 1) = 1.24E-001 ;
% COEF( 2) = -1.56E-004 ;
% COEF( 3) = -2.88E-002 ;
% COEF( 4) = 1.43E-001 ;
% OO = 4.25E+000 ;
% ;
% EJECUCION DE CADA TERMINO DEL MODELO ;
% ;
% TOTAL = COEF(1) * C2F0153.PV ;
% TOTAL = TOTAL + COEF( 2) * C2JC0047.PV ;
% TOTAL = TOTAL + COEF( 3) * C2U0517.PV ;
% TOTAL = TOTAL + COEF( 4) * C2P0160.PV ;
% ;
% Ñ.PV = TOTAL + OO;
% ;
% ENDPROG;

```

Fig. 87. Programa de cálculo de modelo para su utilización en línea.

## Modelos de Impulso finito

Para los modelos de Impulso finito se siguen los mismos pasos que para los modelos de estado estacionario, salvo si proceden esta vez directamente del ordenador de control avanzado y han sido capturados con un programa específico. En este caso, los datos se transfieren al PC con el programa de comunicaciones de **IBM** y se ejecuta un programa para la creación de ficheros **MATLAB \*.m (SPLIT2)**. Estos ficheros se pueden importar a Matlab utilizando el mismo procedimiento que con los datos de estado estacionario (**IMPDATOS**).

## Base de datos

Igualmente que en el caso de modelos de estado estacionario, se consideran dos estructuras de datos: antes y después de modelado.

## Estructura de los datos procedentes de ACS-RTPMS

Los datos de cada variable se agrupan en torno a matrices cuyo nombre se corresponde con el de cada variable. Este nombre contiene además el *item* o característica que se ha leído; así, la variable **C2F505P** corresponde a la variable de proceso (**PV**) del *tag* **C2F505**. Finalmente, las variables **FECHA**, **VAR5** y **DATO1** presentan las mismas características.

## Estructura de los resultados

Una vez modelado con **PLS**, los datos y sus resultados se encuentran en la memoria de entorno de **MATLAB**. A este conjunto de información llamaremos Base de Datos del Modelo. La Fig. 88 muestra el espacio de variables para los datos originales y sin modelar.

---



```

Your variables are:
C2A002P      C2F045P      C2F505P      C2JR400P      C2U513P
C2A003P      C2F046P      C2F511P      C2P117O      C2U514P
C2A004P      C2F048P      C2F515P      C2P117P      C2U515P
C2A005P      C2F0519P     C2F516P      C2P117S      C2U556P
C2A006P      C2F106P      C2F519P      C2P180P      C2U557P
C2A007P      C2F107P      C2F630P      C2TC20P      C2U559P
C2A008P      C2F108P      C2F642P      C2TC402P     C2U560P
C2A009P      C2F109P      C2F653P      C2U509P      data1
C2A011P      C2F115P      C2FR800P     C2U511P      vars
C2A114P      C2F118P      C2JC400P     C2U512P

```

```

Your variables are:
BIAS         MX          SX          YTEST       normalY
C            MY          SXN         a            objetivo
D            OBJ         SY          fin          p
DATOS        P           SYN         i            q
DIFX         PRESS      X           ini          x
DIFY         PRESSX     XRAW        m            xraw
DX           RMSEC     XTEST       n            yraw
DY           RMSEP     Y           nb
EXCEL        SEP        YRAW        normalX

```

Fig. 88. Espacio de variables sin modelar y resultados.

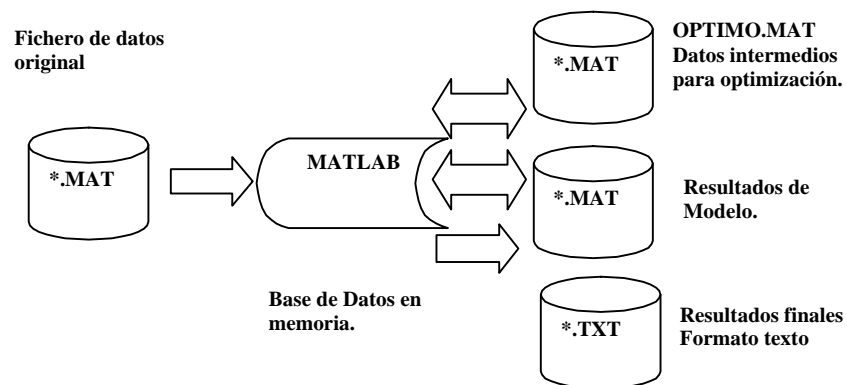


Fig. 89. Flujo de Información entre los datos originales y los resultados de la Aplicación. Modelos dinámicos.

El diagrama de flujo de la Fig. 90 presenta la secuencia de etapas en la creación de Modelos dinámicos.

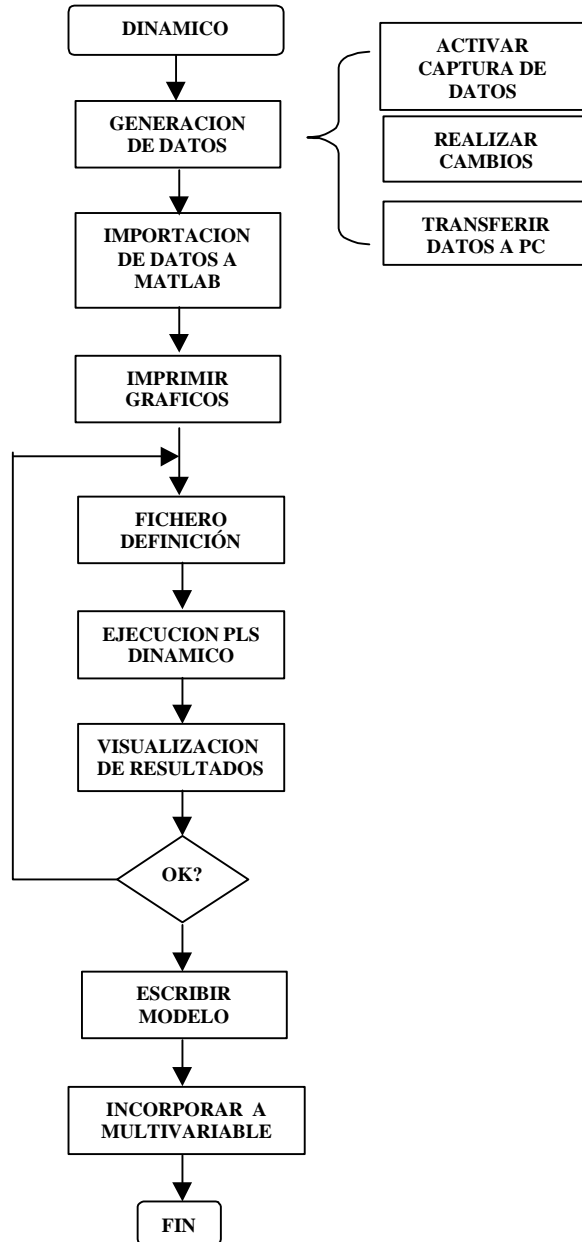


Fig. 90. Diagrama de Flujo. Generación de modelos dinámicos.

## **Fichero de definición**

Para modelar en estado no estacionario, y teniendo en cuenta que es necesario ampliar el espacio de variables incluyendo los retrasos, se utilizó la misma idea que en los modelos de estado estacionario. El fichero de definición es muy similar y varía solamente la sección de creación de variables y la de validación.

## **Sección Título y Comentarios**

Esta Sección presenta el mismo esquema que en el apartado de modelos estacionarios.

## **Sección Definición de Variables**

Se consignan los nombres de las variables  $X$  e  $Y$  dentro de las matrices  $xraw$  e  $yraw$ . Una vez definidas las variables que se pretenden modelar, es preciso retrasar convenientemente las variables  $X$  (para los modelos de impulso finito).

## **Sección Selección de datos de calibración y datos de Validación**

En esta sección se eliminan los datos inválidos o que muestran una variación superior al intervalo de confianza establecido.

Antes de proceder a modelar es necesario construir la matriz de variables con todos los datos que puedan utilizarse y separarlos atendiendo al periodo de calibrado y de validación. En este caso, la selección del periodo de validación se ha de realizar sin interrumpir la base de tiempos del modelo; por lo tanto, sólo cabe la selección por periodo y no por fracción de datos. Hay que tener en cuenta además que en muchos casos no existen tests lo suficientemente largos como para que se puedan indicar ambos periodos y que se presenten las mismas

---

condiciones de variabilidad en las señales.

```

%
%*****
% COPYRIGHT : JOSE MACIAS, 1997          FICHERO   : MODFIR.M
% Version 1.0
% Toolbox para Modelado Multivariante
%*****          SECCION DE TITULO Y COMENTARIOS          *****
%
% OBJETIVO :
%           FICHERO DE DEFINICION PARA CREACION DE MODELOS ESTACIONARIOS
%
% INSTRUCCIONES : Sustituir los valores en todos aquellas posiciones
%                 donde se muestre el simbolo <=====
%
% VARIABLES DE ENTORNO
% EXCEL          : fichero de modelo
% DATOS          : fichero de datos
% nb             : longitud modelo variables manipuladas máximo
% na             : longitud modelo recursivo con variables controladas maximo
% desc          : indicador de estadística descriptiva
% plsalgo        : indicador de calculo PLS desactivar 0 / plslin 1
% normaliza      : matriz de pesos a aplicar a las variables junto con
%                 su desv.std
%
% a              : número de componentes a estudiar, máximo 10
% xraw           : matrix de nombres de variables X
% yraw           : matrix de nombres de variables Y
% opt            : tipo de cálculo de pls dinámico
% objetivo       : funcion objetivo para algo de Hooke y Jeeves
% inicial        : valor inicial de longitud
% minimo         : valor de la longitud mínima
% maximo         : longitud maxima
% increm        : incrementos del algo de optimizacion
%
%*****
% HISTORY        POR          DESCRIPCION
% 1997           JMH          ORIGINAL
%
%*****
%
% clear
%
% PERIODO:
% DETERMINACION:
% UNIDAD:
%*****          PARAMETROS GENERALES          *****
%
% EXCEL = 'modfir'          ;%<=====          NOMBRE DE FICHERO DE MODELO
% DATOS = 'c2tempcb'       ;%<=====          NOMBRE DE FICHERO DE DATOS
%
%*****
%           Carga de datos
%
% eval(['load ',DATOS])    ;
% global a;
%

```

Fig. 91 . Sección Título y Comentarios, fichero de definición.

```

% ***** SECCION DE DEFINICION DE VARIABLES *****
%
%
%
%      nb = [60 60]                ;%<===== una entrada por variable xraw
%      na = [0]                   ;%<===== una entrada por variable yraw
%
%
% DEFINICION DE VARIABLES X
%
% Respetar el número de caracteres de cada variable
% (distancia entre comillas).
%
%
%                                     ;%<===== principio
xraw=[
'C2F106P                '
%'C2F109P                '
%'C2F108P                '
%'C2F048P                '
'C2F118P                '
%'C2P180P                '
];
%
%                                     ;%<===== final
% DEFINICION DE VARIABLES Y
%
%                                     ;%<===== principio
%
%
yraw=[
'C2A004P                '
];
%
%                                     ;%<===== final
%      periodo de analisis
%      perl = 0;
%      per2 = 10000000;
%
%

```

Fig. 92. Sección de definición de variables, fichero de definición.

```

% ***** SECCION DE SELECCION DATOS CALIBRACION Y VALIDACION *****
%
%
%      pertest1 = 0                ;%<===== comienzo para validar
%      pertest2 = 1000000         ;%<===== final para validar
%      permues1 = 0               ;%<===== comienzo para calibrar
%      permues2 = 1000000         ;%<===== final para calibrar
%
%

```

Fig. 93. Sección de Selección de datos de calibración y datos de Validación. Fichero de definición.

## Sección de Proceso

Si se elige la opción de selección automática de la longitud de modelo, el programa busca iterativamente el tamaño óptimo con el algoritmo de optimización de Hooke y Jeeves. Teniendo en cuenta la posible existencia de múltiples mínimos, se deben especificar las condiciones iniciales y

seleccionar una función objetivo entre las siguientes:

$$OBJ = 100 - (DIFY) \quad [ 102 ]$$

$$OBJ = (100 - DIFY) * SEP^2 \quad [ 103 ]$$

$$OBJ = SEP \quad [ 104 ]$$

$$OBJ = 200 - DIFY - media(DIFX) \quad [ 105 ]$$

$$OBJ = RMSEC * RMSEP \quad [ 106 ]$$

En caso contrario, se utilizará la longitud de modelo definido en la parte principal del fichero de definición (variables **nb** y **na**).

```

*****          SECCION DE PROCESO          *****
%
%
desc = 0          ;%<===== activar 1 / desactivar 0
plsalgo = 1      ;%<==== desactivar 0 / plslin 1
normalX = [0 0] ;%<==== 0 significa utilizar su propia desv. est.
NormalY = 0      ;%   si se desea otro valor, se utiliza el valor
                  ;%   que posee en la misma posicion de xraw e yraw,
                  ;%   se utiliza como factor a multiplicar por la
                  ;%   propia desv.std.
a = 2            ;%<=====
%
opt = 2          ;%<===== 0, desactivado/1, hooke-jewees/3, scan
objetivo = 1     ;%<===== 1, 100-DIFY / 2, (100-DIFY)*RMSEP,
                  ;%   3, RMSEP
inicio = [3 3]   ;%<===== valor inicial para el algoritmo
minimo = [1 1]   ;%<===== mínima longitud de búsqueda
maximo = [60 60] ;%<===== máxima longitud de búsqueda
increment = 4    ;%<===== incremento inicial
%
dinamico
%
stepvexx

```

Fig. 94. Sección de Proceso, modelos dinámicos.

## Gráficos de respuesta en escalón

Se utilizan para mostrar la respuesta a un escalón unitario de cada variable manipulada sobre la variable que se pretende modelar (módulo **MATLAB STEPVER**).

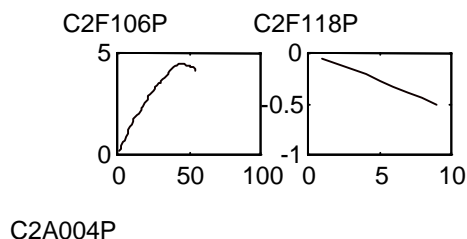


Fig. 95. Gráfico de respuesta en escalón.

### Gráficos de respuesta Impulso

Estos gráficos representan la respuesta a un pulso de cada variable manipulada sobre la variable modelada (módulo **MATLAB IMPULSO**).

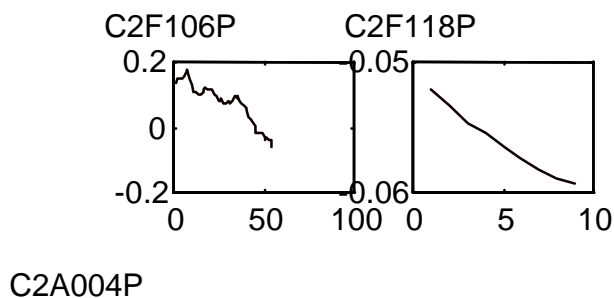


Fig. 96. Gráfico de respuesta impulso.

### Gráficos de pesos *Loadings*

Estos gráficos determinan las regiones de solapamiento entre las variables, es decir, las que son combinación lineal de otras (módulo **MATLAB LOADDIN**). En otras palabras, representaría en función de la longitud de modelo a partir de aquel valor en el que la incertidumbre es elevada ya que ese efecto está unido a los cambios habidos en otras variables.

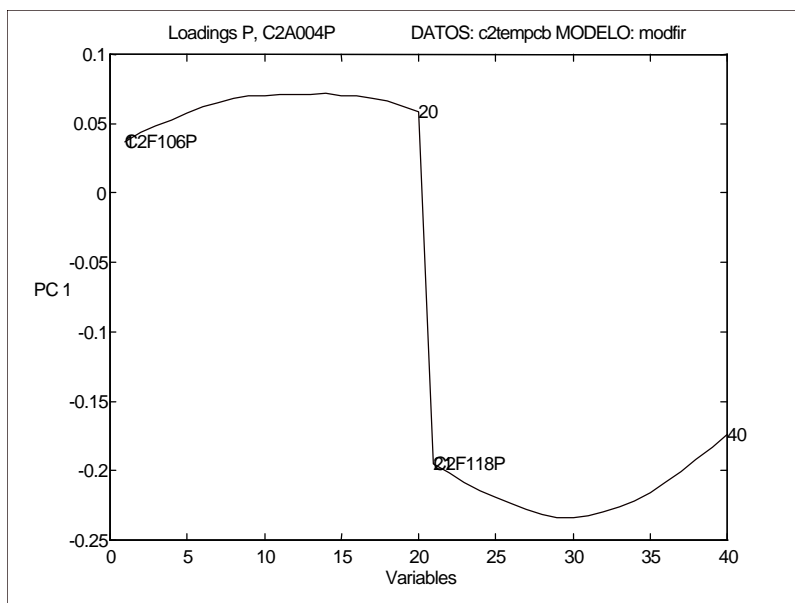


Fig. 97. Gráfico de pesos o «loadings», un componente.

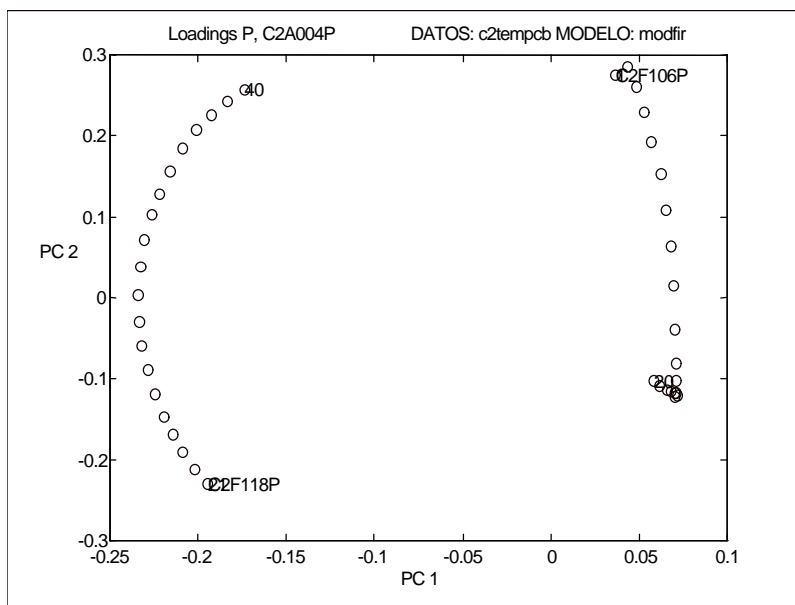


Fig. 98. Gráfico de «loadings», dos componentes.



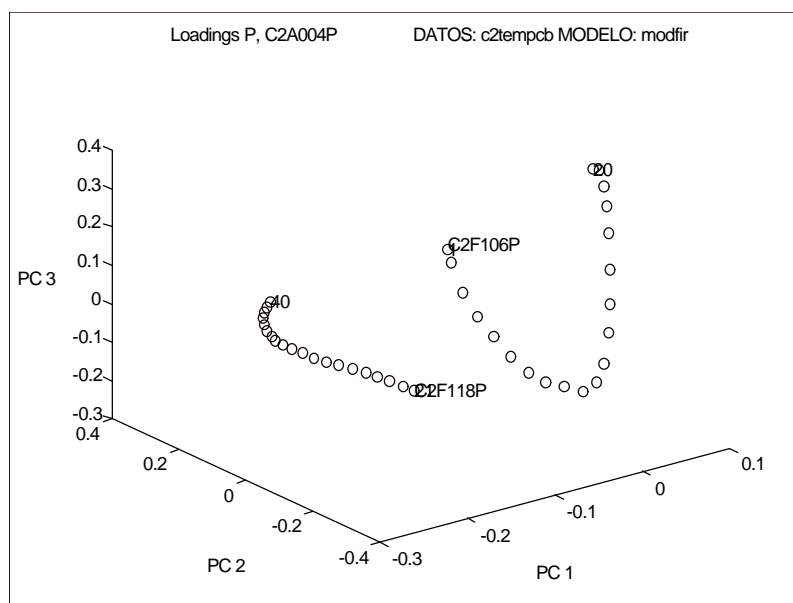


Fig. 99 . Gráfico de «loadings» tres componentes.

### Gráficos de coordenadas en el espacio de componentes

El módulo **MATLAB SCORDIN** representa toda la serie de datos en función de cada componente, con lo que se puede aislar la parte de la serie de datos que mejor participación posea en los componentes relevantes. De la misma manera, permite determinar aquellas regiones en las que existan valores anormales en la serie; por ejemplo, los producidos por alguna variable de perturbación que no se ha incluido.

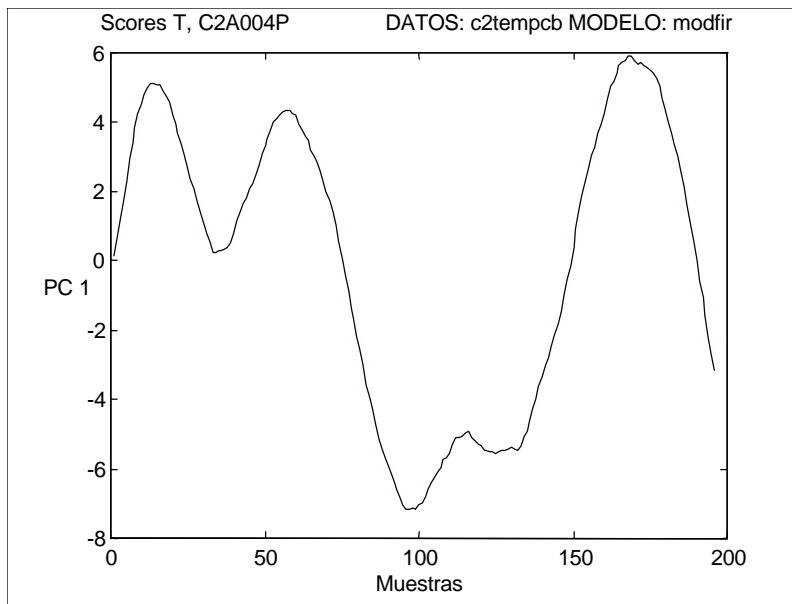


Fig. 100. Gráfico de coordenadas, componente 1.

### Gráfico de Errores residuales para X y para Y

Se utilizan como en el caso de los modelos estacionarios. Para la matriz X no se representan todas las variables sino los errores correspondientes al primer y último coeficiente de cada variable manipulada. En el caso de representar PRESS de las variables X, se representa el primer y el último coeficiente del modelo de impulso.

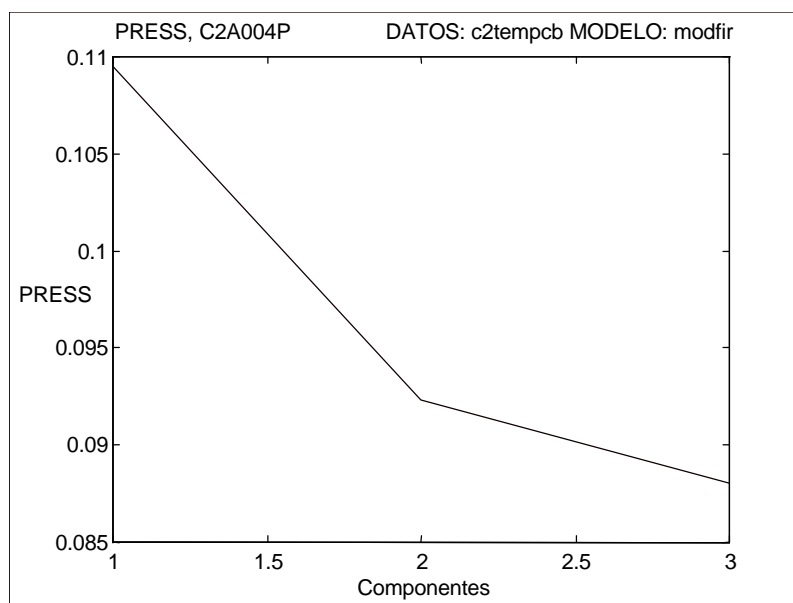


Fig. 101. Gráfico de Errores de la matriz Y, PRESS.

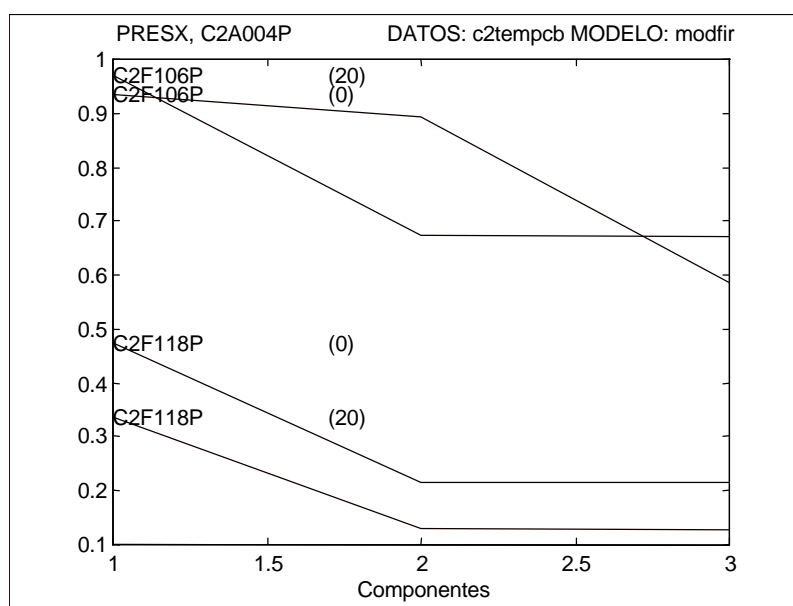


Fig. 102 . Gráfico de errores de la Matriz X, PRESX.

## Resultados

Los resultados del modelo en formato de texto se guardan con la extensión \*.TXT y con el nombre que se indicó en la sección de título y comentarios. La base de datos de MATLAB, conteniendo toda la información sobre los resultados, se guarda con el mismo nombre y extensión MAT.

### Creación del fichero de definición de modelo de impulso finito

Los modelos de impulso finito generados se extraen para utilizarse en la aplicación de control multivariable mediante el módulo **MATLAB SAVE\_MDF**.

```

C Modelo Impulso generado con PLS
C Fichero de Datos : c2tempcb
C Model Gain      : 3.157894
C Dead Time      : 0 (Control Intervals)
C Control Interval : 240 (Seconds)
C Model Length    : 25 (Points)
C Model Scale     : 1.592713
C Coefficient Sum : 1.000000
C Fecha y Hora creación 26 2 1998 19 17
C
C CV Name        : C2A004P
C MV/DV Name     : C2F106P
C
C Model Type     : Impulse Response
C
      3.157894      25      0      1      240
      0.04232692  0.04857626  0.04785210  0.04688137  0.04837392
      0.05086057  0.05367128  0.05693670  0.04710835  0.04027159
      0.03532722  0.03420376  0.03543965  0.03300963  0.03140518
      0.033394778 0.03693135  0.03822607  0.03709439  0.03722287
      0.03625492  0.03742124  0.03320975  0.03081334  0.02663380

```

Fig. 103. Fichero de Modelo de Impulso Finito.

## Redes Neuronales. Programa IPES

Uno de los objetivos de este trabajo ha sido realizar una comparación de la técnica de calibración multivariante PLS con una de las herramientas más potentes que están en estos momentos disponibles, las redes neuronales. Con este objeto, se aplicaron ambas técnicas a los mismos grupos de datos.

Las redes neuronales se han tratado con un programa de correlaciones

que se emplea con éxito en la Industria de Petróleo, **IPES**, que corresponde al acrónimo de *Inferential Property Estimation Software*. Los derechos de este programa son de Logicon R.D.A. y es comercializado por ABB Corporation.

### ***Descripción Funcional***

Entre las características más importantes de este producto destacan las siguientes. La entrada de datos se realiza en **EXCEL**, del que **IPES** es una aplicación interna. Es posible ajustar distintos parámetros relacionados con la topología de la Red (número de neuronas interiores), la selección de la fracción de validación, el número de variables a introducir en el modelo y el número de etapas máximo para aprendizaje. Con respecto a la obtención de resultados, el programa crea en distintas hojas de cálculo del libro de **EXCEL** activo las distintas fórmulas y los gráficos de seguimiento.

Una de las mayores ventajas del programa es la de convertir el resultado de la Red Neuronal en una aproximación a un polinomio cuadrático con todas las variables de entrada a la Red. De esta forma, la introducción de la ecuación de cálculo en el sistema de control se realiza de manera más sencilla. Igualmente se puede escribir en código C el resultado de la fórmula y compilarlo directamente en aquellos sistemas que lo soporten.

Con respecto a los errores, el programa informa del ***Leave-N-out Test Error***, que corresponde al error esperado de la red neuronal cuando se tratan los datos que no se han utilizado en el ajuste. Por lo tanto, equivaldría a los errores de validación de la calibración multivariante en unidades de la variable calculada. Otro dato importante es el error del polinomio de aproximación (***Polynomial-Aprox.-Error***), que indica el error que se puede producir en las predicciones cuando se utiliza la aproximación polinómica. El coeficiente de correlación (***Correlation Coefficient***), que deberá estar entre 0 y 1, constituye el indicador de la dependencia entre los datos reales y los predichos por el modelo. Por último, el «***Confidence in the leaveN-out NN fit***» es el grado de confianza o test F de Fisher.

---

IPES: Analysis of factor						
Leave-13-out Test Error		= 5.10E-01 (output units)				
Combined Nets Total Error		= 4.50E-01 (output units)				
Polynomial Approx. Error		= 4.54E-01 (output units)				
Correlation Coefficient (NN vs. actual)		= 0.938				
Confidence in Leave-13-out NN Fit		= 100.000%				
Neural Net Formula						
PVR=+5.64E-01s(-1.03E+00-3.11E-02*PLU873+7.99E-04*PLF206+4.66E-01*REL. REFLUJO)+1.52E+1.90E-02*PLU873-1.08E-03*PLF206+1.58E-01*REL. REFLUJO)+1.16E+00s(-2.13E+00-6.11E-02*PLU873+7.22E-01*REL. REFLUJO)+1.10E+00s(-1.74E+00-5.48E-02*PLU873+7.51E-03*PLF206+7.41						
Quadratic Approximation to Neural Net Formula						
(Only terms with importance > 1% are included)						
PVR=+1.71E+01-1.53E-01*PLU873+9.52E-03*PLF206+1.94E+00*REL. REFLUJO+3.87E-04*PLU873*						
The above formula is contained in the following table which shows:						
Ranked Importance of each Polynomial Term						
Dependent Variable = PVR (output units)						
Input 1	Input 2	Coefficient of Term	Term Error (output units)	Term Importance (%)		
constant		1.71E+01	N/A	N/A		
REL. REFLUJO		1.94E+00	9.72E-01	82.090		
PLU873		-1.53E-01	6.01E-01	63.651		
REL. REFLUJO	PLU873	-9.77E-03	2.42E-01	22.075		
PLU873	PLU873	3.87E-04	1.76E-01	13.036		
REL. REFLUJO	REL. REFLUJO	6.20E-02	9.30E-02	4.029		
PLF206		9.52E-03	7.25E-02	2.483		
PLF206	PLU873	-2.39E-05	9.27E-03	.042		
REL. REFLUJO	PLF206	2.58E-04	6.06E-03	.018		
PLF206	PLF206	3.65E-06	1.66E-03	.001		
Network Structure						
# Inputs	# Hiddens	# Outputs				
3	8	1				
Selected Columns						
PLU873	PLF206	REL. REFLUJO				
9	12	21				
Network Weights and Thresholds						
wIn			wOut	vHidden	vOut	
-0.031054119	0.000798799	0.46605	0.563597858	-1.027442813	-8.24245739	
-0.071553893	-0.005207758	0.97372538	1.519358277	-2.506270647		
-0.077424563	0.010844824	0.91387713	1.648769021	-2.638982296		
-0.019016236	-0.001076712	0.15790516	0.209244549	-0.647080064		
-0.061115406	0.00374188	0.71675545	1.16360569	-2.133113384		
-0.05815595	0.002957775	0.6524142	1.066420317	-2.07555604		
-0.048344735	0.008865838	0.72190976	1.010169268	-1.389532566		
-0.054814667	0.007507968	0.74140501	1.104103327	-1.740953326		

Fig. 104. Hoja de datos de una fórmula calculada por IPES.

## **Modelado Dinámico, Modelos Multivariables. SMC Model**

El programa *SMC MODEL*, que se suministra con la licencia de uso del programa para control Multivariable Predictivo SMCA, se ha empleado para los modelos dinámicos. Este programa se ejecuta bajo Windows. Permite seleccionar los periodos de datos y la identificación MIMO, así como aplicar un filtro previo a los datos para mejorar la identificación, unir modelos y probar los resultados con distintos grupos de datos. Soporta modelos FIR y ARX y visualiza todos los modelos en forma de gráfico en escalón o impulso. Calcula y visualiza los intervalos de incertidumbre para todos los modelos, y, finalmente, extrae los modelos en forma de ficheros para su lectura automática por el programa de control Multivariable SMCA.

## **Simulación Rigurosa en estado estacionario. Programa PRO-II**

Parte de la información empírica de este trabajo se ha generado mediante un programa de simulación rigurosa de procesos. El simulador PRO-II, comercializado por SIMSCI, corresponde a una versión mejorada de su predecesor (PROCESS) y funciona en PC. Pertenece a la categoría de simuladores modulares y de ejecución secuencial; el concepto modular se refiere al hecho de que la simulación se descompone en las Operaciones Unitarias de que consta la simulación, y el secuencial a que la resolución del diagrama de flujo se realiza en etapas correspondientes a cada una de esas Operaciones. Las corrientes de recirculación se calculan iterativamente.

También este programa se ejecuta bajo Windows y facilita el intercambio DDE con otras aplicaciones. Permite la resolución secuencial y modular en estado estacionario. Contiene varios métodos para acelerar el número de etapas en el cálculo iterativo, y una librería de métodos termodinámicos y de propiedades para fracciones de petróleo. Incluye un módulo de cálculo para optimización (que se resuelve iterativamente a partir de caso base), y ejecuta múltiples casos a partir de uno inicial en el mismo problema. Dispone de un entorno gráfico (PROVISION) para la construcción de las simulaciones.

---

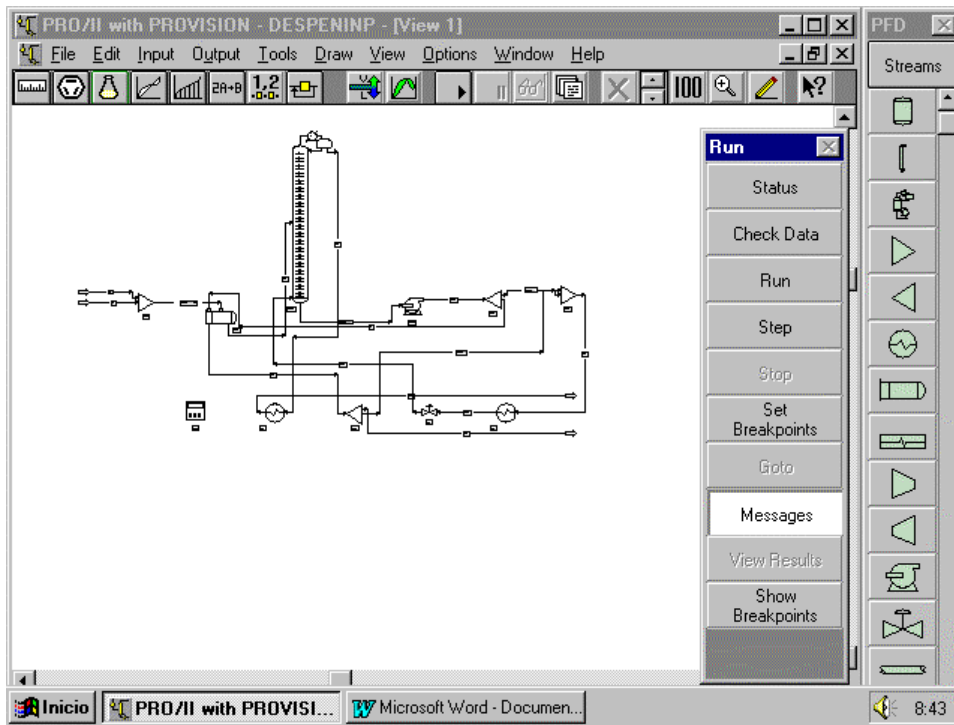


Fig. 105 . Pantalla inicial del entorno gráfico PROVISION y diagrama de simulación.



**Capítulo 6**  
**APLICACIÓN EN RÉGIMEN ESTACIONARIO**  
**PARA PREDICCIÓN DE PROPIEDADES O**  
**DESARROLLO DE MODELOS**

## **6. Aplicación en régimen estacionario para predicción de propiedades o desarrollo de modelos**

### ***6.1. Cálculo por inferencia de la Presión de vapor Reid en una torre Despentanizadora. Datos Simulación***

#### **Procedimiento Experimental**

##### ***Desarrollo de modelo Riguroso de la Torre***

La Torre despentanizadora, como se indicó en la sección correspondiente, realiza la separación de pentanos y hexanos de la nafta sin estabilizar procedente de la Unidad CADU-2. Puede recibir como complemento de carga una inyección de un tanque de nafta ligera.

La carga caliente de la Estabilizadora de CADU-2 se mezcla con la nafta de tanque antes de los cambiadores E-11 para luego entrar en la torre. El circuito de cabeza está constituido por un aerorefrigente y un refrigerante de agua. La presión de la torre se controla por anegamiento de los tubos del refrigerante (condensador total). Los pentanos / hexanos que no vuelvan a la torre como reflujos se envían después de refrigerar a tanque. El circuito de fondo de la torre está constituido por una línea que se divide hacia los cambiadores de carga E-11 y hacia el horno de recalentamiento PH-5 y de ahí vuelve a la torre. La parte de producto de fondo que se hizo pasar por los cambiadores de precalentamiento de la carga E-11 y que no accede al horno de recalentamiento constituye la salida de fondo de la torre y se envía a refrigeración (destino tanque) o al recipiente de carga de la Unidad Unifining (destino proceso). El esquema de la Unidad se puede ver en las Fig. 106 y Fig. 107.

---

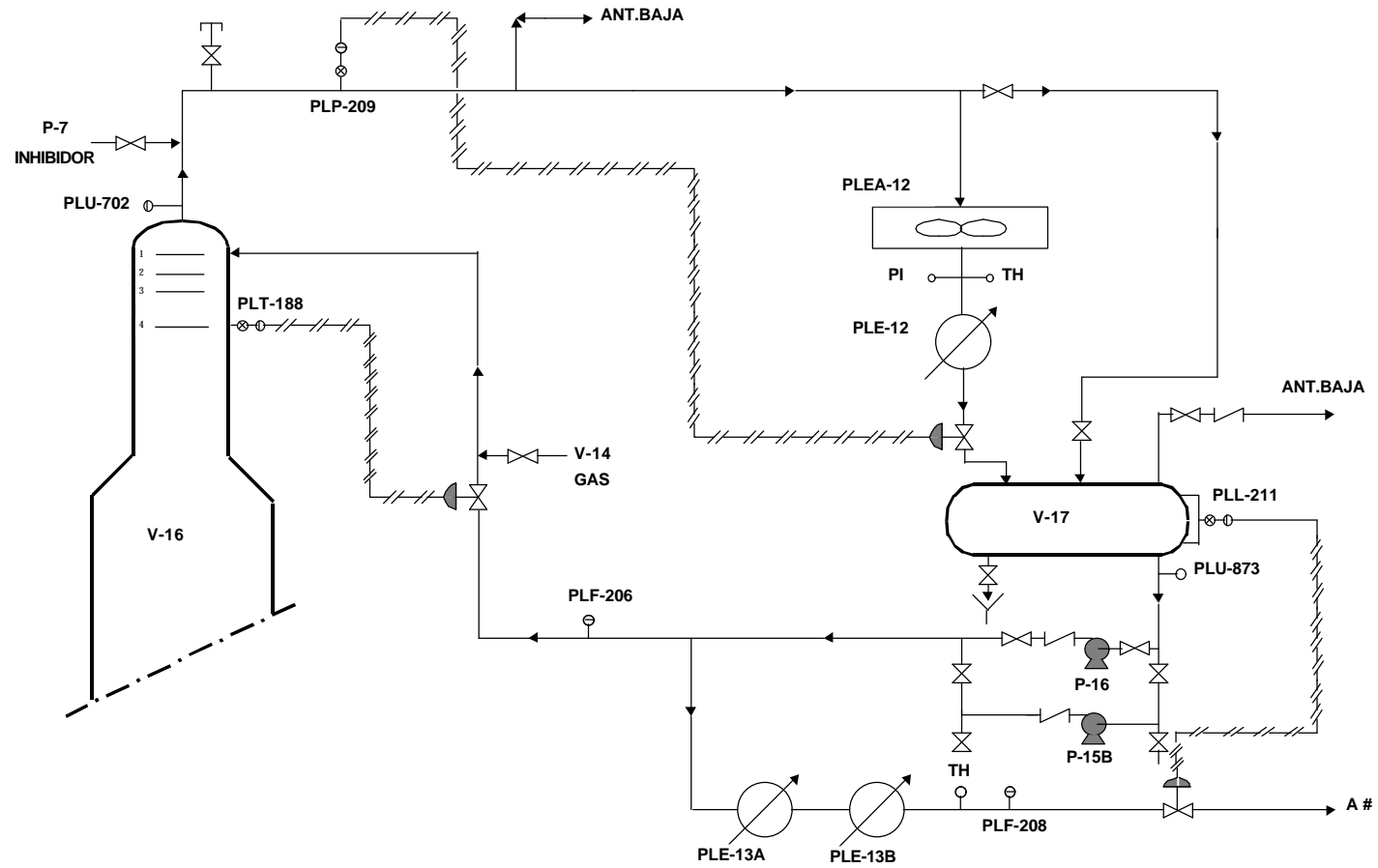


Fig. 106 . Diagrama de proceso de la Unidad Despentanizadora. Circuito de cabeza.

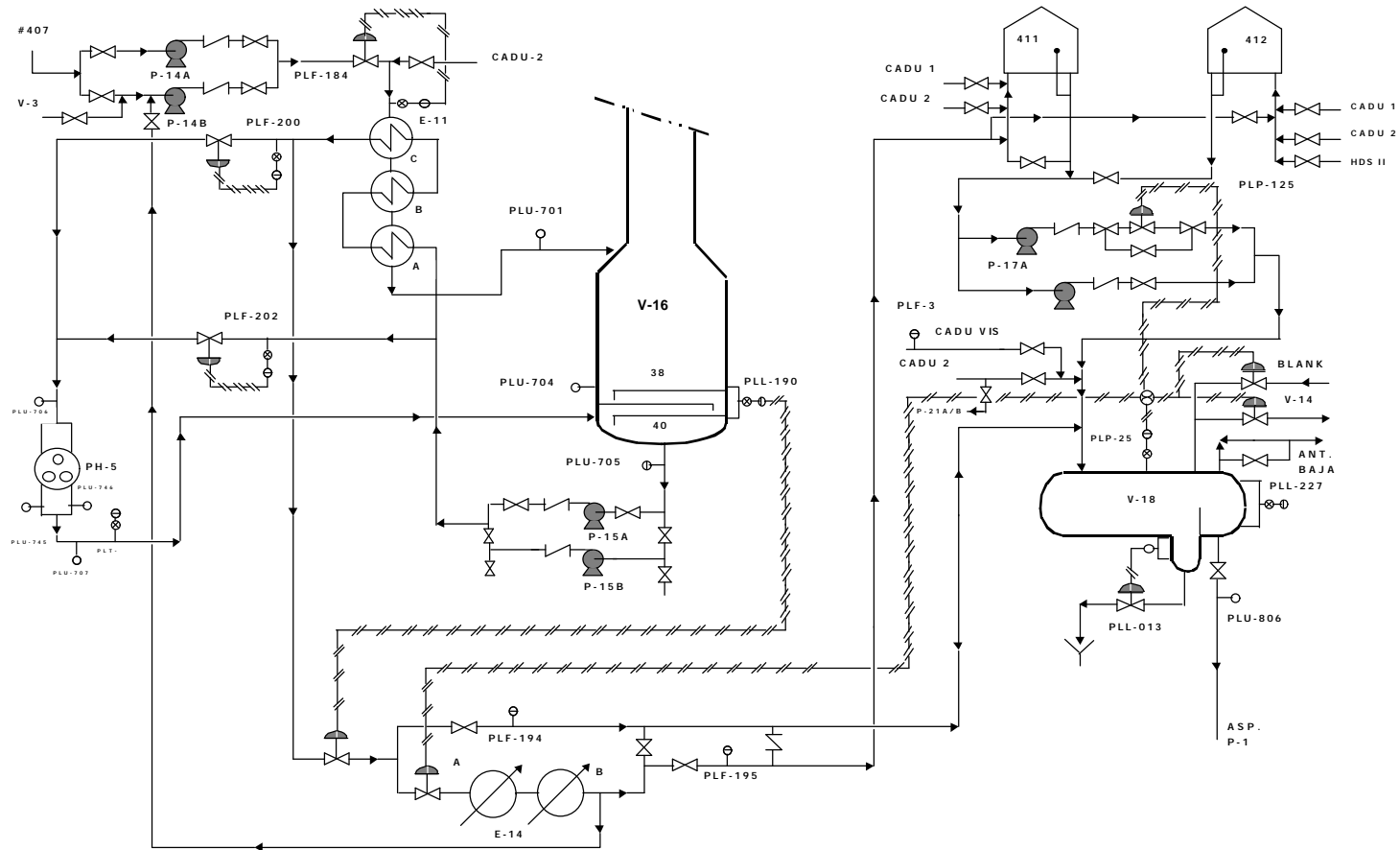


Fig. 107. Diagrama de proceso de la Unidad Despentanizadora. Circuito de fondo.

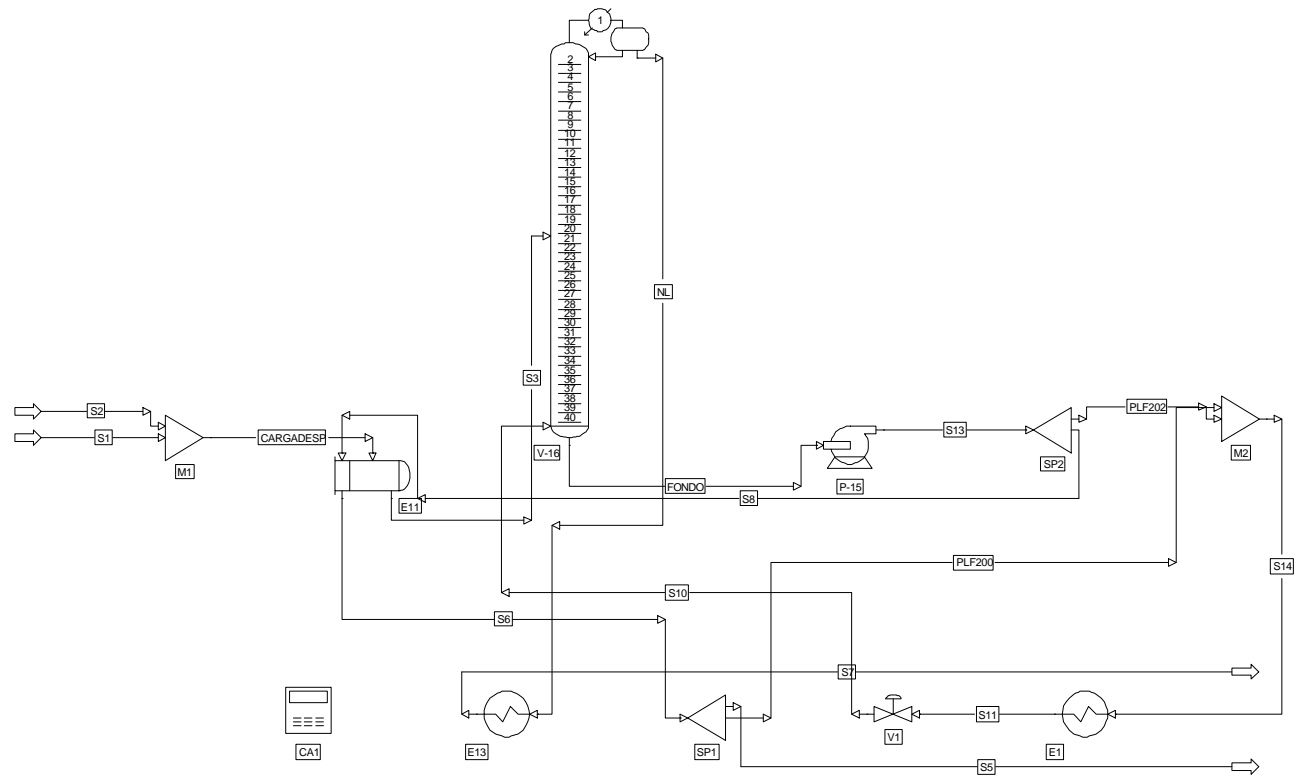


Fig. 108 . Diagrama de Flujo de la Simulación de la Despentanizadora.

Los parámetros de control de calidad de esta torre están relacionados con el uso de los productos. El destilado se exporta como nafta ligera parafinica, lo cual lleva implícito una especificación de exportación de P.V.R. de 13.5 psia<sup>75</sup> máximo. El fondo de la torre se envía a la Unidad de Reformado, en el que se desea un 5% de Destilación D86 (ASTM D86) alto. En ningún caso existe analizador de proceso.

Si se pudiese disponer de un cálculo en línea de la PVR de la cabeza y del 5% de destilación del producto de fondo, sería posible optimizar el funcionamiento de la torre por medio de una aplicación de control que mantenga la calidad reduciendo la cantidad de producto de cabeza en favor de la carga a la Unidad de Reformado Catalítico, que es el producto más valioso.

### **Modelo de PRO-II**

El modelo de PRO-II intenta emular la Unidad real, para lo cual se ha identificado cada Operación Unitaria y se ha transcrito al programa de cálculo. El diagrama de flujo del modelo queda reflejado en la Fig. 108. Se ha encontrado que es posible reproducir los resultados de la Unidad tomando 20 etapas teóricas y simulando la pérdida de carga del circuito de fondo con una válvula ficticia antes de la entrada en la torre. En el Apéndice se incluye el listado del modelo de PRO-II correspondiente a esta Simulación.

Los resultados de la Simulación se escriben a un fichero de datos, que será utilizado para calibrar y luego validar el modelo obtenido. Los datos que se recogen corresponden a la instrumentación real que posee la planta; por lo tanto, aunque en la simulación se conoce toda la información de calidad de la carga, ésta no se utiliza en el calibrado de los modelos.

La presión de vapor Reid se calcula utilizando el método API para naftas (API, 1987). El 5% de Destilación D86 se calcula mediante el método de conversión de TBP a D86 documentado en API (1986).

---

<sup>75</sup> psi, pulgadas por pie cuadrado; psia, absolutas; psig, manométrica.

---

### **Diseño factorial y resultados de la simulación**

Para crear los datos que se necesitan para modelar el comportamiento de la Unidad de Simulación se han identificado siete factores de variación (Véase

Tabla 35). Las variables operativas que definen la separación de la Unidad son: presión de cabeza de la torre; relación de reflujo; condiciones entálpicas de la alimentación (temperatura carga) y temperatura del horno. Con respecto a la alimentación se varían la relación iC5 a nC5 en la carga, el caudal de ligeros y el caudal de pesados; estos valores afectan tanto a la calidad como a la cantidad de la alimentación. El intervalo de variación refleja el comportamiento más normal de los datos, que se ha detectado en la Unidad.

Para no ejecutar las 128 simulaciones que serían necesarias para siete factores y dos niveles, se realizó un diseño factorial parcial por un total de 64 simulaciones. Los efectos confundidos se encuentran a partir de cuatro variables. El diseño se ha realizado utilizando el programa estadístico STATGRAPHICS. En la

Tabla 36 se recogen los distintos casos y el valor de la respuesta de la simulación frente a la PVR del producto de cabeza de la torre.

*Tabla 35 . Factores de variación en los datos de la simulación.*

FACTOR	DESCRIPCIÓN	NIVEL MÍNIMO	NIVEL MÁXIMO	UNIDADES
A	Relación Reflujo Torre	1	2	L/D
B	Temp. Entrada Unidad	40	70	°C
C	Temp. Reboiler	130	140	°C
D	Presión Cabeza Torre (absoluta)	1.5	1.7	kg/cm <sup>2</sup>
E	Ligeros, S1	13697	20546	kg/h
F	Relación iC5/nC5 en S1	15.99/27.93	27.95/15.99	iC5/nC5
G	Pesados, S2	35378	53067	kg/h

Cada uno de estos casos se han definido en el apartado CASESTUDY del

fichero de definición de PRO-II. Todos los factores se pueden variar dentro del misma ejecución, excepto la relación iC5/nC5 de la carga, que se hace utilizando dos ficheros de simulación.

Tabla 36 . Diseño factorial reducido para 7 variables, 2 niveles, 64 casos.  
Respuesta de PVR, psia.

Run	block	response	a	b	c	d	e	f	g	h	i	j	k
( 11)	1	10.396	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	+
( 64)	1	12.771	+	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
( 19)	1	10.584	-	+	-	-	-	-	-	-	-	-	-
( 37)	1	12.577	+	+	-	-	-	-	-	-	-	-	+
( 48)	1	9.8527	-	-	+	-	-	-	-	-	-	-	-
( 46)	1	12.255	+	-	+	-	-	-	-	-	-	-	+
( 15)	1	10.02	-	+	+	-	-	-	-	-	-	-	+
( 50)	1	12.118	+	+	+	-	-	-	-	-	-	-	-
( 23)	1	10.582	-	-	-	+	-	-	-	-	-	-	-
( 53)	1	12.511	+	-	-	+	-	-	-	-	-	-	+
( 63)	1	10.309	-	+	-	+	-	-	-	-	-	-	+
( 1)	1	12.673	+	+	-	+	-	-	-	-	-	-	-
( 35)	1	9.9995	-	-	+	+	-	-	-	-	-	-	+
( 26)	1	12.199	+	-	+	+	-	-	-	-	-	-	-
( 27)	1	9.912	-	+	+	+	-	-	-	-	-	-	-
( 17)	1	12.189	+	+	+	+	-	-	-	-	-	-	+
( 47)	1	10.94	-	-	-	-	+	-	-	-	-	-	-
( 55)	1	13.261	+	-	-	-	+	-	-	-	-	-	+
( 39)	1	11.103	-	+	-	-	+	-	-	-	-	-	+
( 56)	1	13.079	+	+	-	-	+	-	-	-	-	-	-
( 5)	1	10.561	-	-	+	-	+	-	-	-	-	-	+
( 25)	1	12.836	+	-	+	-	+	-	-	-	-	-	-
( 4)	1	10.64	-	+	+	+	+	-	-	-	-	-	-
( 16)	1	12.864	+	+	+	-	+	-	-	-	-	-	+
( 13)	1	11.06	-	-	-	+	+	-	-	-	-	-	+
( 28)	1	13.02	+	-	-	+	+	-	-	-	-	-	-
( 12)	1	10.8585	-	+	-	+	+	-	-	-	-	-	-
( 52)	1	13.166	+	+	-	+	+	-	-	-	-	-	+
( 14)	1	10.595	-	-	+	+	+	-	-	-	-	-	-
( 40)	1	12.808	+	-	+	+	+	-	-	-	-	-	+
( 9)	1	10.64	-	+	+	+	+	-	-	-	-	-	+
( 18)	1	12.7886	+	+	+	+	+	-	-	-	-	-	-
( 51)	1	11.03	-	-	-	-	-	+	-	-	-	-	-
( 45)	1	13.547	+	-	-	-	-	+	-	-	-	-	+
( 10)	1	11.18	-	+	-	-	-	+	-	-	-	-	+
( 29)	1	13.37	+	+	-	-	-	+	-	-	-	-	-
( 2)	1	10.308	-	-	+	-	-	+	-	-	-	-	+
( 22)	1	12.987	+	-	+	-	-	+	-	-	-	-	-
( 58)	1	10.608	-	+	+	-	-	+	-	-	-	-	-
( 62)	1	12.696	+	+	+	-	-	+	-	-	-	-	+
( 3)	1	11.221	-	-	-	+	-	+	-	-	-	-	+
( 38)	1	13.301	+	-	-	+	-	+	-	-	-	-	-
( 54)	1	10.938	-	+	-	+	-	+	-	-	-	-	-
( 33)	1	13.475	+	+	-	+	-	+	-	-	-	-	+
( 6)	1	10.592	-	-	+	+	-	+	-	-	-	-	-
( 36)	1	12.829	+	-	+	+	-	+	-	-	-	-	+
( 8)	1	10.39	-	+	+	+	-	+	-	-	-	-	+
( 49)	1	12.932	+	+	+	+	-	+	-	-	-	-	-
( 60)	1	11.635	-	-	-	-	+	+	-	-	-	-	+
( 42)	1	14.1667	+	-	-	-	+	+	-	-	-	-	-
( 24)	1	11.793	-	+	-	-	+	+	-	-	-	-	-
( 59)	1	13.97	+	+	-	-	+	+	-	-	-	-	+
( 44)	1	11.098	-	-	+	-	+	+	-	-	-	-	-
( 41)	1	13.649	+	-	+	-	+	+	-	-	-	-	+
( 32)	1	11.304	-	+	+	-	+	+	-	-	-	-	+
( 30)	1	13.598	+	+	+	-	+	+	-	-	-	-	-
( 21)	1	11.75	-	-	-	+	+	+	-	-	-	-	-
( 34)	1	13.899	+	-	-	+	+	+	-	-	-	-	+
( 61)	1	11.548	-	+	-	+	+	+	-	-	-	-	+
( 20)	1	14.06	+	+	-	+	+	+	-	-	-	-	-
( 7)	1	11.21	-	-	+	+	+	+	-	-	-	-	+
( 31)	1	13.627	+	-	+	+	+	+	-	-	-	-	-
( 57)	1	11.217	-	+	+	+	+	+	-	-	-	-	-
( 43)	1	13.574	+	+	+	+	+	+	-	-	-	-	-

Para garantizar una dispersión aleatoria, los resultados se ordenan



según consta en el diseño factorial de experimentos.

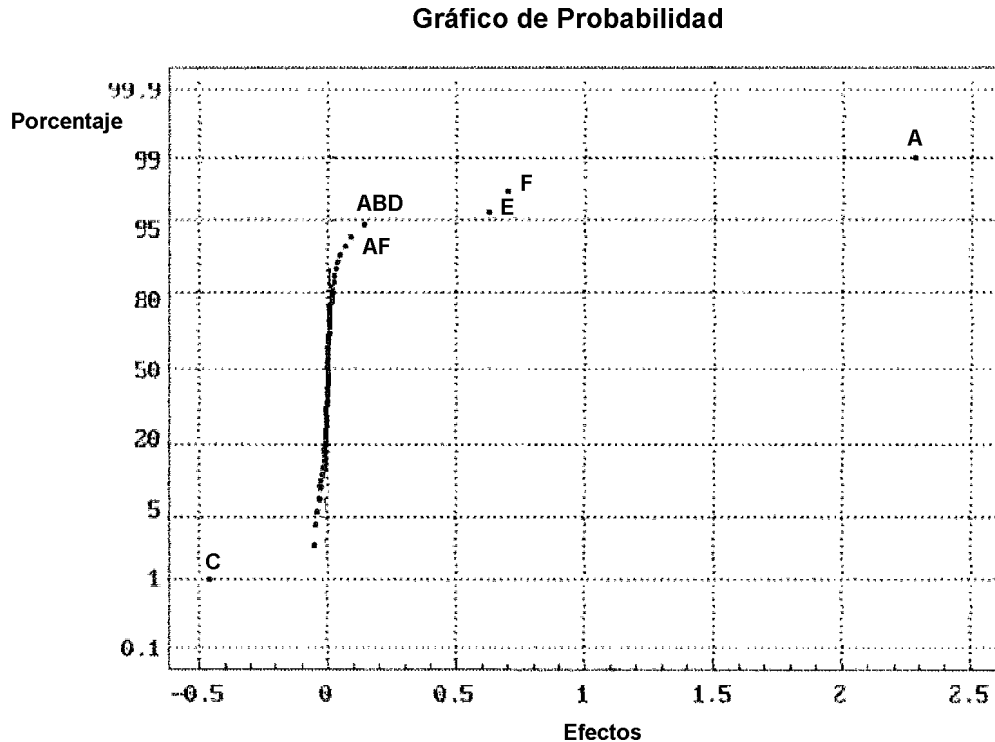


Fig. 109 . Gráfico de probabilidad para los efectos de la variable de respuesta PVR.

El análisis de la varianza resultante se encuentra en la Tabla 37 y permite deducir los efectos más importantes: Relación de Reflujo (**A**); Relación de iC5 a NC5 en la carga (**F**); Caudal de ligeros en carga (**E**); Temperatura del horno (**C**). A continuación se encuentran los efectos combinados: Relación Reflujo, temperatura de entrada y presión de la torre (**ABD**); Reflujo y relación iC5/nC5 (**AF**); Temperatura del horno y caudal de ligeros (**CE**); Temperatura de Horno y Relación Pentanos (**CF**), seguidos por el resto de interacciones que tienen una participación frente al primer coeficiente inferior al 2%.

*Tabla 37. Análisis de varianza para los 7 efectos. Efectos clasificados por orden de importancia, PVR en psia.*

EFFECTO	CONFUNDIDO	RESPUESTA	
MEDIO	+ABCDEFG=		11.948
A	+BCDEFG =		2.2788
F	+ABCDEG =		0.69795
E	+ABCDGF =		0.623957
C	+ABDEFG =		-0.464918
ABD	+CEFG =		0.139772
AF	+BCDEG =		0.0873716
CE	+ABDFG =		0.0711941
CF	+ABDEG =		-0.0516253
ABCD	+EFG =		-0.0484284
EF	+ABCDG =		0.0444622
ABDE	+CFG =		-0.0401534
ABC	+DEFG =		-0.0355909
CD	+ABEFG =		0.0355816
AC	+BDEFG =		0.0338472
D	+ABCEFG =		-0.0288684
ABCDE	+FG =		-0.0282284
AB	+CDEFG =		-0.0234784
BD	+ACEFG =		-0.0232503
ABCDF	+EG =		0.0228847
ABDF	+CEG =		0.0223972
BE	+ACDFG =		0.0155497
BC	+ADEFG =		0.0153622
AD	+BCEFG =		-0.0144528
DE	+ABCFG =		-0.0134184
ABCDEF	+G =		-0.0113153
ABCF	+DEG =		-0.0107403
AEF	+BCDG =		0.0103591
B	+ACDEFG =		-0.0100878
BCE	+ADFG =		9.37E-03
BCD	+AEFG =		-9.14E-03
ACDE	+BFG =		-8.89E-03
ABCE	+DFG =		7.90E-03
ABDEF	+CG =		-7.68E-03
ABEF	+CDG =		-6.68E-03
BCDE	+AFG =		-6.09E-03
ABF	+CDEG =		-5.57E-03
DF	+ABCEG =		5.32E-03
BCDF	+AEG =		-4.91E-03
BCDEF	+AG =		-4.71E-03
CDE	+ABFG =		-4.59E-03
ACF	+BDEG =		-4.39E-03
ACDF	+BEG =		4.23E-03
DEF	+ABCG =		-4.13E-03
BDEF	+ACG =		-4.01E-03
ADE	+BCFG =		-3.40E-03
CDF	+ABEG =		3.34E-03
BDE	+ACFG =		3.17E-03
AE	+BCDFG =		-2.94E-03
ABE	+CDFG =		-2.87E-03
CEF	+ABDG =		2.26E-03
ABCEF	+DG =		-2.23E-03
BF	+ACDEG =		-2.21E-03
ADF	+BCEG =		2.16E-03
CDEF	+ABG =		1.51E-03
ACEF	+BDG =		1.47E-03
BDF	+ACEG =		-1.33E-03
ACDEF	+BG =		1.06E-03
ADEF	+BCG =		8.59E-04
BCF	+ADEG =		-6.93E-04
ACD	+BEFG =		6.85E-04
BCEF	+ADG =		-4.56E-04
BEF	+ACDG =		4.07E-04
ACE	+BDFG =		2.35E-04

El análisis de la varianza indica que para predecir el comportamiento de la PVR, es necesario utilizar las características operativas de la Unidad (principalmente L/D y temperatura del horno, siendo de menor importancia la temperatura de entrada a la Unidad y la presión de operación) y las características de calidad y cantidad de la alimentación (principalmente la relación iC5 a nC5 y el caudal de ligeros), no teniendo ninguna relevancia el caudal de pesados, ya que no participa en las propiedades de la P.V.R.

En una Planta real este análisis no siempre es posible debido a que normalmente la calidad de alimentación varia, ni tampoco se puede realizar un diseño controlado de experimentos como el que se ha simulado. No obstante, existe bastante información procedente de la instrumentación y su adecuado tratamiento puede informar del comportamiento de la Planta y quizás de las características de la alimentación. Por ejemplo, una carga más ligera necesita más calor en el horno para alcanzar la misma temperatura, siendo este requerimiento una indicación indirecta de la calidad. Los datos de la simulación, asociados con la instrumentación correspondiente a la planta real y modelados mediante PLS y Redes Neuronales, permiten comprobar estas afirmaciones. La Tabla 38 muestra la instrumentación de la planta.

---

Tabla 38 . Base de datos de Instrumentos, Unidad Despentanizadora.

VARIABLE	DESCRIPCION	UNIDADES
PLF194195	Salida Fondo	m <sup>3</sup> /h
PLP209	Presión manométrica de la torre,	kg/cm <sup>2</sup>
PLU705	Temperatura de fondo	°C
PLT188	Temperatura plato 8	°C
PLU706	Temperatura entrada Horno	°C
PLT196	Temperatura salida Horno	°C
PLU873	Temperatura Reflujo	°C
PLF163	Caudal gas quemador	nm <sup>3</sup> /h
PLF206	Caudal Reflujo	m <sup>3</sup> /h
PLU701	Temperatura de entrada	°C
PLF184	Caudal Alimentación	m <sup>3</sup> /h
PLF208	Caudal Destilado	m <sup>3</sup> /h
PLU702	Temperatura Cabeza	°C

### PLS

Se realiza un primer análisis con los datos de las variables o *tags* de la Tabla 38. En la Tabla 39 se indican los criterios empleados en el primer análisis.

Tabla 39 . Criterios utilizados, Modelo: mfactoro Datos: factoror.

PARÁMETRO	CRITERIO SEGUIDO
VARIABLES	Sin transformar
Reducción	No activa
Componentes	10
Validación	5 grupos, 20%
Incrementos	No

*Tabla 40. Resultados obtenidos, Modelo: mfactoro Datos: factoror  
 V. dep.:PVR Part. %: 99.81 Desv.Std: 1.3285 E.Std: 0.0549  
 V.Calibración: 0.0554 V.Predicción: 0.0680 BIAS: -0.0030 SEP: 0.0647  
 Media: 11.8935 O.O.: 21.6005*

VARIABLES	MEDIA	COEF.STD.	COEF.MODEL O	DESV.STD	ERR.STD.	IMP.
PLT196	141.2	0.0032	0.000417	10.0266	0.5094	0.1433
PLF208	20.6	0.0041	0.00108	5.6027	0.4281	0.1841
PLF194195	65.1	0.0099	0.000861	14.4627	0.4428	0.4478
PLF184	85.7	0.0114	0.00107	13.5148	0.4849	0.5128
PLF206	28.6	0.0150	0.00238	7.7680	0.4930	0.6772
PLF163	222.4	0.0164	0.000445	46.8067	2.8262	0.7396
PLU702	64.1	0.0254	0.00523	6.3667	0.4218	1.1461
PLT188	80.6	0.0431	0.00623	8.3133	0.4384	1.9451
PLU705	108.7	0.0566	0.0168	4.0564	0.3451	2.5546
PLU701	87.5	0.0618	0.0288	2.6665	0.0862	2.7882
PLU706	98.1	-0.1112	-0.0597	2.2859	0.1730	5.0205
PLP209	1.6	0.6490	8.15	0.1010	0.0092	29.3016
PLU873	57.9	-1.2081	-0.388	3.9329	0.2818	54.5389

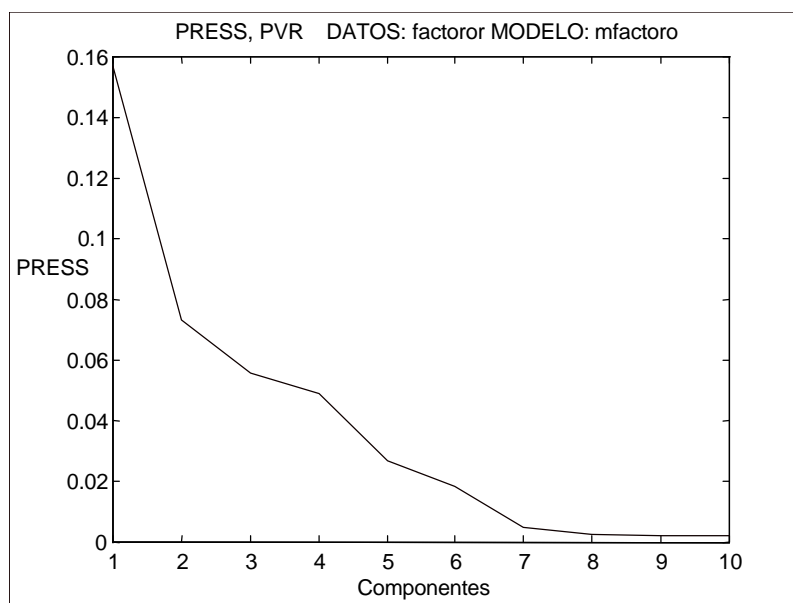


Fig. 110. Gráfico de los residuos de PVR frente a número de componente.

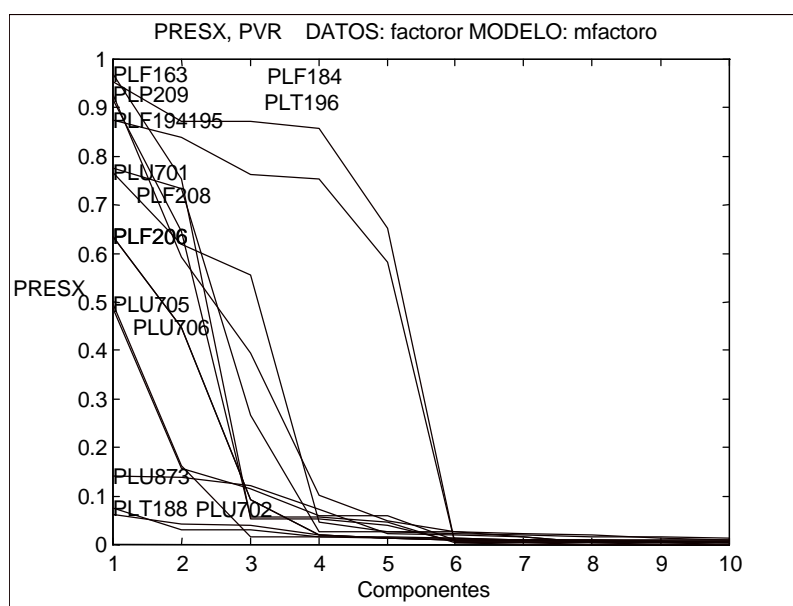


Fig. 111. Gráfico de los residuos de X frente al número de componente del modelo.

La gráfica correspondiente a los residuos de la variable Y (PRESS) indica que a partir de seis componentes la reducción en la varianza del error es pequeña y que a partir de tres componentes se explica el 95% de la variación de Y.

A la vista del gráfico de PRESX, se observa que a partir de seis componentes prácticamente todas las variables X pueden explicarse entre sí. El número de componentes principales indica que los datos poseen al menos seis fuentes importantes de variación (grados de libertad).

En el modelo MFACTO01 se han usado siete componentes (Tabla 41) y sus resultados se reproducen en la Tabla 42.

El gráfico de pesos P sugiere la importancia relativa de las variables X para explicar su interdependencia. En cambio, el gráfico W refleja la importancia que tienen esas variables con respecto al grado de explicación de la variable Y.

*Tabla 41 . Criterios utilizados, Modelo: mfacto01 Datos: factoror.*

PARÁMETRO	CRITERIO SEGUIDO
VARIABLES	Sin transformar
Reducción	No activa
Componentes	7
Validación	5 grupos, 20%
Incrementos	No

---

*Tabla 42 . Resultados obtenidos, Modelo: mfacto01 Datos: factoror  
 V. dep.:PVR Part. %: 99.45 Desv.Std: 1.3285 E.Std: 0.0882  
 V.Calibración: 0.0937 V.Predicción: 0.1094 BIAS: -0.0049 SEP: 0.1076  
 Media: 11.8935 O.O.: 19.7236*

VARIABLES	MEDIA	COEF.STD.	COEF.MODELO	DESV.STD	ERR.STD.	IMP.
PLF184	85.7	0.0156	0.00148	13.5148	0.7770	0.6589
PLU706	98.1	0.0243	0.0131	2.2859	0.1900	1.0271
PLF194195	65.1	0.0357	0.00314	14.4627	0.5478	1.5122
PLF208	20.6	-0.0538	-0.0122	5.6027	0.6989	2.2778
PLT196	141.2	-0.0656	-0.0082	10.0266	0.6042	2.7762
PLT188	80.6	0.0684	0.0103	8.3133	0.6872	2.8955
PLF206	28.6	0.0704	0.0116	7.7680	0.8924	2.9788
PLF163	222.4	-0.0875	-0.00236	46.8067	3.2568	3.7020
PLU701	87.5	-0.1003	-0.0471	2.6665	0.2511	4.2419
PLU705	108.7	0.1834	0.0548	4.0564	0.3933	7.7592
PLU702	64.1	-0.2071	-0.0408	6.3667	0.6091	8.7623
PLP209	1.6	0.4934	6.2	0.1010	0.0106	20.8727
PLU873	57.9	-0.9582	-0.307	3.9329	0.4150	40.5353



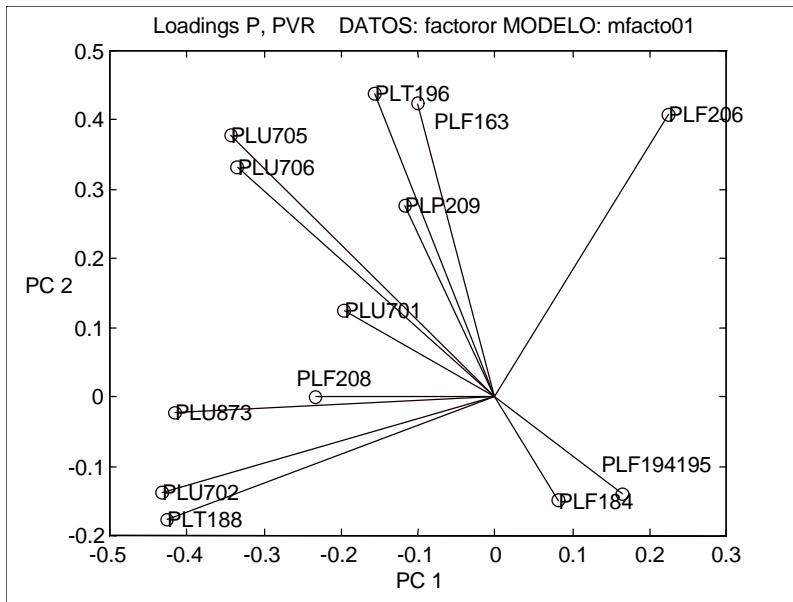


Fig. 112 . Gráfico de pesos «loadings» de dos componentes, 2 frente a 1.

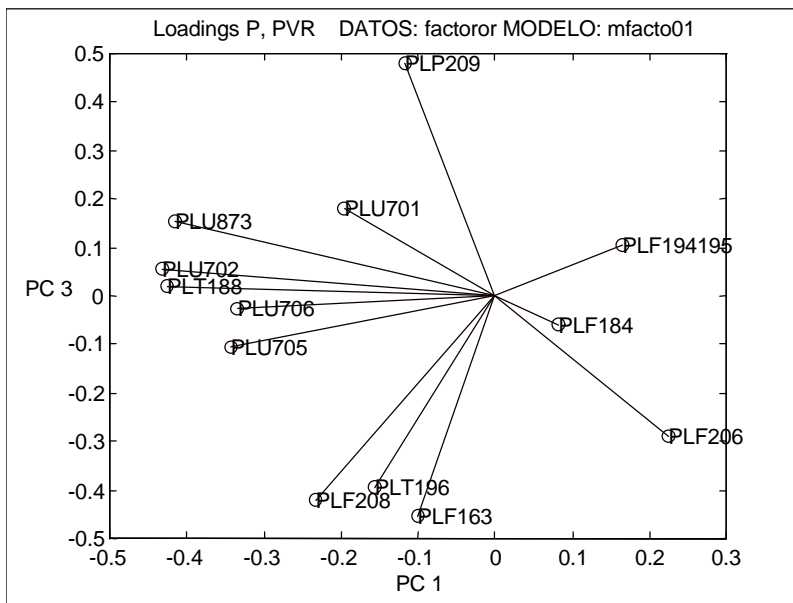


Fig. 113 . Gráfico de pesos «loadings» de dos componentes, 3 frente a 1.

Cuando un gráfico de pesos P muestra variables alineadas a lo largo de un eje imaginario que pasa por su origen, se admite que están relacionadas precisamente por esos componentes y por lo tanto son redundantes. Tales variables se explican a través de estos vectores o pesos y cualquiera puede sustituir la función de la otra y eliminarse del grupo de variables X. El modelo reducido tiene la misma potencia de predicción que el modelo completo y posiblemente tendrá menores desviaciones.

Esta eliminación se puede realizar manualmente a partir de los gráficos de *loadings* o pesos P eligiendo las variables que se encuentran alineadas en todos y cada uno de los gráficos posibles. Esta operación se realiza fácilmente cuando trata tres o cuatro componentes.

La Fig. 112 y Fig. 113 revelan que las variables PLT188 y PLU702 se encuentran prácticamente alineadas. La misma situación se repite hasta el componente cinco, en el que ambas variables se separan y son otras las que se alinean con ellas.

Se ha desarrollado un programa para determinar esas relaciones de forma automática. Se suministra en el propio fichero de definición el ángulo de coincidencia que se desea (normalmente 5 grados) y el criterio para eliminar (por importancia P, W o matriz B, etc.). El resultado puede verse en la Tabla 43.

El gráfico W expresa una de las maneras de identificar las variables que tienen importancia en Y para cada componente. Es posible evaluar el efecto de la supresión de esa variable en el modelo. La matriz de coeficientes normalizados B permite conocer la importancia de cada variable en términos de su propia variación normalizada y respecto a la participación de esa variable en todos los componentes.

---

**Tabla 43 . Resultado del análisis de vecindad para el modelo MFACTO02.**

Análisis de vecindad para el componente 2			
PLU702	y PLT188		están a 4.842
pesos 0.2071	-----	0.06844	
PLT196	y PLP209		están a 3.155
pesos 0.06562	-----	0.4934	
PLU705	y PLU706		están a 3.066
pesos 0.1834	-----	0.02428	
PLU706	y PLF194195		están a 4.533
pesos 0.02428	-----	0.03574	
PLF208	y PLU873		están a 3.336
pesos 0.05384	-----	0.9582	
Análisis de vecindad para el componente 3			
PLU702	y PLT188		están a 4.638
pesos 0.2071	-----	0.06844	
Análisis de vecindad para el componente 4			
PLU706	y PLF184		están a 3.681
pesos 0.02428	-----	0.01558	
PLF194195	y PLF163		están a 3.502
pesos 0.03574	-----	0.08751	
PLU873	y PLU702		están a 4.79
pesos 0.9582	-----	0.2071	
PLU702	y PLT188		están a 1.92
pesos 0.2071	-----	0.06844	
PLT196	y PLU705		están a 1.635
pesos 0.06562	-----	0.1834	
Análisis de vecindad para el componente 5			
PLU873	y PLT196		están a 2.114
pesos 0.9582	-----	0.06562	
PLF194195	y PLF206		están a 4.358
pesos 0.03574	-----	0.07041	
PLU701	y PLU705		están a 3.601
pesos 0.1003	-----	0.1834	
PLU706	y PLT188		están a 0.8168
pesos 0.02428	-----	0.06844	
PLT188	y PLF208		están a 2.114
pesos 0.06844	-----	0.05384	
Análisis de vecindad para el componente 6			
PLT188	y PLU702		están a 4.139
pesos 0.06844	-----	0.2071	
PLU706	y PLF206		están a 2.526
pesos 0.02428	-----	0.07041	
PLF206	y PLT196		están a 0.4816
pesos 0.07041	-----	0.06562	
PLT196	y PLF163		están a 2.633
pesos 0.06562	-----	0.08751	
Análisis de vecindad para el componente 7			
PLF206	y PLF184		están a 1.869
pesos 0.07041	-----	0.01558	
PLF194195	y PLT188		están a 1.369
pesos 0.03574	-----	0.06844	
Desde el componente 2 se pueden borrar por orden:			
Se borra PLU706	y se marca PLU705		
Se borra PLF194195	y se marca PLU706		
Se borra PLF208	y se marca PLU873		
Se borra PLT196	y se marca PLP209		
Se borra PLT188	y se marca PLU702		
Se borra PLU705	y se marca PLU706		
Se borra PLU702	y se marca PLT188		
Se borra PLP209	y se marca PLT196		
Se borra PLU873	y se marca PLF208		
Desde el componente 3 se pueden borrar por orden:			
Se borra PLT188	y se marca PLU702		

Se borra PLU702	y se marca PLT188
-----------------	-------------------

**Tabla 43, Continuación**

Desde el componente 4 se pueden borrar por orden:	
Se borra PLF184	y se marca PLU706
Se borra PLU706	y se marca PLF184
Se borra PLF194195	y se marca PLF163
Se borra PLT196	y se marca PLU705
Se borra PLT188	y se marca PLU702
Se borra PLF163	y se marca PLF194195
Se borra PLU705	y se marca PLT196
Se borra PLU702	y se marca PLU873
Se borra PLU873	y se marca PLU702
Desde el componente 5 se pueden borrar por orden:	
Se borra PLU706	y se marca PLT188
Se borra PLF194195	y se marca PLF206
Se borra PLF208	y se marca PLT188
Se borra PLT196	y se marca PLU873
Se borra PLT188	y se marca PLU706
Se borra PLF206	y se marca PLF194195
Se borra PLU701	y se marca PLU705
Se borra PLU705	y se marca PLU701
Se borra PLU873	y se marca PLT196
Desde el componente 6 se pueden borrar por orden:	
Se borra PLU706	y se marca PLF206
Se borra PLT196	y se marca PLF206
Se borra PLT188	y se marca PLU702
Se borra PLF206	y se marca PLU706
Se borra PLF163	y se marca PLT196
Se borra PLU702	y se marca PLT188
Desde el componente 7 se pueden borrar por orden:	
Se borra PLF184	y se marca PLF206
Se borra PLF194195	y se marca PLT188
Se borra PLT188	y se marca PLF194195
Se borra PLF206	y se marca PLF184
Analizadas las interferencias, es posible borrar ...	
PLT188	
Ejecute de nuevo el fichero de modelo	

El modelo FACTOR02 opera con siete componentes y reduce el número de variables automáticamente con el criterio de importancia en la Matriz B y alineamiento con P. La predicción mejora con la eliminación de la variable redundante PLT188. El valor conseguido de RMSEP es 0.0974 psi.

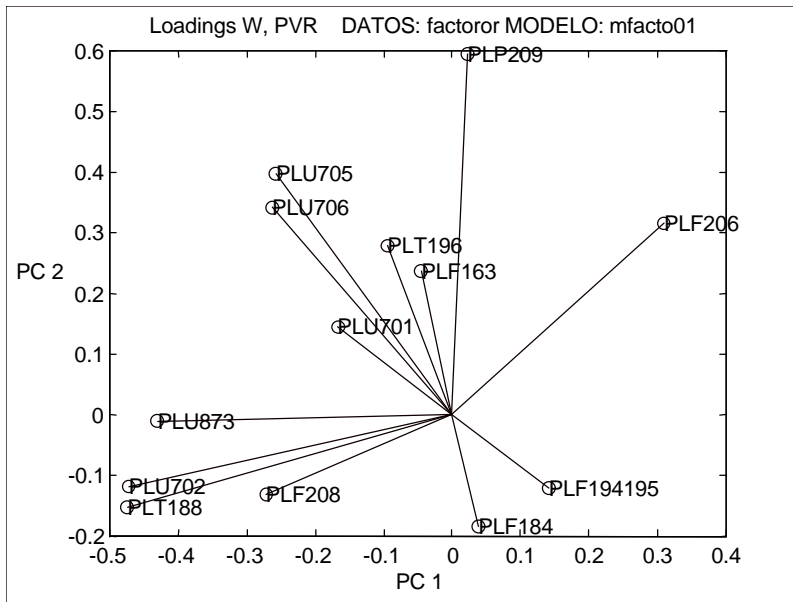


Fig. 114 . Gráfico de pesos «loadings W» Y de dos componentes, 2 frente a 1.

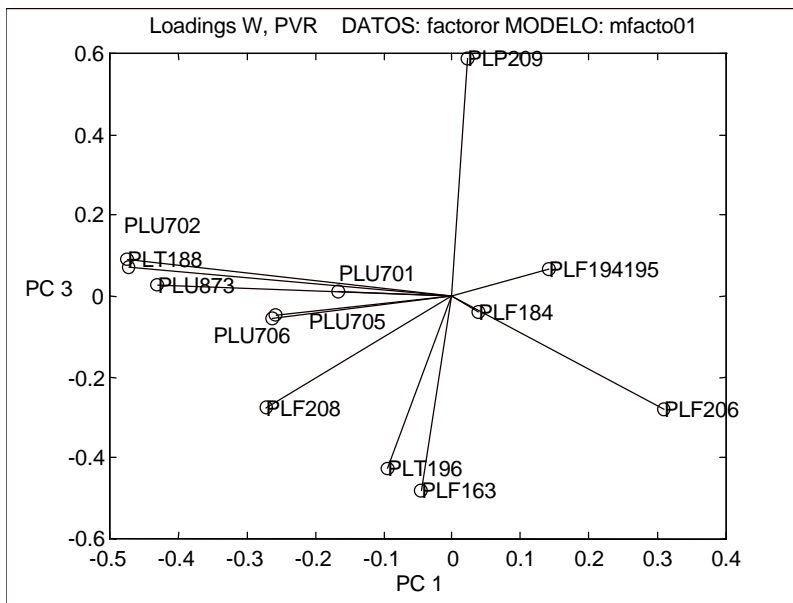


Fig. 115 . Gráfico de pesos «loadings W» Y de dos componentes, 3 frente a 1.

Tabla 44 . Criterios utilizados, Modelo: mfacto02 Datos: factoror.

PARÁMETRO	CRITERIO SEGUIDO
Variables	Sin transformar
Reducción	Dist. B 5 grados, 7comp.
Componentes	7
Validación	5 grupos, 20%
Incrementos	No

Tabla 45 . Resultados obtenidos, Modelo: mfacto02 Datos: factoror

V. dep.:PVR Part. %: 99.55 Desv.Std: 1.3285 E.Std: 0.0842

V.Calibración: 0.0854 V.Predicción: 0.0974 BIAS: -0.0011 SEP: 0.0961

Media: 11.8935 O.O.: 19.4776

VARIABLES	MEDIA	COEF.STD.	COEF.MODELO	DESV.STD	ERR.STD.	IMP.
PLF184	85.7	0.0188	0.00176	13.5148	0.6352	0.8403
PLF208	20.6	-0.0188	-0.00426	5.6027	0.5698	0.8439
PLU706	98.1	0.0203	0.011	2.2859	0.1879	0.9102
PLF194195	65.1	0.0253	0.00222	14.4627	0.5253	1.1351
PLF206	28.6	0.0267	0.00439	7.7680	0.7902	1.1943
PLT196	141.2	-0.0656	-0.0082	10.0266	0.5449	2.9374
PLU701	87.5	-0.0827	-0.039	2.6665	0.2338	3.7065
PLF163	222.4	-0.0875	-0.00236	46.8067	2.9584	3.9183
PLU702	64.1	-0.1493	-0.0293	6.3667	0.7699	6.6877
PLU705	108.7	0.1973	0.0588	4.0564	0.3721	8.8362
PLP209	1.6	0.5226	6.56	0.1010	0.0096	23.4100
PLU873	57.9	-1.0176	-0.326	3.9329	0.4151	45.5802

Es posible identificar relaciones que aportan información sobre las características de separación de la torre y, además, de la calidad de la carga. Entre estas relaciones podemos identificar: la relación de reflujo (L/D) para el poder de separación; el menor consumo de gas en el horno por unidad de carga (PLF163/PLF184), que sugiere la presencia de menor caudal de ligeros en la carga, así como las relaciones de Destilado/carga (D/F) y Fondo/carga (B/F). En el modelo MFACTO03 se han introducido, además de las variables individuales, las relaciones de

caudal de Reflujo y de los distintos caudales respecto a la carga, según se indica en la

Tabla 47.

Tabla 46 . Criterios utilizados, Modelo: mfacto03 Datos: factoror.

PARÁMETRO	CRITERIO SEGUIDO
Variables	Sin transformar
Reducción	Dist. B5 grados, 7comp.
Componentes	7
Validación	5 grupos, 20%
Incrementos	No

Tabla 47 . Variables utilizados para modelar PLS, Modelo MFACTO03.

VARIABLES
PLF194195./PLF184
PLF194195
PLP209
PLU705
PLT188
PLU706
PLT196
PLU873
PLF163./PLF184
PLF206./PLF184
PLF206./PLF208
PLF163
PLF206
PLF206
PLU701
PLF184

PLF208./PLF184
PLF208
PLU702

Después de modelar el grupo restante de variables se presenta en la Tabla 48:

*Tabla 48. Resultados obtenidos, Modelo: mfacto03 Datos: factoror*

*V. dep.:PVR Part. %: 98.75 Desv.Std: 1.3285 E.Std: 0.1239*

*V.Calibración: 0.1387 V.Predicción: 0.1662 BIAS: -0.0137 SEP: 0.1617*

*Media: 11.8935 O.O.: 20.8850*

VARIABLES	MEDIA	COEF.STD.	COEF.MODELO	DESV.STD	ERR.STD.	IMP.
PLF184	85.7	-0.0024	-0.000248	13.5148	1.1377	0.1173
PLU706	98.1	0.0092	0.00525	2.2859	0.2150	0.4461
PLT188	80.6	0.0128	0.00189	8.3133	0.7518	0.6170
PLF194195	65.1	0.0162	0.00139	14.4627	1.1763	0.7826
PLF206./PLF184	0.3	-0.0199	-0.246	0.0987	0.0114	0.9623
PLF208	20.6	-0.0473	-0.0107	5.6027	0.7630	2.2873
PLF206	28.6	0.0566	0.00939	7.7680	0.8659	2.7364
PLF206./PLF208	1.5	0.0899	0.226	0.5049	0.0338	4.3436
PLF163	222.4	-0.1194	-0.00323	46.8067	6.2644	5.7730
PLU701	87.5	-0.1218	-0.0574	2.6665	0.2805	5.8873
PLU705	108.7	0.1513	0.0454	4.0564	0.4199	7.3142
PLU702	64.1	-0.2191	-0.0432	6.3667	0.6502	10.5880
PLP209	1.6	0.4112	5.17	0.1010	0.0125	19.8742
PLU873	57.9	-0.7918	-0.254	3.9329	0.2906	38.2708

Ahora bien, aunque los resultados (RMSEP 0.1712 psi antes de la reducción y 0.1662 psi, después) son bastante convincentes, no son mejores que los obtenidos mediante la simple introducción de las variables sin transformación. Por esta razón, debe avanzarse en la optimización de la estructura del modelo.



Las interacciones entre las variables X, construidas a partir de cada variable individualmente (efectos principales, 13) y con el resultado de la multiplicación de dos variables (efectos de interacción, dos variables, 78), se han correlacionado con la variable Y. De esta manera, el programa identifica si existe y en qué magnitud se manifiesta la importancia de otras variables sobre su mismo efecto (MFACTO04). Una vez reducido el grupo de variables, la predicción RMSEP 0.1222 psi mejora ligeramente frente a la anterior.

Tabla 49 . Criterios utilizados, Modelo: mfacto04 Datos: factoror.

PARÁMETRO	CRITERIO SEGUIDO
Variables	Fact., 2 niveles,13,13
Reducción	Dist. B5 grados, 7comp.
Componentes	7
Validación	5 grupos, 20%
Incrementos	No

Hasta ahora la medida del error esperado de validación RMSEP ha sido la única medida empleada para analizar la bondad de los modelos. Por otro lado, la presentación de los errores del modelo, frente a los datos utilizados en el ajuste, puede indicar la existencia de alguna relación no lineal, sin identificar hasta ese momento. Volviendo al primer modelo con las variables individuales, MFACTO01, el error que se encuentra tiene la forma de la Fig. 116, Fig. 117 y Fig. 118.

Aunque la predicción es adecuada, se observa que los errores dependen de la variable Y, lo que sugiere que la variable no es lineal. Igual que en la regresión lineal clásica, es posible hacer lineal el valor de Y tomando su logaritmo (criterios en Tabla 51). En este caso el programa no encuentra ninguna variable redundante.

La predicción RMSEP 0.0042 psi. es ahora mucho mejor, y su gráfico de errores se observa en la Fig. 119 y Fig. 120.

*Tabla 50 . Resultados obtenidos, Modelo: mfacto04 Datos: factoror  
 V. dep.:PVR Part. %: 99.12 Desv.Std: 1.3285 E.Std: 0.1108  
 V.Calibración: 0.1194 V.Predicción: 0.1581 BIAS: -0.0087 SEP: 0.1508  
 Media: 11.8935 O.O.: 17.0030*

VARIABLES	MEDIA	COEF.STD.	COEF.MODELO	DESV.STD	ERR.STD.	IMP.
PLT188 *PLU701	7060.1	0.0136	0.0000207	814.4009	114.9635	0.4209
PLF208	20.6	-0.0270	-0.00612	5.6027	0.5298	0.8381
PLU701*PLF208	1793.0	-0.0298	-0.0000806	468.9553	40.1467	0.9225
PLU701	87.5	0.0374	0.0176	2.6665	0.2817	1.1608
PLT188*PLF163	17933.8	0.0389	0.0000119	4201.9800	360.0812	1.2072
PLU705*PLF184	9300.2	0.0447	0.0000412	1411.8433	148.5704	1.3868
PLF194195. *PLU701	5691.5	-0.0477	-0.0000484	1248.5312	112.6198	1.4773
PLT196*PLU702	9062.0	-0.0607	-0.0000653	1186.2296	109.3832	1.8832
PLT196*PLF163	31864.0	-0.0802	-0.0000117	8705.0181	924.7696	2.4879
PLF206*PLF184	2465.1	-0.0804	-0.000133	819.0969	111.9359	2.4940
PLF184*PLU702	5479.6	-0.1277	-0.000162	960.7111	120.6252	3.9590
PLP209*PLF206	45.7	0.1417	0.0143	12.9098	1.5920	4.3938
PLF194195 *PLP209	104.1	0.1694	0.00871	24.6749	1.9192	5.2528
PLF163*PLF206	6587.2	-0.1874	-0.0000862	2854.2655	409.9913	5.8094
PLP209*PLF184	136.8	0.2466	0.0132	23.8977	2.2029	7.6447
PLU873*PLF184	4955.4	-0.2551	-0.000387	831.9748	91.0110	7.9092
PLT196*PLU873	8183.5	-0.2613	-0.000376	892.8164	80.3286	8.0999
PLU873*PLU701	5065.9	-0.3728	-0.00113	415.7611	29.1317	11.5567
PLU873*PLU873	3364.7	-0.4371	-0.00121	456.2315	23.7243	13.5523
PLP209*PLT196	225.5	0.5659	0.0325	22.3759	2.6932	17.5438

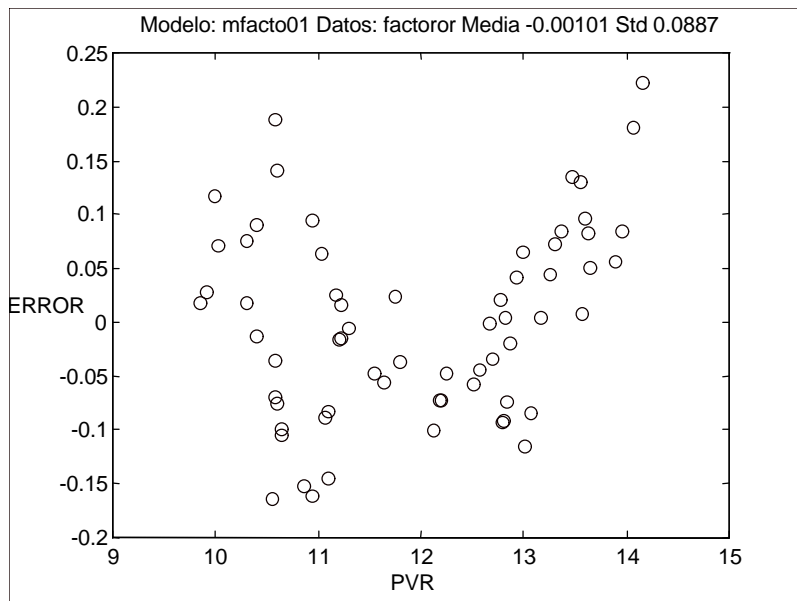


Fig. 116 . Gráfico de errores de la PVR frente al valor real de la variable.

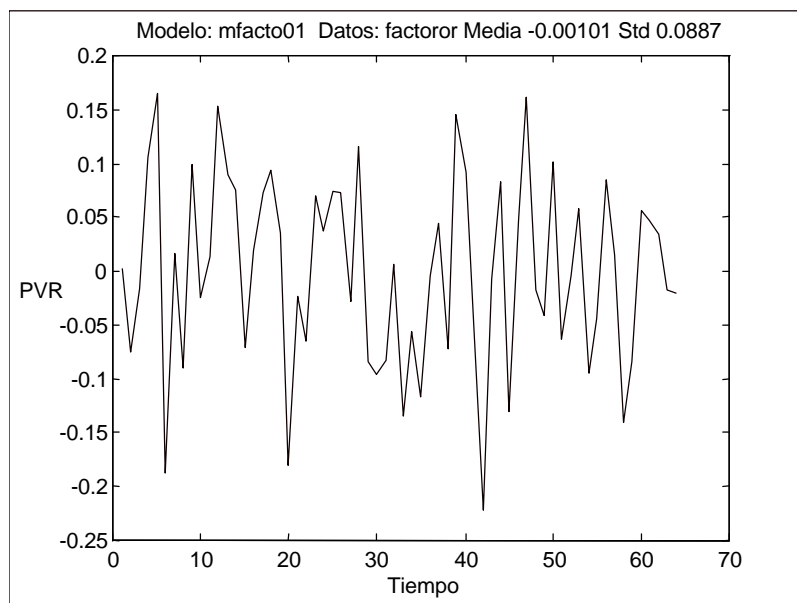


Fig. 117 . Gráfico de errores de la PVR frente al tiempo.

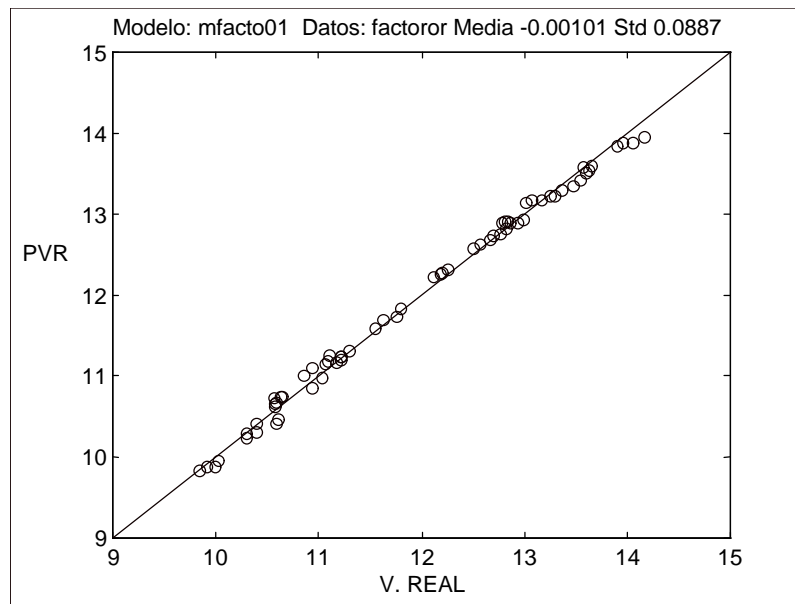


Fig. 118 . Gráfico de la variable PVR calculada y Real.

Tabla 51 . Criterios utilizados, Modelo: mfacto05 Datos: factoror.

PARÁMETRO	CRITERIO SEGUIDO
Variables	Sin transformar
Reducción	Dist. B5 grados, 7 comp.
Componentes	7
Validación	5 grupos, 20%
Incrementos	No

Tabla 52 . Resultados obtenidos, Modelo: mfacto05 Datos: factoror  
 V. dep.:log(PVR) Part. %: 99.67 Desv.Std: 0.1118 E.Std: 0.0059  
 V.Calibración: 0.0061 V.Predicción: 0.0075 BIAS: 0.0000 SEP: 0.0072  
 Media: 2.4699 O.O.: 3.0957

VARIABLES	MEDIA	COEF.STD.	COEF.MODELO	DESV.STD	ERR.STD.	IMP.
PLF208	20.6	-0.0086	-0.000159	5.6027	0.5544	0.3804
PLF206	28.6	0.0096	0.000134	7.7680	0.7846	0.4247
PLF184	85.7	0.0218	0.000173	13.5148	0.6243	0.9626
PLF194195	65.1	0.0244	0.00018	14.4627	0.5312	1.0760
PLU706	98.1	0.0350	0.0016	2.2859	0.1865	1.5460
PLT196	141.2	-0.0689	-0.000725	10.0266	0.5469	3.0460
PLF163	222.4	-0.0936	-0.000213	46.8067	2.9612	4.1334
PLU701	87.5	-0.0943	-0.00374	2.6665	0.2268	4.1658
PLU702	64.1	-0.1943	-0.00322	6.3667	0.7801	8.5858
PLU705	108.7	0.2023	0.00508	4.0564	0.3673	8.9376
PLP209	1.6	0.5174	0.546	0.1010	0.0094	22.8615
PLU873	57.9	-0.9931	-0.0268	3.9329	0.4045	43.8800

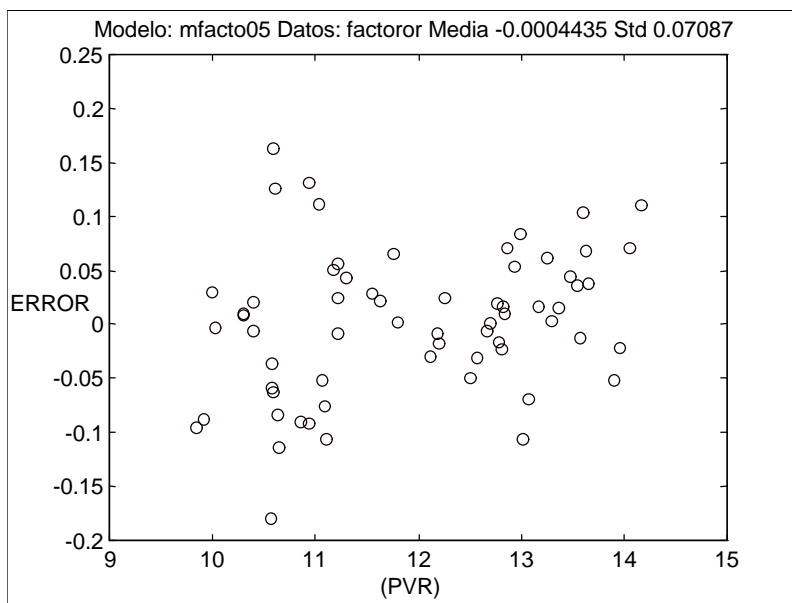


Fig. 119 . Gráfico de errores de la PVR frente al valor real de la variable, MFACTO05.

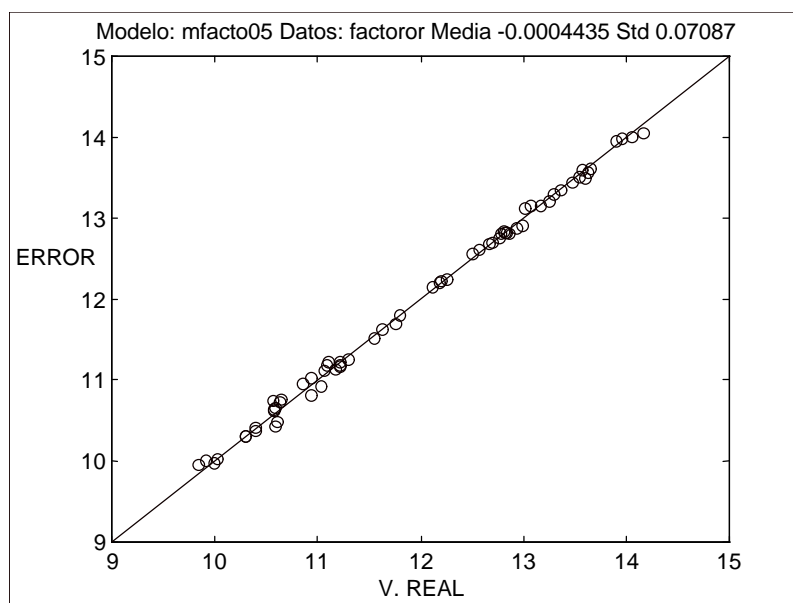


Fig. 120 . Gráfico de la variable PVR calculada y Real.

En todo caso, siempre se ha utilizado el mismo grupo de datos (FACTOROR), incluso para valorar la bondad de cada modelo (20% como fracción de validación). No obstante, el comportamiento con un nuevo grupo de datos puede ser distinto del esperado. En este sentido, se ha utilizado unos nuevos valores obtenidos por simulación. Corresponden a 20 simulaciones en las que se ha variado de forma aleatoria y simultáneamente seis factores, y tomando la relación  $iC5/nC5$  en la carga constante y a un nivel distinto al utilizado en la generación del primer grupo de datos (véase Tabla 53).

Tabla 53 . Valor asignado a cada factor en la generación de los datos de la Simulación. (FACTORTE).

RUN	A	B	C	D	E	F	G
	Relación	Temp. Ent.	Temp.	Presión	Caudal	Relación	Caudal
	Reflujo	Torre	Reboiler	Cabeza	Ligeros	iC5/nC5	Pesados
1	1.5	69.1	149.9	1.50	18598	1.1159	48747
2	1.8	56.8	144.7	1.50	18919	1.1159	49934
3	1.1	63.9	146.5	1.65	19173	1.1159	51823
4	1.9	66.5	145.5	1.69	16997	1.1159	48225
5	1.6	40.4	149.4	1.59	16504	1.1159	37273
6	1.3	50.4	144.5	1.58	17564	1.1159	43439
7	1.5	63.4	144.9	1.57	20446	1.1159	48309
8	1.2	66.7	134.5	1.64	20315	1.1159	43456
9	1.3	49.5	135.7	1.51	15797	1.1159	37835
10	1.7	64.9	140.9	1.56	18797	1.1159	42448
11	1.1	57.0	149.8	1.70	19738	1.1159	37459
12	1.4	55.6	139.4	1.55	20271	1.1159	45981
13	1.9	45.0	137.4	1.54	18018	1.1159	41989
14	1.6	49.0	144.4	1.50	20045	1.1159	48629
15	1.1	48.1	130.2	1.64	16418	1.1159	50585
16	1.9	43.2	146.7	1.55	20133	1.1159	50956
17	1.2	53.0	148.7	1.69	17451	1.1159	37146
18	1.7	68.8	142.3	1.69	17571	1.1159	41806
19	2.0	52.2	130.3	1.61	20481	1.1159	43149
20	1.5	66.2	147.7	1.65	20008	1.1159	35783
Mín.	1	40	130	1.5	15697	1.1159	35378
Máx.	2	70	150	1.7	20546	1.1159	53067

Al enfrentar el modelo a los datos se obtiene la Fig. 121 y Fig. 122.

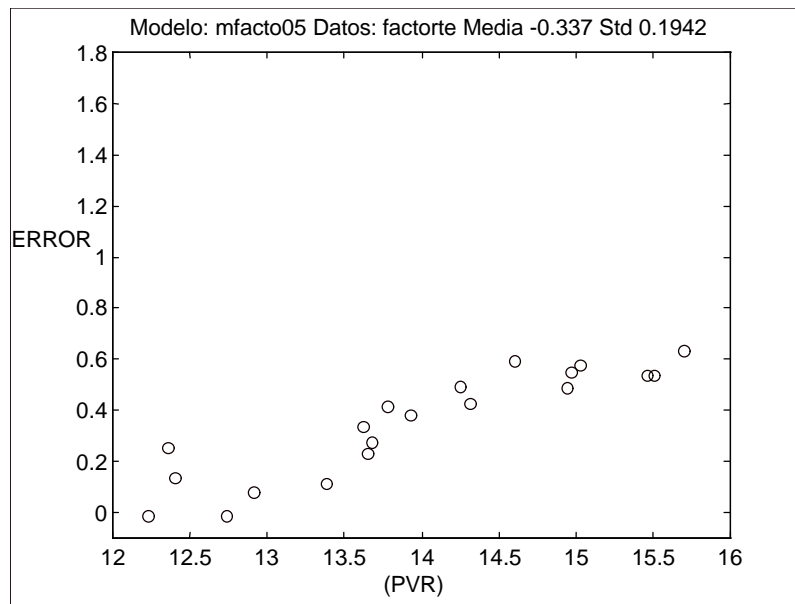


Fig. 121 . Gráfico de errores de la PVR frente al valor real de la variable.

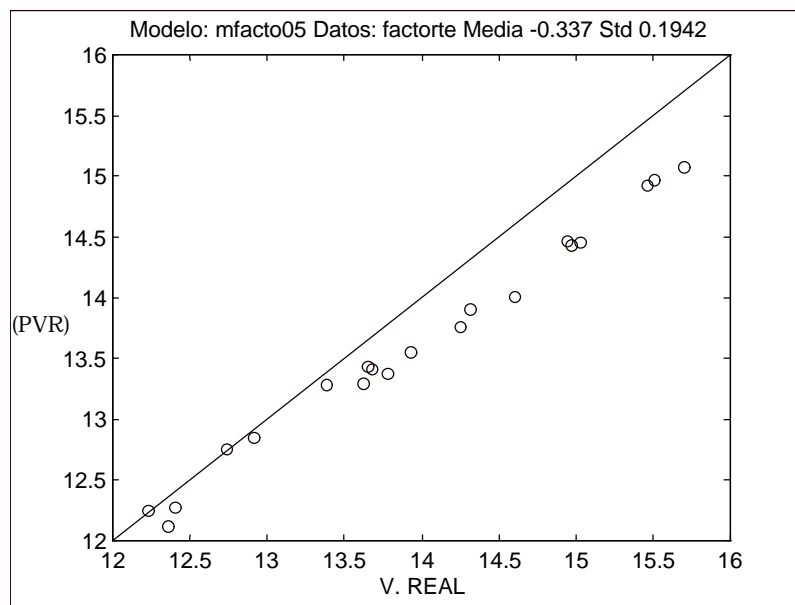


Fig. 122 . Gráfico de la variable PVR calculada y Real, nuevos datos.



## Redes Neuronales

Se ha utilizado IPES para modelar con redes neuronales los datos obtenidos por simulación. IPES tiene la particularidad de elegir automáticamente las variables más importantes a tener en cuenta en el modelo. Aún así y para mejorar la predicción se ha forzado la entrada en el modelo de otras variables de menor importancia. Los resultados pueden verse reflejado en las tablas siguientes.

Tabla 54 . Resultados de la Red Neuronal con 2 capas ocultas y tres variables de entrada. PLU873, PLF206, Rel. Reflujo.

IPES: Analysis of factor					
Leave-13-out Test Error		= 5.10E-01 (output units)			
Combined Nets Total Error		= 4.50E-01 (output units)			
Polynomial Approx. Error		= 4.54E-01 (output units)			
Correlation Coefficient (NN vs. actual)		= 0.938			
Confidence in Leave-13-out NN Fit		= 100.000%			
The above formula is contained in the following table which shows:					
Ranked Importance of each Polynomial Term					
Dependent Variable = PVR (output units)					
Input 1	Input 2	Coefficient of Term	Term Error (output units)	Term Importance (%)	
constant		1.71E+01	N/A	N/A	
REL. REFLUJO		1.94E+00	9.72E-01	82.090	
PLU873		-1.53E-01	6.01E-01	63.651	
REL. REFLUJO	PLU873	-9.77E-03	2.42E-01	22.075	
PLU873	PLU873	3.87E-04	1.76E-01	13.036	
REL. REFLUJO	REL. REFLUJO	6.20E-02	9.30E-02	4.029	
PLF206		9.52E-03	7.25E-02	2.483	
PLF206	PLU873	-2.39E-05	9.27E-03	.042	
REL. REFLUJO	PLF206	2.58E-04	6.06E-03	.018	
PLF206	PLF206	3.65E-06	1.66E-03	.001	
Network Structure					
# Inputs	# Hiddens	# Outputs			
3	8	1			
Selected Columns					
PLU873	PLF206	REL. REFLUJO			
9	12	21			

Tabla 55 . Resultados de la Red Neuronal con 4 capas ocultas y tres variables de entrada. PLU873, PLF206, Rel. Reflujo

IPES: Analysis of factor				
Leave-13-out Test Error	=	4.64E-01	(output units)	
Combined Nets Total Error	=	4.36E-01	(output units)	
Polynomial Approx. Error	=	4.37E-01	(output units)	
Correlation Coefficient (NN vs. actual)	=	0.938		
Confidence in Leave-13-out NN Fit	=	100.000%		
The above formula is contained in the following table which shows:				
Ranked Importance of each Polynomial Term				
Dependent Variable = PVR (output units)				
Input 1	Input 2	Coefficient of Term	Term Error (output units)	Term Importance (%)
constant		1.62E+01	N/A	N/A
REL. REFLUJO		1.72E+00	8.58E-01	79.433
PLU873	PLU873	-1.27E-01	4.97E-01	56.376
REL. REFLUJO	PLU873	-4.23E-03	1.05E-01	5.435
PLF206		9.68E-03	7.37E-02	2.769
PLU873	PLU873	1.53E-04	6.96E-02	2.475
REL. REFLUJO	REL. REFLUJO	2.95E-02	4.43E-02	1.018
PLF206	PLU873	-1.46E-05	5.65E-03	.017
REL. REFLUJO	PLF206	1.95E-04	4.57E-03	.011
PLF206	PLF206	1.48E-06	6.74E-04	.000
Network Structure				
# Inputs	# Hiddens	# Outputs		
3	16	1		
Selected Columns				
PLU873	PLF206	REL. REFLUJO		

Tabla 56 . Resultados de la Red Neuronal con 2 capas ocultas y seis variables de entrada. PLU873, PLF208, PLP209, PLT196, PLF208, Rel. Reflujo.

IPES: Analysis of factor				
Leave-13-out Test Error		= 2.17E-01 (output units)		
Combined Nets Total Error		= 1.49E-01 (output units)		
Polynomial Approx. Error		= 1.42E-01 (output units)		
Correlation Coefficient (NN vs. actual)		= 0.993		
Confidence in Leave-13-out NN Fit		= 100.000%		
The above formula is contained in the following table which shows:				
Ranked Importance of each Polynomial Term				
Dependent Variable = PVR (output units)				
Input 1	Input 2	Coefficient of Term	Term Error (output units)	Term Importance (%)
constant		2.11E+01	N/A	N/A
PLU873		-4.04E-01	1.59E+00	99.165
PLU873	PLU873	2.72E-03	1.23E+00	98.628
PLU873	PLP209	-1.16E-01	1.21E+00	98.566
PLP209		8.66E+00	8.64E-01	97.243
REL. REFLUJO		1.12E+00	5.60E-01	93.678
PLT196	PLU873	4.50E-04	3.93E-01	87.959
PLP209	PLP209	1.23E+00	3.93E-01	87.945
REL. REFLUJO	PLU873	-1.50E-02	3.72E-01	86.727
PLT196		-3.47E-02	3.47E-01	85.045
REL. REFLUJO	PLP209	3.17E-01	2.60E-01	76.165
PLF206		3.33E-02	2.53E-01	75.170
PLT196	PLP209	-9.57E-03	2.09E-01	67.418
PLF206	PLU873	-4.38E-04	1.70E-01	57.613
PLF208		2.70E-02	1.48E-01	50.955
PLU873	PLF208	-3.59E-04	1.30E-01	44.346
PLF206	PLP209	9.39E-03	1.17E-01	39.277
REL. REFLUJO	PLT196	-1.26E-03	9.01E-02	27.706
PLF208	PLP209	7.65E-03	6.82E-02	18.007
PLT196	PLT196	1.95E-05	5.45E-02	12.310
PLF206	PLT196	-3.71E-05	4.63E-02	9.189
REL. REFLUJO	REL. REFLUJO	2.19E-02	3.29E-02	4.867
REL. REFLUJO	PLF206	1.16E-03	2.71E-02	3.357
PLT196	PLF208	-2.98E-05	2.66E-02	3.240
PLF206	PLF206	1.87E-05	8.52E-03	.341
REL. REFLUJO	PLF208	9.61E-04	7.32E-03	.252
PLF206	PLF208	2.96E-05	6.81E-03	.218
PLF208	PLF208	1.25E-05	2.90E-03	.040

Tabla 57 . Resultados de la Red Neuronal con 4 capas ocultas y seis variables de entrada. PLU873, PLF208, PLP209, PLT196, PLF208, Rel. Reflujo.

IPES: Analysis of factor				
Leave-13-out Test Error		=	2.35E-01	(output units)
Combined Nets Total Error		=	1.60E-01	(output units)
Polynomial Approx. Error		=	1.55E-01	(output units)
Correlation Coefficient (NN vs. actual)		=	0.992	
Confidence in Leave-13-out NN Fit		=	100.000%	
Ranked Importance of each Polynomial Term				
Dependent Variable = PVR (output units)				
Input 1	Input 2	Coefficient of Term	Term Error (output units)	Term Importance (%)
constant		1.99E+01	N/A	N/A
PLU873		-3.17E-01	1.24E+00	98.428
PLP209		6.76E+00	6.75E-01	94.872
PLU873	PLU873	1.34E-03	6.10E-01	93.787
PLU873	PLP209	-5.69E-02	5.94E-01	93.473
REL. REFLUJO		1.02E+00	5.09E-01	91.317
PLT196		-3.18E-02	3.18E-01	80.379
PLT196	PLU873	2.78E-04	2.43E-01	70.565
PLF206		3.17E-02	2.41E-01	70.292
REL. REFLUJO	PLU873	-9.05E-03	2.24E-01	67.045
PLP209	PLP209	6.14E-01	1.96E-01	60.928
REL. REFLUJO	PLP209	1.90E-01	1.56E-01	49.645
PLT196	PLP209	-5.86E-03	1.28E-01	39.975
PLF208		1.97E-02	1.08E-01	32.190
PLF206	PLU873	-2.69E-04	1.04E-01	30.667
PLF206	PLP209	5.58E-03	6.96E-02	16.418
REL. REFLUJO	PLT196	-9.63E-04	6.91E-02	16.246
PLU873	PLF208	-1.44E-04	5.20E-02	9.877
PLT196	PLT196	1.54E-05	4.31E-02	7.021
PLF206	PLT196	-2.87E-05	3.58E-02	4.941
PLF208	PLP209	2.95E-03	2.63E-02	2.728
REL. REFLUJO	REL. REFLUJO	1.59E-02	2.39E-02	2.259
REL. REFLUJO	PLF206	9.26E-04	2.17E-02	1.881
PLT196	PLF208	-1.42E-05	1.27E-02	.650
PLF206	PLF206	1.43E-05	6.49E-03	.171
REL. REFLUJO	PLF208	4.60E-04	3.51E-03	.050
PLF206	PLF208	1.45E-05	3.33E-03	.045
PLF208	PLF208	5.90E-06	1.37E-03	.008

Con seis variables de entrada y dos capas ocultas se consigue la mejor predicción de las redes estudiadas (Tabla 56). Para este caso, se representa en la figura el error que se encuentra para el nuevo grupo de datos FACTORTE.

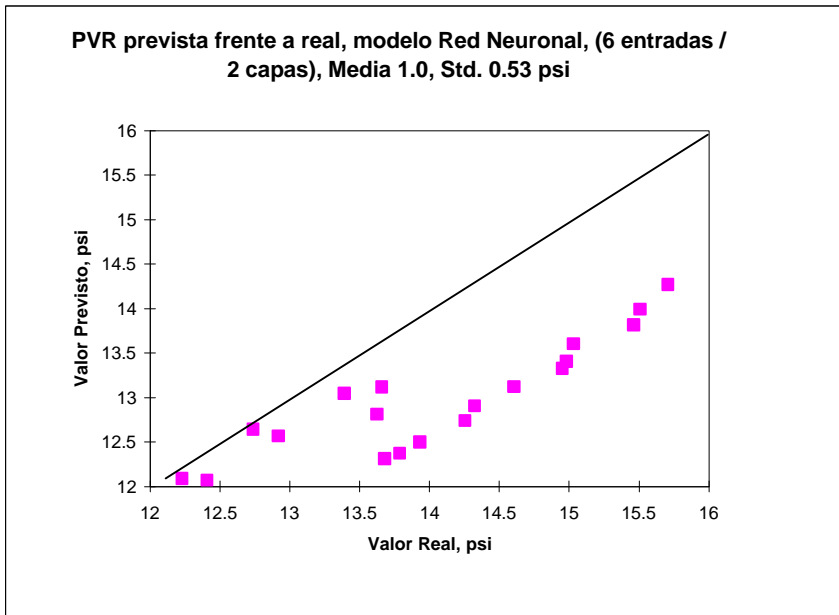


Fig. 123 . Gráfico de los valores encontrados y reales de PVR, FACTORTE.

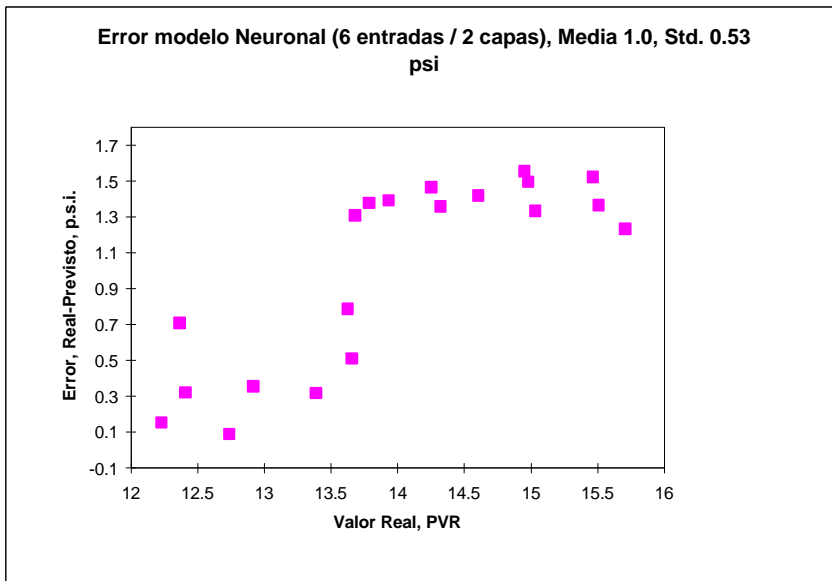


Fig. 124 . Gráfico del error de PVR, FACTORTE.

## Discusión

El modelo PLS y el modelo Neuronal ofrecen resultados bastante diferentes. Además, en el supuesto de que se complique la red con más variables y más capas ocultas, es difícil encontrar mejores resultados que los que se obtuvieron con PLS lineal.

La PVR en el intervalo de trabajo se puede considerar prácticamente lineal cuando se consideran todas las variables de la Unidad. La red neuronal no encuentra ninguna variable o grupo reducido de ellas que explique suficientemente el comportamiento de la PVR. Es necesario entonces el concurso de todas ellas para conseguir un buen ajuste.

---

## 6.2. Cálculo por inferencia de la temperatura del 5% de destilación D86 en el producto de fondo de la torre Despentanizadora. Datos Simulación

### PLS

Se han utilizado los mismos datos que para la PVR. El número óptimo de componentes se determina en un primer análisis tomando diez componentes y representando PRESS. Los resultados se pueden apreciar en la Fig. 125 y Fig. 126. Se observa que a partir de tres componentes no hay reducciones importantes en la varianza residual de la variable Y.

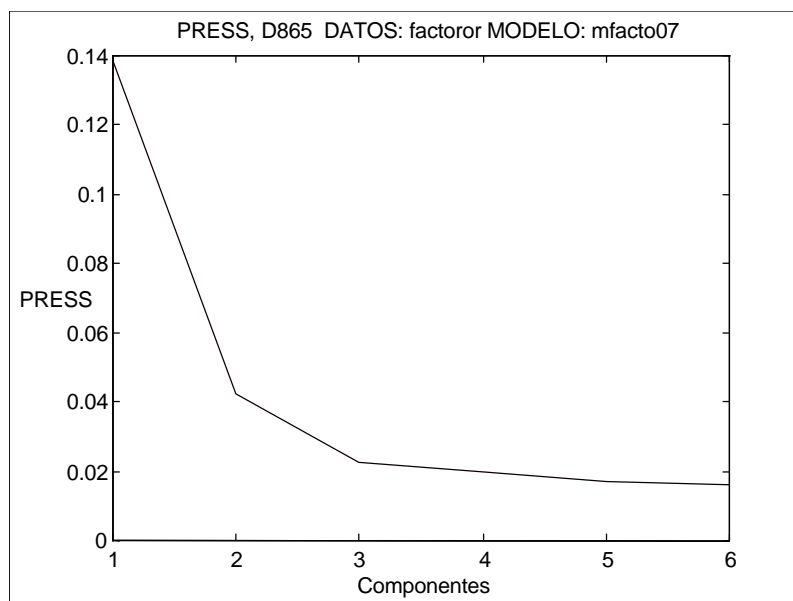


Fig. 125 . Gráfico de los residuos del 5% D86 frente al número de componente.

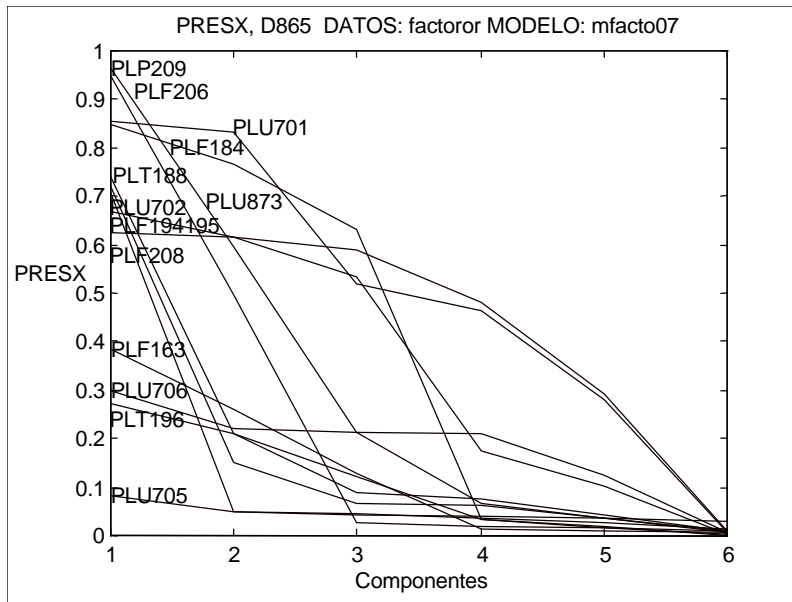


Fig. 126 . Gráfico de los residuos de X frente al número de componente del modelo.

El gráfico de residuos indica, como es habitual en estos datos, que sólo existen seis componentes de varianza importantes.

En el fichero MFACTO07 se han elegido tres componentes. Los criterios y resultados se pueden ver en la Tabla 58 y Tabla 59.

Tabla 58 . Criterios utilizados, Modelo: mfacto07 Datos: factoror.

PARÁMETRO	CRITERIO SEGUIDO
VARIABLES	Sin transformar
Reducción	Dist. B5 grados, 3comp.
Componentes	3
Validación	5 grupos, 20%
Incrementos	No



*Tabla 59. Resultados obtenidos, Modelo: mfacto07 Datos: factoror  
 V. dep.:D865 Part. %: 97.70 Desv.Std: 6.3540 E.Std: 1.1036  
 V.Calibración: 1.0152 V.Predicción: 1.2227 BIAS: -0.0050 SEP: 1.1142  
 Media: 73.8732 O.O.: -23.7122*

VARIABLES	MEDIA	COEF.STD.	COEF.MODELO	DESV.STD	ERR.STD.	IMP.
PLU702	64.1	0.0061	0.00641	6.3667	1.6784	0.3466
PLT188	80.6	0.0239	0.0188	8.3133	2.6630	1.3589
PLU873	57.9	-0.0370	-0.0626	3.9329	0.7911	2.1074
PLF206	28.6	0.0579	0.0503	7.7680	1.4689	3.2992
PLF208	20.6	0.1233	0.149	5.6027	4.3114	7.0232
PLU701	87.5	0.1450	0.359	2.6665	2.0187	8.2602
PLU706	98.1	0.1566	0.446	2.2859	1.1510	8.9193
PLF184	85.7	-0.1571	-0.0787	13.5148	10.1325	8.9461
PLU705	108.7	0.1737	0.275	4.0564	1.0322	9.8896
PLF194195	65.1	-0.1927	-0.0891	14.4627	10.2918	10.9770
PLF163	222.4	0.2194	0.0313	46.8067	13.0606	12.4940
PLT196	141.2	0.2221	0.147	10.0266	2.9102	12.6501
PLP209	1.6	-0.2411	-16	0.1010	0.0586	13.7282

La Fig. 127, Fig. 128 y Fig. 129 muestran los resultados obtenidos en el modelo con los datos de calibrado.

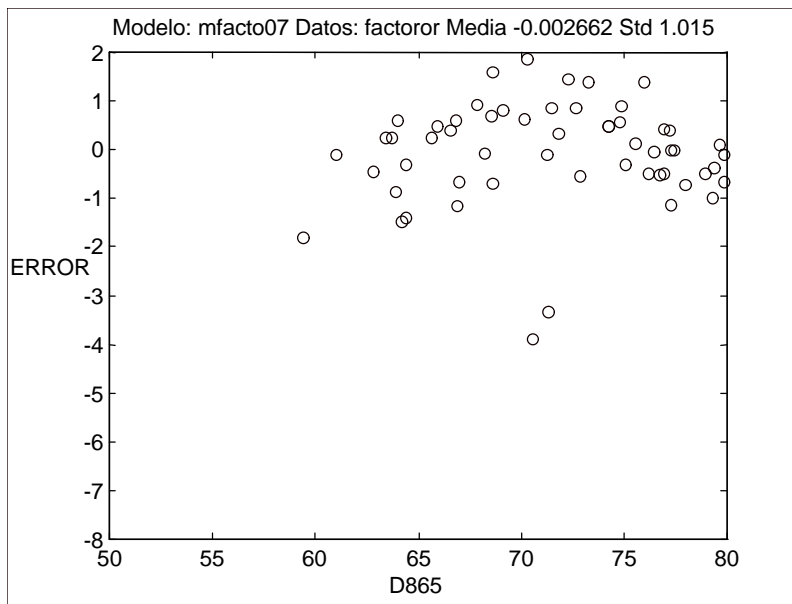


Fig. 127 . Gráfico de errores de la D86, 5% frente al valor real de la variable, datos calibración.

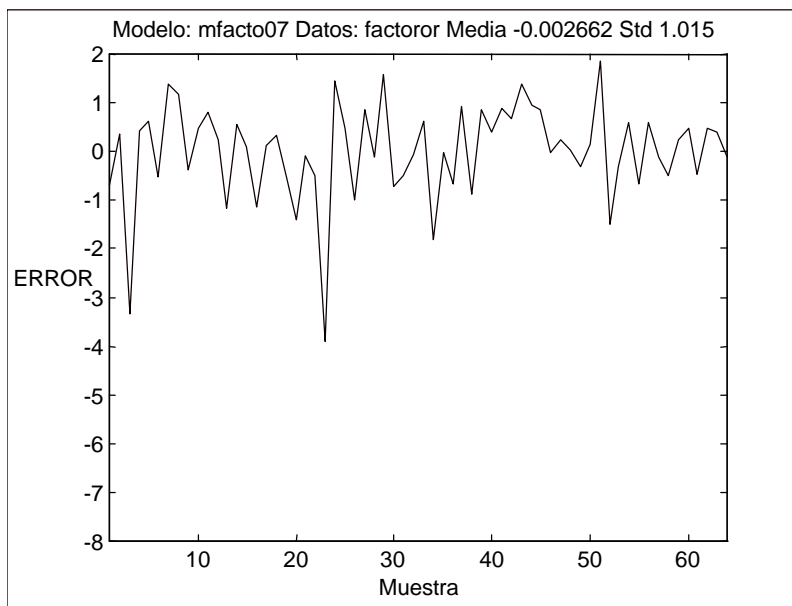


Fig. 128 . Gráfico de errores de 5% D86 frente a la muestra, datos calibración.

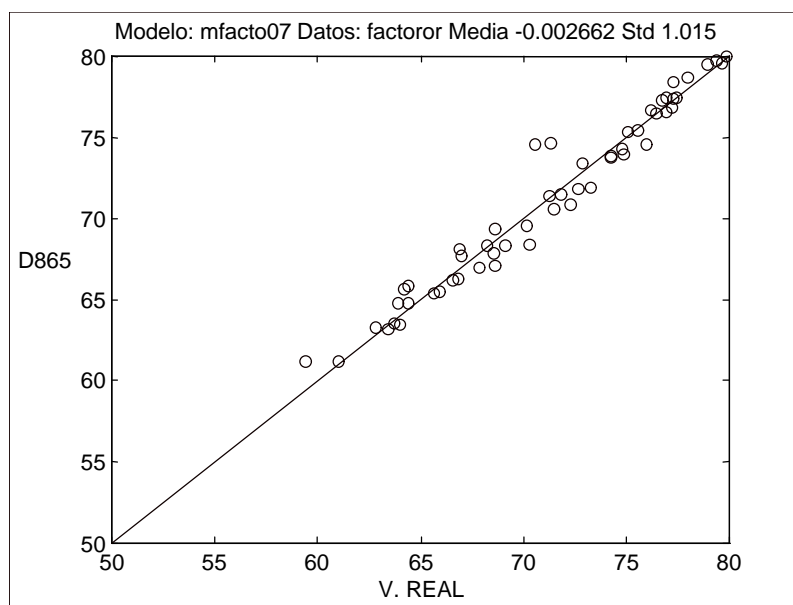


Fig. 129 . Gráfico de la variable 5% D86 calculada y Real, datos calibración.

La Fig. 130 y Fig. 131 representan la misma información con los datos nuevos de simulación.

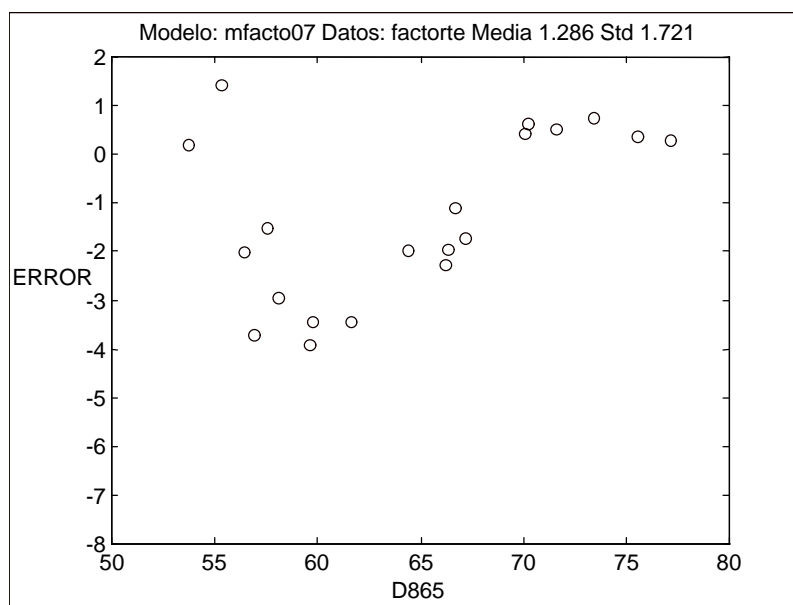


Fig. 130 . Gráfico de errores de la D86, 5% frente al valor real de la variable, datos comprobación.

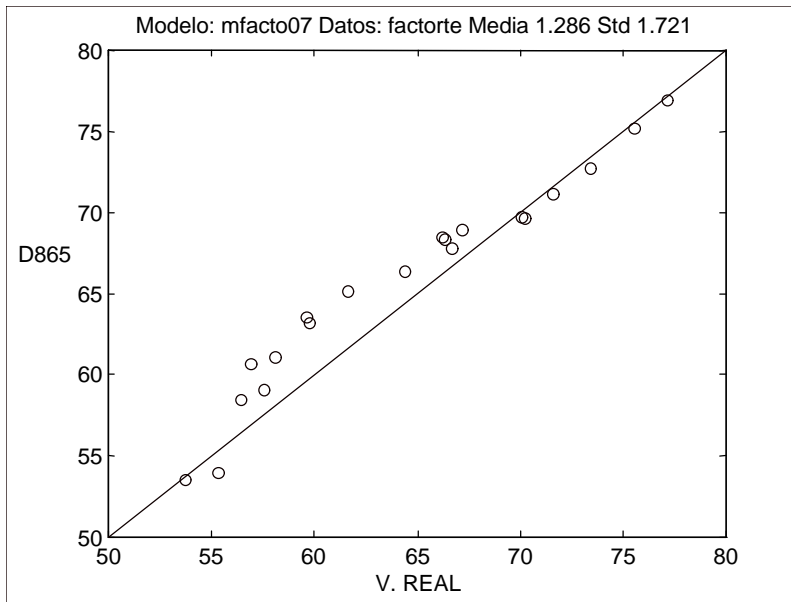


Fig. 131 . Gráfico de la variable 5% D86 calculada y Real, datos de comprobación.

Para mejorar el modelo se aplica logaritmo neperiano a la variable Y, obteniéndose los resultados del fichero MFACTO06.

Tabla 60. Criterios utilizados, Modelo: mfacto06 Datos: factoror.

PARÁMETRO	CRITERIO SEGUIDO
Variables	Sin transformar
Reducción	Dist. B5 grados, 3comp.
Componentes	3
Validación	5 grupos, 20%
Incrementos	No

Tabla 61. Resultados obtenidos, Modelo: mfacto06 Datos: factoror  
 V. dep.:log(D865) Part. %: 97.42 Desv.Std: 0.0874 E.Std: 0.0160  
 V.Calibración: 0.0148 V.Predicción: 0.0180 BIAS: -0.0001 SEP: 0.0169  
 Media: 4.2987 O.O.: 2.9640

VARIABLES	MEDIA	COEF.STD.	COEF.MODELO	DESV.STD	ERR.STD.	IMP.
PLU702	64.1	0.0056	0.0000818	6.3667	1.6778	0.3185
PLT188	80.6	0.0253	0.000275	8.3133	2.6600	1.4350
PLU873	57.9	-0.0403	-0.00094	3.9329	0.7902	2.2866
PLF206	28.6	0.0574	0.000686	7.7680	1.4584	3.2536
PLF208	20.6	0.1221	0.00203	5.6027	4.3122	6.9230
PLU701	87.5	0.1482	0.00506	2.6665	2.0177	8.4017
PLU706	98.1	0.1558	0.00611	2.2859	1.1509	8.8368
PLF184	85.7	-0.1567	-0.00108	13.5148	10.2244	8.8842
PLU705	108.7	0.1701	0.00372	4.0564	1.0335	9.6490
PLF194195	65.1	-0.1919	-0.00122	14.4627	10.3754	10.8813
PLF163	222.4	0.2209	0.000435	46.8067	13.1050	12.5245
PLT196	141.2	0.2232	0.00203	10.0266	2.9169	12.6590
PLP209	1.6	-0.2459	-0.225	0.1010	0.0579	13.9471

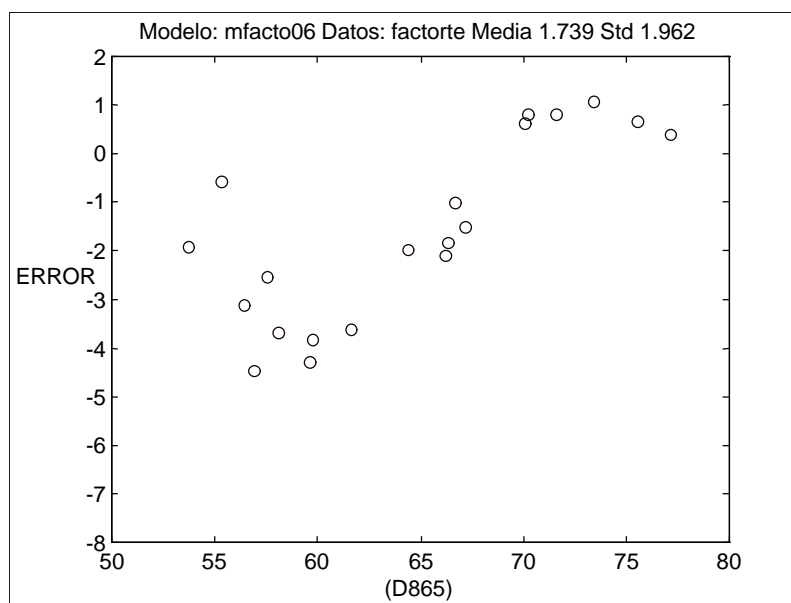


Fig. 132. Gráfico de errores del 5% destilación D86, frente al valor real de la variable, datos de comprobación.

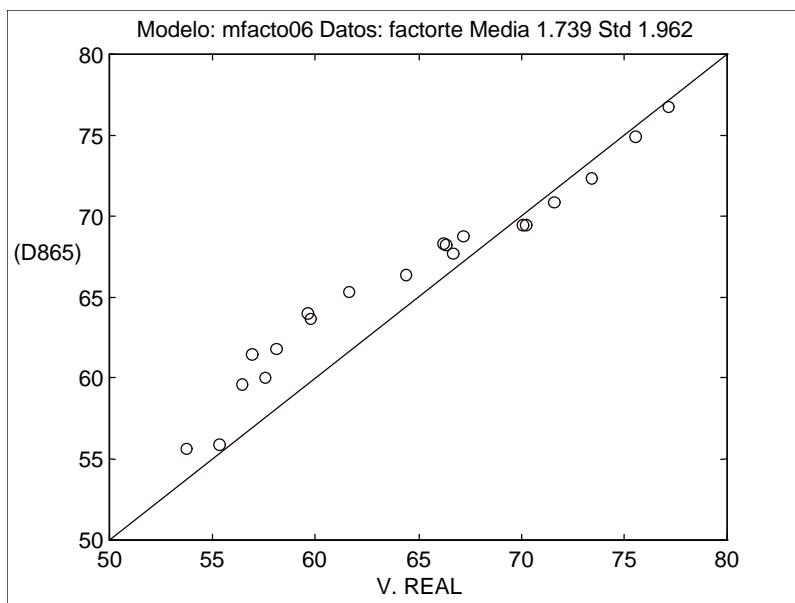


Fig. 133 . Gráfico del 5% destilación D86 calculada y Real, datos de comprobación.

El error esperado de predicción con este último modelo es 2°C, valor que es muy parecido al obtenido sin ningún tipo de transformación.

### **Redes Neuronales**

Se han utilizado Redes Neuronales para modelar el 5% de Destilación. Los resultados se muestran en la Tabla 62.

El programa ha seleccionado de manera automática las variables caudal de fondo de torre, caudal de Destilado, temperatura de entrada y temperatura horno como las principales para entrenar la Red Neuronal.

En la Fig. 134 y Fig. 135 se observa en este caso que la predicción utilizando red neuronal sobre las variables más importantes no es tan exacta como sucede con el método PLS. En efecto. Según el programa el error esperado de la correlación es 1.87°C, mientras que en PLS el error esperado de predicción RMSEP (1.018°C) es inferior.

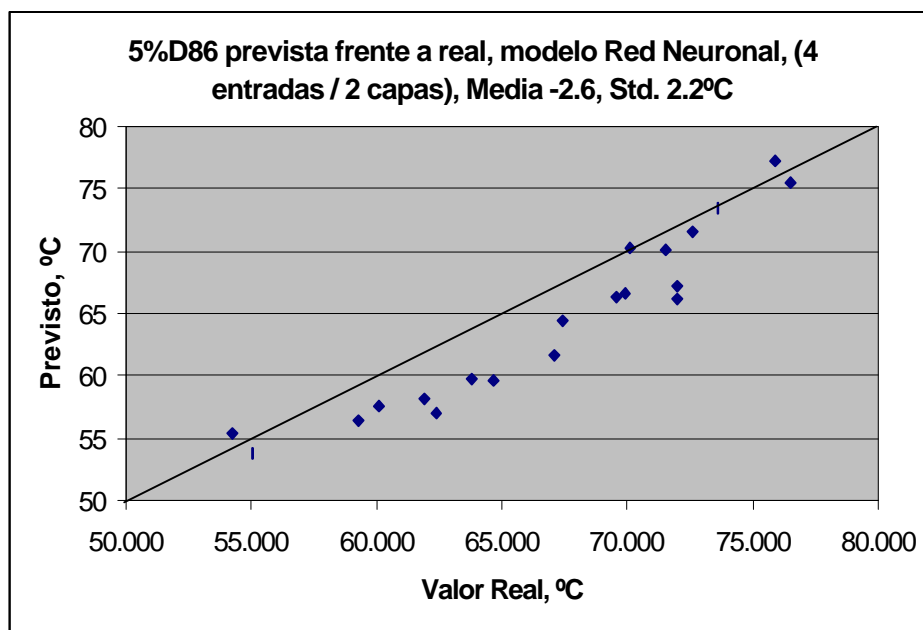


Fig. 134. Gráfico de los valores previstos frente a reales, 5% D86, datos de comprobación.

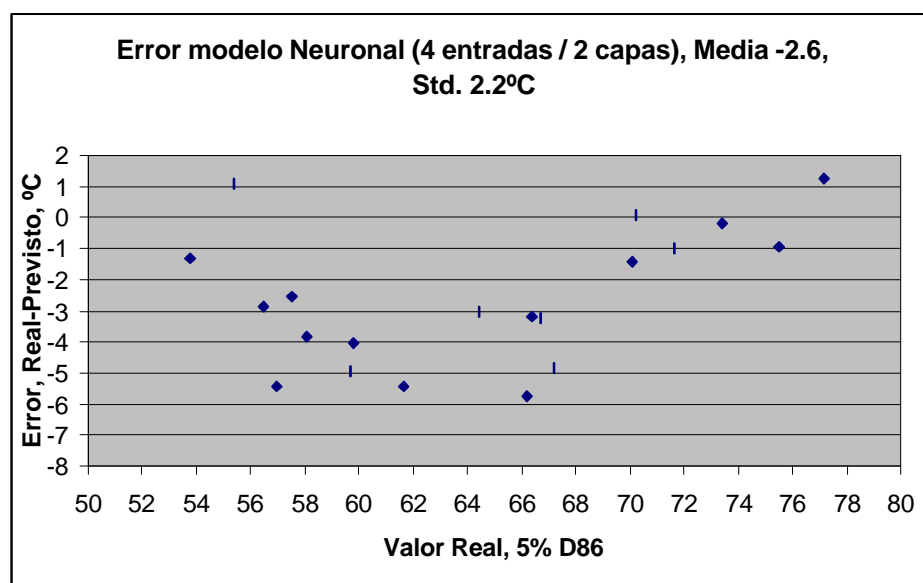


Fig. 135. Gráfico del error en la estimación de 5% D86, datos de comprobación.

Tabla 62 Resultados de la Red Neuronal para predicción de la Destilación D86.

<b>IPES: Analysis of factor</b>				
Leave-13-out Test Error	=	1.87E+00	(output units)	
Combined Nets Total Error	=	1.64E+00	(output units)	
Polynomial Approx. Error	=	1.66E+00	(output units)	
Correlation Coefficient (NN vs. actual)	=	0.971		
Confidence in Leave-13-out NN Fit	=	100.000%		
<b>Neural Net Formula</b>				
D865= sum of 8 terms. (too long to print)				
<b>Quadratic Approximation to Neural Net Formula</b>				
(Only terms with importance > 1% are included)				
D865=-7.21E+01-3.00E-01*PLF194195+2.66E-01*PLF208+1.06E+00*PLU701+7.07E-01*PLU701-4.92E-04*PLT196*PLT196				
The above formula is contained in the following table which shows:				
<b>Ranked Importance of each Polynomial Term</b>				
Dependent Variable = D865 (output units)				
<b>Input 1</b>	<b>Input 2</b>	<b>Coefficient of Term</b>	<b>Term Error (output units)</b>	<b>Term Importance (%)</b>
constant		-7.21E+01	N/A	N/A
PLT196		7.07E-01	7.07E+00	94.803
PLF194195		-3.00E-01	4.29E+00	87.065
PLU701		1.06E+00	2.84E+00	74.657
PLT196	PLU701	-1.53E-03	1.53E+00	46.087
PLF208		2.66E-01	1.46E+00	43.869
PLT196	PLT196	-4.92E-04	1.38E+00	40.956
PLT196	PLF194195	4.17E-04	8.29E-01	20.073
PLU701	PLF194195	6.46E-04	8.01E-01	18.966
PLU701	PLU701	-1.23E-03	5.74E-01	10.743
PLT196	PLF208	-3.77E-04	3.37E-01	3.984
PLU701	PLF208	-6.01E-04	2.76E-01	2.715
PLF194195	PLF194195	-8.88E-05	1.70E-01	1.042
PLF208	PLF194195	1.59E-04	5.86E-02	.125
PLF208	PLF208	-7.57E-05	1.76E-02	.011
<b>Network Structure</b>				
# Inputs	# Hiddens	# Outputs		
4	8	1		
<b>Selected Columns</b>				
PLF194195	PLF208	PLU701	PLT196	
2	4	5	10	



### ***Discusión***

En este caso, PLS es superior a los resultados del programa de Redes Neuronales. Incluso el comportamiento de las redes con los datos no utilizados en calibración es muy inferior a la predicción. Cuando se presenta esta situación puede ser debida a sobreajuste. En este sentido, sucede lo mismo si PLS ajusta con un número superior de componentes. Se ha comprobado que en este caso a partir de seis o siete componentes, el comportamiento de PLS es mucho peor a la Red Neuronal.

---

### **6.3. Cálculo por inferencia y control de la presión de vapor Reid del producto de cabeza de la torre Despentanizadora y del 5% D86 del producto de fondo. Datos reales de Planta**

#### ***Procedimiento experimental***

En el apartado anterior, referido a la estimación de la presión de vapor del producto de cabeza en la torre despentanizadora, se observaba que esta medida, independientemente del tipo de carga que se haya supuesto y de las condiciones operativas, era capaz de calcularse con mucha exactitud por medio de la técnica pls. En este apartado se pretende estimar también la PVR y compararla con la información de Laboratorio. Posteriormente, con la medida en línea de la PVR se diseña una estrategia para el control automático.

Realizada en dos etapas y con un intervalo de varios meses, esta distribución temporal permite un análisis del impacto que cada una de esas intervenciones ha tenido en la reducción de la desviación estándar de la PVR en la torre Despentanizadora.

#### ***Etapas 1. Modelo en línea, sin control en lazo cerrado***

El primer modelo PLS para cálculo automático en línea se pone en servicio en el verano de 1995. El modelo constaba de seis variables, cuyos coeficientes recoge la Tabla 63.

---

Tabla 63 . Coeficientes de modelo PLS para la predicción de la PVR en el producto de cabeza y del 5%D86 de fondo Despentanizadora, Agosto 1995.

VARIABLE	UNIDADES	DESCRIPCIÓN	COEF. PVR	COEF. 5%D86
PLT188	°C	Temp. Plato 8	0.024	-0.223
PLP209	kg/cm2	Presión cabeza Torre (manométrica)	6.206	-13.486
PLU701	°C	Temperatura Ent. Alim.	-0.080	0.079
PLU702	°C	Temp. Cabeza Torre	-0.280	0.437
PLU705	°C	Temperatura Fondo	-0.076	0.456
PLU706	°C	Temp. Ent. Horno Reboiler	0.137	-0.017
Ord. ORIGEN			26.17	29.16

Las medias horarias se refieren a las 5:00 (que constituye la media de proceso entre las 5:00 y 6:00), y el dato de Laboratorio es una muestra puntual, tomada entre las 3:30 y las 4:30 aproximadamente. Por estos motivos, para realizar la correlación es necesario comprobar que el efecto producido por la diferencia horaria no se manifiesta de forma importante en la estabilidad de las medidas y tampoco en el poder de predicción de la correlación. En definitiva, se trata de ver la importancia de la hora de toma de muestra, y si un modelo realizado con medias horarias puede tener validez para comparar con una muestra de laboratorio tomada puntualmente.

Otra fuente de variación es la diferencia entre el comportamiento de la Unidad, el de la instrumentación (los valores que en definitiva se utilizan para la correlación) y el reflejo que de ella se tiene en la calidad de los productos. Este comportamiento dinámico no se puede determinar en un estudio de este tipo. Se asume, por lo tanto, que el comportamiento dinámico de la planta a los estímulos o instrumentación incide siempre de la misma manera en la calidad. Además, se asume también que su dinámica es mucho más lenta que la que posee la instrumentación frente a otros estímulos (por ejemplo, cambio en la apertura de válvula), de tal forma que ésta se cancela cuando se traten las medias horarias. De hecho,

de cumplirse esta afirmación, indicaría que es mejor la toma de medias horarias para realizar el calibrado, frente a la utilización de los valores puntuales de la instrumentación en el momento de la toma de muestra.

Al no ser posible instalar un analizador en línea para la medida de la calidad de la corriente, el estudio de los aspectos anteriores se realizó de manera indirecta. Se efectuó una correlación con las medias horarias de las 5:00, se puso en servicio y se recogieron durante varios días los datos de hora de toma de muestra, valor que tomaba la correlación en ese momento, el resultado de laboratorio y las medias de la correlación a las 4:00, 5:00 y 6:00. La Tabla 64. recoge los resultados.

---

Tabla 64 . Estudio del efecto dinámico de la recogida de toma de muestra y las medias horarias en la PVR (psia), del producto de cabeza de la Despentanizadora.

FECHA	HORA	PVR	PVR	ERROR	CALC	CALC	CALC
	MUESTRA	LAB.	CALC	psia	MEDIA	MEDIA	MEDIA
					4:00	5:00	6:00
9/08/95	4:00	12.5	12.7	0.2	12.5	12.6	12.5
10/08/95	3:30	12.8	12.6	-0.2	12.6	12.8	12.8
11/08/95	3:30	13.2	12.9	-0.3	12.8	12.7	12.7
12/08/95	3:40	13	12.6	-0.4	12.6	12.5	12.5
13/08/95	4:00	12.9	12.6	-0.3	12.6	12.6	12.7
14/08/95	3:30	13.1	12.6	-0.5	12.7	12.7	12.5
15/08/95	3:45	12.1	11.7	-0.4	11.8	12	12
16/08/95	3:45	13.1	12.4	-0.7	12.5	12.6	12.4
17/08/95	4:00	11.9	11.8	-0.1	11.8	11.8	11.7
18/08/95	4:00	12	11.9	-0.1	11.9	11.9	12
19/08/95	4:00	12.2	12	-0.2	12.1	12.1	12.1
20/08/95	4:00		12		12.1	12.1	12.1
21/08/95	4:00	12.1	11.7	-0.4	11.9	11.8	11.6
22/08/95	4:00	12.3	12.1	-0.2	12.4	12.3	12.4
23/08/95	4:00	12.3	12	-0.3	12	12	12
24/08/95	4:00	12.9	13.2	0.3	13.1	13.3	13.3
25/08/95	3:45	12.6	12.4	-0.2	12.5	12.5	12.6

26/08/95	3:40	12.2	11.4	-0.8	11.5	11.6	11.8
27/08/95	3:45		11.9		11.8	11.9	11.9
28/08/95	3:45		11.7		11.7	11.7	11.7

La hora de toma de muestra se mantiene de forma estable alrededor de una hora antes del valor que se usa en el calibrado (media de las 5:00). Si las medias de los tres valores previstos son iguales, se puede considerar que la planta estaba estable en el momento de la toma de muestra. En caso contrario, es posible que la muestra de laboratorio no sea representativa y el error sea anormalmente mayor. En la Fig. 136 se observa que, efectivamente, la estabilidad de la Planta es un factor importante para reducir la desviación producida por no considerar el efecto dinámico de cada variable sobre la calidad de la carga. Es posible afirmar que si el valor calculado de la PVR se mantiene en control automático, las diferencias con laboratorio se reducirían. Al contrario, si la correlación no tiene un valor estable en el periodo de la toma de muestra, cabe esperar que los errores frente a laboratorio sean mayores.

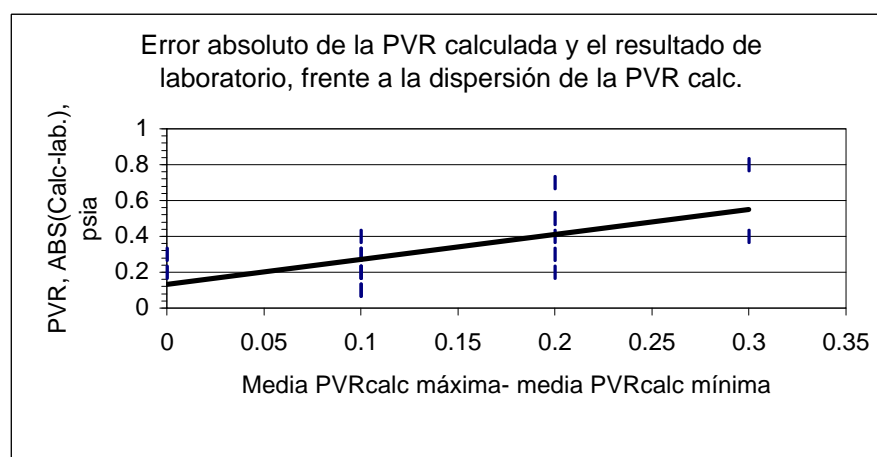


Fig. 136 . Error absoluto entre el dato puntual de laboratorio y valor de la correlación, periodo 9-27/8/95.

## **Precisión de los ensayos**

Durante la duración de este trabajo la medida de la Presión de Vapor Reid se ha realizado con el estándar ASTM D323-94 (procedimiento B), que tiene una reproducibilidad de 0.66 psia y una repetitividad de 0.17 psia al 95%.

En cuanto a la temperatura de Destilación al 5%, en todos los casos se utilizó el estándar ASTM D86 - 93, con una reproducibilidad entre 5.4 - 12.2 C y una repetitividad de 1.5 - 5 C, dependiendo de la velocidad de destilación del aparato (método automático).

## **Seguimiento PVR y 5% destilación D86**

El modelo de PVR, al igual que la destilación D86, se mantuvo disponible para el operador de la consola de Catálisis desde el primer momento. La Fig. 137 representa el histograma de frecuencias para un periodo en el que Operación tiene como único recurso la información de laboratorio y su conocimiento del proceso para ajustar la Presión de Vapor Reid. Los datos en este periodo poseen una desviación estándar de 1.2psia y una media de 11.4psia o, lo que es lo mismo, el 95% de los datos se encuentran entre 9.0 y 13.8psia. Como la especificación de PVR es <13.5, Operación debe mantener una media baja para no producir un producto fuera de especificaciones.

La Tabla 65 recoge los resultados estadísticos más importantes de la muestra de PVR de laboratorio correspondiente al periodo 1-4-95/10-7-95, datos que consideramos representativos de la situación inicial antes de instalar la correlación en el sistema de control.

---

*Tabla 65 . Estadísticos principales de la muestra de datos PVR (psia) en cabeza Despentanizadora, antes de correlación, para el periodo 1-4-95/10-7-95.*

MODA	11.00
Media Aritmética	11.43
Media Aritmética acotada (95%)	11.28
Desviación estándar	1.16
Coefficiente de asimetría	0.86
Curtosis	1.61
Percentil al 68%	0.87
Desv. Estándar como perc.68%	0.87
Porcentaje muestras fuera espec.	6.94

Como se observa en la distribución de frecuencias, en la distribución normal para la misma media y en la desviación estándar relativa a este periodo (Fig. 137), existe un grupo de datos (7%) que se encuentran por encima de la especificación.

La correlación propuesta entró en servicio el 11/7/95, pero no se informó a Operación hasta el 9/8/1995, fecha en la que se emite el informe correspondiente. Por otro lado, tampoco se insistió en que se mantuviera especial atención sobre los resultados; al contrario, se sugirió su uso como valor aproximado.



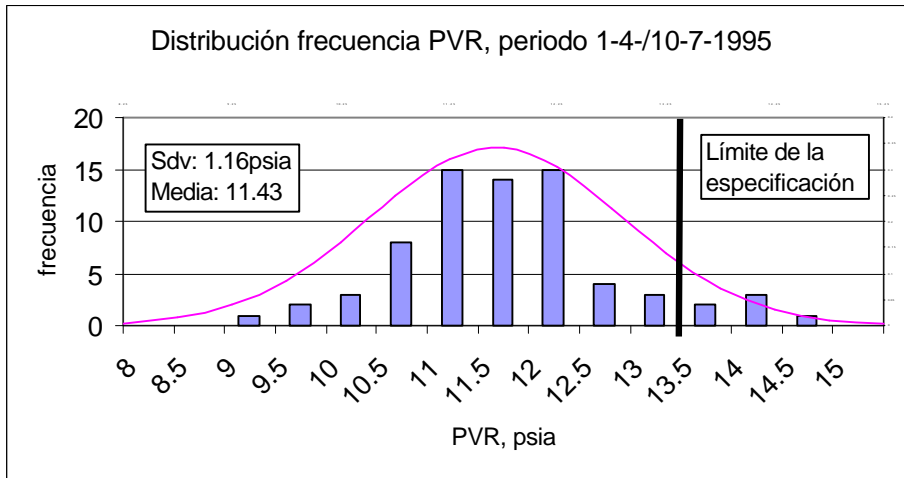


Fig. 137 . Histograma de frecuencias de la PVR, periodo 1/4/95-10/7/95. Sin predicción.

Tabla 66 . Estadísticos principales de la muestra de datos PVR en cabeza Despentanizadora, correlación en servicio, para el periodo 9-8-95/23-3-97.

MODA	12.10
Media Aritmética	12.20
Media Aritmética acotada (95%)	11.66
Desviación estándar	0.94
Coefficiente.asimetria	-0.75
Curtosis	5.45
Percentil al 68%	0.94
Desv. Estándar como perc.68%	0.94
Porcentaje muestras fuera espec.	6.00

La Tabla 66 muestra los mismos resultados estadísticos que la tabla anterior, pero esta vez en el periodo que comprende la correlación en servicio, 9-8-95/10-7-97. En esta ocasión se observa claramente que la distribución tiene también un porcentaje de valores fuera de

especificaciones (6%) bastante similar al valor anterior. Sin embargo, existe una reducción de la desviación estándar de 1.16 a 0.94 y un desplazamiento de la media desde 11.43 a 12.20psia.

Merece destacarse de este periodo que Operación, al conocer el valor de la PVR calculada, ha sido capaz de realizar un desplazamiento de la media y reducir la desviación estándar de la muestra, manteniendo el mismo porcentaje de datos fuera de especificaciones.

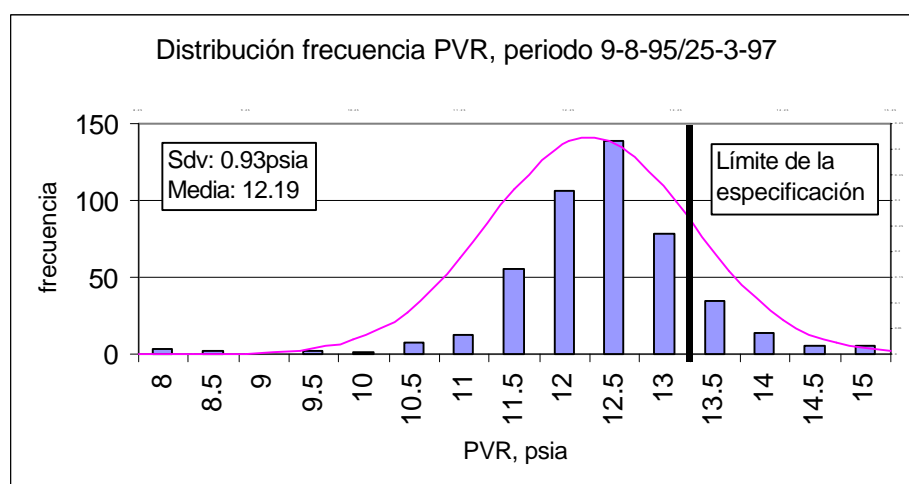


Fig. 138. Histograma de frecuencias de la PVR, periodo 1/4/95-10/7/95. Cálculo en línea.

Mientras en las figuras anteriores se analiza el impacto de la correlación sobre el valor de la PVR que informa Laboratorio, en las figuras siguientes (Fig. 139 y Fig. 140) se puede observar el error que se encuentra frente a laboratorio para el mismo periodo, tanto en lo referente a la Presión de Vapor Reid en cabeza como en el 5% de Destilación de fondo.

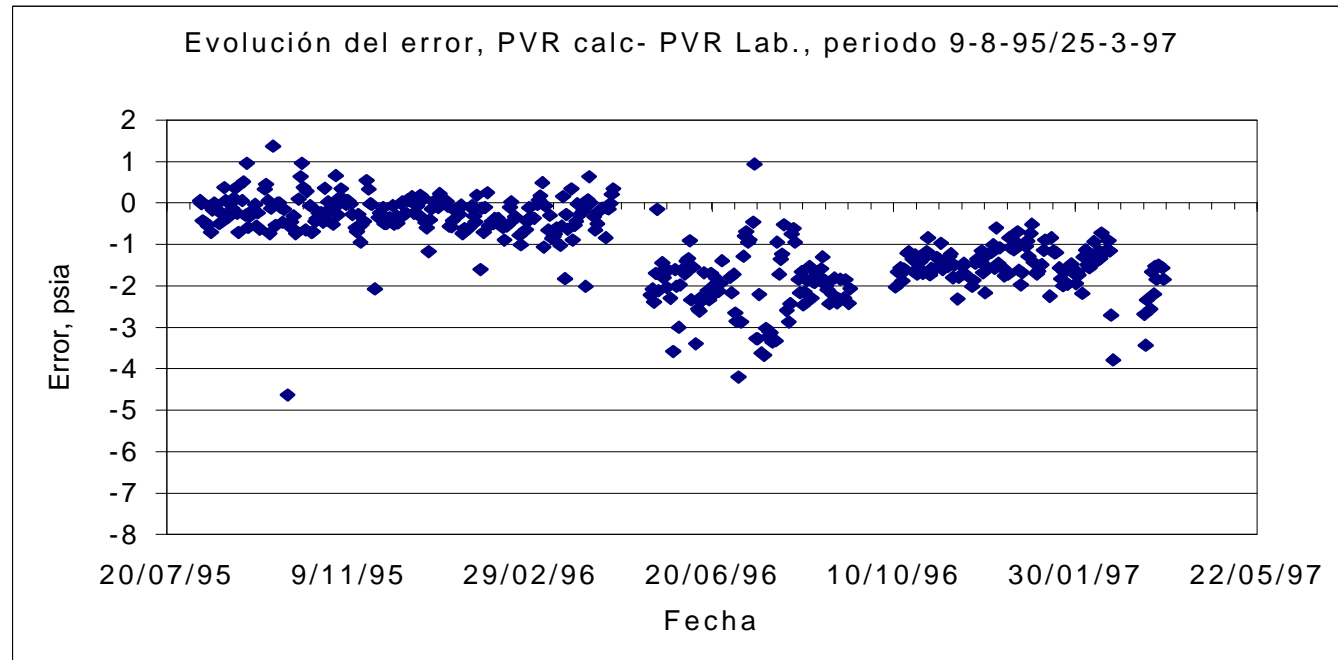


Fig. 139 . Evolución del Error (PVR calc- PVR Laboratorio), periodo 9-8-95/25-3-97.

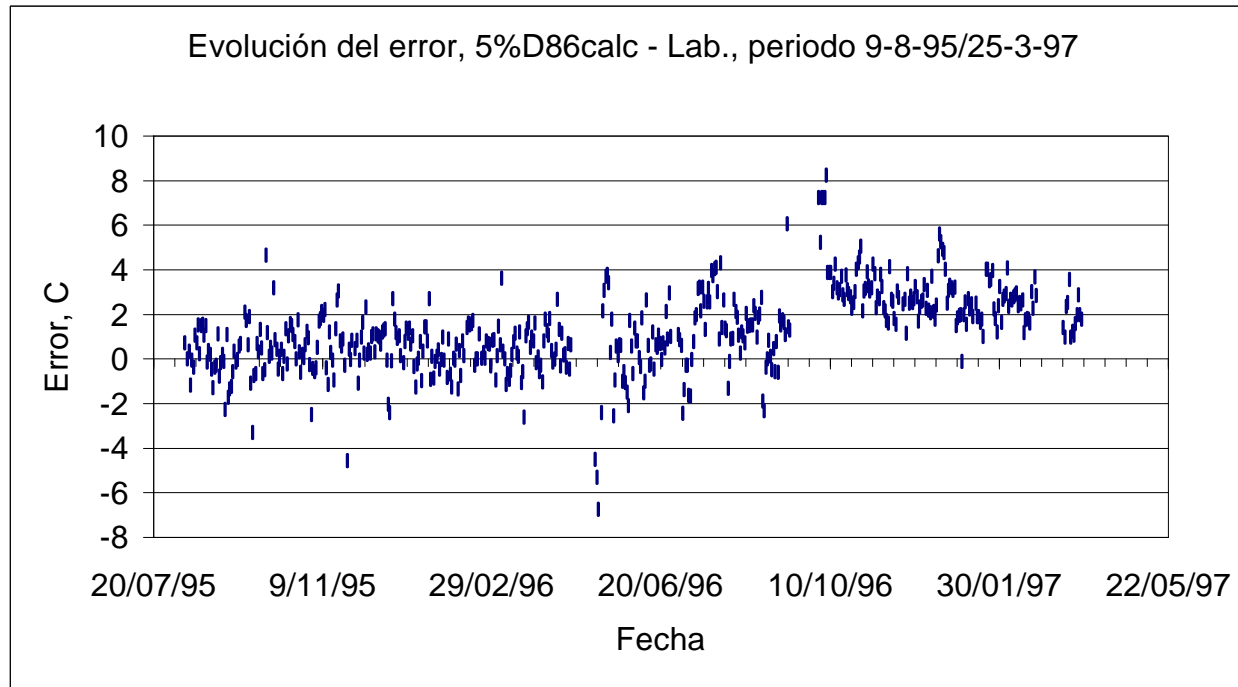


Fig. 140 . Evolución del Error (5%D86 calc- 5%D86 Laboratorio), periodo 9-8-95/25-3-97.

Y, al igual que ocurre para la PVR y el 5% D86, el error en el periodo comprendido desde el comienzo de la correlación hasta aproximadamente abril 1996, se encontraba distribuido de forma aleatoria alrededor de cero, mientras que a partir de esa fecha se produce un desplazamiento en la predicción que se mantuvo hasta el final de ese periodo. Este desplazamiento, que se produjo a partir de la parada de abril/mayo de 1996, pudo obedecer a las siguientes razones:

1.- Acciones de mantenimiento sobre la torre Despentanizadora, realizadas durante la parada.

2.- Desplazamiento de algún medidor por cambio de parámetros o cambio de instrumento, etc.

3.- Desplazamiento con respecto a la medida de laboratorio por cambio de método de análisis.

Estas razones fueron estudiadas y se detectó que los trabajos de mantenimiento realizados durante la parada eran probablemente los responsables de ese desplazamiento. Se ha producido no sólo un cambio del valor medio de las variables más importantes, sino también un cambio de sensibilidad, como lo manifiesta el ligero aumento de la desviación estándar de los datos.

Un efecto similar se refleja en los datos del 5%D86, referidos al mes de octubre de 1996. Después de la reparación del medidor de temperatura PLU0705 (temperatura de fondo de la despentanizadora), éste pasa a marcar una media de 6-8 grados menos de lo que hacía antes del trabajo de mantenimiento. Se puede comprobar que, de acuerdo con la sensibilidad de este instrumento frente al 5%D86 (coeficiente 0.456), éste provocaría un desplazamiento de  $0.456 \times 8 = 3.6^\circ\text{C}$ , que es lo que se observa experimentalmente. Ahora bien, en el caso de la PVR pasa casi inadvertido, pues el efecto es mucho menor ( $8 \times 0.076 = 0.6\text{psia}$ ).

## ***Etapas 2. Modelo en línea. Control en lazo cerrado***

En abril de 1997 se decidió poner en servicio en lazo cerrado un modelo para el cálculo de la presión de vapor Reid de la torre

---

Despentanizadora. El modelo propuesto no es el mismo que el utilizado hasta ese momento, ya que se observó que debía volver a calibrarse.

Al tener que realizar de nuevo un estudio de los datos, se observó que podría ser interesante modificar las variables que participaban en el modelo por otras que dieran igual o mayor grado de explicación. El modelo entonces desarrollado responde a los coeficientes de la Tabla 67.

*Tabla 67 . Coeficientes de modelo PLS para la predicción de la PVR en el producto de cabeza Despentanizadora, Agosto marzo 1997.*

VARIABLE	UNIDADES	DESCRIPCIÓN	COEF. PVR
PLU705	°C	Temperatura Fondo	0.00903
(PLF194+PLF195)/PLF184		Rendimiento en Fondo B/F	-0.8810
PLF206/PLF208		Relación reflujo L/D	0.111
PLF206/PLF184		Relación Reflujo/Carga, L/F	-2.54
PLU706	°C	Temp. Ent. Horno Reboiler	0.0696
PLF1846	m <sup>3</sup> /h	Carga a la Unidad	0.0273
PLU701	°C	Temperatura Ent. Alim.	-0.04380
PLP209	kg/cm <sup>2</sup>	Presión cabeza Torre (manométrica)	3.78
C2A003	psia	PVR Nafta ligera	0.5390
PLU702	°C	Temp. Cabeza Torre	-0.2230
Ord. ORIGEN			17.4335

En este modelo se hace participar un mayor número de variables y se emplean esta vez caudales. Los caudales no se habían utilizado en la versión anterior del modelo para evitar los problemas derivados de la inestabilidad de los medidores de orificio cuando el rango de operación es próximo a cero. En esta ocasión este hecho, añadido a que también se requieren relaciones de caudal para determinar el valor de la PVR, permitirá estudiar la estabilidad de la señal para utilizarse en esta estrategia de control.

La gráfica del error encontrado desde abril 1997 hasta la fecha de la

tercera etapa se puede ver en la Fig. 141.





## Diseño de la estrategia de control

Las dos especificaciones importantes en la torre Despenta, como ya se había indicado, eran la Presión de Vapor Reid en cabeza y el 5%D86 en fondo. Se decide por el control descentralizado, pues esta aplicación es más sencilla de construir que con el control centralizado.

Inicialmente se identificaron las válvulas de control de la sección despentanizadora y se estudiaron las posibles interacciones con el método de ganancias relativas RGA (Shinskey, 1984).

Aunque el método RGA se puede aplicar utilizando los datos experimentales de ganancias del proceso, también está completamente desarrollado de forma teórica. Se construyó una hoja de cálculo (Fig. 142) para aplicar el método. Teniendo en cuenta que se basa en las composiciones de los componentes clave que se pretenden separar, es necesario identificar cual de ellos está mejor relacionado con la propiedad que se desea controlar. En este sentido, la presión de vapor está fuertemente relacionada con la cantidad total de pentanos que se toman como componente clave ligero (CL). Por el contrario, los hexanos se consideran clave pesado (CP).

Se supuso que la carga estaba constituida por un 20% de pentanos, obteniéndose un producto de cabeza con un 60% de pentanos (CL) y 30% de hexanos (CP), y en el fondo 5% de pentanos máximo y 40% hexanos, con una relación de reflujo 2. Por otro lado, trabajos anteriores de la Despenta señalaron que la torre posee aproximadamente 20 etapas teóricas (40 platos reales).

Según los resultados obtenidos con la matriz de ganancias relativas, y teniendo en cuenta algunas consideraciones dinámicas y la sencillez de la estrategia, se decide optar por la configuración  $\Lambda_{DV}$ , esto es, por el control de la composición de la cabeza de la torre mediante el destilado y por el control de la composición de fondo mediante el caudal de vapores (temperatura salida Reboiler PH-5).

---

## Análisis de Ganancias Relativas

Destilación Multicomponente Torre: PV16 Descripción: Despentanizadora

yl	0.6	%mol	Lig. cabeza
yh	0.3	%mol	Pes. cabeza
xl	0.05	%mol	Lig. fondo
xh	0.4	%mol	Pes. fondo
zl	0.2	%mol	Lig. en carga

Se define como la relación de ganancias entre la variable manipulada y variable controlada, para los casos en que el resto de las variables están en manual y cuando están en automático.

D_m	5
L_m	10
nE_m	20

zII	0.027
DL	-2.667
EP	2.25
SG	4.5
RR	2
LF	-8.4
VF	-5.684
FB	1.375
LB	-6.09
VB	-4.635

x \ y		D	L	S	
				L/D	D/V
D					
B			-0.465		0.372
V	1.884	-2.093			0.558
L/B	1.779	-2.636			0.575
V/B	2.355	-1.231			0.507

Fig. 142 . Análisis de Ganancias Relativas para el control de la Presión de Vapor Reid, cabeza Despentanizadora.

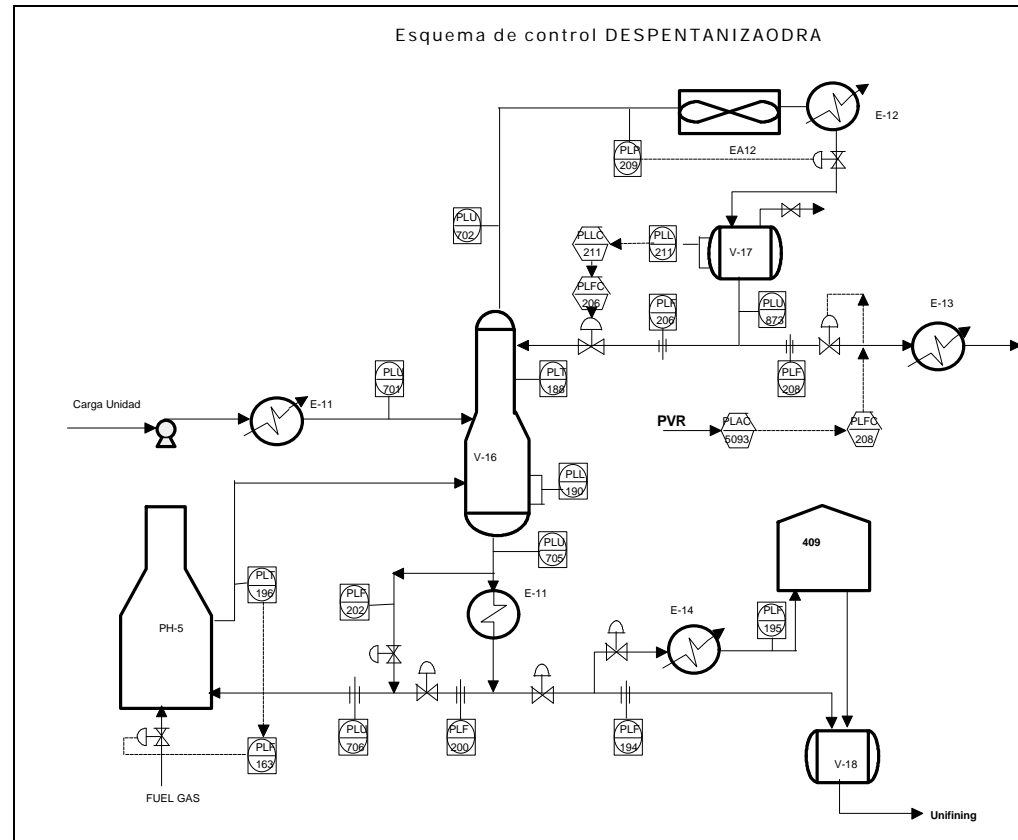


Fig. 143 . Estrategia de control propuesta. Presión de Vapor Reid.

La estrategia de control que se propuso se refleja en la Fig. 143. La presión de vapor Reid se controla manipulando la extracción, mientras que el nivel del botellón de reflujo se regula por medio del caudal de Reflujo. Sin embargo, esta estrategia altera la seguida en Operación hasta ese momento; esto es, el caudal de reflujo se mantenía constante o se manipulaba según la presión de vapor Reid de Laboratorio, y el nivel del botellón de reflujo se controlaba con el caudal de Destilado. A petición de Operación, se procedió a cambiar la estrategia para mantener la que imperaba hasta ese momento.

La Tabla 68 y la Fig. 144 recogen los datos estadísticos y el histograma de frecuencias de los datos de PVR de Laboratorio representativos de este periodo. Se representan solamente los datos obtenidos cuando la aplicación de control estaba en servicio.

*Tabla 68 . Estadísticos principales de la muestra de datos PVR en cabeza Despentanizadora, aplicación en servicio, para el periodo 28-3-97/31-1-98.*

MODA	12.40
Media Aritmética	12.42
Media Aritmética acotada (95%)	12.48
Desviación estándar	0.79
Coefficiente.asimetria	-0.32
Curtosis	0.33
Percentil al 68%	0.76
Desv. Estándar como perc.68%	0.76
Porcentaje muestras fuera espec.	6.13

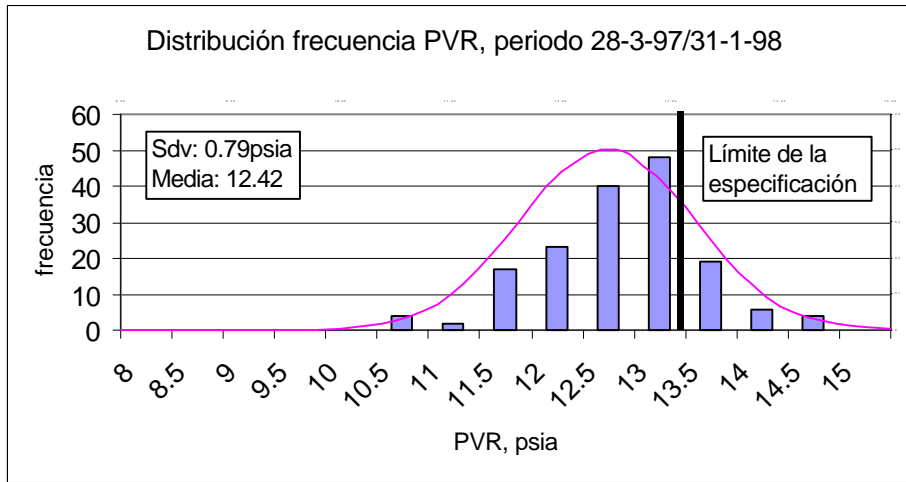


Fig. 144 . Histograma de frecuencias de la PVR, periodo 1/4/95-10/7/95. Cálculo en línea.

La aplicación en control ha representado un diferencial de mejora de aproximadamente 0.2psia. Este valor, comparado con el que se consiguió al poner la correlación en línea, es bastante inferior. Esto indica que casi el 80% de la mejora se ha conseguido con la instalación de la correlación, frente a un escaso 20% por la aplicación de control en lazo cerrado. Sin embargo, se ha de realizar varias puntualizaciones:

1.- La estrategia de control implementada no responde exactamente a la más adecuada según la matriz de ganancias relativas.

2.- La correlación empleada en la aplicación de control difiere de la utilizada en la primera etapa. Al estar el caudal de destilado en el denominador de una variable en el modelo y manipularse por el control de nivel, como en algunas ocasiones la cantidad de ligeros es pequeña, al dividir por un número tan pequeño se perdía el comportamiento lineal. En estos casos, el error con laboratorio era anormalmente alto e incluso la Aplicación abría el lazo de control automáticamente.

Ambas apartados están relacionados, ya que si se hubiese instalado el criterio definido en la matriz de ganancias relativas utilizando el destilado para control de calidad y el reflujo para control de nivel, las oscilaciones serían menores y probablemente las diferencias con Laboratorio.

## **Análisis económico de los resultados obtenidos**

En un trabajo previo realizado sobre la torre Despentanizadora (Macias, 1995) para determinar el diferencial de la producción en fondo por la variación de la PVR del Destilado, se observó que aproximadamente un aumento de 1psia de la PVR implicaba el aumento de 1.000bbl/d más de carga a la Unidad de Reformado Catalítico. Este valor se puede utilizar para evaluar el impacto de la correlación en cada periodo.

Si se asume que el porcentaje de datos fuera de especificaciones es aceptable para la PVR (teniendo en cuenta la integración en tanque) y como en los tres periodos estudiados ese valor se mantuvo prácticamente constante (7, 6 y 6%), el desplazamiento de la media de los datos representa una indicación directa de la mejora conseguida.

$$\Delta \bar{x} = \bar{x}_c - \bar{x} \quad [ 107]$$

donde  $\bar{x}$  y  $\bar{x}_c$  son la media de los datos antes y después de la mejora.

Por lo tanto, si se acepta el valor 1.000bbl/d (densidad 0.74kg/m<sup>3</sup>) de carga adicional a Platforming por cada 1psia de aumento en la Presión de Vapor Reid del producto de cabeza, así como un diferencial entre éste y la Platformada de 2.500ptas/t (una vez descontados los costos operativos del Platforming), se concluye:

### ***Etapa 1: Cálculo en línea de la PVR.***

Incremento en la media: 12.20 – 11.43 = 0.74 psia

Diferencial de carga a Platforming: 1.000/6.3\*345\*0.74\*0.74 = 29.988 t/a

Lo que representa un beneficio de: 29.988\*2.500/1.000.000 = 75 Mptas/a

### ***Etapa 2: Control automático de la PVR, partiendo de la etapa 1.***

Incremento en la media: 12.42 – 12.20 = 0.22 psia

Diferencial de carga a Platforming: 1.000/6.3\*345\*0.74\*0.22 = 8.915 t/a

Lo que representa un beneficio de:  $8.915 \cdot 2.500 / 1.000.000 = 22$  Mptas/a

Produciendo un beneficio total acumulado de 97 Mpts/a.

Si se utiliza el método de estimación esbozado por Martin, Turpin y Cline (1991) y se asume el mismo porcentaje de muestras fuera de especificaciones antes y después del control automático, se tiene:

$$\Delta \bar{x} = (x_l - \bar{x}) \times \left( 1 - \frac{s_c}{s} \right) \quad [ 108]$$

donde  $x_l$  y  $\bar{x}$  es el límite de especificación y la media actual,  $s_c$  y  $s$  son la desviación estándar después y antes de control automático.

Este método considera que la nueva desviación estándar (después de control automático) es la mitad de la que inicialmente poseen los datos. De ahí se deduce posteriormente que el cambio en la media será:

$$\Delta \bar{x} = \frac{(x_l - \bar{x})}{2} \quad [ 109]$$

Este método de estimación representa para el caso de la PVR,

$$\Delta \bar{x} = \frac{(13.5 - 11.46)}{2} = 1.02 \text{ psia} \quad [ 110]$$

valor que comparado con el obtenido  $\Delta \bar{x} = 0.74 + 0.22 = 0.96 \text{ psia}$ , resulta bastante similar.

### **Discusión**

La aplicación de control diseñada en torno al valor calculado de la PVR ha significado a lo largo de tres años una reducción en la exportación de Nafta Ligera Tratada, que se confirma en los informes de Planificación, de 40.000t/a o 5% con respecto a la carga.

La participación del modelo de PVR frente al total de mejora conseguido representa un 80% del total.

---

La reducción de la desviación estándar de la PVR estimada por medio del método de Martin, Turpin y Cline se aproxima a los resultados reales obtenidos.

---



---

## **6.4. Cálculo por inferencia de la Penetración del asfalto de la Unidad de Destilación a Vacío, Foster2**

### ***Descripción del problema***

La Unidad de Destilación a Vacío Foster-2 tiene dos modos de operación, ligeros y asfaltos. En la operación asfaltos se procesan crudos pesados, principalmente Maya y Merey, en distintas proporciones o bien asociados a otros crudos en menor porcentaje.

La Penetración es una medida que indica el grado de dureza que posee un asfalto y es el parámetro principal de control de ese producto. Esta medida se modifica cambiando las condiciones operativas de la sección de vacío, principalmente la temperatura de horno e inyección de *slop*<sup>76</sup>. La Penetración de un asfalto se correlaciona fácilmente con la medida de temperatura de isoviscosidad, para la cual existe un analizador en línea. Existen principalmente dos especificaciones en la fabricación de asfaltos: producción de asfaltos de penetración 60-70 y 180-210.

Cuando se instaló el analizador de isoviscosidad, fruto del proyecto de Control Avanzado, se realizó una regresión lineal de las medidas de isoviscosidad con los datos de penetración del Laboratorio. La principal dificultad de esa medida de carácter inferencial es que mientras en la zona 60-70 correlacionaba bien, no sucedía lo mismo en la zona de penetración alta, donde los errores eran muy elevados.

El objetivo que se plantea ahora es encontrar alguna otra correlación que permita mejorar las predicciones frente al valor de laboratorio. Los datos proceden de un seguimiento que se ha realizado durante varios meses, anotando la temperatura del analizador de Isoviscosidad, la hora de obtención de la muestra y el valor de la Penetración que informa Laboratorio. Se sospechaba que el tipo de alimentación determinaba el comportamiento de la medida y por ello se recogieron datos sobre los crudos cargados a la Unidad (porcentaje y tipo).

---

<sup>76</sup> *Slop*, una de las corrientes laterales de la torre de vacío.

---

Al tratarse de dos tipos mayoritarios de carga, la medida de la densidad (existe analizador en línea) puede servir para indicar la proporción de ambos. De esta manera se evita la intervención del Operador para definir la proporción de carga de cada uno de los crudos.

### PLS

Como en la matriz X existen dos variables, el número máximo de componentes es también dos. Los resultados que se obtienen sin transformaciones a las variables se presentan en la Tabla 69 y Tabla 70.

Tabla 69 . Criterios utilizados, Modelo: mpenet01 Datos: isov-pe3.

PARÁMETRO	CRITERIO SEGUIDO
Variables	Sin transformar
Reducción	No activa
Componentes	2
Validación	5 grupos, 20%
Incrementos	No

Tabla 70 . Resultados obtenidos, Modelo: mpenet01 Datos: isov-pe3,  
 V.dep.: Penet, Part. %: 74.04 Desv.Std: 38.3738 E.Std: 19.7813,  
 V.Calibración: 20.4088 V.Predicción: 21.9888 BIAS: -2.1486  
 SEP: 20.7770, Media: 82.1000 O.O.:2207.1628

VARIABLES	MEDIA	COEF.STD.	COEF.MODELO	DESV.STD	ERR.STD.	IMP.
DENSIDAD	926.7	-0.2998	-1.1	4.4427	0.0013	24.6117
Isovis	186.8	-0.9183	-5.93	5.8404	0.0651	75.3883

El valor de la varianza de predicción RMSEP, (21.9 unidades) como el gráfico press (Fig. 145), indican que el comportamiento de la penetración no es lineal o que son necesarias más variables para tener resultados más fiables.

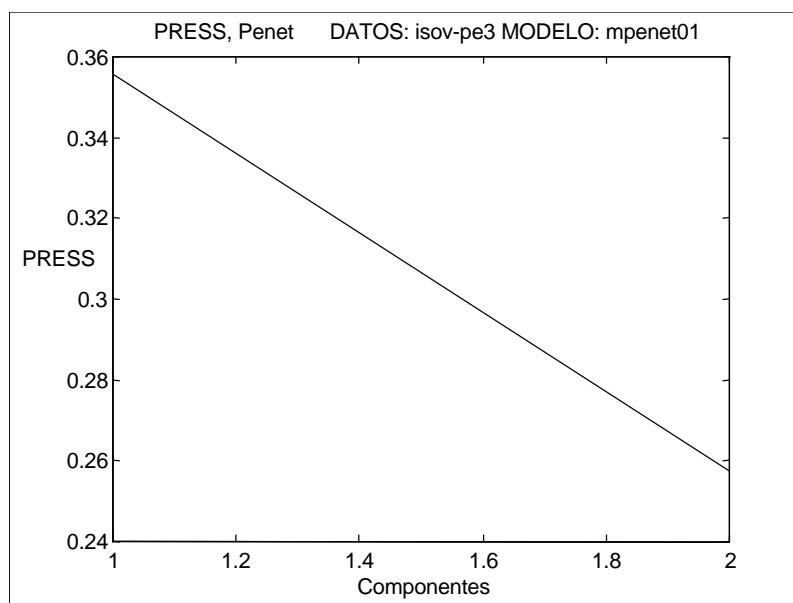


Fig. 145 . Gráfico de los residuos de Penetración frente a número de componente.

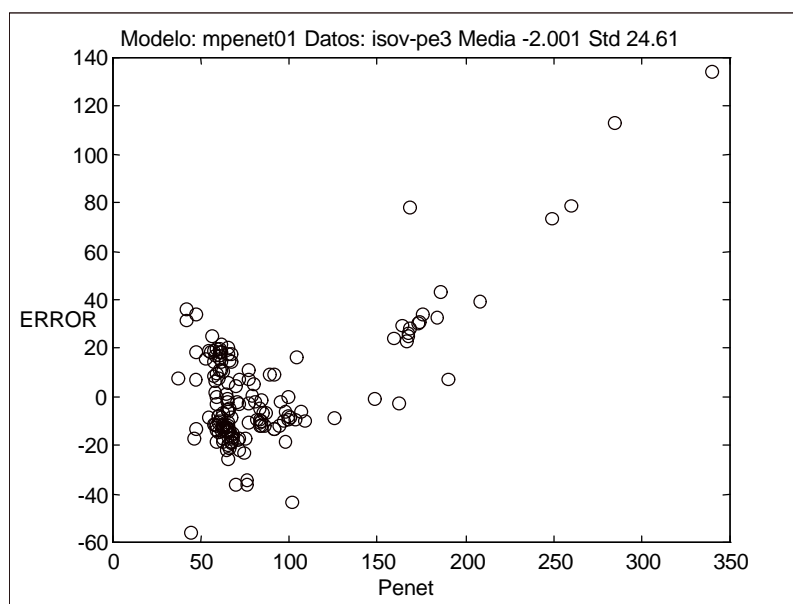


Fig. 146 . Gráfico de la Penetración calculada y real, datos de calibración..

La representación de los errores frente a los datos de calibración (Fig. 146 y Fig. 147) confirma que el error depende del valor de la variable Y, de modo que la Penetración frente a la densidad e isoviscosidad no es

lineal.

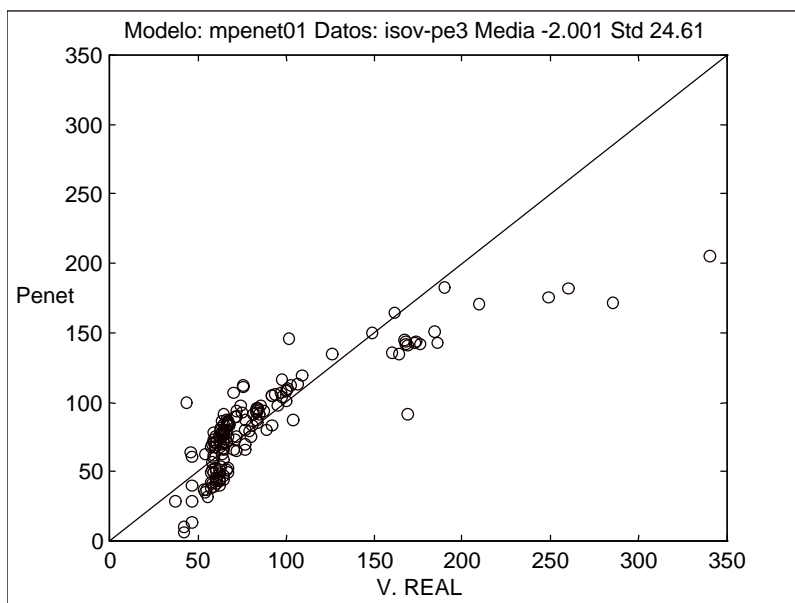


Fig. 147 . Gráfico de la Penetración calculada y real, datos de calibración.

En el modelo MPENET02 se ha tomado el logaritmo neperiano de la Penetración con los siguientes resultados:

Tabla 71 . Criterios utilizados, Modelo: mpenet02 Datos: isov-pe3.

PARÁMETRO	CRITERIO SEGUIDO
Variables	Sin transformar
Reducción	No activa
Componentes	2
Validación	5 grupos, 20%
Incrementos	No

Tabla 72. Resultados obtenidos, Modelo: mpenet02 Datos: isov-pe3  
 V. dep.:log(Penet) Part. %: 82.20 Desv.Std: 0.4065 E.Std: 0.1699  
 V.Calibración: 0.1699 V.Predicción: 0.1830 BIAS: 0.0014 SEP: 0.1687  
 Media: 4.3537 O.O.: 25.5967

VARIABLES	MEDIA	COEF.STD.	COEF.MODELO	DESV.STD	ERR.STD.	IMP.
DENSIDAD	926.5	-0.3066	-0.0109	4.3194	0.0002	24.2596
Isovis	186.6	-0.9572	-0.0597	6.2281	0.0397	75.7404

Lo que resulta un error de predicción 14.39 unidades de Penetración.

En la Fig. 148 y Fig. 149 se pueden ver los resultados de aplicar ese nuevo modelo.

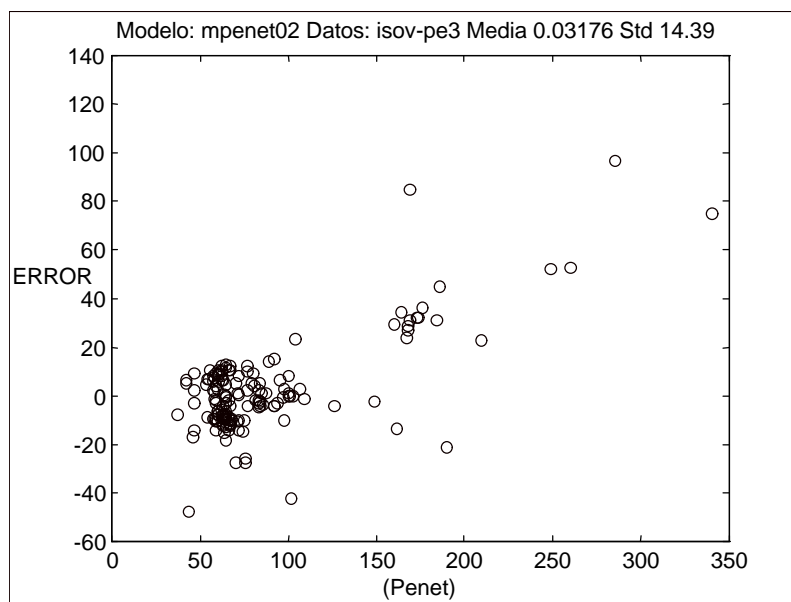


Fig. 148. Gráfico de errores de la Penetración calculada y real, datos de calibración.

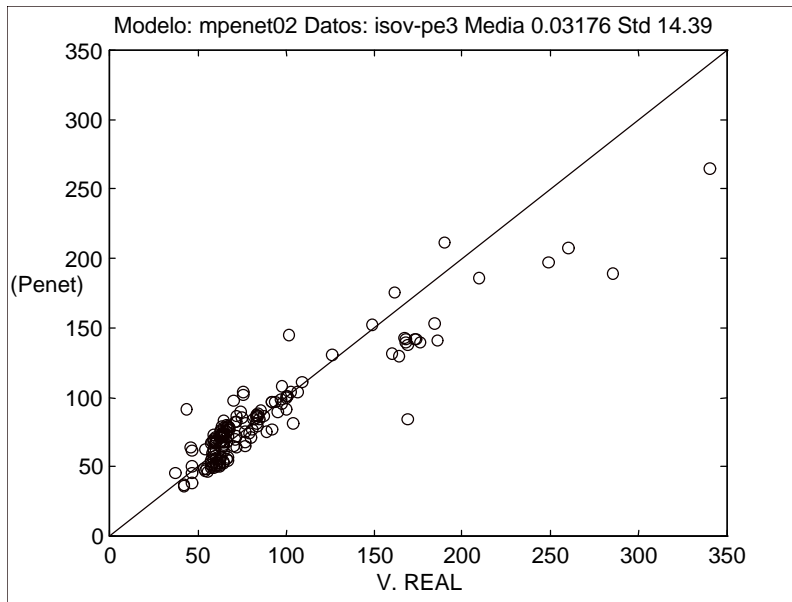


Fig. 149 . Gráfico de la Penetración calculada y real, datos de calibración.

Por último, no es posible aumentar el número de componentes del modelo y por ello se evalúan los efectos de interacción entre las variables X por si fueran decisivas en el cálculo de Y (MPENET03).

Tabla 73. Criterios utilizados, Modelo: mpenet03 Datos: isov-pe3.

PARÁMETRO	CRITERIO SEGUIDO
Variables	Fact., 2 niveles,2,2
Reducción	Dist. B5 grados, 2comp.
Componentes	2
Validación	5 grupos, 20%
Incrementos	No

Tabla 74. Resultados obtenidos, Modelo: mpenet03 Datos: isov-pe3  
 V. dep.:log(Penet) Part. %: 82.26 Desv.Std: 0.4065 E.Std: 0.1699  
 V.Calibración: 0.1696 V.Predicción: 0.1825 BIAS: 0.0015 SEP: 0.1683  
 Media: 4.3537 O.O.: 17.5246

VARIABLES	MEDIA	COEF.STD.	COEF.MODEL O	DES.V.STD	ERR.STD.	IMP.
DENSIDAD. *DENSIDAD	858480.5	-0.1206	-2.31e-006	7993.1103	1.4321	11.4693
Isovis	186.6	-0.4277	-0.0267	6.2281	0.0087	40.6640
Isovis *DENSIDAD	172861.8	-0.5035	-0.0000359	5732.6348	8.0121	47.8668

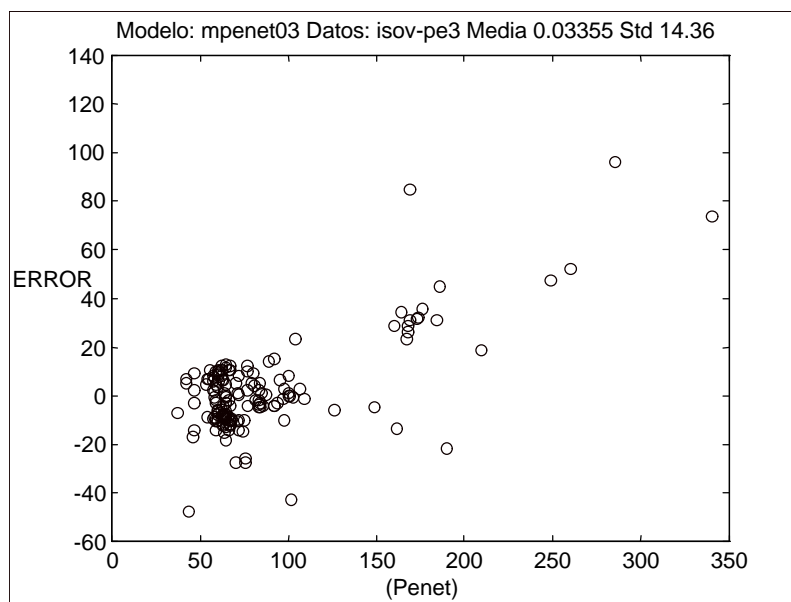


Fig. 150 . Gráfico de errores de la Penetración calculada y real, datos de calibración.

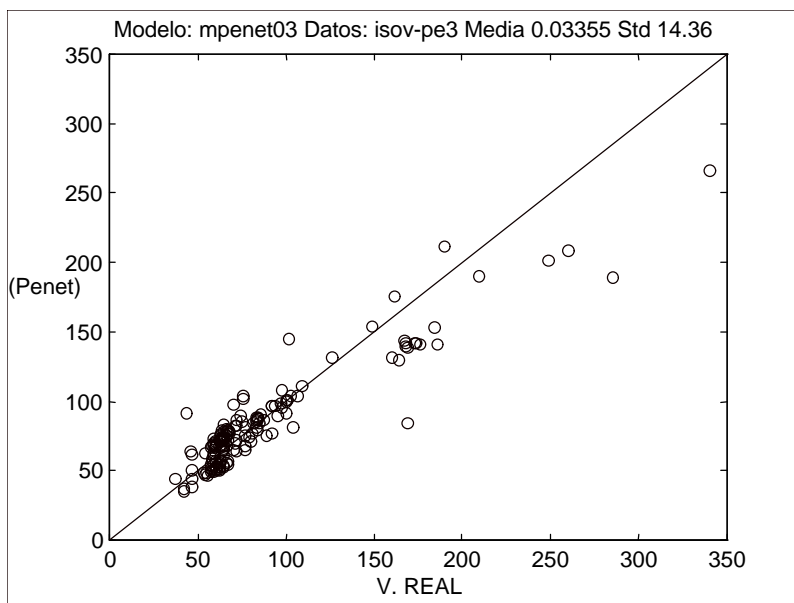


Fig. 151 . Gráfico de la Penetración calculada y real, datos de calibración.

El error esperado de predicción con este último modelo (MPENET02) es 14.4 unidades de penetración, valor idéntico aplicando sólo logaritmo,.

### **Redes Neuronales**

Los resultados de la Red Neuronal para el caso de la Penetración se observan en la Tabla 75, al igual que las gráficas correspondientes (Fig. 152 y Fig. 153). En todo caso, el error de predicción es superior al valor obtenido por PLS cuando éste toma el logaritmo de la variable Penetración.



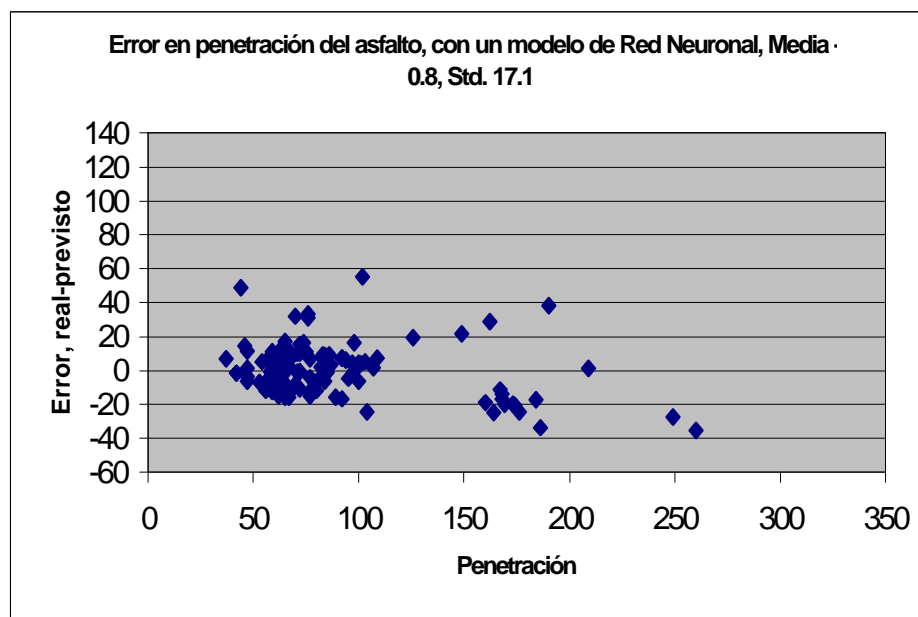


Fig. 152 . Gráfico de errores de la Penetración calculada y real, datos de calibración.

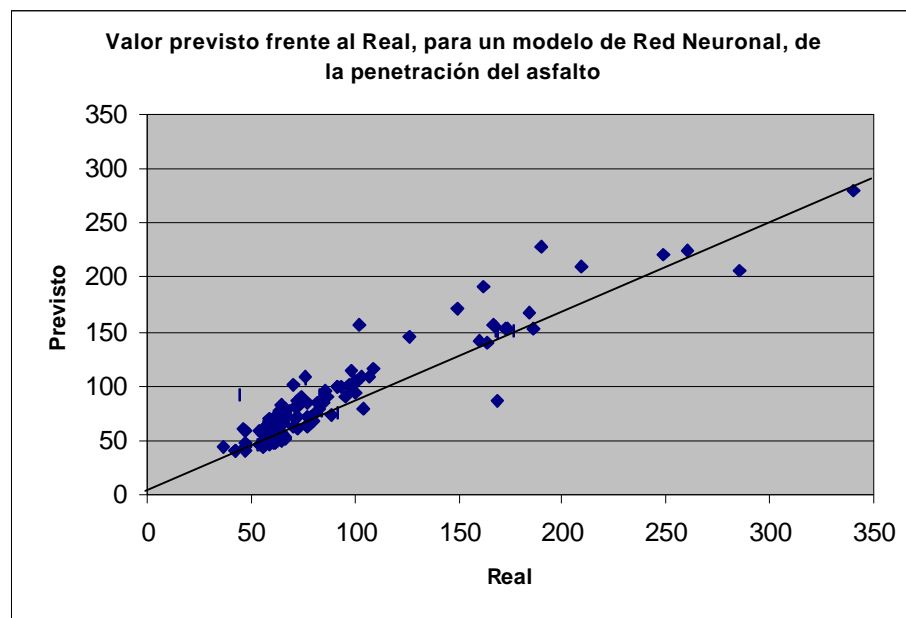


Fig. 153 . Gráfico de la Penetración calculada y real, datos de calibración.

*Tabla 75 Resultados de la Red Neuronal para predicción de la Penetración a partir de la Densidad y de la temperatura de Isoviscosidad del asfalto.*

IPES: Analysis of ISOV-PE3				
Leave-31-out Test Error = 1.85E+01 (output units)				
Combined Nets Total Error = 1.71E+01 (output units)				
Polynomial Approx. Error = 1.71E+01 (output units)				
Correlation Coefficient (NN vs. actual) = 0.933				
Confidence in Leave-31-out NN Fit = 100.000%				
<b>Neural Net Formula</b>				
Penetración=+2.26E+01s(-5.41E+00-1.39E-02*Isoviscosidad-3.66E-03*DENSIDAD)+1.46I				
*DENSIDAD)-8.99E+00s(1.32E+00+4.57E-03*Isoviscosidad+4.17E-04*DENSIDAD)+1.40E				
NSIDAD)+1.43E+01s(-4.10E+00-8.76E-03*Isoviscosidad-3.04E-03*DENSIDAD)+1.42E+0I				
<b>Quadratic Approximation to Neural Net Formula</b>				
(Only terms with importance > 1% are included)				
Penetración=+2.58E+04-1.47E+02*Isoviscosidad-2.39E+01*DENSIDAD+2.12E-01*Isovis				
The above formula is contained in the following table which shows:				
Ranked Importance of each Polynomial Term				
Dependent Variable = Penetración (output units)				
Input 1	Input 2	Coefficient of Term	Term Error (output units)	Term Importance (%)
constant		2.58E+04	N/A	N/A
Isoviscosidad		-1.47E+02	9.54E+02	99.968
Isoviscosidad	Isoviscosidad	2.12E-01	5.04E+02	99.885
DENSIDAD	Isoviscosidad	6.77E-02	3.82E+02	99.800
DENSIDAD		-2.39E+01	2.89E+02	99.650
DENSIDAD	DENSIDAD	5.58E-03	1.27E+02	98.212
<b>Network Structure</b>				
# Inputs	# Hiddens	# Outputs		
2	10	1		
<b>Selected Columns</b>				
Isoviscosidad	DENSIDAD			
1	3			

**Discusión**

Cuando se añaden modificaciones al grupo de variables X o Y, aumenta enormemente la potencia de predicción con PLS. La Penetración es una característica no-lineal en todo el intervalo de trabajo. Y aunque la temperatura de Isoviscosidad es la variable más relevante, la densidad participa en más de la tercera parte de la variación total de la Penetración. Por consiguiente, es muy importante tener en cuenta esa variable para corregir la influencia de los distintos crudos.

Se observa que PLS, al utilizar logaritmo neperiano de la variable penetración aumenta la potencia de predicción aproximándose a la red neuronal.

---

## **6.5. Estimación del número de octano de la Nafta Reformada para su seguimiento y control, así como el desarrollo de un modelo riguroso de simulación en línea para la optimización de una Unidad de Reformado Catalítico**

### ***Descripción del problema***

Se ha elegido la Unidad de Reformado Catalítico de la Refinería Tenerife para desarrollar un modelo inferencial, pues constituye una de las unidades más importantes de la Refinería, después de la destilación atmosférica. La citada Unidad produce el principal componente de las gasolinas (nafta reformada), del hidrógeno (fundamental para las unidades de hidrodeshidrosulfuración) y la mayor proporción del LPG de la Refinería.

El parámetro de control más significativo de la planta es el número de octano de la nafta reformada. No existe analizador en línea y, por consiguiente, el control de la severidad de la reacción se realiza a partir del análisis de laboratorio realizado a una muestra que diariamente se toma en la Unidad. Con el fin de mantener el número de octano constante, Operación se encarga de aumentar o disminuir la temperatura de entrada a los reactores de acuerdo a dos reglas básicas:  $0.5\text{RON}/^{\circ}\text{C}$  y  $500\text{bbl}/\text{d}/^{\circ}\text{C}$ .

Además de la velocidad espacial y de la temperatura de reacción, se han de tener en cuenta otras variables que afectan al número de octano. En este sentido, la Refinería dispone de una matriz de interacción (Macias, 1995), que se utiliza para determinar el efecto neto sobre el rendimiento C5+, número de octano, lpg, longitud de ciclo, etc. que se produce en la Unidad por efecto de la variación de la calidad de la carga (N, A, FBP, etc.) y de las principales variables operativas de la Unidad (temperatura de reacción, presión de operación, etc.). El desarrollo de esta matriz se efectuó a partir de la información suministrada por el fabricante de catalizador (Procatalyse, IFP) y mediante un diseño factorial de dos niveles

---

(Tabla 76).

Tabla 76 . Efecto de la variación de la calidad de la carga y condiciones de operación sobre las características principales de la Unidad de Reformado Catalítico Platforming, (Macías, 1995).<sup>77</sup>

VARIABLE		N.O.	REND. C5+	C3+C4 ESTA.	CARGA ESTA.	LRC	GAS REC.	M <sup>3</sup> /KG
			%wt	%wt	%wt	% var.	H <sub>2</sub> ,%vol	BASE 20
P Sep.	kg/cm <sup>2</sup>	0.000	0.000	0.094	0.159	0.000	0.200	0
P Reac. <sup>78</sup>	kg/cm <sup>2</sup>	-0.200	-0.100	0.064	-0.001	6.000	-0.300	1.2
FBP	°C	0.080	-0.060	0.019	-0.042	-2.333	-0.090	-0.467
N	%vol	0.179	0.051	-0.078	-0.055	0.000	0.103	0
A	%vol	0.333	0.000	-0.044	-0.018	-2.910	-0.048	-0.58
Marcha	1000bbl/ d	-0.476	0.473	-0.155	0.276	7.846	0.640	1.57
Temp.R.	°C	0.400	-0.397	0.130	-0.231	-6.587	-0.537	-1.32
Rel. H/HC	mol/mol	0.000	0.000	0.000	0.000	39.400	0	7.88

Sería interesante disponer de una medida en línea del número de octano; una medida que permita conocer con anterioridad la posible evolución de la calidad del producto y aumentar o disminuir la temperatura de reacción antes de obtener el resultado de laboratorio.

Si bien las reglas mencionadas anteriormente son coincidentes con los efectos de la Tabla 76, no se conoce *a priori* la información sobre la calidad de la carga (N, A, Final de destilación, etc.). Además, aunque se contara con un modelo cinético riguroso de la planta, no es posible adelantarse al comportamiento de la Unidad porque para ejecutar este modelo también se requiere la composición de la carga. En todo caso, las reacciones catalíticas que ocurren en la Unidad están sujetas al comportamiento que

<sup>77</sup> Los valores se consideran incrementos aditivos para todas las variables excepto para la longitud relativa de ciclo que los efectos se han de multiplicar.

<sup>78</sup> La presión en Reactores se calcula como la media entre el Separador y la Impulsión del Compresor.

se deriva del envenenamiento paulatino del catalizador (coke, azufre, metales, etc.), que obliga a aplicar coeficientes correctores a las predicciones de los modelos.

Se han aplicado las técnicas de calibración multivariante a la Unidad de Reformado Catalítico con un doble objetivo. Primero, para identificar las variables que mejor predicen el número de octano y, segundo, para construir un modelo empírico del comportamiento de los reactores; un modelo que facilite la utilización de un simulador como el PRO-II para el resto de la Unidad. Con este modelo híbrido es posible predecir el comportamiento de la planta frente a cambios de calidad de la carga y obtener las condiciones operativas más óptimas.

Estos objetivos se traducen en el control (vía inferencia del número de octano) y la optimización (vía modelo riguroso de PRO-II) de la Unidad de Reformado catalítico.

*Tabla 77 . Nombre y descripción de las variables utilizadas inicialmente para el modelado.*

VARIABLE	DESCRIPCIÓN	UNIDAD	DESV.EST.	MEDIA
PL U 0724	ENTRADA REACTOR N-1	°C	60.352	496.06
PL U 0730	ENTRADA REACTOR N-2	°C	52.040	497.39
PL U 0736	ENTRADA REACTOR N-3	°C	60.517	496.05
PL JF2724	DELTA RX-1 PLATFOR	°C	12.712	-74.63
PL JF2730	DELTA RX-2 PLATFORM	°C	7.858	-18.54
PL JF2736	DELTA RX-3 PLATFORM	°C	6.239	-1.28
PL P 0110	SEPRDOR DE PL (MAN)	kg/cm <sup>2</sup>	3.877	21.76
PL U 0804	ENTR BOTLN SEP PLAT	°C	2.866	27.05
PL A 0001	DENSIDAD GAS RECICLO	R.A.	0.065	0.35
PL A 0102	P.V.R. PLATFORMADA	p.s.i.	1.112	7.32
PL P 0104	GAS REC. COMPRESR (MAN)	kg/cm <sup>2</sup>	4.268	26.36
PL P 0150	CABEZA ESTABILIZAD. (MAN)	kg/cm <sup>2</sup>	1.917	16.25
PL U 0739	FONDO ESTABIL.	°C	24.113	213.86
PL U 0738	VAPORES CABEZA ESTAB	°C	13.107	72.15

PL T 0742	SLDA COMBIN REBOILER	°C	17.453	230.86
PL U 0758	REFLUJO ESTABILIZAD.	°C	2.846	26.00
PL F 0101	CRGA PLATFORM PASO-1	m <sup>3</sup> /h	6.292	39.82
PL F 0102	CRGA PLATFORM PASO-2	m <sup>3</sup> /h	5.579	39.95
PL F 0021	BPASS GAS SIST.UNFNG	nm <sup>3</sup> /h	653.116	2909.34

Tabla 77. Continuación.

PL F 0023	HIDROGEN A UNIFINING	knm <sup>3</sup> /h	1.520	6.63
PL F 0114	GAS SEPAR PLAT FABR	nm <sup>3</sup> /h	1894.413	4336.61
PL F 0103	GAS RECIRCUL.PLTFRMG	knm <sup>3</sup> /h	11.716	74.91
PL F 0100	SLDA GAS BTELON EXP	nm <sup>3</sup> /h	91.383	133.73
PL F 0152	GAS ESTAB PLATF FABR	knm <sup>3</sup> /h	0.164	0.24
PL F 0149	BTLN RFLJ ESTBLZ LPG	m <sup>3</sup> /h	4.094	13.81
PL U 0705	FONDOS DESPENTA	°C	12.887	108.34
PL F 0194	FNDO DSPNTNZD.A V-18	m <sup>3</sup> /h	11.291	22.91
PL P 0209	CABEZA DESPENTAN. (MAN)	kg/cm <sup>2</sup>	0.105	0.50
PL U 0702	VAPOR CABEZA DESPENT	°C	7.980	61.68
PL F 0003	NAFTA CADUVIS V-18	m <sup>3</sup> /h	1.728	4.07
C2 F 0106	NAFTA A TANQUE	m <sup>3</sup> /h	10.902	41.37
PL T 0003	SALID HRN RBLR STRPR	°C	14.986	211.27
PL P 0046	CABEZA STRIPPER (MAN)	kg/cm <sup>2</sup>	0.748	6.91
PL F 0045	REFLUJO STRIPPER	m <sup>3</sup> /h	4.525	28.45
PL U 0713	FONDO STRIPPER	°C	21.926	200.33
PL F 0147	REFLUJO ESTABILIZ.	m <sup>3</sup> /h	7.602	24.02
PL U 0874	CARG.ESTAB.SALD.E-7	°C	17.524	152.40
PL F 0161	GAS HORNO ESTABILIZA	nm <sup>3</sup> /h	39.523	241.50
PL F 0162	GAS HORNO ESTABILIZA	nm <sup>3</sup> /h	42.635	239.50
C2 A 0114	DENSIDAD CRUDO CORRE	g/l	18.459	871.52
C2 A 0004	95% NAFTA PESADA	°C	4.635	160.12
C2 A 0002	95% NAFTA LIGERA	°C	4.478	108.59
VB U 0782	ENTRADA GSLN REBOILR	°C	34.215	158.48

PL FC0103 VP	CAUDAL COMPRESOR CP1	Knm <sup>3</sup> /h	8.544	84.34
PL H 0221 VP	MANDO REVOLUC.COMPRSR	r.p.m.	966.173	6836.92
PL F 0180 VP	SALDA CNDSO COMPRSR	m <sup>3</sup> /h	1.878	7.61

### ***Predicción del Número de Octano de la Platformada***

Para la predicción del número de octano en línea sólo se puede emplear la información que está disponible en la instrumentación automática. Esta instrumentación deberá suministrar indicaciones precisas sobre la calidad de carga. Se obtuvieron los datos correspondientes a los RUN<sup>79</sup> números 8 a 12 (actualmente el Platforming está empezando su 13<sup>o</sup> RUN con el mismo catalizador).

Los hechos más relevantes de los distintos RUN se pueden ver en la Tabla 78.

---

<sup>79</sup> Se conoce como RUN al periodo comprendido entre regeneraciones para un mismo catalizador.

---



Tabla 78 . Hechos más relevantes RUN 8 a 12.

RUN	M <sup>3</sup> /KG <sup>80</sup>	PERIODO	FICHERO	CARACTERÍSTICAS
8	9	3/12/93- 9/8/94	PLSPL085	Envenenamiento por cobre en Reactor 1, reducción incremento temperaturas 9 meses
9	6	25/8/94- 2/3/95	PLSPL095	Al término de este RUN, se intercambia 10Tn de catalizador del primer Reactor por 10Tn del segundo. Cernido
10	12.2	1/4/95- 21/4/96	PLSPL105	
11	10.3	5/5/96- 23/2/97	PLSPL115	
12			PLSPL125	

La elección del periodo para calibrar el modelo es de vital importancia. El final del RUN 8 está distorsionado por una velocidad de desactivación alta, que se produjo al envenenarse el primer reactor por cobre. Esta situación se mantiene en el RUN 9 y, por lo tanto, no es representativo de lo que acontece en el RUN 10 y sucesivos en el caso de que se altere el orden de los lechos catalíticos. La diferencia de comportamiento en los distintos periodos se manifiesta en el error existente entre las predicciones del modelo y los valores reales.

Dentro de un mismo RUN, los reactores van acumulando deposiciones de carbón, que obliga a aumentar paulatinamente la temperatura de trabajo. Es posible abordar este problema de dos maneras: a) estableciendo una variable adicional (por ejemplo, m<sup>3</sup> de carga / kg de catalizador), que tendría en cuenta el efecto de envenenamiento por coke; b) manteniendo el catalizador inalterado en cada periodo, de modo que es la variación de cada muestra con respecto a la anterior la que suministra información sobre el comportamiento de la Unidad (método en incrementos). En este último caso, como el cálculo se hace en términos de desviación, el calibrado se *adapta* a las condiciones de la Unidad (véase Tabla 79).

---

<sup>80</sup> m<sup>3</sup>/kg, metros cúbicos de alimentación por cada Kg de catalizador.

---

*Tabla 79 . Predicción del número de Octano. Efecto del error de predicción frente al método de calibrado cuando se utilizan todas las variables. Datos: RUN10FUL, Modelo: Mplatf.*

INCREMENTOS	COMPONENTES	RMSEP	SEP	RMSEP/SY
No	5	0.7115	0.572	0.89
Si	5	0.5159	0.416	0.62
Si, Media 3 valores	5	0.5654	0.477	0.85
Si	4	0.4133	0.4132	0.62
Si	3	0.4201	0.4201	0.63
Si	2	0.454	0.454	0.68

RMSEP representa la varianza prevista del error de predicción y SY es la correspondiente a los datos de calibración. Por consiguiente, el cociente RMSEP/SY es una medida de la fracción de varianza que el modelo no puede predecir(en términos de varianza de validación). En este sentido, en el modelo sin incrementos prácticamente sólo se puede explicar el 10% de la varianza, siendo el resto dependiente del tiempo y de los errores de instrumentación y laboratorio. Por el contrario, el modelo de incrementos, cuando se toma la diferencia entre el valor anterior y el actual, es superior al que se obtiene con la media móvil de tres valores anteriores. La varianza que no puede ser explicada en el mejor de los casos es ligeramente superior a la mitad.

Las últimas tres filas de la Tabla 79 indican que el número óptimo de componentes se encuentra entre tres y cuatro. Una vez identificado el número óptimo de componentes y el método de tratamiento de los datos, se procede a reducir el número de variables siguiendo dos criterios: a) eliminando variables cuya participación en el modelo sea superior a 5% (en realidad este número debe representar el mínimo de RMSEP/SY); b) eliminando variables con un criterio de proximidad de 2º (también se ha de buscar el mínimo de RMSEP/SY). La experiencia revela que en los modelos de tres a seis componentes un 5% de participación coincide con el mínimo de RMSEP/SY; lo mismo ocurre cuando el ángulo de proximidad se sitúa entre dos y cinco grados (Tabla 80).

Tabla 80 . Efecto del criterio de participación y proximidad para la reducción de la dimensión del modelo, Datos: RUN10FUL, Modelo: Mplatf.

INCREMENTOS	COMPONENTES	RMSEP/SY	PARTIC.	REDUND.
SI	4	0.61	>1%	No
SI	4	0.59	>1.5%	No
SI	4	0.60	>2%	No
SI	4	0.58	>3%	No
SI	4	0.56	>5%	No
SI	3	0.55	>5%	No
SI	3	0.55	5%	>2°

La Tabla 81 y la Tabla 82 muestran los criterios que se han empleado y los resultados obtenidos en la predicción del número de octano.

Tabla 81 . Criterios utilizados, Modelo: mplatf Datos: RUN10FUL

PARÁMETRO	CRITERIO SEGUIDO
Periodo	17- 4-95: 4:59:60
Al	18- 4-96: 4:59:60
34806	35174
Muestras	310
Variables	Sin transformar
Reducción	Dist. B 2 grados, 3comp.
Componentes	3
Validación	5 grupos, 20%
Incrementos	Si

*Tabla 82 . Resultados obtenidos, Modelo: mplatf Datos: RUN10FUL  
 V. dep.:U0110222 Part. %: 73.05 Desv.Std: 0.7873 E.Std: 0.3879  
 V.Calibración: 0.4080 V.Predicción: 0.4336 BIAS: 0.0017 SEP: 0.4297  
 Media: 0.0133 O.O.: -0.0173*

VARIABLES	MEDIA	COEF.STD.	COEF.MOD ELO	DESV.STD	ERR.STD.	IMP.
C2F0106	0.0	0.1414	0.0141	7.2386	3.9995	7.3717
C2A0114	0.0	0.1692	0.00932	13.5024	5.0995	8.8193
PLT0742	-0.1	0.1980	0.0476	3.2981	2.4104	10.3228
PLU0730	0.1	0.2891	0.161	1.4561	1.0372	15.0702
PLU0736	0.1	0.3428	0.191	1.4355	0.9718	17.8680
PLF0101	0.0	-0.3639	-0.166	1.7148	0.5821	18.9692
PLU0713	0.0	0.4139	0.0805	3.5458	2.1124	21.5789

Según el orden de participación en el modelo, se ha seleccionado automáticamente las siguientes variables: la temperatura de fondo del stripper de Unifining (**PLU713**); la carga a la Unidad por el paso número uno (**PLF101**); la temperatura de entrada al tercer (**PLU736**) y segundo reactor (**PLU730**); la temperatura de salida del Reboiler de la estabilizadora (**PLT742**); la densidad de carga de crudo a la Unidad CADU-2 (**C2A114**); y, por último, el caudal de nafta pesada (**C2F106**). Las cinco primeras variables aportan al modelo más del 80% y las dos últimas menos del 20% restante.

### Interpretación del modelo

Las variables elegidas se pueden asociar a dos grupos de factores:

#### **Condiciones Operativas**

**PLF101**, Caudal de carga al paso número 1. La carga a la Unidad se divide por igual a los pasos uno y dos. Por lo tanto, se detecta que **PLF101** y **PLF102** son redundantes, y se opta por uno de ellos. La carga a la Unidad afecta a la extensión de la reacción vía tiempo de residencia. Se

puede sustituir en el modelo por la suma **PLF101** + **PLF102** y dividir el coeficiente del modelo entre dos.

**PLU730**, temperatura de entrada al segundo reactor y **PLU736**, temperatura entrada tercer reactor. Si en algún momento las temperaturas de entrada a los reactores no están igualadas, es posible que el programa de identificación encuentre un efecto diferente entre cada una de ellas y el número de octano. En efecto, teniendo en cuenta la velocidad de reacción y el volumen del catalizador<sup>81</sup>, el número de octano se ve afectado de manera distinta por cada una de las reacciones. De hecho, la deshidrogenación de naftenos no aporta tanto al número de octano como lo hacen las reacciones de isomerización e hidrocracking (véase Fig. 154 y Little, 1985). En este modelo, el efecto del tercer reactor es ligeramente superior al primer reactor (las reacciones de hidrocracking aportan más al número de octano que la isomerización de parafinas). El efecto combinado de la subida de temperatura a los tres reactores representa 0.352RON/°C, es decir, un valor muy similar al obtenido en la Tabla 76.

---

<sup>81</sup> En el primer reactor ocurren reacciones de deshidrogenación de Naftenos (muy rápidas) mientras que en el segundo tienen lugar reacciones de isomerización de parafinas, y, por último, en el tercer reactor ocurren principalmente reacciones de hidrocracking.

---

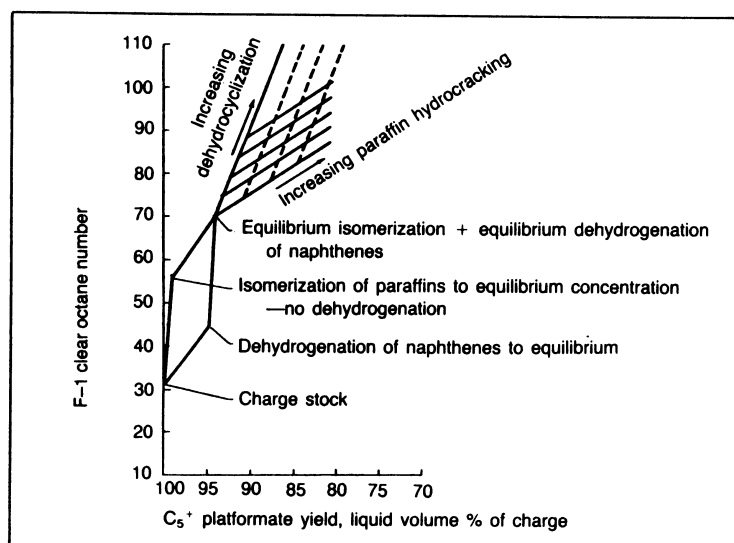


Fig. 2-1 Theoretical yield-octane study, Midcontinent-type stock (courtesy UOP Process Div., after Haensel and Belden, ref. 8)

Fig. 154. Efecto de las distintas reacciones que ocurren en Platforming sobre el número de octano de la Nafta.

**PLT742**, temperatura de salida del Horno Reboiler PH-4. El número de octano se analiza en la platformada, que es el producto de fondo de la estabilizadora. El principio de destilación de la platformada contiene pentanos, y éstos tienen un número de octano inferior al que poseen los aromáticos de temperatura de ebullición superior. El principio de destilación está relacionado con la temperatura de burbuja de la corriente. Por lo tanto, la temperatura de fondo de la torre o, en su defecto, la temperatura de salida del Horno Reboiler representa una indicación de la existencia de mayor o menor cantidad de pentanos.

**Calidad de la Carga.** A este grupo pertenecen las variables:

**PLU0713**, temperatura fondo del stripper de Unifining. El número de octano se ve afectado por el principio de destilación de la Nafta que se envía al platforming. En las condiciones de fondo del stripper, la nafta se encuentra en su punto de burbuja; por lo tanto, esta temperatura es indicación indirecta del principio de destilación (corregido por el efecto

de la presión de operación de la torre, que no aparece en el modelo debido a que es constante).

**C2A114**, *densidad de la Carga al CADU-2*. Como se puede encontrar profusamente en la bibliografía, las reacciones de reformado catalítico dependen de la fracción nafténica y aromática en la carga a la Unidad. En ésta no pueden existir compuestos olefínicos (ya que se saturan en la sección de Unifining), de modo que el volumen de parafinas totales es una indicación del conjunto Naftenos + Aromáticos presentes en la carga.

El valor *K de Watson* es una medida de la parafinicidad de un hidrocarburo. Se calcula a partir de la densidad y del punto medio de destilación. Por lo tanto, la densidad de la carga al platforming y la destilación es una medida de la calidad de la carga a la Unidad. Se ha detectado que la densidad de la carga a la Unidad de Crudo se correlaciona con el número de octano. Se asume en este modelo, en definitiva, que la densidad de carga a la Unidad de Crudo covaría con la densidad de carga a la Unidad de Reformado Catalítico.

**C2F0106**, *caudal de Nafta pesada*. La carga a la Unidad de Reformado Catalítico se compone de: a) nafta pesada (**C2F106**); b) nafta ligera procedente de la Despentanizadora (**PLF194**); c) nafta de cracking producida en el Visbreaker (**PLF003**); y d) cantidades no conocidas de Nafta ligera del tanque de nafta pesada, que actúa como pulmón.

El caudal de nafta pesada es el más importante y estable, mientras que el resto son pequeños y/o constantes<sup>82</sup>, y toda vez que se conoce el caudal total de la Unidad, que viene dado por el **PLF101** (ya incluido en el modelo), el programa identifica la participación de la nafta pesada en la carga a la Unidad o, lo que es lo mismo, la fracción pesada de la carga al Platforming. Esta fracción incide de forma positiva sobre el número de octano, como refleja su coeficiente.

No obstante, la fracción de varianza que no es posible predecir es todavía alta (aproximadamente, 55%), y, por consiguiente, existen factores

---

<sup>82</sup> El caudal de nafta del Visbreaker es prácticamente constante y pequeño, el caudal de nafta ligera de la Despenta se regula para mantener la temperatura y presión en el botellón de carga V-18.

---

no identificados que afectan a la medida del número de octano y que proceden de la propia incertidumbre de las medidas, entre otras causas. Es necesario recordar que la desviación estándar original del número de octano es bastante baja, ya que es un parámetro de control de la Unidad y que el valor deseado se mantiene dentro de estrechos límites.

Para mejorar la capacidad de predicción del modelo se procedió a analizar los efectos de la interacción entre las variables ya seleccionadas en el modelo anterior. Se consideraron los efectos de interacción hasta el número de tres variables y, posteriormente, se redujo este número utilizando los criterios de 5% de participación y 2º de separación en el espacio de componentes. Los resultados obtenidos se aprecian en la Tabla 83 y Tabla 84.

*Tabla 83 . Criterios utilizados, Modelo: mplatf01 Datos: RUN10FUL*

PARÁMETRO	CRITERIO SEGUIDO
Periodo	17- 4-95: 4:59:60
Al	18- 4-96: 4:59:60
34806	35174
Muestras	310
Variables	Fact., 3 niveles,7,7
Reducción	Dist. B 2 grados, 3comp.
Componentes	3
Validación	5 grupos, 20%
Incrementos	Si



Tabla 84 . Resultados obtenidos, Modelo: mplatf01 Datos: RUN10FUL  
 V. dep.:U0110222 Part. %: 72.79 Desv.Std: 0.7873 E.Std: 0.3886  
 V.Calibración: 0.4100 V.Predicción: 0.4356 BIAS: 0.0020  
 SEP: 0.4315, Media: 0.0133 O.O.: -0.0192

VARIABLES	MEDIA	COEF.STD.	COEF.MODEL O	DESV.STD	ERR.STD.	IMP.
PLU0730 .*PLU0713 .*C2A0114	5231.8	0.1580	6.3e-008	1718464.4407	1016599.2598	10.2294
PLU0730 .*PLU0736 .*PLT0742	10557.6	0.1768	1.53e-007	913491.1419	543587.7779	11.4417
PLU0730 .*PLU0713	8.2	0.1804	0.0000693	1778.4668	447.0624	11.6750
PLU0730 .*PLU0736 .*PLU0713	14879.8	0.2085	1.55e-007	915929.7661	232988.7157	13.4989
PLU0736 .*PLU0736	105.2	0.2401	0.000132	1437.4314	277.1867	15.5413
PLU0730 .*PLU0736	107.4	0.2439	0.000138	1406.0423	278.1522	15.7863
PLF0101	0.0	-0.3372	-0.154	1.7148	0.2917	21.8274

El cociente RMSEP/SY (0.55) y el porcentaje de explicación DIFY (72.8%) no permiten sostener que este modelo predice mejor que el anterior. Atendiendo entonces a la variación de los datos de la muestra utilizada, se puede concluir que para calcular el número de octano no es necesario utilizar efectos de interacción entre las variables.

Como la predicción es, en cualquier caso, el principal objetivo de la construcción de estos modelos, en la Fig. 155, Fig. 156 y Fig. 157 se presenta el resultado del modelo con los datos del RUN 10, y en las sucesivas figuras los valores obtenidos en la predicción del RUN 11 y RUN 12 hasta la fecha de adquisición de estos datos.

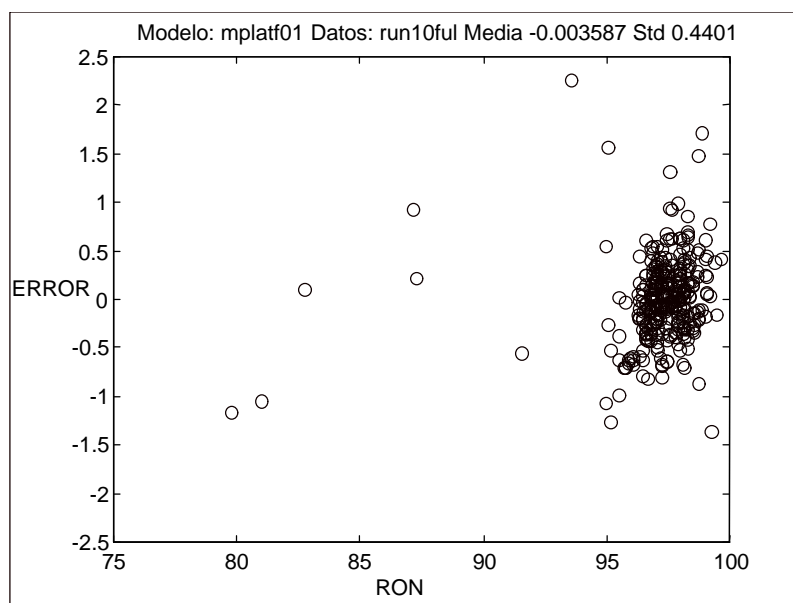


Fig. 155 . Error de predicción frente al número de octano. RUN 10.

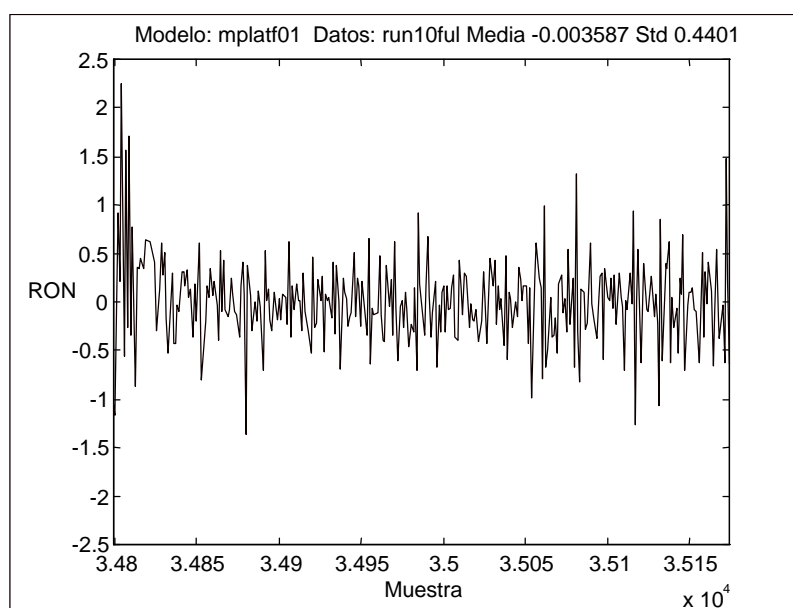


Fig. 156 . Error de predicción frente al tiempo. RUN 10.

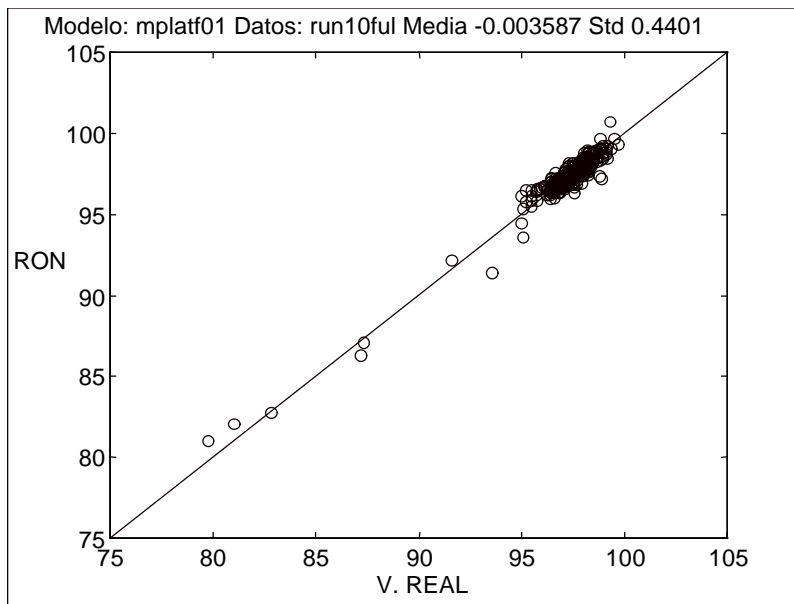


Fig. 157. Valor previsto frente al Real, número de octano. RUN 10.

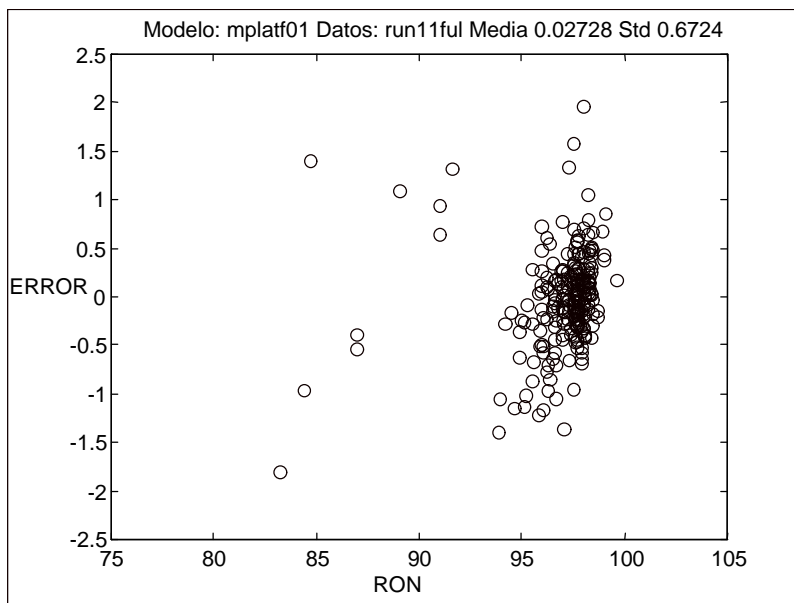


Fig. 158. Error de predicción frente al número de octano. RUN 11.

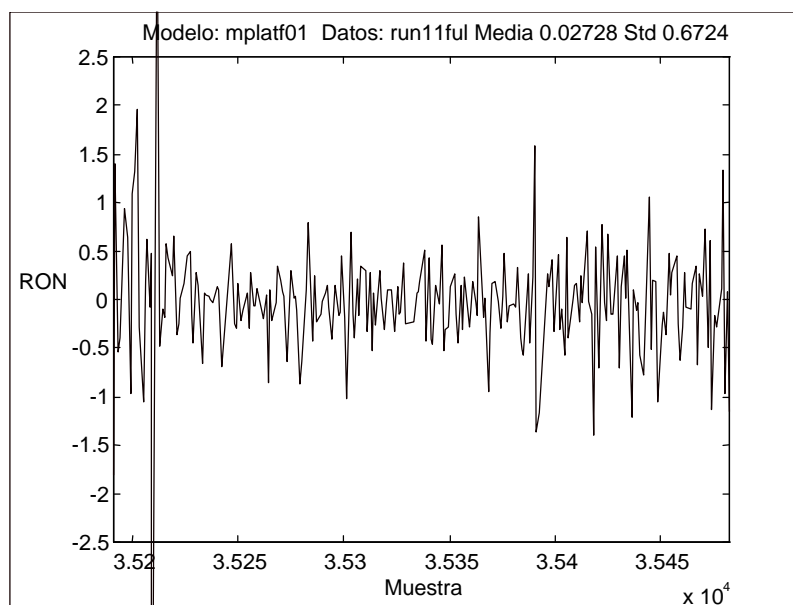


Fig. 159. Error de predicción frente al tiempo. RUN 11.

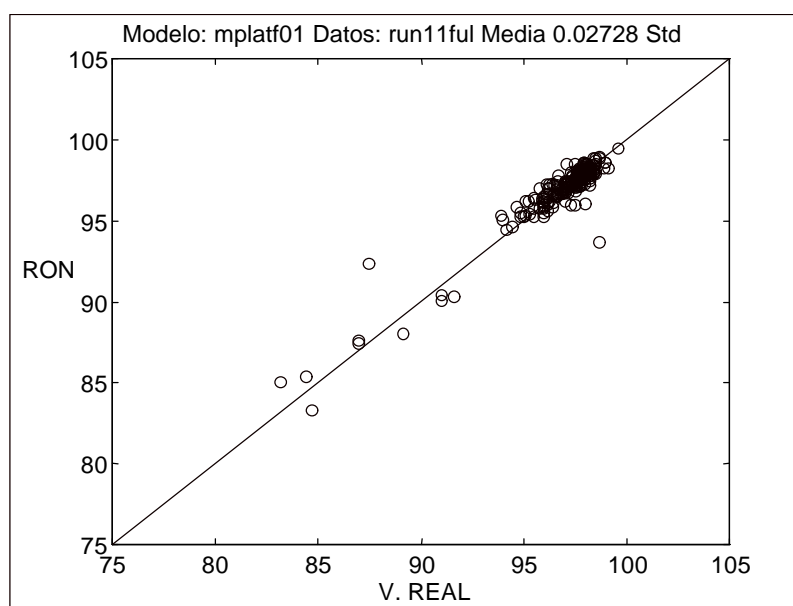


Fig. 160. Valor previsto frente al Real, número de octano. RUN 11.

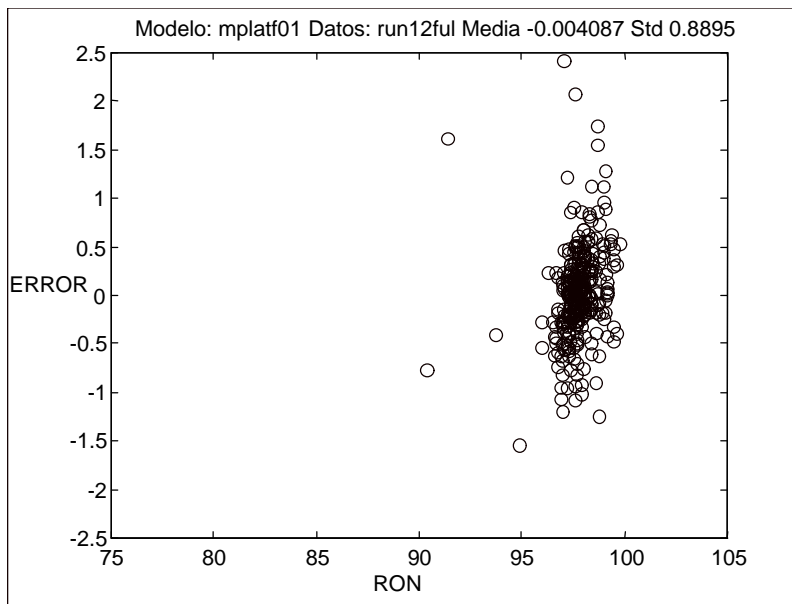


Fig. 161 . Error de predicción frente al número de octano. RUN 12.

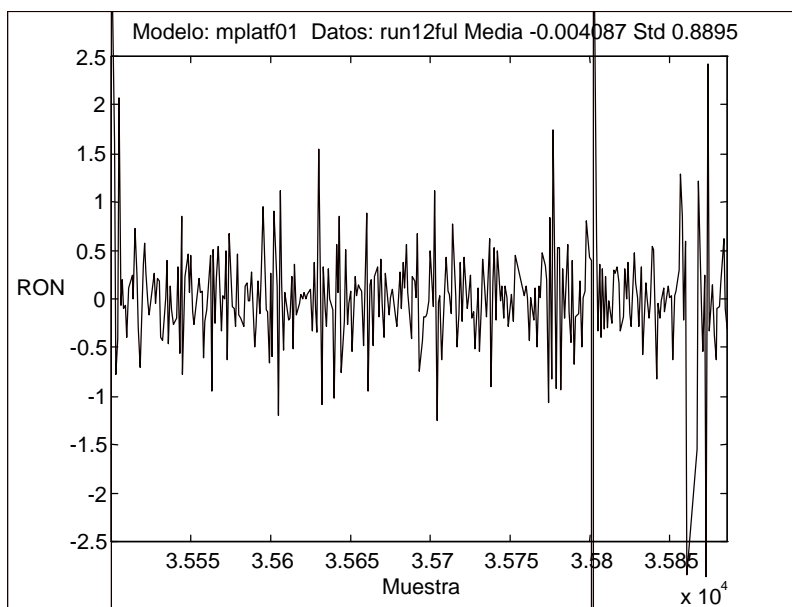


Fig. 162 . Error de predicción frente al tiempo. RUN 12.

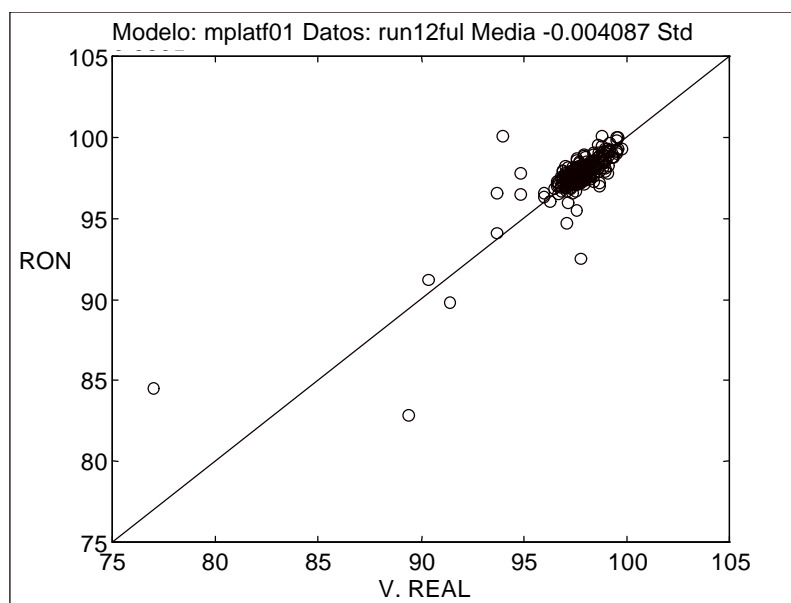


Fig. 163. Valor previsto frente al Real, número de octano. RUN 12.

Durante el tiempo de observación (tres años), se aprecia que el error estándar del modelo ha aumentado ligeramente. Este efecto puede ser debido a varios factores:

1.- *Distinta sensibilidad de las variables identificadas.* El catalizador de reforming, después de cada regeneración, no recupera el 100% de su actividad inicial; al contrario, sufre una reducción en su área específica y en su capacidad para obtener una buena dispersión de los metales. Este efecto puede hacer que no sea constante la sensibilidad del número de octano frente a las mismas variables.

2.- *Condiciones de operación.* La bibliografía identifica otras variables que inciden en las reacciones de reformado y que no fueron identificadas en el calibrado del RUN 10, debido probablemente a que no variaban lo suficiente. En los RUN 11 y 12 la media de estas variables puede ser distinta, provocando un desplazamiento en el comportamiento del modelo. Entre ellas se puede identificar la presión del separador y la relación hidrógeno hidrocarburo.

3.- *Incertidumbre en las medidas.* Las variables que intervienen en el modelo proceden de instrumentación automática, cuya precisión ya ha

sido comentada en el apartado de instrumentación del capítulo de técnica experimental. Con respecto a la medida de laboratorio del número de octano, la repetitividad del método, según la norma ASTM D2699-95a, es 0.2 al 95%, mientras que la reproducibilidad es 0.7 al 95%.

En todo caso, la predicción del número de octano es difícil, pues se ve afectada por diversos factores, no sólo desde el punto de vista de las condiciones operativas, calidad de la carga, comportamiento del catalizador, método de ensayo e incertidumbre de las medidas, sino también porque la variación del número de octano en estos datos es muy reducido, lo que impide que se manifiesten no linealidades y la desviación estándar del error de predicción sea importante.

Si se mantiene el error del modelo, es posible que una aplicación de control, funcionando óptimamente, consiga reducir la desviación estándar del número de octano de la platformada en más de un 40%.

### ***Predicción de rendimientos para diseño de modelo riguroso***

La construcción de un modelo riguroso en línea requiere contar con un método de cálculo que represente las condiciones de entrada y salida de los reactores. Es posible construir este método a partir de los datos de interacción definidos en la Tabla 76, de las gráficas del fabricante de catalizador o bien a través de información genérica extraída de la bibliografía. En todos estos casos, el modelo tendría un carácter general debido a que estimaría como se comporta la Unidad desde el punto de vista de un catalizador de reforming en una situación ideal (por ejemplo, a comienzos de su primer ciclo).

Posiblemente, el modelo generado a partir de la Tabla 76 es una mejor opción que el construido a partir de la utilización de datos bibliográficos por constituir el comportamiento previsto del fabricante para el catalizador instalado en la Unidad. No obstante, el catalizador que posee actualmente la Unidad está en su 12º ciclo, el segundo reactor parcialmente envenenado y el tercer reactor con menos del 50% del área específica con respecto al catalizador nuevo. Por lo tanto, el comportamiento teórico esperado con un modelo genérico puede diferir del que manifiesta la Unidad en cada ciclo.

---

Las predicciones del fabricante del catalizador se refieren siempre a rendimientos esperados a la salida de los reactores y no incluyen el efecto de la configuración del resto de la Unidad (separadores, torre de fraccionamiento, etc.). El modelo necesita las características de calidad de la carga, que normalmente no está disponible para el cálculo en línea (N, A, Destilación, etc.). Los ensayos de calidad de la carga se realizan de forma rutinaria dos veces por semana (martes y viernes, a las 5 de la mañana). Consisten en la caracterización de la carga a la Unidad (P, N, A, Destilación D86, cromatografía, densidad, metales, etc.), cromatografía de cada corriente que sale de la Unidad (Gas del Separador V-8, botellón de expansión V-9, gas de la cabeza estabilizadora, LPG producido y Nafta Reformada). Esta última corriente se somete a la destilación D86 y la información obtenida, junto con la instrumentación de la Unidad, se ha utilizado para relacionar los parámetros de calidad de la carga con la producción de cada especie en la Unidad.

El tratamiento de estos datos tiene un doble objetivo. Primero, permite la confección de un modelo empírico a partir de los parámetros de calidad de carga determinados por laboratorio (N, A, destilación, etc.). Y, segundo, facilita la utilización de las medidas de instrumentación disponibles, tanto en la propia Unidad de Reformado como en las Unidades precedentes, para el cálculo de los rendimientos esperados de cada componente.

El primer paso trata los datos para luego ajustar el balance de materia global (utilizando densidades, cromatografías y caudales corregidos de cada extracción) y calcular los componentes a la salida de los reactores. Toda esta información se ha procesado para los RUN 10, 11 y 12. El siguiente paso construye los modelos de predicción, y en este proceso es preferible utilizar los incrementos en vez del valor absoluto de las variables.

---



Tabla 85 . Variables utilizadas para la predicción de rendimientos y octano platformada.

VARIABLE	UNIDADES	DESCRIPCIÓN
BBL	bbbl/kg cat.	Barriles de carga por kilogramo de catalizador
PSEP	Kg/cm <sup>2</sup>	Presión Separador
PREACT	Kg/cm <sup>2</sup>	Presión media Reactores
N	%vol	%Vol Naftenos en carga
A	%vol	%vol de Aromáticos en carga
WAIT	°C	Temperatura media ponderada entrada reactores
HHC	molH/molHC	Relación H/HC
LHSV	h <sup>-1</sup>	Velocidad espacial
GREC	Knm <sup>3</sup> /h	Caudal gas Reciclo
DNAFTA	Kg/m <sup>3</sup>	Densidad Nafta
IBP	°C	Principio destilación D86
D8610	°C	10% destilación D86
D8650	°C	50% destilación D86
D8690	°C	90% destilación D86
FBP	°C	Final destilación D86
TER1	°C	Temperatura entrada RX1
TER2	°C	Temperatura entrada RX2
TER3	°C	Temperatura entrada RX3
API		Densidad API
KWATSON		Factor K Watson

Las variables que se pretenden predecir se encuentran en la Tabla 86. El análisis del cociente RMSEP/SY muestra que, en el cálculo de los incrementos de temperatura en reactores, la reducción en la varianza original de los datos disminuye más de cuatro veces. Sin embargo, no sucede lo mismo en el resto de las variables; la varianza de predicción es, en muchos casos, peor que la de los datos originales.

Tabla 86 . Predicción de rendimientos y número de octano. RUN 10, tomando incrementos y 6 componentes. Modelo: Mdes01, Datos: DESRUN10.

VARIABLE	UNIDADES	DESCRIPCION	RMSEP/SY
INCR1	°C	Incremento Temperatura RX1	0.34
INCR2	°C	Incremento Temperatura RX2	0.46
INCR3	°C	Incremento Temperatura RX3	0.60
DPLATF	Kg/m <sup>3</sup>	Densidad Platformada	0.65
RON		Número de octano platformada	0.69
RONC5		Número de octano C5+	0.68
RONC6		Número de octano C6+	0.74
C5TOTAL	% peso	Rendimiento C5+	0.84
C3C4TOTAL	% peso	Rendimiento C3+C4	0.89
RIQH2	%vol	Riqueza H2, gas reciclo	0.73
H2	% peso	Rendimiento H <sub>2</sub>	0.85
C1	% peso	Rendimiento C1	1.18
C2	% peso	Rendimiento C2	1.20
C3	% peso	Rendimiento C3	1.10
IC4	% peso	Rendimiento iC4	1.05
NC4	% peso	Rendimiento nC4	1.15
IC5	% peso	Rendimiento iC5	1.01
NC5	% peso	Rendimiento nC5	0.97
C6	% peso	Rendimiento C6+	0.68

Se han identificado las siguientes hipótesis para explicar por qué la predicción de rendimientos no es adecuada:

1.- No existen variables X con capacidad de predicción sobre los rendimientos y número de octano. La bibliografía identifica claramente a las variables X como las responsables de los rendimientos de la Unidad.

2.- Los datos que se han utilizado no representan con exactitud el comportamiento de la Unidad. En el cálculo de los rendimientos se han utilizado los caudales reconciliados y las cromatografías de laboratorio de

todas las extracciones. Laboratorio informa del contenido en Hidrogeno, deducido de la diferencia de la cromatografía con la densidad Shilling<sup>83</sup>. Igualmente, el valor de cada rendimiento de H<sub>2</sub> a C5 es pequeño en relación con el rendimiento en C6+. Concretamente, el rendimiento medio de H<sub>2</sub> representa por término medio 1.5 - 1.6%p, mientras que el error de instrumentación medio (calculado por reconciliación) está ya por encima de ese valor.

En cualquiera de las circunstancias anteriores, no es posible encontrar modelos para la predicción de rendimientos en Platforming con los datos disponibles. De ahí la necesidad de encontrar otro método para construir el modelo de rendimientos de la simulación.

No obstante, si se tienen en cuenta que la Unidad de Reformado no opera solamente con los reactores; que la sección de fraccionamiento constituye una parte de la Unidad y es la responsable de la separación de los productos formados; que el primer objetivo anteriormente esbozado era construir un modelo capaz de reproducir los resultados reales de la Unidad a partir de los parámetros de calidad de carga, entonces cabe plantear la elaboración de un modelo utilizando toda la instrumentación disponible en la Unidad. Operando de este modo y omitiendo las cromatografías procedentes de laboratorio, se podría predecir las cantidades esperadas de gas, LPG y Platformda, así como los incrementos de temperatura en los reactores. La Tabla 87 recoge las variables observadas.

---

<sup>83</sup> " Shilling", peso específico del gas.

---

Tabla 87 . Variables utilizadas para la predicción de incremento de temperatura reactores y producción de gas en separadores (\*) y para predicción de rendimientos LPG y Platformada. Datos: RUN10FUL.

VARIABLE	UNIDADES	DESCRIPCION
CARGA/88	h <sup>-1</sup>	Velocidad Espacial
GASREC	Knm <sup>3</sup> /h	Gas de Reciclo
U0105R05	kg/m <sup>3</sup>	Densidad Carga
U0105D00	°C	Principio Destilación D86
U0105D10	°C	10% Destilación D86
U0105D50	°C	50% Destilación D86
U0105D90	°C	90% Destilación D86
U0105DF0	°C	Final Destilación D86
M105PARA	%vol	%vol parafinas carga
U0105GP9	%vol	%vol
U0105GPJ	%vol	%vol
PLU0724	°C	Entrada RX1
PLU0730	°C	Entrada RX2
PLU0736	°C	Entrada RX3
PLP0110	kg/cm <sup>2</sup>	Presión Separador (Manométrica)
PLU0804	°C	Temperatura V-8
PLA0102	psi	PVR Platformada
PLP0104	kg/cm <sup>2</sup>	Presión impulsión CP-1 (Manométrica)
PLP0150	Kg/cm <sup>2</sup>	Presión estabilizadora (Manométrica)
PLU0739	°C	Temperatura Fondo Estabilizadora
PLU0738	°C	Temperatura cabeza estabilizadora
PLU0758	°C	Temperatura Reflujo Estabilizadora
PLF0147	m <sup>3</sup> /h	Caudal Reflujo Estabilizadora

Tabla 88 . Predicción de rendimientos y número de octano C6+. RUN 10, tomando genericamente incrementos y 6 componentes. Modelo: Mdes01, Datos: DESRUN10.

VARIABLE	UNIDADES	DESCRIPCION	RMSEP/SY
U0110222		Número de octano	0.49
PLA0001	R.A.	Densidad Gas Reciclo	0.38
PLJF2724	°C	Incremento Temperatura RX1	0.33
PLJF2730	°C	Incremento Temperatura RX2	0.46
PLJF2736	°C	Incremento Temperatura RX3	0.59
PLATF	m <sup>3</sup> /h	Caudal Platformada	0.25
LPG	m <sup>3</sup> /h	Caudal LPG	0.45
GU+GASSEP	nm <sup>3</sup> /h	Caudal Gas Separador V8	0.42
GASEST	nm <sup>3</sup> /h	Caudal Gas Estabilizadora	0.52
GASEXP	nm <sup>3</sup> /h	Caudal Gas Botellón Exp.	
U0110R05	kg/cm <sup>3</sup>	Densidad Platformada	
PLH0221	rpm	Revoluciones CP-1	
PLF0180	t/h	Consumo vapor Turbina CP-1	

Los resultados obtenidos corroboran la hipótesis de que probablemente el balance de componentes realizado utilizando las cromatografías tiene mayor error que las variaciones reales de rendimientos en cada componente.

Una vez obtenida la producción de LPG, Platformada y gases en función de la calidad de la carga y de las condiciones operativas, mediante un simulador riguroso de proceso se puede «sintetizar» la corriente de salida de reactores variando cada componente y observando como se reflejan las producciones de LPG, gases y Platformada cuando aquella corriente se introduce en los separadores y en la fraccionadora.

El problema surge cuando se analiza el tipo de datos que utiliza la regresión. En la Tabla 87 se puede observar que las variables elegidas por

---

el método de ajuste PLS se refieren a condiciones de burbuja del botellón de reflujo y del fondo de la torre (temperaturas de reflujo y fondo). También se utiliza la presión de vapor Reid de la Platformada (PLA102), además del caudal de reflujo y presiones. Desde el punto de vista de la simulación sólo se han identificado los componentes H<sub>2</sub>, C1, C2, C3, IC4, NC4, IC5, NC5 y C6+. Se tienen por lo tanto nueve grados de libertad. Sin embargo, el número de especificaciones es mayor, pues habría que considerar los caudales calculados a partir de los modelos, temperaturas y presiones y PVR de la platformada como condiciones de operación actuales; en total, cinco caudales y nueve condiciones operativas). Para encontrar una distribución de componentes que sea capaz de cumplir las condiciones operativas sería necesario emplear un método de optimización que reduzca el error entre especificaciones y variables.

Las especificaciones están fuertemente correlacionadas entre sí; por ejemplo, la presión de vapor Reid de la Platformada depende fuertemente de su temperatura de burbuja. La incertidumbre de las medidas tampoco es igual en todos los casos; por ejemplo, el caudal de gas del botellón de expansión deja de marcar (cae a cero) cuando la producción de gas es muy pequeña (baja presión en Separador V-8).

Por otro lado, si bien se pueden conocer *a priori* en el modelo las condiciones de la alimentación (densidad, destilación y PNA), no sucede así con las especificaciones anteriores, que no dependen de las condiciones operativas que se pueden fijar en la Unidad, sino que varían precisamente con la distribución de los componentes y el tipo de carga. De hecho, en la fraccionadora las variables que se pueden fijar son: la presión de la cabeza de la torre (que no ha de ser necesariamente la misma que la presión de burbuja en el botellón de reflujo, dada la pérdida de carga de los condensadores) y la temperatura de salida del Horno Reboiler PH-4 (cuyo valor no necesariamente obliga a la presión de vapor de fondo de la torre), entre otras condiciones.

En definitiva, no se conoce *a priori* el valor que, para cada tipo de carga, debe tener el resto de las variables que los modelos identifican para predecir los rendimientos y número de octano. Por lo tanto, aún en el caso de que se consiga un juego de valores H<sub>2</sub> a C6+ que haga que el error de las especificaciones sea mínimo, no se garantiza que la distribución de

---

componentes sea cierta cuando una carga de esas características entra en la Unidad.

Los argumentos expuestos sugieren sin la menor duda que no es posible construir un modelo riguroso no en línea mediante las correlaciones anteriores. Ahora bien, estos mismos argumentos sugieren también la posibilidad de que pueda utilizarse la misma metodología para crear un modelo riguroso en línea para la planta.

En este caso, las variables que se utilizan para predecir el comportamiento de la salida de los reactores han de ser necesariamente las condiciones operativas (separadores y fraccionadora), combinadas con un método de optimización que reduzca la desviación de esas especificaciones cuando se varía el caudal de los componentes H<sub>2</sub> a C6+. De esta forma, operando con las condiciones de proceso, las relaciones interiores entre las variables vienen definidas por el propio comportamiento de la Unidad.

A partir de las condiciones de proceso actuales (condiciones en Separadores y fraccionadora, y caudales de productos), se ha realizado un modelo riguroso utilizando el programa de simulación de procesos PRO-II para predecir la distribución de los componentes a la salida los reactores que haga mínima la función objetivo siguiente:

$$OBJ = \sum_{i=1}^n \left( \frac{c_i}{c_i} (x_i - x_i') \right)^2 \quad [ 111]$$

donde  $c_i$  es un coeficiente que se emplea para ajustar el peso que esa variable tiene dentro de la función objetivo;  $c_i'$  se utiliza para normalizar la variación esperada de cada variable;  $i$  es el subíndice que se refiere a cada especificación;  $x_i$  es el valor de la especificación calculada por el programa; y  $x_i'$  es el valor inicial de la especificación. Ajustando el valor que toma  $C_i$  se puede penalizar a una determinada especificación en favor de otra.

La Tabla 89 muestra las variables utilizadas por el modelo para ajustar aquella distribución de componentes a la salida de los reactores que haga mínima la función de error entre especificaciones y resultados de

simulación, además de las que se necesitan para predecir el comportamiento del número de octano de la platformada.

Esta simulación calcula la distribución de componentes a la salida de los reactores y la composición prevista de cada corriente. Una vez conocida la composición de la Platformada y sabiendo además que el número de octano se puede considerar aditivo en volumen, es posible calcular el número de octano C6+.

*Tabla 89 . Variables utilizadas para el ajuste de la composición de salida de reactores a partir de las condiciones operativas y los caudales de productos, y para la predicción del número de octano de la Platformada. Datos: RUN10FUL.*

VARIABLE	UNIDADES	DESCRIPCION
PLP0122	kg/cm <sup>2</sup>	Presión Botellón expansión (manometrica)
PLP0110	kg/cm <sup>2</sup>	Presión Separador (manometrica)
PLU0804	°C	Temperatura V-8
PLA0102	psi	PVR Platformada
PLP0104	kg/cm <sup>2</sup>	Presión impulsión CP-1 (manometrica)
PLP0150	kg/cm <sup>2</sup>	Presión estabilizadora (manometrica)
PLU0739	°C	Temperatura Fondo Estabilizadora
PLU0738	°C	Temperatura cabeza estabilizadora
PLU0758	°C	Temperatura Reflujo Estabilizadora
PLF0147	m <sup>3</sup> /h	Caudal Reflujo Estabilizadora
PLATF	m <sup>3</sup> /h	Caudal Platformada
LPG	m <sup>3</sup> /h	Caudal LPG
GU+GASSEP	nm <sup>3</sup> /h	Caudal Gas Separador V8
GASEST	nm <sup>3</sup> /h	Caudal Gas Estabilizadora
GASEXP	nm <sup>3</sup> /h	Caudal Gas Botellón Exp.



U0110222		Número de octano
PLA0001	R.A. <sup>84</sup>	Densidad Gas Reciclo
GASREC	Knm <sup>3</sup> /h	Gas de Reciclo
PL U 0730	°C	ENTRADA REACTOR N-2
PL U 0736	°C	ENTRADA REACTOR N-3
PL T 0742	°C	SLDA COMBIN REBOILER
PL F 0101	m <sup>3</sup> /h	CRGA PLATFORM PASO-1
C2 F 0106	m <sup>3</sup> /h	NAFTA A TANQUE
PL U 0713	°C	FONDO STRIPPER
C2 A 0114	g/l	DENSIDAD CRUDO CORRE

Estos resultados, unidos a la composición de la carga en los días en que se ha ajustado la cromatografía de salida de los reactores, generan los datos necesarios para calibrar con PLS, y los modelos obtenidos permiten observar si existe correlación PLS entre N, A, destilación y densidad y los rendimientos obtenidos en cada componente. En segundo lugar, los rendimientos de salida de los reactores y el número de octano C6+ constituyen la infraestructura de un modelo en línea para optimizar la Unidad. Este trabajo plantea estas dos líneas de investigación y, con respecto a la segunda, desarrolla un modelo riguroso de toda la Unidad para el seguimiento del calor absorbido en los Hornos, consumo compresor de reciclo, eficacia de la separación en la fraccionadora, etc.

Para el ajuste inicial del modelo se ha utilizado las condiciones medias de RUN de la Unidad. Está previsto, aunque no ha sido necesario, utilizar unos coeficientes de ajuste iniciales para compensar las diferencias entre las predicciones del modelo en el punto de calibración y los rendimientos reales de la Unidad. Estos coeficientes quedarían fijos hasta un nuevo calibrado del modelo de simulación.

En la Tabla 90 y Fig. 164 se muestran algunos de los resultados obtenidos y la evolución del error en el número de octano cuando se calcula de forma absoluta.

---

<sup>84</sup> R.A. Relativa al Aire.

---

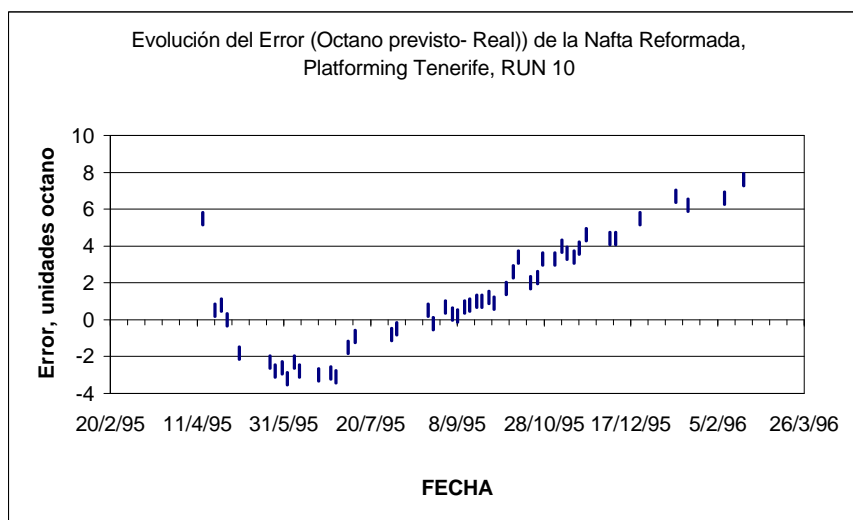


Fig. 164 . Error de predicción del número de octano.

Tabla 90 . Resultados de la simulación (tabla parcial) cuando se aplica a las condiciones de operación que existen en los días señalados, frente al número de octano y calidad de la alimentación analizadas por Laboratorio.

FECHA	N+2*A	FBP	RON REAL	LHSV	ERX	DIF. RON	H2	H2+C1+C2	C3+C4	C5+
	%vol	C		h <sup>-1</sup>	C		%wt	%wt	%wt	%wt
14/4/95	64.9	169	87.2	0.90	480	5.5	1.1	3.2	7.3	89.6
28/4/95	69	174	99.1	0.98	499	0	1.2	4.5	14.3	81.2
23/5/95	54.3	164	98	1.05	495	-2.3	1.1	4.2	17.9	77.9
2/6/95	59.5	62	98.1	0.98	490	-3.2	1.2	4.4	16.5	79.1
20/6/95	59.5	163	97.9	0.90	489	-3	1.2	4.2	19.0	76.7
7/7/95	55.2	168	96.3	0.86	488	-1.5	1.1	4.1	14.7	81.2
4/8/95	64.1	172	98.1	0.83	495	-0.5	1.3	4.6	20.2	75.2
1/9/95	70.4	170	98.4	1.02	500	0.7	1.1	4.1	15.5	80.4
12/9/95	68.6	162	97.8	1.02	500	0.7	1.1	4.0	14.4	81.6
22/9/95	81.8	173	98.2	1.05	505	1	1.2	4.3	16.7	79.0
6/10/95	72	164	97	1.09	505	1.7	1.1	3.9	13.7	82.4
20/10/9	62.2	167	97.3	1.05	507	2	1.3	4.7	19.2	76.1

5										
3/11/95	59.5	168	97.5	0.98	510	3.3	1.2	4.3	16.9	78.8
14/11/95	73.4	169	97.9	0.94	508	3.4	1.1	3.9	12.5	83.6
5/12/95	57.7	170	97.1	0.86	507	4.4	1.2	4.3	15.4	80.3
12/1/96	68.7	169	96.5	0.79	511	6.7	1.2	4.2	15.1	80.7
20/2/96	61.3	172	97.1	1.01	517	7.6	1.2	4.3	16.6	79.2
15/3/96	66.8	165	96.1	0.79	512	7.7	1.3	4.4	12.8	82.8
2/4/96	67.7	170	96.5	0.79	517	9	1.4	4.8	14.4	80.8
12/4/96	64.3	164	95	0.98	521	8.5	1.1	3.8	11.4	84.7

Como puede observarse, el error que se obtiene en el número de octano evoluciona continuamente desde un valor inicial negativo (-3, después del primer mes) hasta valores positivos (+8). Esto es debido a que no se ha tenido en cuenta el número de octano de la muestra anterior para corregir las diferencias debidas a la desactivación del catalizador. Si se operara de esta forma, las predicciones seguirían el comportamiento del catalizador. No obstante, este error sirve para realizar un seguimiento de la desactivación del catalizador a lo largo del RUN.

Se observa también que el error, positivo al principio, cae luego fuertemente hasta el valor mínimo -3 en el primer mes. Este hecho indica que el octano real en la platformada era inferior al previsto. Normalmente, se considera que durante ese tiempo el catalizador está estabilizándose para ajustar los niveles de humedad, cloro y azufre.

El error entre el octano previsto y el real marca la diferencia entre las condiciones actuales y las condiciones medias del RUN. Esto supone una ventaja frente a los programas de simulación del fabricante de catalizador, ya que el error es independiente de la información de laboratorio sobre la calidad de la carga y sólo necesita el último resultado del número de octano de la Platformada para determinar el grado de desactivación del catalizador. La pendiente indicaría precisamente la velocidad de desactivación en términos de número de octano del catalizador.

Si el error o el grado de desactivación del catalizador se divide por la sensibilidad media del número de octano frente a la temperatura encontrada por el modelo PLS –estimada en 0.352RON/C--, y traslada el origen a cero, la representación en este caso muestra la evolución del ciclo de temperatura de la Unidad (Fig. 165).

La determinación de este valor y su utilización en línea es muy útil, ya que permite seguir el comportamiento de la Unidad y realizar una predicción en automático de la longitud esperada de RUN (para un ciclo de temperatura definido).

En la Fig. 166 se representa el comportamiento del rendimiento C5+ en función del contenido en Naftenos de la carga. Como se puede observar comparando con la Tabla 76, la pendiente representaría el coeficiente del efecto del contenido en Naftenos con el rendimiento C5+. No obstante, la figura incluye los efectos derivados de los cambios en la presión del separador, en la temperatura de horno y en el caudal de alimentación.

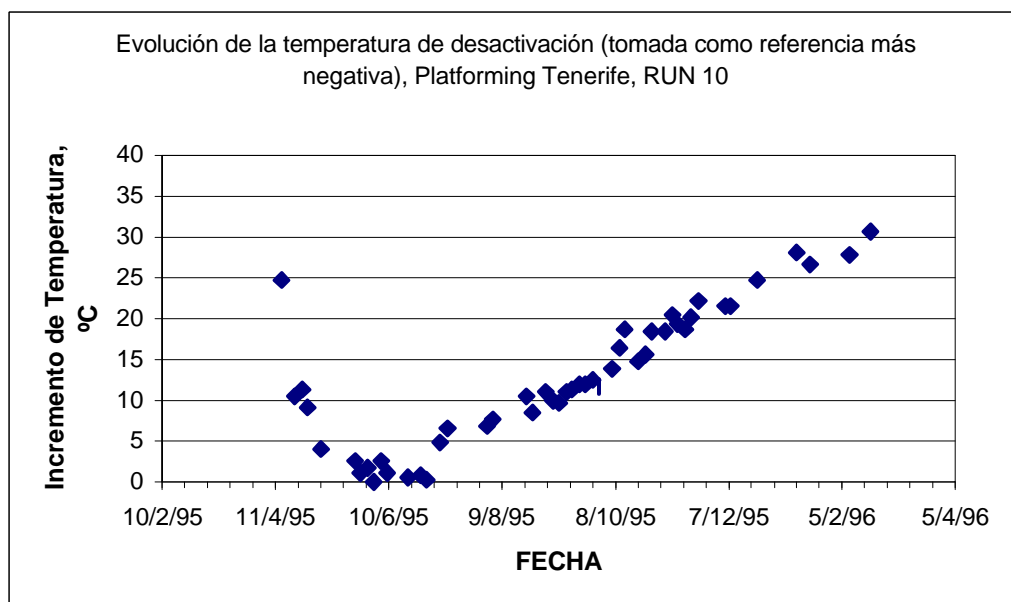


Fig. 165. Evolución de la temperatura de desactivación calculada por el error de predicción de octano.

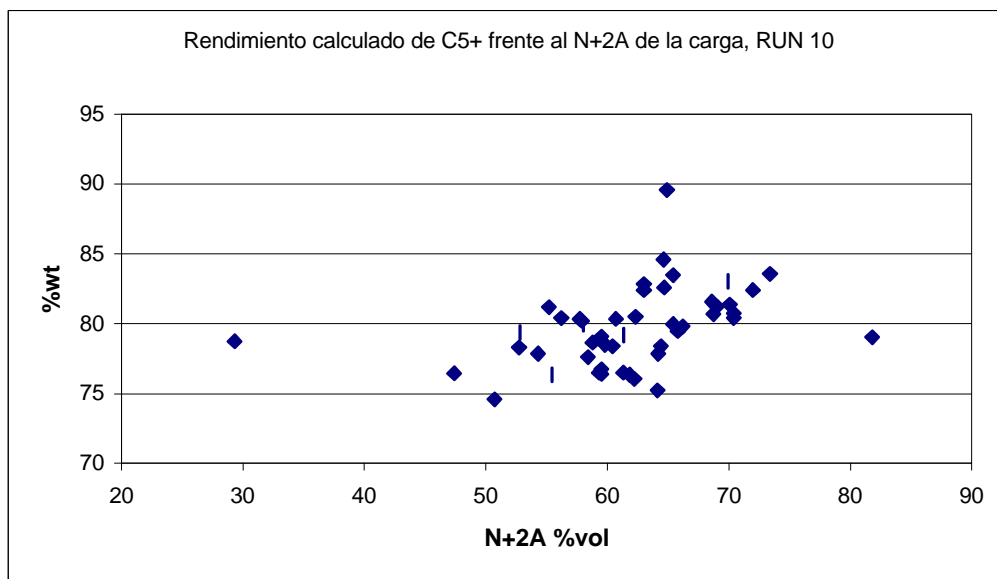


Fig. 166 . Evolución del rendimiento C5+wt ajustado por la simulación.

El seguimiento del rendimiento en C5+, al igual que la producción de C3 y C4 y Gas de fábrica que se realiza en línea, permite desarrollar un programa de simulación rigurosa de los equipos para conocer parámetros de funcionamiento, tales como rendimientos en Hornos, compresor, fraccionadora, etc. Además, gracias al conocimiento de la evolución diaria del rendimiento en peso de cada componente, es posible realizar una optimización que tenga en cuenta la calidad de la alimentación (vía predicción del número de octano), las condiciones de fraccionamiento y la capacidad de la Unidad.

Por último, el final de un ciclo del catalizador viene determinado básicamente por el balance económico entre el precio de los productos, los rendimientos y los costos operativos, así como por los costos derivados de realizar una nueva regeneración. Esta optimización está sujeta a las restricciones de los equipos (temperaturas de horno, potencia compresor, riqueza hidrógeno, etc.).

### **Discusión**

La incertidumbre de los datos de rendimiento calculado por

cromatografía en los datos de Planta es superior a los cambios esperados en la Unidad por variaciones de calidad de la carga. No es posible a partir de esa información generar un modelo PLS fiable de rendimientos. Por este motivo se utiliza un modelo riguroso de PRO-II y datos de instrumentación para encontrar las composiciones y rendimientos en las distintas corrientes. Estos datos pueden servir para calibrar un modelo PLS de rendimientos.

En la predicción del número de octano en línea a partir de sólo información de la instrumentación se encuentra que es posible reducir la desviación en un 40%. Teniendo en cuenta el error del método de ensayo y el rango de variación de los datos este resultado se puede considerar aceptable. El seguimiento posterior durante 3 años confirma este hecho.

Se plantean dos líneas de trabajo; por un lado generar modelos PLS para predecir rendimientos y por otro la utilización del modelo de ajuste de rendimientos y un modelo mecánico de la unidad para monitorización y optimización de los equipos más importantes (Hornos, compresor, estabilizadora, etc.).

---

**Capítulo 7**  
**IDENTIFICACIÓN DE MODELOS**  
**DINÁMICOS DE PROCESO (RÉGIMEN**  
**NOESTACIONARIO) CON PLS PARA SU**  
**UTILIZACIÓN EN APLICACIONES DE**  
**CONTROL MULTIVARIABLE PREDICTIVO**

## **7. Identificación de modelos dinámicos de proceso (régimen no-estacionario) con PLS para su utilización en Aplicaciones de Control Multivariable Predictivo**

### ***7.1. Identificación MISO para un sistema con cuatro variables de entrada y tres de salida. Datos de simulación***

Hasta este momento, los modelos desarrollados son aplicables a procesos en *régimen estacionario*. Para su calibrado se ha recurrido a la abundante información disponible en la base de datos de las Unidades de Refinería, en forma de medias horarias. No obstante, también es posible emplear técnicas de calibración multivariante para desarrollar modelos en estado no estacionario, o sea, que los valores anteriores de las variables X explican el valor actual de la variable Y.

### **Procedimiento Experimental**

La puesta a punto del método y del programa propuesto se realiza con los datos generados mediante una simulación, de la que se conoce su función de transferencia. Posteriormente, el método se aplicará a los datos generados por algunos de los «test» que se han ejecutado en la estabilizadora de Nafta ligera de la Unidad de Destilación CADU-2. Por último, los modelos obtenidos se utilizan en una aplicación de Control Predictivo Multivariable.

### **Simulación**

Las variables de la Tabla 91 configuran una teórica torre de destilación. Se podía haber empleado un modelo Dinámico Riguroso de Planta (Speed-Up, Hisys, etc.), pero teniendo en cuenta que esta simulación pretende solamente poner a punto el método de trabajo, se ha considerado que las variables pueden estar representadas por modelos de

---



primer o segundo orden, con tiempo muerto. La matriz de interacción se muestra en la Tabla 92. En los procesos de refinación y, en concreto, en un sistema de destilación como el propuesto, los modelos pueden asimilarse a estos dos tipos fundamentales (Marlin, 1995). Las funciones de transferencia quedan de la siguiente manera:

$$G_{ij} = k_{ij} \frac{e^{-q_{ij}s}}{1 + t_{1,ij}s} \quad [ 112]$$

$$G_{ij} = k_{ij} \left( \frac{e^{-q_{ij}s}}{(1 + t_{1,ij}s)(1 + t_{2,ij}s)} \right) \quad [ 113]$$

Tabla 91. Base de datos de la Unidad de Simulación.

Variable	Unidades	Descripción
S1P100	kg/cm <sup>2</sup>	Presión cabeza Torre (manométrica)
S1F100	m <sup>3</sup> /h	Caudal Reflujo
S1F110	m <sup>3</sup> /h	Caudal Carga
S1F200	t/h	Caudal de Vapor al Calderín
S1A001	%v	Riqueza componente ligero en cabeza (Cromatógrafo).
S1A002	%v	Riqueza componente ligero en fondo (Cromatógrafo)
S1VC100	%	Porcentaje apertura válvula control presión cabeza

Se consideran cuatro variables de entrada y tres variables de salida. Como variables de entrada se identifican los caudales de reflujo de la torre, de vapor al calderín, de carga a la Unidad y la presión de operación. Como variables a identificar se utilizan la riqueza del producto de cabeza y de fondo, cuya señal procede de analizadores discontinuos (para considerar tiempo muerto) y la apertura de la válvula de presión (a la que no se le asigna retardo por suponerse la dinámica del controlador superior al muestreo).

Tabla 92 . Matriz de interacción para las variables de la simulación, unidad de tiempo 5 minutos. Muestreo 5 minutos.

Variables	S1F100	S1F110	S1F200	S1P100
S1A001	$K_p = 0.25$ $\tau_1 = 6$ $\tau_2 = 2$ $\vartheta = 2$	$K_p = -0.1$ $\tau_1 = 15$ $\tau_2 = 3$ $\vartheta = 2$	$K_p = -2$ $\tau_1 = 8$ $\tau_2 = 4$ $\vartheta = 2$	$K_p = -4$ $\tau_1 = 3$ $\tau_2 = 0$ $\vartheta = 2$
S1A002	$K_p = -0.1$ $\tau_1 = 10$ $\tau_2 = 4$ $\vartheta = 3$	$K_p = 0.05$ $\tau_1 = 10$ $\tau_2 = 0$ $\vartheta = 3$	$K_p = -2.5$ $\tau_1 = 5$ $\tau_2 = 0$ $\vartheta = 3$	$K_p = -1$ $\tau_1 = 8$ $\tau_2 = 0$ $\vartheta = 3$
S1VC100	$K_p = 1$ $\tau_1 = 3$ $\tau_2 = 0$ $\vartheta = 0$	$K_p = 1$ $\tau_1 = 2$ $\tau_2 = 0$ $\vartheta = 0$	$K_p = 3$ $\tau_1 = 4$ $\tau_2 = 0$ $\vartheta = 0$	$K_p = 30$ $\tau_1 = 0$ $\tau_2 = 0$ $\vartheta = 0$

Las funciones de transferencia anteriores se implementaron en el Sistema de Control y las salidas se combinaron para crear las variables de proceso de la Tabla 92.

## Resultados

Un programa efectuó los cambios en las variables de entrada (según el método PRBS) y otro la recogida de los datos puntuales de cada variable. Esta infraestructura será la misma que se utilizará en la captura y realización de «test» reales de Planta.

La Fig. 167 muestra los resultados de la captura de datos para introducirlos en el programa de identificación. Como puede observarse, todas las variables de entrada (S1F100, S1F200, S1F110 y S1P100) se movieron de forma secuencial. El tiempo de ciclo mínimo empleado ha sido equivalente a 75 minutos.

Las variables de entradas tienen la etiqueta MV<sup>85</sup> y las variables de

<sup>85</sup> MV, "Manipulated Variable", Variable Manipulada.

respuesta CV<sup>86</sup>. El caudal de refluo (**S1F100**) se modifica entre  $\pm 5\text{m}^3/\text{h}$ ; el caudal de vapor (**S1F200**) lo hace entre  $\pm 0.5\text{tn}/\text{h}$ ; el caudal de carga a la torre (**S1F110**) entre  $\pm 5\text{m}^3/\text{h}$  y, por último, la presión de la torre (**S1P100**) se hace variar entre  $\pm 0.05\text{kg}/\text{cm}^2$ .

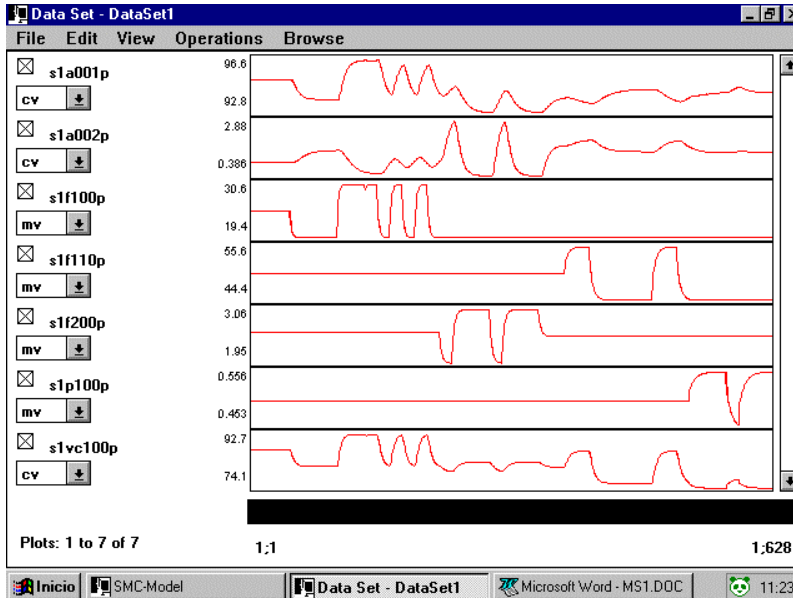


Fig. 167. Evolución de las variables empleadas en la simulación. SIDATA03.

## Identificación

Los datos obtenidos procuran la identificación de la matriz de interacción mediante dos métodos. El primero se propone en este trabajo (FIR con PLS) y segundo es un programa comercial de identificación (**SMCMODEL**), que puede realizar una identificación FIR y ARX.

### Identificación con SMCMODEL

Las Fig. 168, Fig. 169, Fig. 170 y Fig. 171 muestran las curvas de respuesta en escalón, junto con la ganancia de cada modelo, obtenidas cuando se utiliza un modelo FIR y ARX, tanto con el parámetro «*smoothing Factor*» en cero y en 2. Este parámetro (cuyo valor recomendado está entre

<sup>86</sup> CV, "Controlled Variable", Variable Controlada.

cero y cinco) afecta a los modelos, pues modifica la ganancia y la forma de la curva de respuesta (SMCMODEL User's guide, 1996). El «*smoothing factor*» afecta a los resultados del modelo al aplicar un algoritmo de restricción a los coeficientes de la respuesta impulso y, por lo tanto, suaviza la respuesta en escalón.

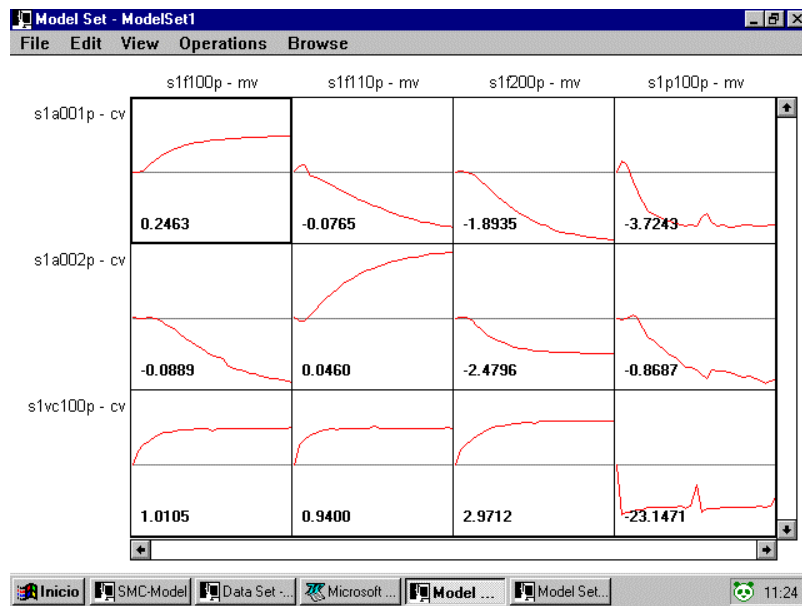


Fig. 168 . Matriz de modelos obtenidos mediante FIR, longitud 30, utilizando todos los datos y con el parámetro «SMOOTHING FACTOR» a cero. Datos S1DATA03.

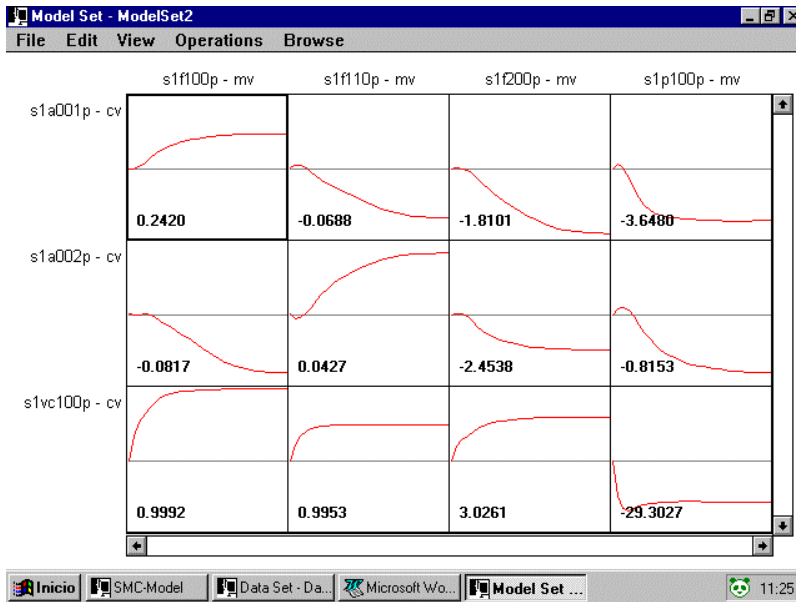


Fig. 169 . Matriz de modelos obtenidos mediante FIR, longitud 30, utilizando todos los datos y con el parámetro «SMOOTHING FACTOR» a 2. Datos S1DATA03.

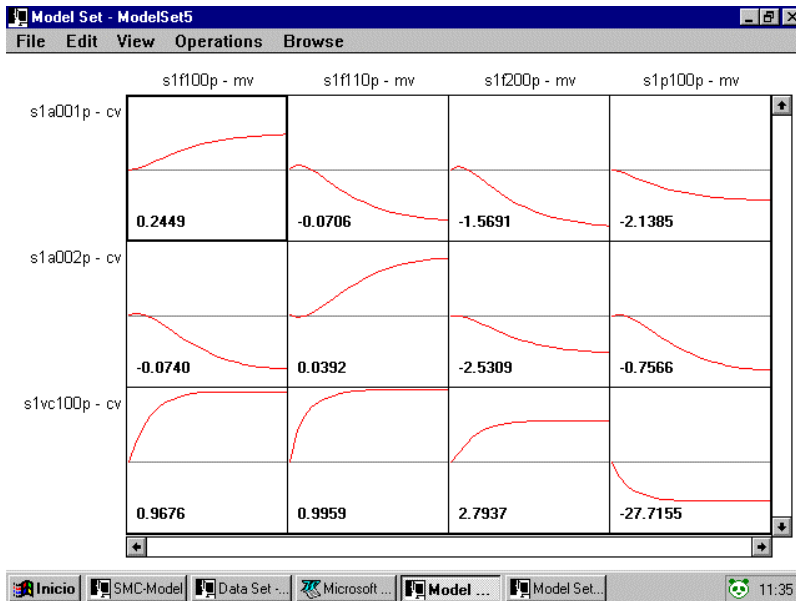


Fig. 170 . Matriz de modelos obtenidos mediante ARX, longitud 3, utilizando todos los datos y con el parámetro «SMOOTHING FACTOR» a cero. Datos S1DATA03.

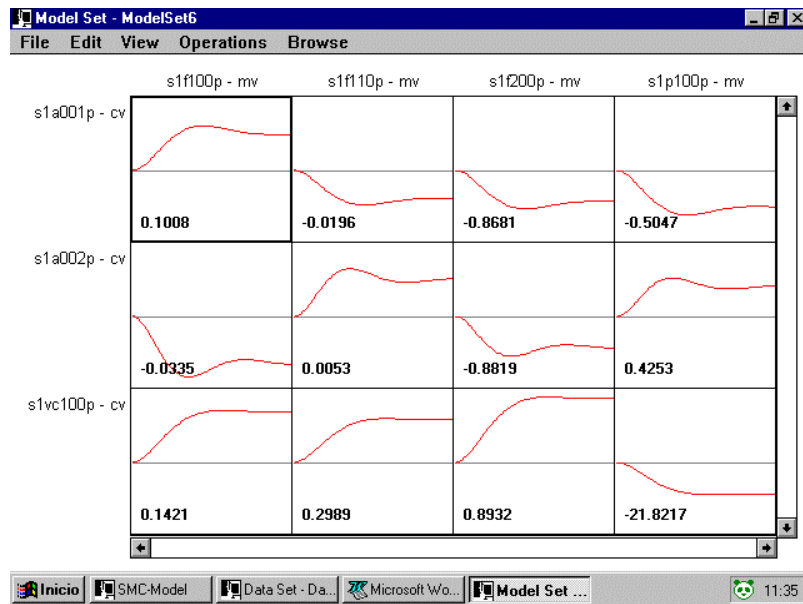


Fig. 171 . Matriz de modelos obtenidos mediante ARX, longitud 3, utilizando todos los datos y con el parámetro «SMOOTHING FACTOR» a 2. Datos SIDATA03.

### Identificación con PLS

El fichero de definición de modelo PLS (véase la sección correspondiente en la documentación de técnica experimental) genera las matrices retrasadas de X. La identificación FIR se realiza como si se tratara de variables independientes. El valor del coeficiente C de cada variable X retrasada del modelo PLS corresponderá a la ganancia del modelo de impulso. La curva de respuesta en escalón vendrá dada por la integral de esas contribuciones a lo largo de la longitud de modelo.

En los modelos de impulso finito es importante definir el número de coeficientes o longitud. En este trabajo se propone y aplica un método de selección basado en hacer mínimo los residuos de la variable de respuesta Y (véase apartado de descripción de este programa). La longitud podría definirse a voluntad o dejar al programa que la busque automáticamente, en cuyo caso se aplica el algoritmo optimización de Hooke y Jeeves, si bien modificado para poder utilizar valores enteros en el cálculo de los movimientos.

En todo modelo PLS, al igual que ocurre en PCA, el número de

componentes que se utiliza es fundamental, ya que un número elevado de ellos puede producir un sobreajuste. Por otro lado, al aplicar el método de optimización para minimizar la varianza del error en las variables Y, puede existir más de un mínimo. La presencia de mínimos locales depende del número de variables X, del peso de esas variables y de las características de cada muestra de datos. La solución que se obtenga está condicionada, por lo tanto, por el punto de partida del algoritmo de búsqueda. Para analizar el efecto de estos dos parámetros, número de componentes y solución inicial, se modifican por separado y se compararan los resultados.

La Fig. 172 representa la respuesta en escalón de la variable S1A001 ante un escalón unitario de cada una de las variables de entrada. La Tabla 93 recoge los resultados numéricos de aplicar el algoritmo de búsqueda con cuatro componentes.

*Tabla 93. Criterios y resultados, para modelo FIR de datos Simulación Torre. Datos s1data03. Componentes 4.*

% Importancia	S1A001P
S1P100P	4.516
S1F200P	25.8
S1F100P	52.06
S1F110P	17.63
Ganancia	S1A001P
S1P100P	-4.455
S1F200P	-2.041
S1F100P	0.2481
S1F110P	-0.09815
Longitud_serie	50,50,50,50
Longitud_inicial	15,15,15,15
Longitud_mínima	1,1,1,1
Longitud_máxima	50,50,50,50
Longitud_optima	17,37,27,49
Función_objetivo, 100-DIFY	0.3114

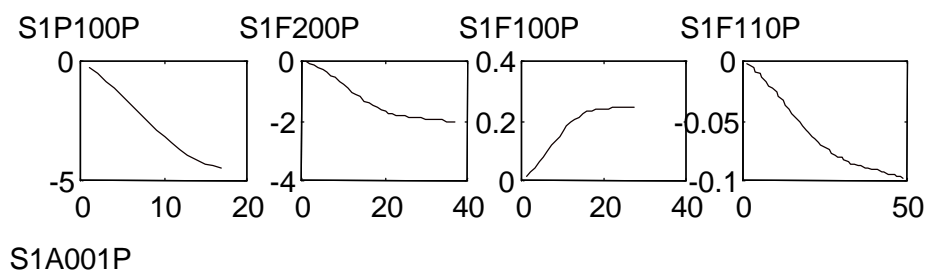


Fig. 172 . Curvas de respuesta de escalón de la variable S1A001, 4 componentes, longitud inicial 15.

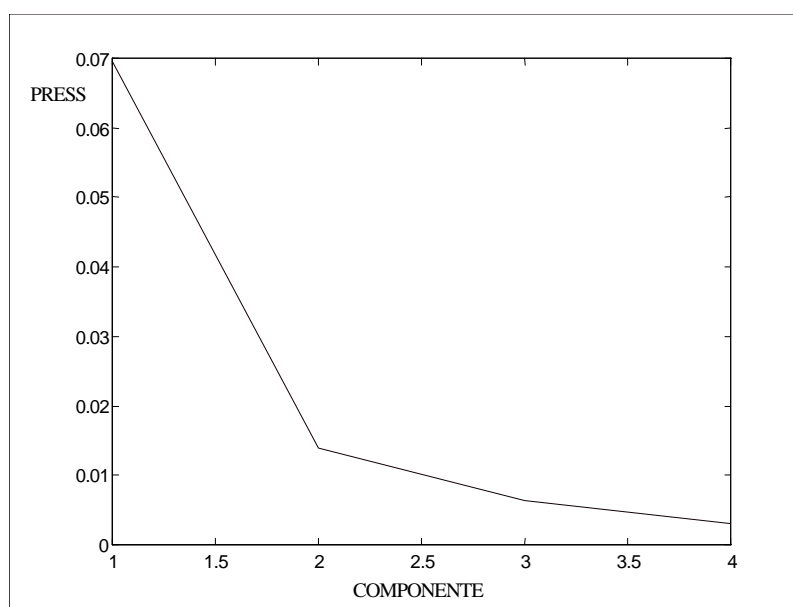


Fig. 173 . PRESS frente al número de componente del modelo. Modelo dinámico de la Simulación.

Si se representa PRESS frente al número de componentes se observa (Fig. 173) que con dos componentes es posible explicar más del 98% de la variación esperada en S1A001. Cuando se consideran dos componentes se obtienen los modelos de la Fig. 174.



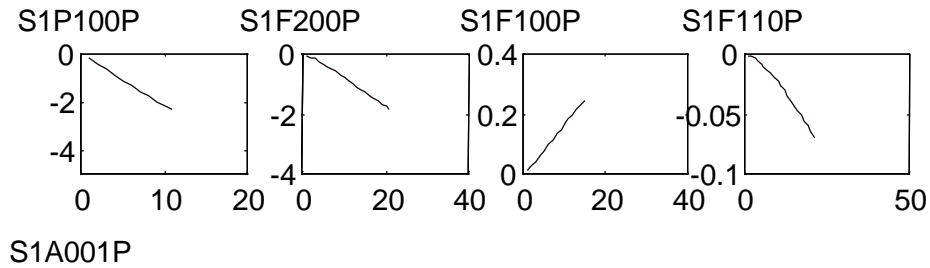


Fig. 174 . Curvas de respuesta de escalón de la variable S1A001, 2 componentes, longitud inicial 15.

Tabla 94 . Criterios y resultados, para modelo FIR de datos Simulación Torre. Datos s1data03. Componentes 2.

% Importancia	S1A001P
S1P100P	2.644
S1F200P	25.93
S1F100P	57.32
S1F110P	14.11
Ganancia	S1A001P
S1P100P	-2.302
S1F200P	-1.835
S1F100P	0.2445
S1F110P	-0.06953
Longitud_serie	50,50,50,50
Longitud_inicial	15,15,15,15
Longitud_mínima	1,1,1,1
Longitud_máxima	50,50,50,50
Longitud_optima	11,21,15,21
Función_objetivo	1.394

Los modelos aparecen truncados y el valor mínimo de varianza no explicada se sitúa en un 1.4%. Lógicamente, al tener un valor de varianza no explicada mayor, el modelo mínimo obtenido posee una longitud

inferior. El caso contrario sucede cuando el número de componentes se eleva a seis, como en el caso de la Fig. 175.

Las curvas en este caso aparecen distorsionadas y la longitud del modelo es anormalmente alta (superior a la propia dinámica de los modelos simulados). Por lo tanto, al igual que en los modelos de estado estacionario, lo primero que se ha de hacer en un modelo dinámico PLS es determinar el número de componentes que se desean (observando PRESS en el primer punto de inflexión, por ejemplo).

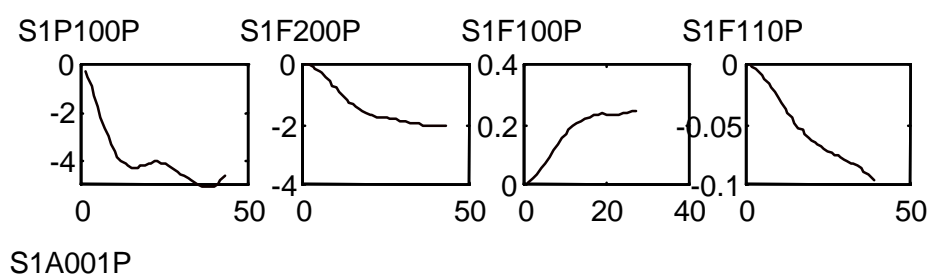


Fig. 175 . Curvas de respuesta de escalón de la variable S1A001, 6 componentes, longitud inicial 15.

Tabla 95. Criterios y resultados, para modelo FIR de datos Simulación Torre. Datos s1data03. Componentes 6.

% Importancia	S1A001P
S1P100P	5.828
S1F200P	25.29
S1F100P	51.71
S1F110P	17.17
Ganancia	S1A001P
S1P100P	-4.615
S1F200P	-2.03
S1F100P	0.2485
S1F110P	-0.09684
Longitud_serie	50,50,50,50
Longitud_inicial	15,15,15,15
Longitud_mínima	1,1,1,1
Longitud_máxima	50,50,50,50
Longitud_optima	43,43,27,39
Función_objetivo	0.1814

Tabla 96. Criterios y resultados, para modelo FIR de datos Simulación Torre. Datos s1data03. Componentes 6.

% Importancia	S1A001P
S1P100P	4.374
S1F200P	25.92
S1F100P	52.84
S1F110P	16.86
Ganancia	S1A001P
S1P100P	-3.596
S1F200P	-2.021
S1F100P	0.2483
S1F110P	-0.09232
Longitud_serie	50,50,50,50
Longitud_inicial	5,5,5,5
Longitud_mínima	1,1,1,1
Longitud_máxima	50,50,50,50
Longitud_optima	21,37,25,37
Función_objetivo	0.3365

El efecto de la solución inicial del algoritmo se puede evaluar si se toman cuatro componentes y se inicia el algoritmo en otro valor, por ejemplo, en cinco. El resultado obtenido se puede ver en la Fig. 176, en la que además se observa que la longitud óptima es diferente, aunque próxima al valor estimado en la Fig. 172. En los datos procedentes de distintos «test» de Unidad se ha comprobado que este efecto es tanto más importante cuanto mayor es la diferencia de peso en el modelo entre las variables y mayor sea la relación señal ruido de los datos. En todo caso, en esta muestra los resultados entre todos los modelos son bastante equivalentes.

En la Fig. 177 y Fig. 178 se muestra la respuesta escalón de las variables S1A002 y S1VC100.

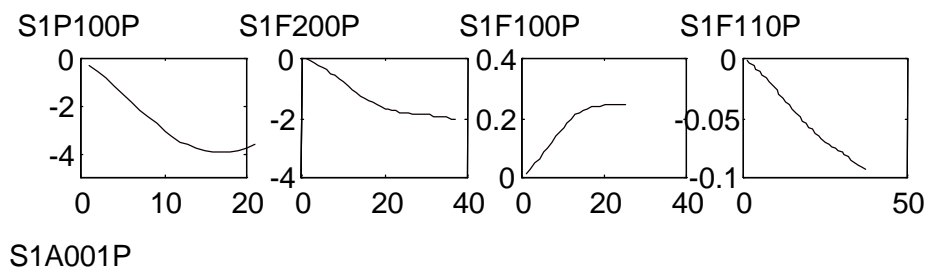


Fig. 176 . Curvas de respuesta de escalón de la variable S1A001, 4 componentes, longitud inicial 5.

Tabla 97. Criterios y resultados, para modelo FIR de datos Simulación Torre. Datos s1data03. Componentes 4.

% Importancia	S1A002P
S1P100P	1.246
S1F200P	50.9
S1F100P	33.53
S1F110P	14.33
Ganancia	S1A002P
S1P100P	-0.7411
S1F200P	-2.427
S1F100P	-0.09581
S1F110P	0.04756
Longitud_serie	50,50,50,50
Longitud_inicial	15,15,15,15
Longitud_mínima	1,1,1,1
Longitud_máxima	50,50,50,50
Longitud_optima	11,17,31,27
Función_objetivo	0.7928

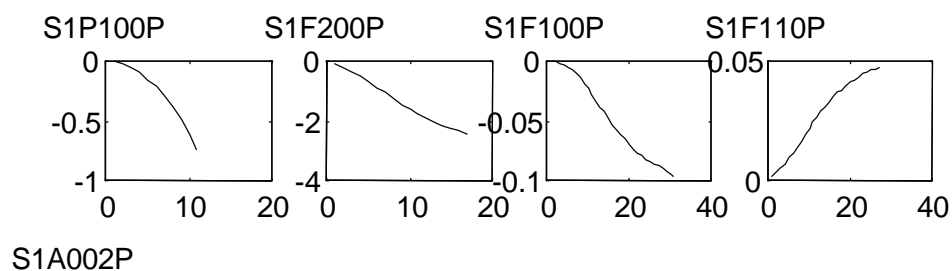


Fig. 177. Curvas de respuesta de escalón de la variable S1A002, 4 componentes, longitud inicial 15.

Tabla 98. Criterios y resultados, para modelo FIR de datos Simulación Torre. Datos s1data03. Componentes 4.

Datos	s1data03
Modelo	Mdinamic
Componentes	4
Iniciar	0
% Importancia	S1VC100P
S1P100P	8.948
S1F200P	5.945
S1F100P	42.98
S1F110P	42.13
Ganancia	S1VC100P
S1P100P	-32.48
S1F200P	2.274
S1F100P	0.9949
S1F110P	0.9789
Longitud_serie	50,50,50,50
Longitud_inicial	15,15,15,15
Longitud_mínima	1,1,1,1
Longitud_máxima	50,50,50,50
Longitud_optima	13,9,11,15
Función_objetivo	0.2925

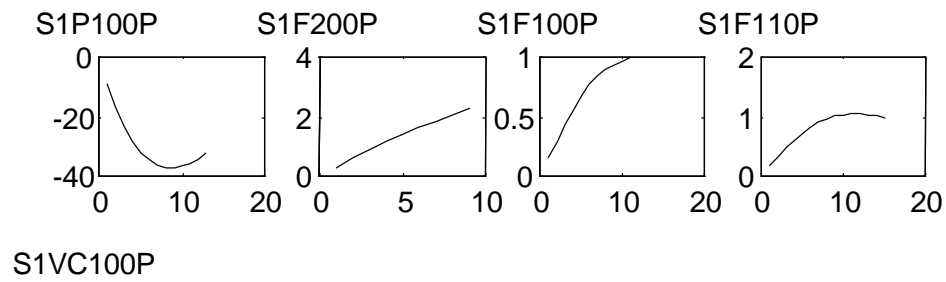


Fig. 178 . Curvas de respuesta de escalón de la variable S1VC100, 4 componentes, longitud inicial 15.

En lugar de tomar 15 como longitud inicial de modelo para las variables S1A002 y S1VC100, se emplea un valor más corto, cinco por ejemplo, y entonces se consiguen los resultados de las Fig. 179 y Fig. 180.

Tabla 99. Criterios y resultados, para modelo FIR de datos Simulación Torre. Datos s1data03. Componentes 4.

% Importancia	S1A002P
S1P100P	0.1357
S1F200P	53.95
S1F100P	32.07
S1F110P	13.84
Ganancia	S1A002P
S1P100P	-0.07273
S1F200P	-2.421
S1F100P	-0.08645
S1F110P	0.04322
Longitud_serie	50,50,50,50
Longitud_inicial	5,5,5,5
Longitud_mínima	1,1,1,1
Longitud_máxima	50,50,50,50
Longitud_optima	1,17,19,19
Función_objetivo	2.02

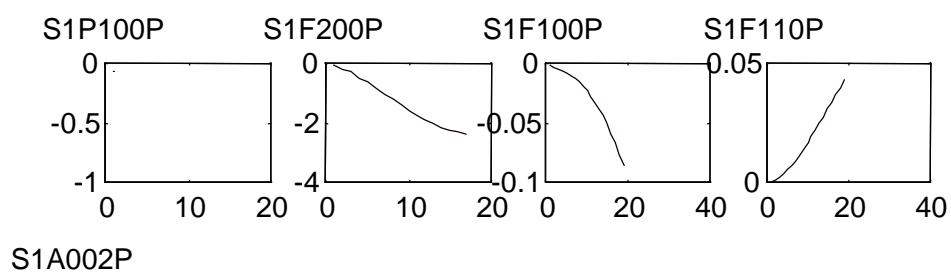


Fig. 179. Curvas de respuesta de escalón de la variable S1A002, 4 componentes, longitud inicial 15.



Tabla 100. Criterios y resultados, para modelo FIR de datos Simulación Torre. Datos s1data03. Componentes 4.

% Importancia	S1VC100P
S1P100P	6.612
S1F200P	8.4
S1F100P	45.07
S1F110P	39.92
Ganancia	S1VC100P
S1P100P	-28.68
S1F200P	3.047
S1F100P	0.9898
S1F110P	0.9943
Longitud_serie	50,50,50,50
Longitud_inicial	5,5,5,5
Longitud_mínima	1,1,1,1
Longitud_máxima	50,50,50,50
Longitud_optima	1,7,11,5
Función_objetivo	0.08729

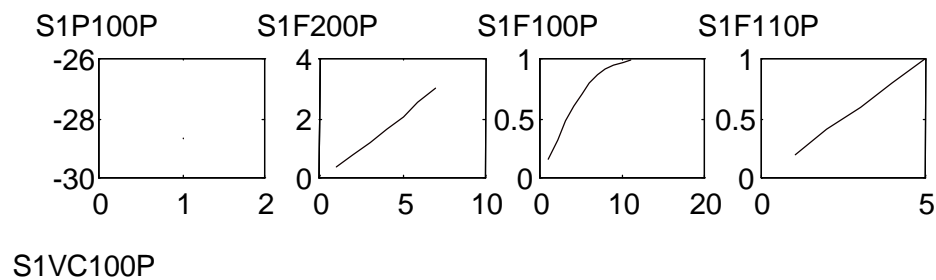


Fig. 180. Curvas de respuesta de escalón de la variable S1VC100, 4 componentes, longitud inicial 15.

Se observa en estos casos que el programa no detecta un modelo dinámico para el efecto de la presión (S1P100) sobre las variables S1A002

y S1VC100. Si este comportamiento fuera cierto, el programa indicaría que el efecto de cada una de esas variables sobre S1A002 no tiene efecto dinámico y sólo se tiene en cuenta su ganancia.

En el caso de la variable S1A002, lo que ocurre es que se combina una ganancia y un cambio muy pequeño en la variable S1P100. Por lo tanto, el programa refleja un coeficiente de importancia pequeño en el modelo (0.14%) respecto a la participación del resto de variables.

Por otro lado, el efecto de la Presión S1P100 sobre la válvula S1VC100 es diferente, ya que su participación frente al resto de las variables es relativamente importante (7%). De ahí que en este caso sea plausible que la variable no tenga dinámica y que su respuesta sea instantánea de magnitud -29 (como se comprueba en la realidad con una ganancia de -30).

Por último, en la Fig. 181 aparece el resultado gráfico de aplicar PLS con una longitud de modelo fija en 30 para la variable S1A002, al igual que se había utilizado en el programa de identificación SMCMODEL. Tanto las curvas obtenidas como los coeficientes son similares.

---

Tabla 101. Criterios y resultados, para modelo FIR de datos Simulación Torre. Datos s1data03. Componentes 4.

% Importancia	S1A002P
S1P100P	1.232
S1F200P	51.68
S1F100P	33.03
S1F110P	14.06
Ganancia	S1A002P
S1P100P	-0.7654
S1F200P	-2.378
S1F100P	-0.0962
S1F110P	0.04761
Longitud_serie	50,50,50,50
Longitud	30,30,30,30

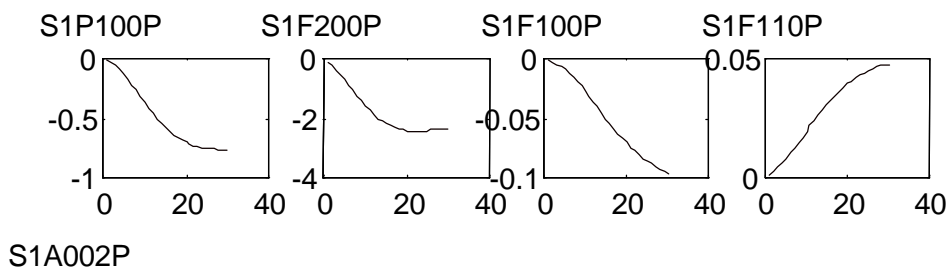


Fig. 181 . Curvas de respuesta de escalón de la variable S1A002, 4 componentes, longitud 30.

### Discusión

Los resultados que se obtienen por medio de PLS con una longitud fija de modelo son equivalentes a los que se obtienen con SMCMODEL para los datos simulados. El número de componentes tiene un papel muy importante en la definición del modelo. En concreto, un número elevado de componentes, aunque en principio pudiera disminuir la varianza de

predicción, produce sobreajuste y los modelos que se obtienen quedan distorsionados.

La longitud final del modelo de impulso finito depende del valor de entrada en la optimización. A diversos valores de entrada pueden corresponder diferencias en la longitud final del modelo y estas divergencias están condicionadas por el peso relativo de las variables en el modelo y el ruido (efecto que se demostrará en el próximo apartado).

Si la suma de la longitud inicial de modelo y del cambio máximo permitido es inferior al tiempo muerto del modelo real, el programa de optimización no encontrará mejoría en la función objetivo al realizar el primer movimiento de exploración. En este caso particular, el modelo quedaría truncado en la región de tiempo muerto. Para evitar este posible problema se realizan al menos dos exploraciones, en las que se varía la longitud y se elige el mínimo de ambas.

En sistemas con ruido en las medidas, los modelos están especialmente truncados debido a que el método no encuentra mejora alguna en la reducción del error por aumento de la longitud del modelo. En estos casos, el modelo alcanza un grado de explicación que sería equivalente al nivel de cambio de la variable. Por ejemplo, en un sistema de primer orden, un grado de explicación alcanzado del 95% representaría una longitud equivalente a tres veces su constante de tiempo.

Si la muestra de datos de que se parte es representativa del intervalo normal de variación de las variables de entrada, la longitud de los modelos obtenida por este método es adecuada porque entre ellos no consumirían más recursos de máquina que los necesarios para el grado de aproximación deseado de la variable Y.

---

## **7.2. Identificación de modelo dinámico para el control de una columna de estabilización de Nafta en la Unidad de Destilación de Crudo, CADU-2**

En este apartado se utiliza el método de ajuste dinámico PLS propuesto anteriormente y se compara con los resultados obtenidos mediante el programa comercial SMCMODEL.

### **Procedimiento Experimental**

La torre de estabilización de Nafta Ligera forma parte de la Unidad de Destilación CADU-2 y recibe Nafta Total (Nafta ligera + LPG) desde el botellón de reflujo de la cabeza de la torre principal y después de la inyección de condensado del compresor (véase esquema de la Unidad en la descripción del apartado de Técnica Experimental). La carga, precalentada en un cambiador de calor carga efluente, accede a la torre, separándose por cabeza una corriente de gases que se dirige a la planta de Amina, otra de LPG a la Planta LPG, mientras que el producto de fondo, consistente en Nafta Ligera, se envía a despentanizar. El calor necesario en la torre se aporta mediante un cambiador con Gasoil Ligero procedente del Reciclo a la torre.

En esta torre se desea obtener principalmente un producto en fondo con una presión de vapor indicativa de la ausencia de Butanos. Por otro lado, debe controlarse la concentración de n-pentanos en cabeza (LPG), dada su influencia en el número de octanos del producto de fondo de la torre Desbutanizadora al final de la planta de LPG.

Las variables que se han estudiado en la torre se pueden ver en la Tabla 102. Se identifican con CV (variables controladas), MV (variables manipuladas) y DV (disturbios).

---

Tabla 102. Base de datos Estabilizadora de CADU-2.

Variable	Unidades	Descripción
C2A003	psi	P.V.R. Nafta Ligera
C2T139	°C	Temp. Fondo Estabilizadora
C2A001	%v	I-pentano cabeza estabilizadora
C2A012	%v	I-pentano fondo estabilizadora
C2F519	%v	Carga Estabilizadora
C2FC415	m <sup>3</sup> /h	Caudal de Reflujo Interno de la Estabilizadora
C2P160	kg/cm <sup>2</sup>	Presión Cab. Estabilizadora (manométrica)
C2JC47	Mcal/h	Calor fondo Estabilizadora
C2T024	°C	Carga Estabilizadora

## Resultados

En todos los casos no fue posible modificar los valores de las variables de entrada de manera directa. Así, por ejemplo, el cambio de caudal de alimentación se realizó con la temperatura de cabeza de la torre principal. Por otro lado, algunas variables están influenciadas por otras, como en el caso de la temperatura de entrada a la torre, considerada como disturbio, que depende no sólo del estado del cambiador carga efluente sino también del caudal de alimentación y, sobre todo, de la temperatura de fondo de la torre estabilizadora, que, a su vez, está condicionada por la temperatura del recalentador. La Fig. 182 muestra el resultado de la captura de datos para introducirlos en el programa de identificación.

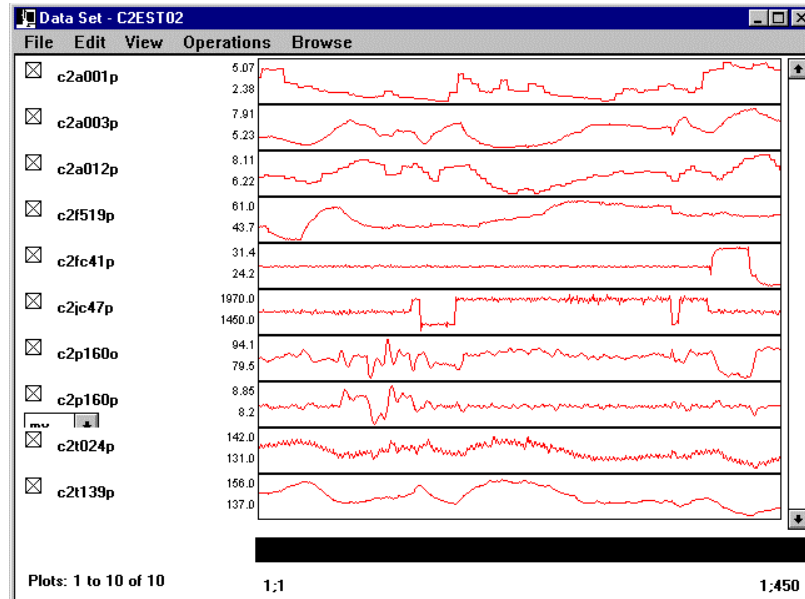


Fig. 182 . . Evolución de las variables «test» estabilizadora, fichero C2EST02, muestreo 2 minutos.

## Identificación

Se realiza la misma secuencia que en el apartado anterior, se analizan los resultados con un programa comercial de identificación y luego se aplica el método propuesto.

### **Identificación con SMCMODEL**

Las Fig. 183 a Fig. 186 recogen las matrices de modelos de interacción obtenidas cuando se utilizan los modelos FIR o ARX sobre la muestra de datos C2EST02, tanto con el parámetro «Smoothing Factor» en cero como en 2.

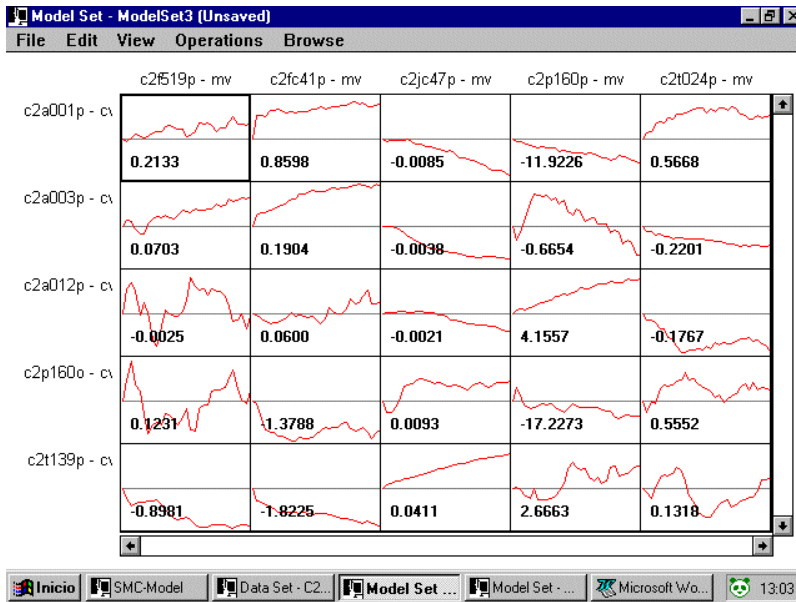


Fig. 183 . Matriz de modelos obtenidos mediante FIR, longitud 30, utilizando todos los datos y con el parámetro «SMOOTHING FACTOR» a cero. Datos C2EST02.

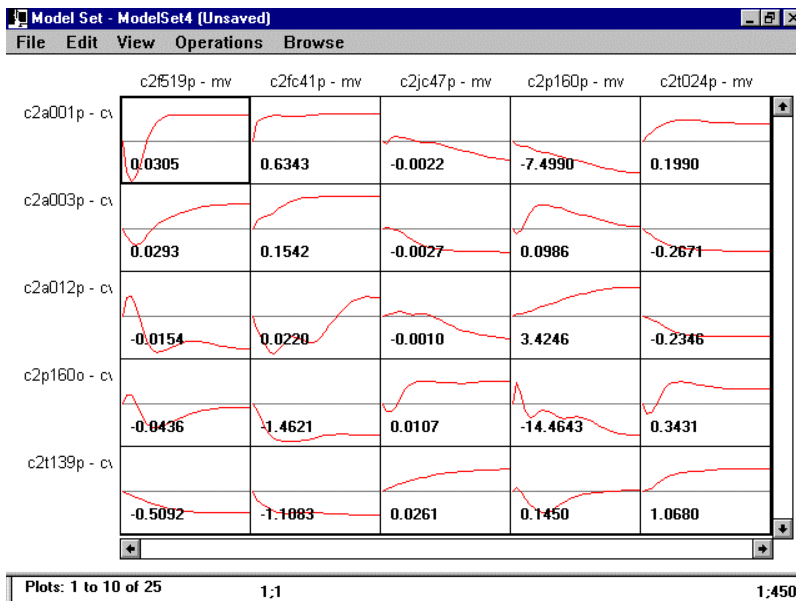


Fig. 184 . Matriz de modelos obtenidos mediante FIR, longitud 30, utilizando todos los datos y con el parámetro «SMOOTHING FACTOR» a 2. Datos C2EST02.

El parámetro «smoothing factor» suaviza el comportamiento de los coeficientes del modelo resultando en una respuesta en escalón más



estilizada. No obstante, este parámetro puede modificar fuertemente el valor y signo de la ganancia del modelo, como se aprecia entre las Fig. 183 y Fig. 184.

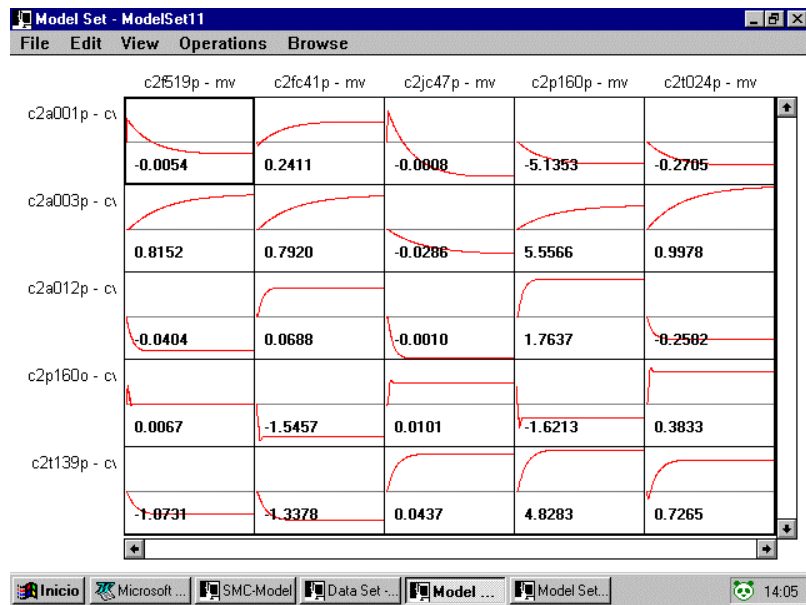


Fig. 185. Matriz de modelos obtenidos mediante ARX, longitud 2, utilizando todos los datos y con el parámetro «SMOOTHING FACTOR» a cero. Datos C2EST02.

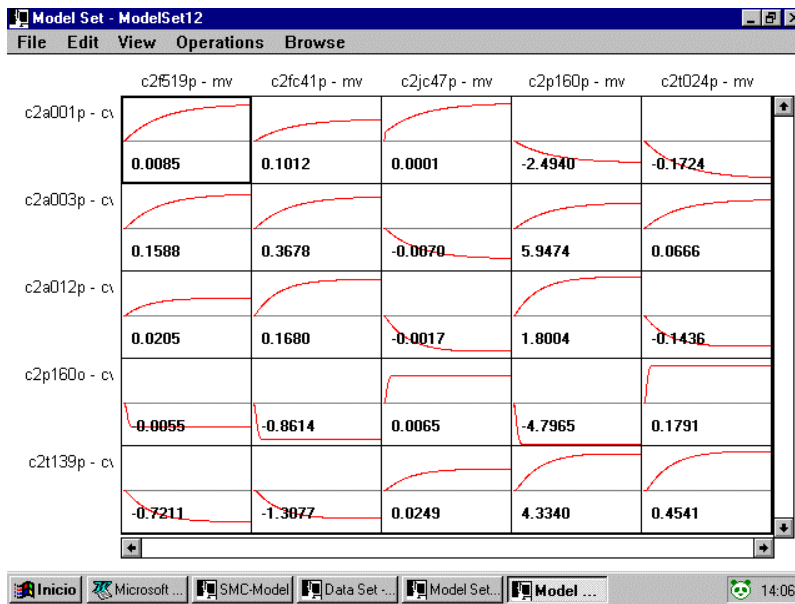


Fig. 186. Matriz de modelos obtenidos mediante ARX, longitud 2, utilizando todos los datos y con el parámetro «SMOOTHING FACTOR» a 2. Datos C2EST02.

En cuanto al modelado ARX, como el número de parámetros que se ajustan es menor, las características de la muestra de datos no afecta tanto como en los modelos FIR. También en esta ocasión el valor del parámetro «*smoothing factor*» modifica el signo y el valor de la ganancia.

Las Fig. 187 a Fig. 191 representan los resultados obtenidos de otro «test» realizado a la torre dos semanas después. En esta ocasión también se produce los efectos mencionados anteriormente.

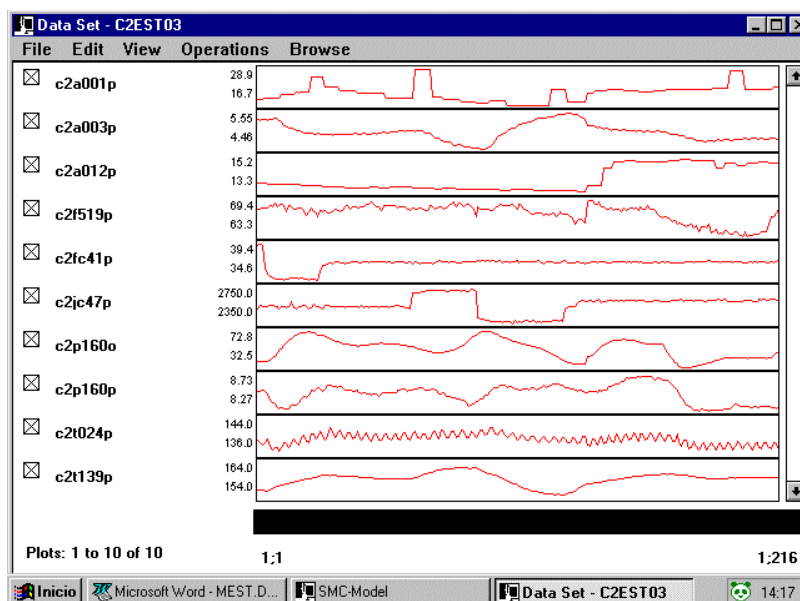


Fig. 187. Evolución de las variables «test» estabilizadora, fichero C2EST03. Muestreo 2 minutos.

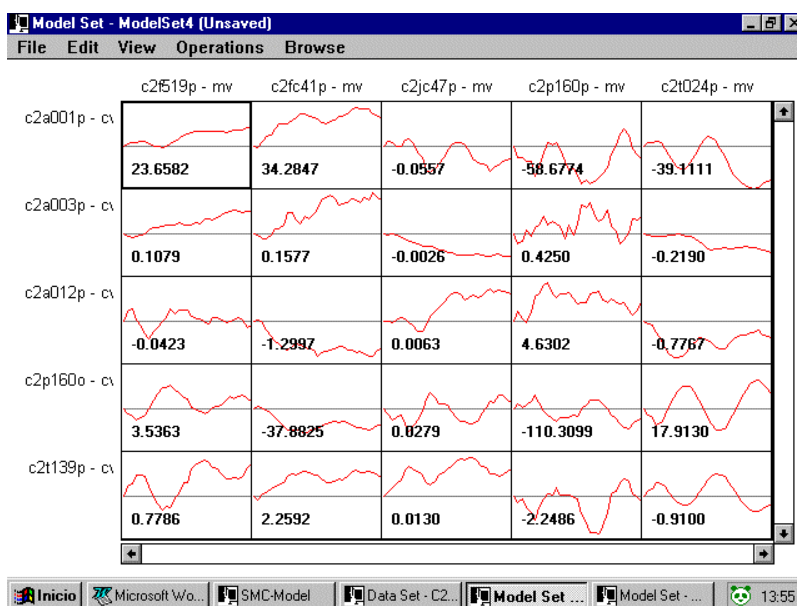


Fig. 188. Matriz de modelos obtenidos mediante FIR, longitud 30, utilizando todos los datos y con el parámetro «SMOOTHING FACTOR» a cero. Datos C2EST03.

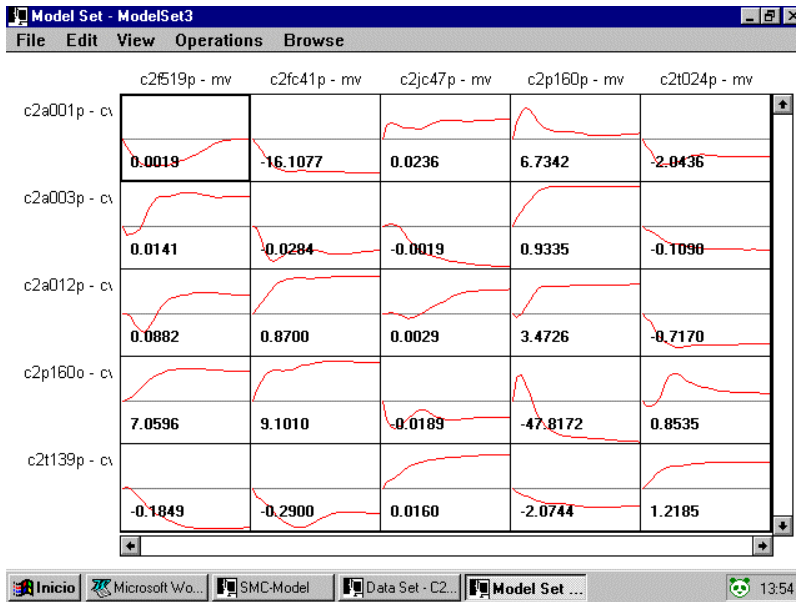


Fig. 189 . Matriz de modelos obtenidos mediante FIR, longitud 30, utilizando todos los datos y con el parámetro «SMOOTHING FACTOR» a 2. Datos C2EST03.

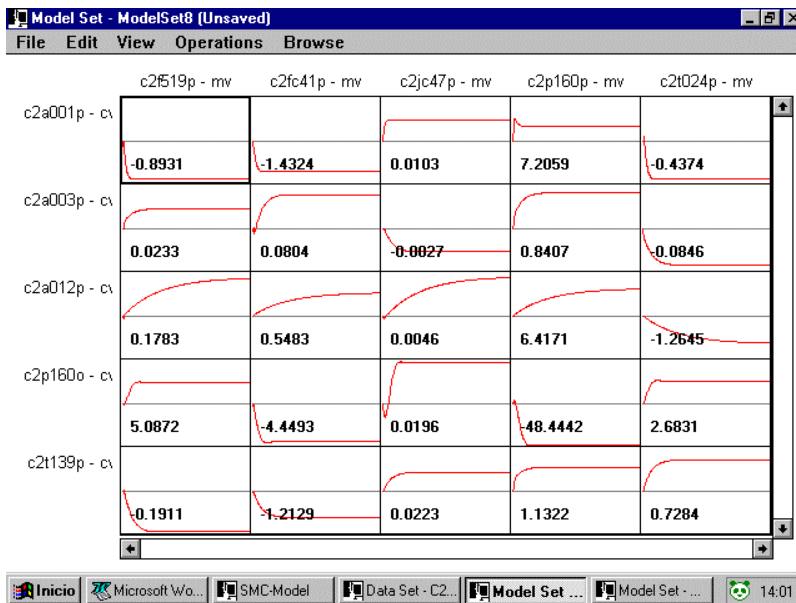


Fig. 190 . Matriz de modelos obtenidos mediante ARX, longitud 3, utilizando todos los datos y con el parámetro «SMOOTHING FACTOR» a cero. Datos C2EST03.

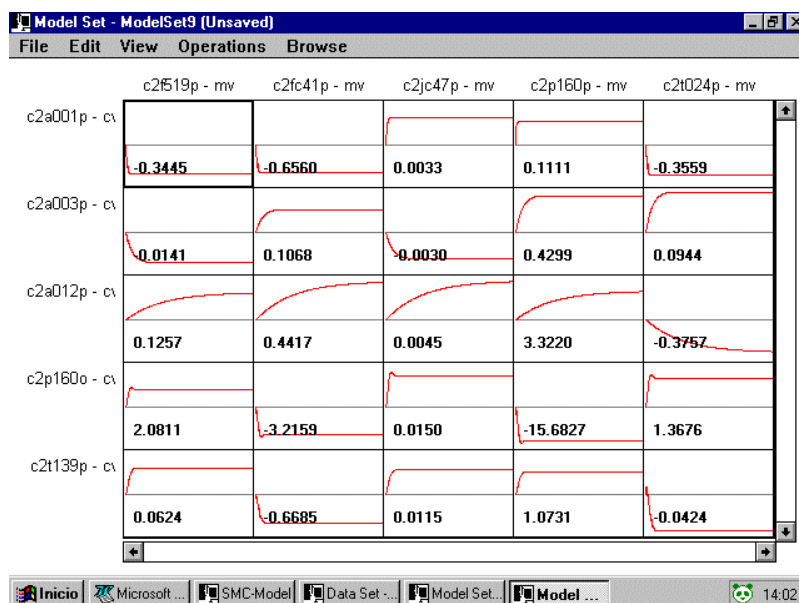


Fig. 191. Matriz de modelos obtenidos mediante ARX, longitud 3, utilizando todos los datos y con el parámetro «SMOOTHING FACTOR» a 2. Datos C2EST03.

La consistencia de los resultados cuando se trata de identificar modelos es muy importante para poder garantizar el comportamiento esperado de la Aplicación Multivariable. En este sentido, la Tabla 103 recoge el valor obtenido de la ganancia final del lazo y la longitud, así como la participación porcentual de cada variable de entrada X en el modelo global de la variable de salida.

Los resultados obtenidos son muy parecidos a los estimados mediante los métodos FIR o ARX. No obstante, entre las muestras de datos de «test» tomadas en diferentes días se observan bastantes discrepancias, al igual que cuando se aplica el programa SMCMODEL.

Las características de la muestra de datos es fundamental para obtener modelos estables. En concreto, en la Muestra C2EST03 (véase Fig. 187), se observa claramente que los cromatógrafos C2A001 y C2A012 no estaban variando de acuerdo con los cambios que estaban ocurriendo en la Unidad.

La magnitud de los cambios que se produjeron en las variables es diferente en cada muestra de datos, lo que puede producir distinta

participación en el modelo. En concreto, el intervalo de variación de la variable de entrada C2F519 en el fichero de datos C2EST02 fue superior a la que tuvo en el C2EST03. Por otro lado, las condiciones medias de proceso eran distintas en ambos casos, al igual que la Nafta de Carga a la Unidad era más pesada en el caso C2EST03, ya que tenía mucha mayor cantidad de pentanos (analizador C2A001 y C2A012), la apertura de la válvula automática de cabeza estaba más cerrada (C2P160O) y el consumo específico de calor era superior en el recalentador.

Este trabajo plantea la utilización de PLS para generar modelos de impulso finito; una técnica que permite realizar un análisis pormenorizado de la contribución de cada variable al modelo en su conjunto. Además, el empleo de un corto número de componentes permite reducir la contribución que el nivel de «ruido» de las señales aporta a los modelos. Por último, este texto aboga por una reducción de la longitud de los modelos que se introducen en el Control Predictivo Multivariable, pues con ello disminuyen los recursos de cálculo.

---

Tabla 103. Resultados obtenidos en dos test, FIR con PLS, longitud inicial  
5. Estabilizadora de CADU-2.

Variables	Datos	<sup>87</sup>	C2F519	C2FC415	C2P160	C2JC47	C2T024
C2A001	C2EST02	Kp	-0.07	0.108	-2.86	-0.0003	-0.1925
		Test.	5	7	11	5	5
		Part.	29	11	21	3	35
	C2EST03	Kp	-0.6881	-1.08	7.16	0.01	-0.77
		Test.	9	7	13	3	13
		Part.	21	17	22	19	20
C2A003	C2EST02	Kp	0.006	0.095	1.7	-0.0019	-0.35
		Test.	1	9	7	11	9
		Part.	2	9	11	18	59
	C2EST03	Kp	0.0024	0.063	0.589	-0.00247	-0.00618
		Test.	1	19	9	19	19
		Part.	1	19	15	51	15
C2A012	C2EST02	Kp	-0.054	-0.019	2.55	-0.00032	-0.2408
		Test.	11	11	15	1	11
		Part.	24	7	19	4	46
	C2EST03	Kp	-0.24	0.19	2.29	0.00268	-0.248
		Test.	5	11	5	11	7
		Part.	28	11	20	19	21
C2T139	C2EST02	Kp	-0.056	-0.53	-4.3	0.014	2.22
		Temp.	1	5	11	7	7
		Reboiler	3	8	7	22	59
	C2EST03	Kp	0.006	-0.65	-0.21	0.0194	0.48
		Test.	1	19	19	19	17
		Part.	0.3	20	2	61	18

<sup>87</sup> Kp, Ganancia del modelo; Test. número de coeficientes o longitud del modelo; Part., participación porcentual de esa variable de entrada frente al modelo global de la variable de salida.

### ***Estrategia de control Predictivo Multivariable***

En junio de 1997 se configura en la Refinería Tenerife una aplicación Multivariable para la Estabilizadora que utiliza modelos de impulso finito generados con la herramienta que se propone en este trabajo. En concreto, los modelos se generaron con la muestra de datos C2EST02, tomando una longitud para todos los modelos de 20.

Como variables controladas se tienen: temperatura del calentador (C2T139); PVR de Fondo (C2A003); Analizador de i-pentanos en cabeza (C2A001); analizador de i-C5 en fondo (C2A012) y una restricción sobre el caudal de gas producido (C2F555). Como variables manipuladas se utilizan: calor calentador (C2JC47); caudal de reflujo interno de la torre (C2FC4153); presión de cabeza de la torre (C2P160).

La minimización de presión en esta torre se realiza con la restricción de producción de Gas y la presión de cabeza de la torre como IRV<sup>88</sup>.

Utilizando esta tecnología, FIR con PLS, en este momento se están implementando modelos como parte del proyecto de control Multivariable de la Torre principal de la Unidad de Destilación CADU-2.

Aunque este trabajo se ha limitado a la preparación de los programas para realizar modelos FIR, es posible, con pequeñas modificaciones, ampliar el código para incorporar otros modelos, como ARX y desplazamiento predefinido de tiempo muerto.

---

<sup>88</sup> IRV, "Ideal Resting Value", Valor de descanso deseado para una variable si existen grados de libertad disponibles en la Aplicación.

---



## **Conclusiones**

## 8. Conclusiones

El estudio realizado permite extraer las siguientes conclusiones. En primer término, con respecto a la construcción de modelos estacionarios:

1. - La técnica de calibración multivariante PLS identifica y representa fielmente las principales fuentes de variación empleadas en la simulación rigurosa de la presión de vapor Reid y del 5% de destilación ASTM D86 de la torre Despentanizadora.

2. - En todos los casos analizados, el método de selección de variables propuesto no encuentra diferencias significativas en los modelos obtenidos. Esta conclusión se alcanza tanto si consideramos las relaciones o factores de orden superior entre las variables como si las consideramos de forma independiente.

3. - En la muestra de datos de simulación, estimada con intervalos normales de variación, el grado de explicación de la variable a inferir Y es alto, de modo que se puede considerar lineal frente a la matriz de variables X.

4. - No se han encontrado predicciones mejores que con el método PLS en el caso de la red neuronal utilizada en la predicción de la presión de vapor Reid a partir de datos simulados.

5. - Los resultados que se obtienen utilizando PLS dependen fuertemente del número de componentes del modelo. De ahí que un número elevado de componentes puede disminuir fuertemente la capacidad de predicción.

6. - En los casos estudiados, cuando los datos proceden del Sistema de Información, la reducción de la varianza (varianza del error de predicción respecto de la que se parte) se encuentra, en el peor de los casos, en un 50%.

7. - Cuando el error de predicción depende del valor de la variable Y (como ocurre en la predicción de la Penetración del asfalto), su

---

transformación mejora los resultados de predicción y éstos pueden en algunos casos ser equivalentes a los que se obtienen con una red neuronal.

8. - Los datos de planta de tres años de estudio indican que es posible reducir en un 50% la variación del número de octano de la Platformada mediante un modelo PLS.

9. - Se puede construir un modelo híbrido de Platforming que utilice datos de tipo inferencial para detectar el comportamiento de la Unidad frente al número de octano, así como un modelo riguroso que permita realizar en línea un seguimiento de la Planta.

10. - El seguimiento en línea del modelo de Platforming propuesto facilita evaluar la evolución del grado de desactivación del catalizador.

11. - En el caso de la Presión de vapor Reid, una reducción de la desviación estándar del 50% en los tres años de seguimiento en línea ha permitido una disminución en la exportación de Nafta Ligera de casi 30.000t/año.

Con respecto a la construcción de modelos dinámicos:

12. - Se propone un método para el ajuste de la longitud óptima de modelo de impulso finito.

13. - Aplicado este método a datos de simulación, los resultados son equivalentes a los obtenidos por otro programa comercial de identificación.

14. - Por el contrario, cuando se aplica a datos reales de planta, se obtienen modelos diferentes a los aportados por el segundo programa de identificación. En todo caso, estos modelos están truncados a la longitud que genera el mínimo residuo en la variable de respuesta.

15. - Los modelos FIR, obtenidos por el método propuesto, se han ejecutado durante más de un año en una aplicación de Control Multivariable Predictivo, y en este tiempo no se han presentado casos de inestabilidad o degradación de la estrategia de control, lo que obligaría a proceder a una nueva identificación.

---

## **Bibliografia**

---

## 9. Bibliografía

- Aarnio, P.** :”Application of partial least squares modelling in the optimization of a waste - water treatment Plant”, *Analytica Bhimica Acta* , **191** , 457-460 . **(1986)**.
- Acedo Sanchez, J.** :”Instrumentación y control de procesos: Control de columnas de destilación”, *Ingeniería Química*, **Feb.** , 81-89 . **(1995)**.
- Acedo Sánchez, J.** :”Los Analizadores en el control de Procesos, partes I, II, y III”, *Ing. Quím.* , **Oct./Nov./Dic.** , 265-268/191-206/143-145 . **(1990)**.
- Aguilar Rodriguez, E.; Anchieta-Juarez, J.** :”New process model proves accurate in test on catalytic reformer”, *Oil and Gas Journal* , **92(30)** , 93-95 . **(1994)**.
- Albers, J.E.** :”Data Reconciliation with unmeasured variables”, *Hydrocarbon Processing* , **Marzo** , 65-66 . **(1994)**.
- Anchieta-Juarez, J.** :”New model accurately predicts reformat composition”, *Oil and Gas Journal* , **Jan 31** , 93-95 . **(1994)**.
- Aris, R.** :”Manners Makyth modellers”, *CEP* , **69(A2)** , 165-174 . **(1991)**.
- Aris, R.** :”Ends and Beginnings in the mathematical Modelling of Chemical Engineering Systems”, *Chem.Eng.Sci.* , **48(14)** , 2507-2517 . **(1993)**.
- ASTM** :”Standard Practice for validation of Process Stream Analyzers, D 3764 - 92”.
- Baratti, R. y otros** :”Neural Networks modeling of distillation columns”, *Hydrocarbon Processing* , **Junio** , 35-38 . **(1995)**.
- Beachene, Chebre y Hartmann, F.** :”Fuzzy level Control of Distillation
-

drums with anticipation of measured disturbances”, *ERTC*, **Junio**, . . (1997).

**Beard, M.J.** :”Model Predictive Control, a new perspective.”, *Linkage, Honeywell*, **9(2)**, 25-26 . (1992).

**Blanco, C.;Martin, M; Vega, A.; Diaz, M** :”Following of Industrial Processes using empirical behaviour models”, *Computer Oriented Process Engineerin, Amsterdam*, , 171-176 . (1991).

**Blank Thomas B.** :”Data processing using neural Networks”, *Analytica Chimica Acta*, **277**, 273-287 . (1993).

**Blickey, G.J.** :”Distributed Process Control”, *Control Engineering*, **Sept.**, 110 . (1985).

**Booksh, K.S.;Kowalsky, B.P.** :”Theory of Analytical Chemistry”, *Analytical Chemistry*, **66(15)**, 782A-791A . (1994).

**Box, Jenkins** :”Time Series Analysis”, *Wiley, New York*, (1966).

**Brosilow, C. Y Tong, M** :”Inferential Control of Processes. The structure and dynamics of inferential Control Systems”, *AICHE Journal*, **24(3)**, 492-500 . (1976).

**Bullerdiek, E.A. et al.** :”Advanced Controls Impact Refinery Economics”, *OIL GAS*, **3**, 37-41 . (1995).

**Cabellos, V.** :”Las ecuaciones de Modelo en los procedimientos de reconciliación de datos”, *Ing. Quim.*, **22(259)**, 499-505 . (1990).

**Callaghan, P.J. et al.** :”An experimental investigation of predictive controller design by principal component analysis”, *Chem.Eng.Res.Des.*, **66(4)**, 345-356 . (1988).

**Cepsa Tenerife** :”CEPSA, descripción del centro”, . (1996).

**Chapat, C; Depeyre, D.** :”Industrial Process Control in Distillation-Research and Development”, *Entropie*, **25(151)**, 7580 . (1989).

---

- 
- CHEN, Chun-Yu; SUN, Chang-Chuen** :”Inferential control of packed bed reactors.”, *J. of the Chin.I.Chem.Eng.* , **20(1)** , 53-58 . **(1989)**.
- Chia, T.L.; Brosilow, C.B.** :”Modular Multivariable Control of a Fractionator”, *Hydrocarbon Processing* , **70(6)** , 61-66 . **(1991)**.
- Cingara, A et al.** :”Analytical First Order dynamic model of binary distillation column”, *Chem.Eng.Sci* , **45(12)** , 3585-3592 . **(1990)**.
- Corbett, Richard A.** :”Advanced Techniques improve process control”, *OGJ Report* , , 50-63 . **(1987)**.
- Crandall, J.A.** :”How to choose an online analytical system”, *Hydrocarbon Processing* , **February** , 69-74 . **(1995)**.
- Cutler, Ramaker** :”Dynamic Matrix Control. A computer Control Algorithm”, *AICHE* , , . **(1979)**.
- Darby, M.L.; White, D.C.** :”On-Line Optimization of Complex Process Units”, *CEP* , **Octubre** , 51-59 . **(1988)**.
- de Jong Sijmen** :”Facets of PLS”, . **(1994)**.
- Dollar, R. et al.** :”Consider Adaptive Multivariate predictive Controllers”, *Hydrocarbon Processing* , **72(3)** , 109-112 . **(1993)**.
- Draper, Smith** :”Applied Regression Analysis”, *Wiley, New York* , , . **(1966)**.
- Eaton, J.W. y otros** :”Model Predictive control of chemical processes”, *Chemical Engineering Science* , **47(4)** , 705-720 . **(1992)**.
- Eijk, H. van der; Otter, G.J. den; Blauwhoff, P.M.M.; Maxwell, I.E.** :”The Application of Advanced Process Models in Oil and Refining R&D”, *Chem. Eng. Sci.* , **45(8)** , 2117-2124 . **(1990)**.
- Esbensen et al.** :”Multivariate Analysis in Practice”, *Weinbergs Trykkeri AS, Trondheim* , , . **(1996)**.
- Evans, L.B.** :”Process Modelling: what lies ahead”, *CEP* , **86(10)** , 42-44 .
-

(1990).

**Eykhoff, P.** : "System Identification: parameter and State Estimation", *Wiley, New York* , , . (1992).

**Fay Martin, J.** : "Improved principal component analysis of noisy data", *Analytical Chemistry* , **63** , 1058-1063 . (1991).

**Fruehauf, P.S et al.** : "Improve Distillation column Control design", *Chemical Engineering Progress* , **Marzo** , 75-83 . (1994).

**García; Morshedi** : "Quadratic Programming solution of dynamic Matrix Control (QDMC)", *Chem.Eng.Com.* , **46** , 73-87 . (1989).

**Gauglitz G.** : "Principal component regression and partial least squares", *GIT Fachz. Lab.* , **36** , 232-235 . (1992).

**Geladi, P.; Kowalski, B.R.** : "And example of 2 block Predictive Partial Least Squares Regression with Simulated data", *Analytica Chimica Acta* , **185** , 19-32 . (1986).

**Geladi, P.; Kowalski, B.R.** : "Partial Least Squares Regression: a tutorial", *Analytica Chimica Acta* , **185** , 1-17 . (1986).

**Golden, S.** : "Temperature, pressure measurements solve column operating problems", *Oil and Gas Journal* , **93(52) 25/12/95** , . (1995).

**González-Jeanne, P.** : "Statistical Analysis updates online predictive models", *Hydrocarbon Processing* , **71(5)** , 75-76 . (1992).

**Goupy,J.L.** : "Methods for experimental design. Principles and applications for physicist and chemist", *Elsevier, Amsterdam* , **1ªEd.** , .(1993).

**Grosdidier et al.** : "The IDCOM Controller", *Proceedings of the 1988 IFAC workshop on Model Based Process Control* , **Pergamon Press, Oxford** , 31-36 . (1988).

**Haskins, D.E.** : "How to justify small Refinery info-Control System modernization", *Hydrocarbon Processing* , **72(5)** , 69-72 . (1993).

---



- 
- Ildiko, K.** : "NNPPSS: Neural networks based on PCR and PLS components nonlinearized by smoothers and splines", *INCINC'94 The first International Chemometrics InterNet Conference* . (1994).
- Jansson P.A.** : "Neural Networks, an overview", *Analytical Chemistry* , **63** , 357A-362A . (1991).
- Joseph, B, y Brosilow, C.** : "Inferential Control of Processes. Construction of optimal and suboptimal dynamics estimators", *AICHE Journal* , **24(3)** , 500-509 . (1978).
- Joseph, Babu; Brosilow, C.** : "Inferential Control of Processes, Steady state Analysis and Design", *AICHE J.* , **24(3)** , 485-492 . (1978).
- Kane, Les A.** : "Can you use fuzzy", *Hydrocarbon Processing* , **72(11)** , 25-25 . (1993).
- Kaspar, Michael H.** : "Dynamic PLS modelling for Process Control", *Chemical Engineering Science* , **48** , 3447-3461 . (1993).
- Kaspar, Michael H.; Ray, W.H.** : "Chemometric Methods for Process Monitoring and High Performance Controller Design", *AICHE J.* , **38(10)** , 1593-1608 . (1992).
- Keller, J.Y.; Zasadzinski, M.; Darouach, M.** : "Analytical estimator of measurement error variances in data reconciliation", *Comunicacion Autor* , , . 0).
- Kim, Y.H.; Lee, J.M.** : "Improve process measurements with a least squares filter", *Hydrocarbon Processing* , **71(8)** , 143-146 . (1992).
- Kneile, R.** : "Wring more information out of plant data", *Chemical Engineering* , **Marzo** , 110-116 . (1995).
- Kosanovich, K. y otros** : "Improved Process Understanding Using Multiway Principal omponent Analysis", *Ind.Eng.Chem.Res.* , **35** , 138-146 . (1996).
- Kramer, M.A.** : "Nonlinear principal component analysis using autoassociative Neural Networks", *AICHE Journal* , **17(2)** , 233-243 .
-

(1991).

**Krane, H.G. Et Al.** : "Reactions in catalytic Reforming of Naphtas, 5th World Petroleum Congress", , **vol 3** , 39 . (1960).

**Kresta, J.V.; Marlin T.E.; McGregor, J.F.** : "A general Method for the development of inferential Control Schemes using PLS", *Comunicacion Autor*

**Kruskal, J.B.** : "Multilinear methods", *Proceeding of symposia i applied mathematics* , **28** , 75-104 . (1983).

**Kymerly, K. y otros** : "Design of experiments", *Chemical Engineering* , **Noviembre** , 142-147 . (1995).

**Latour, P.R.** : "Quantify auality control's intangible benefits", *Hydrocarbon Processing* , **71(5)** , 61-68 . (1992).

**Ledgerwood, B.** : "Evolution of a Field", *Control Engineering* , **Sept.** , 109 . (1984).

**Lee, J.H.; Morari, M** : "Robust Inferential Control of Multirate Sample-data Systems", *Chem. Eng. Sci.* , **47(4)** , 865-885 . (1992).

**Leffler, W.L.** : "Petroleum Refining for the non-technical Person", *Penwell, Tulse* , , . (1984).

**Li Zheng** : "Nonlinear fitting using neural net algorithm", *Analytical Chemistry* , **65** , 393-396 . (1993).

**Lin, Chin-teng y Lee, CSG** : "Neural Fuzzy Systems", *Prentice-Hall, Upper saddle River, NJ* , , . (1996).

**Lipták, B.G** : "Instrument Engineers Handbook. Process Control", *Chilton* , **Edición Revisada** , . (1985).

**Lipták, B.G** : "Process Control and Optimization Course", *CPA, Amsterda, Marzo* . (1991).

**Ljung** : "System Identification: theory for the user", *Prentice Hall, Englewood*

---

- 
- Cliffs, N.J.* , , . (1987).
- Luyben, W.L.** : "Parallel Cascade Control", *Ind.Engng.Chem.Fundam.* , **12** , 463-467 . 0.
- MacGregor, J.F.** : "Proces monitoring and diagnosis by Multiblock PLS methods", *AICHE Journal* , **40** , 826-838 . (1994).
- MacGregor, John F.** : "Multivariate statistical process control of batch processes using PCA and PLS", *IFAC Internation Symp., ADCHEM* , , . (1994).
- Macías, J.** : "Efecto del cambio de condiciones operativas y calidad alimentación, Platforming Tenerife", *Refinería Tenerife* , , . (1995).
- Macías, J.** : "Test Despentanizadora", *Refinería Tenerife* , , . (1995).
- Malthouse, E.C.** : "Nonlinear partial least squares using neural networks", *INCINC'94 The foirst International Chemometrics InterNet Conference* , , . (1994).
- Marlin, T.E.** : "Process Control, Designing Processes and Control Systems for dynamic Performance", *McGraw-Hill, New York* , , . (1995).
- Martens Harald y otros** : "Partial Least Squares regression on design variables as an alternative to analysis of variance", *Analytica Chimica Acta* , **191** , 133-148 . (1986).
- Martin, G.D.; Turpin, L.E.; Cline, R.P.** : "Estimating Control Function Benefits", *Hydrocarbon Processing* , **70(6)** , 68-73 . (1991).
- Martin, M** : "Aplicación de diferentes métodos de calibración a la determinación de fármacos", *Tesis Doctoral, Universidad de LaLaguna, Facultad de Química* , , .(1997).
- Massart D Luc** : "Chemometrics: a textbook", , , . (1988).
- May,D.L.; Payne, J.T.** : "Validate Process data automatically", *Chemical Engineering* , -**6** , 112-116 .(1992).
-

- Mc Avoy T.J. y otros** : "Nonlinear Inferential Parallel Cascade Control", *Ind.Eng.Chem.Res.* , **35** , 130-137 . **(1996)**.
- McCroskey, P.S.; Wassick, J.M.** : "Integration of model development & advanced Process Control", *Elsevier Science Publishers* , **COPE** , 293-298 . **(1991)**.
- Mcfarlane, Rivera** : "Identification of distillation Systems in practical distillation Control", *Ed. Luyben, Van Nostrand Reinhold, New York* , , . **(1992)**.
- Mizsey, P.** : "How construction affects column control", *Hydrocarbon Processing* , **Feb.** , 53-56 . **(1987)**.
- Moore, C.E.** : "Practical Mathematical Model development", *Hydrocarbon Processing* , **70(7)** , 92-94 . **(1991)**.
- Morari, M.** : "Advances in Process Control Theory", *CEP* , **84(10)** , 60-67 . **(1988)**.
- Morari, M.** : "Process Control and Operations, recent trends and a look at the future, proceedings of the 4th world Congress of Chemical Engineering", *Karlsruhe, editor* , , . **(1991)**.
- Morningred, J.D.; Paden, B.E.; Seborg, D.E.** : "An adaptive Nonlinear Predictive controller", *Chem.Eng.Sci.* , **47(4)** , 755-762 . **(1992)**.
- Muske, K.; Rawlings, J.B.** : "Model predictive control with linear Models", *AIChE J.* , **39(2)** , 262-287 . **(1993)**.
- Ogden-Swift A.** : "Robust multivariable process control technology", *PTQ* , **Winter 96/97** , 89-93 . **(1996)**.
- Ogunnaike B.A.** : "Advanced Multivariate control of a pilot plant distillation column", *AIChE Journal* , **29** , 632-640 . **(1983)**.
- Perino, J.O. y otros** : "Process model based multivariable control alternatives", *Hydrocarbon Processing* , **September** , 65-72 . **(1994)**.
- Peterson, T. y otros** : "A Nonlinear DMC algorithm and its application to a
-

---

semibatch polymerization reactor”, *Chemical Engineering Science* , **47** (4) , 737-753 . (1992).

**Pob San, Y;Landells, K.;Mackay, D** :”Inferential Control- parts, 1 and conclusion.”, *Oil and Gas journal* , **92(nos 48 y 49) 28/11/94 5/12/94** , . (1994).

**Prett, D.M. And Morari, M.** :”Shell Process Control Workshop”, *Butterworks, Stoneham, MA* . (1987).

**Prett; Guillette** :”Optimizing an constrained Multivariable Control of a Catalytic Cracking Unit”, *AICHE Nat. Meeting* , **Abril** , . (1979).

**Qin S. Joe** :”Partial least squares regression for recursive System identification”, *Proceedings of the 32nd conference on decision and control* , , 2617-2621 . (1993).

**Qin; Badgwell** :”An overview of Industrial Model Predictive Control Technology”, *Comunicacion Autor* . (1996).

**Ramasamy, S.; Deshpande, P.B. y otros** :”Consider neural networks for process identification”, *Hydrocarbon Processing* , **June** , 59-62 . (1995).

**Refinería Algeciras** :”RASPA”, *ERTC Conferenc, London* **June** . (1998).

**Richalet et al.** :”Algorithmic Control of Industrial Processes”, *Proceedings of the 4th IFAC Symposium of Identification and System Parameter Estimates.* , , 1119-1167 . (1976).

**Ricker** :”The use of Biased Least Squares Estimators for parameter in Discrete time pulse response Models”, *JEC Res.* , **27** , 343 . (1988).

**San, Y.P. y otros** :”Crude unit advanced controls pass accuracy and repeatability tests”, *Oil and Gas Journal* , **Nov. 28** , 76-80 . (1994).

**Schuler, H.; Schmidt, Ch.U.** :”Model Based measurement techniques in chemical reactor applications”, *Int. Chem. Eng.* , **33(4)** , 559-576 . ().

**SetPoint** :”SMCA Training Manual”, *Setpoint* . (1994).

---

**SetPoint** : "SMCA users guide", *Setpoint* . (1994).

**SetPoint** : "SMCBUILD Users Guide V.1.3.a", *Setpoint* . (1995).

**SetPoint** : "SMC-IDCOM Reference Manual V.1.3", *Setpoint* . (1995).

**SetPoint** : "SMCMODEL Users Guide V.3.0c", *Setpoint* . (1996).

**Shah, P.N.; Macías J.** : "Tenerife Audit Proposal", *Refinería Tenerife* ,  
Noviembre . (1987).

**Shinskey, F.G.** : "Process Control System", *McGraw Hill, New York* , 2<sup>a</sup>Ed.  
 , . (1979).

**Shinskey, F.G.** : "Distillation Control for productivity an energy  
conservation", *McGraw-Hill, New York* , , . (1984).

**Sjoberg, J.** : "Neural networks in System identification", *IFAC SYSID* , , .  
(1994).

**Smith, C.L.** : "Fundamentals of Control Theory", *Chemical Engineering* ,  
October, 15 , 14550 . (1979).

**Smith, C.L.** : "Digital Computer Process Control", *Intext Educational  
Publishers, Scranton* , . (1972).

**Sofer, S.S. y otros** : "From simple regulatory control to computer  
optimization", *Hydrocarbon Processing* , January , 38-42 . (1988).

**Stephanopoulos, G** : "Chemical Process Control, an introduction to Theory  
and Practice", *Prentice-Hall, Englewood Cliffs* , , . (1984).

**Stone, M.; Brooks, R.J.** : "Continuum Regression: Cross-validated  
Sequentially Constructed Prediction Embracing Ordinary Least  
Squares, Partial Least Squares and Principal Components Regression",  
*J.R. Statist.Soc.* , 52(2) B , 237-269 . (1990).

**Taskar,U.; Riggs, J** : "Modelling and optimization of a semiregenerative  
Catalytic Nafta Reformer", *AIChE Journal* , 43(3) , . (1997).

---

- 
- Tay, M.E.** :”Keeping Tabs on Plant energy and mass flows”, *Chemical Engineering* , **103(9)** , 82-88 .(1996).
- Thomas, E.V.** :”A primer on Multivariate calibration”, *Analytical Chemistry* , **66(15)** , 795A-803A . (1994).
- Twu, C.H. y otro** :”Predict octane numbers using a generalized interaction method”, *Hydrocarbon Processing* , **Feb.** , 51-56 . (1996).
- Varios** :”Instrumentacion y control de procesos, INTRO Y CAP. 4”, *Ingeniería Química* , , . (1993).
- Varios** :”Acances en Quimiometría Práctica”, *Universidad de Santiago de Compostela* , , .(1994).
- Visigalli R.; Simola, F.; Tarzia, T.** :”Predicto AGO quality”, *Hydrocarbon Processing* , **72(9)** , 47-51 . (1993).
- Wadi, I.** :”Neural Network model predicts naphtha cut point”, *Oil and Gas Journal* , **November 25** , 67-70 . (1996).
- Walczak Beata** :”Non- Linear modelling of chemical data by combination of linear and neural net methods”, *Analytica Chimica Acta* , **283** , 508-517 . (1993).
- Warren S. Sarle** :”Neural networks and statistical methods”, *SAS Institute* , , 1538-1550 . (1995).
- Weber, R.; Brosilow, C.** :”The use of secondary Measurements to Improve Control”, *AIChE J.* , **18(3)** , 614-623 . (1972).
- Willermaux, J.** :”Future Challenges for basic research in Chemical Engineering”, *Chem.Eng.Sci.* , **48(14)** , 2525-2535 . (1993).
- Wise, B.** :”A comparison of non linear biased regression, neural networks and a genetic algorithm for dynamic model identification”, , , . (1994).
- You Yong** :”Dynamic Process modelling with recurren neural networks”, *AIChE Journal* , **39** , 1654-1667 . (1993).
-

**Zeghal, S.; Isambert, A.; Laouilleau, P.; Boudehen, A.; Depeyre, D.**  
:"Dynamic Simulation: a tool for process Analysis", *Elsevier Science  
Publisher* , **COPE** , 165-170 . **(1991)**.

---



## **Apéndice**

## 10. Apéndice

### 10.1. Listados PRO-II.

#### Modelo Despentanizadora.

```

$ Generated by PRO/II Keyword Generation System <version 2.68 - 08-31-95>
$ Generated on: Sat Nov 29 02:52:38 1997
TITLE DATE=08/05/97
TOLERANCE STREAM=0.1,-1,0.1
DIMENSION METRIC, STDTEMP=0, STDPRES=1.03323
SEQUENCE SIMSCI
CALCULATION TRIALS=40, RVPBASIS=APIN, TVP=37.778, RECYCLE=TEAR
COMPONENT DATA
LIBID 1,H2O/2,IBUTANE/3,BUTANE/4,IPENTANE/5,PENTANE/6,HEXANE/7,CP/ &
      8,CH/9,23MB/10,BNZN/11,HEPTANE/12,23MP/13,MCH/14,2MP/15,3MP/ &
      16,24MP/17,33MP/18,223B/19,3EPN/20,2MHX/21,3MHX/22,AIR
THERMODYNAMIC DATA
METHOD SYSTEM=SRKM, TRANSPORT=PURE, SET=SRKM01, DEFAULT
STREAM DATA
PROPERTY STREAM=S1, TEMPERATURE=70, PRESSURE=1.5, PHASE=M, &
      RATE(WT)=13697, COMPOSITION(M)=4,15.99/5,27.93/6,16.66/7,3.5/ &
      8,10.68/9,16.06/10,1.28/11,0.12/12,2.21/13,1.52, NORMALIZE
PROPERTY STREAM=S2, TEMPERATURE=70, PRESSURE=1.5, PHASE=M, &
      RATE(WT)=35378, ASSAY=LV
D86 STREAM=S2, DATA=0,86/5,92/50,102/95,147/100,167, TEMP=C
SPGR STREAM=S2, AVERAGE=0.7278
LIGHTEND STREAM=S2, COMPOSITION(M)=7,6.72/8,8.16/9,3.02/10,4.73/ &
      11,17.34/12,12.91/13,25.09, PERCENT(WT)=78, NORMALIZE
PROPERTY STREAM=FONDO, TEMPERATURE=115, PRESSURE=2, &
      REFSTREAM=CARGADESP
PROPERTY STREAM=S3, TEMPERATURE=98, PRESSURE=2, REFSTREAM=CARGADESP
PROPERTY STREAM=S10, TEMPERATURE=115, PRESSURE=2, &
      REFSTREAM=CARGADESP, RATE(LV)=58.1
NAME S1,DATOS ACS CABEZA TORRE/S2,FONDO A TANQUE/ &
      CARGADESP,Nafta Ligera sin estabilizar/NL,PENTANO
UNIT OPERATIONS
CALCULATOR UID=CA1, NAME=resultados
RESULT 1,PLF184/2,PLF194-195/3,PLP209/4,PLF208/5,PLU701/ &
      6,PLU705/7,PLU706/8,PLT188/9,PLU873/10,PLT196/ &
      11,PLF163/12,PLF206/13,PLU702/14,PLF200/15,PLF202/ &
      16,PVR/17,5D86/18,LIGEROS/19,R-IC5-NC5/20,R-NC5-C6+/ &
      21,REL. REFLUJO
DEFINE P(1) AS STREAM=CARGADESP, RATE(LV,M3/H)
DEFINE P(2) AS STREAM=S5, RATE(LV,M3/H)
DEFINE P(3) AS COLUMN=V-16, TRAY=1, PRESSURE(KG/CM), PHASE=L
DEFINE P(4) AS STREAM=S7, RATE(LV,M3/H)
DEFINE P(5) AS STREAM=S3, TEMPERATURE(C)
DEFINE P(6) AS COLUMN=V-16, TRAY=40, TEMPERATURE(C)
DEFINE P(7) AS STREAM=S14, TEMPERATURE(C)
DEFINE P(8) AS COLUMN=V-16, TRAY=8, TEMPERATURE(C)
DEFINE P(9) AS COLUMN=V-16, TRAY=1, TEMPERATURE(C)
DEFINE P(10) AS STREAM=S11, TEMPERATURE(C)
DEFINE P(11) AS HX=PH-5, DUTY(KC/H)
DEFINE P(12) AS COLUMN=V-16, REFLUX(LV,M3/H)
DEFINE P(13) AS COLUMN=V-16, TRAY=2, TEMPERATURE(C)
DEFINE P(16) AS STREAM=S7, RVP(D495)
DEFINE P(17) AS STREAM=S5, D86(5,C)
DEFINE P(14) AS STREAM=PLF200, RATE(LV,M3/H)
DEFINE P(15) AS STREAM=PLF202, RATE(LV,M3/H)
DEFINE P(18) AS STREAM=CARGADESP, RATE(KGM/H), COMP=2,5

```

```
DEFINE P(19) AS STREAM=CARGADESP, RATE(KGM/H), COMP=4, DIVIDE, &
    STREAM=CARGADESP, RATE(KGM/H), COMP=5
DEFINE P(20) AS STREAM=CARGADESP, RATE(KGM/H), COMP=2,5, &
    DIVIDE, STREAM=CARGADESP, RATE(KGM/H), COMP=6,21
DEFINE P(21) AS COLUMN=V-16, RRATIO
PROCEDURE
$   ASIGNACIONES A LOS RESULTADOS, PREVIAMENTE DEFINIDOS
$   COMO TAGS DE ACS
$   SE REALIZA LEYENDO LOS VALORES DE CADA UNA DE LAS
$   OPERACIONES UNITARIAS
$
$
DO 10 IX1=1,21
    R(IX1) = P(IX1)
10 CONTINUE
$
$   CALCULO DEL FIRING DE FUEL GAS A PARTIR DEL DUTY REBOILER
$   TOMANDO 1.25 * 9600 Y DENSIDAD 0.7 KG/NM3
$
    R(11) = R (11) / 8400 *1000000
$
$   APERTURA FICHERO DE RESULTADOS PARA TAGS DE ACS
$
OPEN (FILE=CAL01,APPEND)
OUTPUT R(1:21)
RETURN
COLUMN UID=V-16, NAME=DESPENTANIZADORA
PARAMETER TRAY=40,IO DAMPING=0.5
FEED S3,20/S10,40
PRODUCT OVHD(LV)=NL, BTMS(LV)=FONDO,154, SUPERSEDE=OFF
CONDENSER TYPE=BUBB, PRES=1.5, TEST=25
DUTY 1,1
PSPEC PTOP=1.5, DPCOLUMN=0.3
PRINT PROPTABLE=PART
ESTIMATE MODEL=SIMPLE, RRATIO=1, CTEMP=25
SPEC RRATIO, VALUE=1
VARY DUTY=1
TOLERANCE KVALUE=0.01, EQUILIBRIUM=0.01, ENTHALPY=0.01
TRATE SECTION(1)=2,39,V1, PASSES=1, DIAMETER(TRAY)=500, &
    DIAMETER(VAIVE,IN)=1.875, WEIR=50.8, DCC=38.1
TEFFICIENCY(MURP) 2,0.6/39,0.6
EFACTOR 1
METHOD SET=SRKM01
HX   UID=PH-5
    COLD FEED=S14, M=S11, DP=0.5
    OPER CTEMP=130
HX   UID=E13
    HOT FEED=NL, M=S7
    OPER HTEMP=33.54
HXRIG UID=E11, NAME=CARGA EFLUENTE DESPENTA
TYPE TEMA=AES, ORIENTATION=HORI, FLOW=COUN, AREA=98
TUBES FEED=S8, M=S6, LENGTH=5.85, BWG=14, NUMBER=310, &
    PATTERN=90, MATERIAL=CS, FOUL=0.00061445
SHELL FEED=CARGADESP, M=S3, SERIES=3, MATERIAL=CS, &
    FOUL=0.00061445, ID=584.2
BAFFLE NONE
MIXER UID=M1
FEED S1,S2
PRODUCT M=CARGADESP
MIXER UID=M2
FEED PLF202,PLF200
PRODUCT M=S14
PUMP UID=P-15
FEED FONDO
PRODUCT M=S13
OPERATION DP=15
SPLITTER UID=SP1
FEED S6
PRODUCT M=PLF200, M=S5
```

```

OPERATION OPTION=FILL
SPEC STREAM=PLF200, RATE(LV,M3/H), VALUE=60
SPLITTER UID=SP2
FEED S13
PRODUCT M=S8, M=PLF202
OPERATION OPTION=FILL
SPEC STREAM=PLF202, RATE(LV,M3/H), VALUE=40
VALVE UID=V1
FEED S11
PRODUCT M=S10
OPERATION PRESSURE=1.8
RECYCLE DATA
ACCELERATION TYPE=WEGSTEIN, FREQUENCY=5

** UTILIZACION DE CASESTUDY
CASESTUDY NEWCASE=1,OLDCASE=BASECASE

*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, CAUDAL PESADOS KG/H G
CHANGE STREAM=S2,RATE(WT),VALUE=53067

CASESTUDY NEWCASE=2,OLDCASE=BASECASE
*RELACION DE REFLUJO A
CHANGE COLUMN=V-16,SPEC(1),VALUE=2

CASESTUDY NEWCASE=3,OLDCASE=BASECASE
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, TEMPERATURA B
CHANGE STREAM=S1,TEMP,VALUE=70
CHANGE STREAM=S2,TEMP,VALUE=70

CASESTUDY NEWCASE=4,OLDCASE=BASECASE
*RELACION DE REFLUJO A
CHANGE COLUMN=V-16,SPEC(1),VALUE=2
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, TEMPERATURA B
CHANGE STREAM=S1,TEMP,VALUE=70
CHANGE STREAM=S2,TEMP,VALUE=70
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, CAUDAL PESADOS KG/H G
CHANGE STREAM=S2,RATE(WT),VALUE=53067

CASESTUDY NEWCASE=5,OLDCASE=BASECASE
*TEMPERATURA REBOILER DESPENTANIZADORA C
CHANGE HX=PH-5,CTEMP,VALUE=150

CASESTUDY NEWCASE=6,OLDCASE=BASECASE
*RELACION DE REFLUJO A
CHANGE COLUMN=V-16,SPEC(1),VALUE=2
*TEMPERATURA REBOILER DESPENTANIZADORA C
CHANGE HX=PH-5,CTEMP,VALUE=150
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, CAUDAL PESADOS KG/H G
CHANGE STREAM=S2,RATE(WT),VALUE=53067

CASESTUDY NEWCASE=7,OLDCASE=BASECASE
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, TEMPERATURA B
CHANGE STREAM=S1,TEMP,VALUE=70
CHANGE STREAM=S2,TEMP,VALUE=70
*TEMPERATURA REBOILER DESPENTANIZADORA C
CHANGE HX=PH-5,CTEMP,VALUE=150
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, CAUDAL PESADOS KG/H G
CHANGE STREAM=S2,RATE(WT),VALUE=53067

CASESTUDY NEWCASE=8,OLDCASE=BASECASE
*RELACION DE REFLUJO A
CHANGE COLUMN=V-16,SPEC(1),VALUE=2
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, TEMPERATURA B
CHANGE STREAM=S1,TEMP,VALUE=70
CHANGE STREAM=S2,TEMP,VALUE=70
*TEMPERATURA REBOILER DESPENTANIZADORA C
CHANGE HX=PH-5,CTEMP,VALUE=150

```

```
CASESTUDY NEWCASE=9,OLDCASE=BASECASE
*PRESION DE OPERACION D
      CHANGE COLUMN=V-16,PTOP,VALUE=1.7

CASESTUDY NEWCASE=10,OLDCASE=BASECASE
*RELACION DE REFLUJO A
      CHANGE COLUMN=V-16,SPEC(1),VALUE=2
*PRESION DE OPERACION D
      CHANGE COLUMN=V-16,PTOP,VALUE=1.7
      CHANGE COLUMN=V-16,PCOND,VALUE=1.7
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, CAUDAL PESADOS KG/H G
      CHANGE STREAM=S2,RATE(WT),VALUE=53067

CASESTUDY NEWCASE=11,OLDCASE=BASECASE
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, TEMPERATURA B
      CHANGE STREAM=S1,TEMP,VALUE=70
      CHANGE STREAM=S2,TEMP,VALUE=70
*PRESION DE OPERACION D
      CHANGE COLUMN=V-16,PTOP,VALUE=1.7
      CHANGE COLUMN=V-16,PCOND,VALUE=1.7
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, CAUDAL PESADOS KG/H G
      CHANGE STREAM=S2,RATE(WT),VALUE=53067

CASESTUDY NEWCASE=12,OLDCASE=BASECASE
*RELACION DE REFLUJO A
      CHANGE COLUMN=V-16,SPEC(1),VALUE=2
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, TEMPERATURA B
      CHANGE STREAM=S1,TEMP,VALUE=70
      CHANGE STREAM=S2,TEMP,VALUE=70
*PRESION DE OPERACION D
      CHANGE COLUMN=V-16,PTOP,VALUE=1.7
      CHANGE COLUMN=V-16,PCOND,VALUE=1.7

CASESTUDY NEWCASE=13,OLDCASE=BASECASE
*TEMPERATURA REBOILER DESPENTANIZADORA C
      CHANGE HX=PH-5,CTEMP,VALUE=150
*PRESION DE OPERACION D
      CHANGE COLUMN=V-16,PTOP,VALUE=1.7
      CHANGE COLUMN=V-16,PCOND,VALUE=1.7
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, CAUDAL PESADOS KG/H G
      CHANGE STREAM=S2,RATE(WT),VALUE=53067

CASESTUDY NEWCASE=14,OLDCASE=BASECASE
*RELACION DE REFLUJO A
      CHANGE COLUMN=V-16,SPEC(1),VALUE=2
*TEMPERATURA REBOILER DESPENTANIZADORA C
      CHANGE HX=PH-5,CTEMP,VALUE=150
*PRESION DE OPERACION D
      CHANGE COLUMN=V-16,PTOP,VALUE=1.7
      CHANGE COLUMN=V-16,PCOND,VALUE=1.7

CASESTUDY NEWCASE=15,OLDCASE=BASECASE
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, TEMPERATURA B
      CHANGE STREAM=S1,TEMP,VALUE=70
      CHANGE STREAM=S2,TEMP,VALUE=70
*TEMPERATURA REBOILER DESPENTANIZADORA C
      CHANGE HX=PH-5,CTEMP,VALUE=150
*PRESION DE OPERACION D
      CHANGE COLUMN=V-16,PTOP,VALUE=1.7
      CHANGE COLUMN=V-16,PCOND,VALUE=1.7

CASESTUDY NEWCASE=16,OLDCASE=BASECASE
*RELACION DE REFLUJO A
      CHANGE COLUMN=V-16,SPEC(1),VALUE=2
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, TEMPERATURA B
      CHANGE STREAM=S1,TEMP,VALUE=70
      CHANGE STREAM=S2,TEMP,VALUE=70
*TEMPERATURA REBOILER DESPENTANIZADORA C
```

```

CHANGE HX=PH-5,CTEMP,VALUE=150
*PRESION DE OPERACION D
CHANGE COLUMN=V-16,PTOP,VALUE=1.7
CHANGE COLUMN=V-16,PCOND,VALUE=1.7
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, CAUDAL PESADOS KG/H G
CHANGE STREAM=S2,RATE(WT),VALUE=53067

CASESTUDY NEWCASE=17,OLDCASE=BASECASE
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, CAUDAL LIGEROS KG/H E
CHANGE STREAM=S1,RATE(WT),VALUE=20546
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, CAUDAL PESADOS KG/H G
CHANGE STREAM=S2,RATE(WT),VALUE=53067

CASESTUDY NEWCASE=18,OLDCASE=BASECASE
*RELACION DE REFLUJO A
CHANGE COLUMN=V-16,SPEC(1),VALUE=2
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, CAUDAL LIGEROS KG/H E
CHANGE STREAM=S1,RATE(WT),VALUE=20546

CASESTUDY NEWCASE=19,OLDCASE=BASECASE
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, TEMPERATURA B
CHANGE STREAM=S1,TEMP,VALUE=70
CHANGE STREAM=S2,TEMP,VALUE=70
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, CAUDAL LIGEROS KG/H E
CHANGE STREAM=S1,RATE(WT),VALUE=20546

CASESTUDY NEWCASE=20,OLDCASE=BASECASE
*RELACION DE REFLUJO A
CHANGE COLUMN=V-16,SPEC(1),VALUE=2
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, TEMPERATURA B
CHANGE STREAM=S1,TEMP,VALUE=70
CHANGE STREAM=S2,TEMP,VALUE=70
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, CAUDAL LIGEROS KG/H E
CHANGE STREAM=S1,RATE(WT),VALUE=20546
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, CAUDAL PESADOS KG/H G
CHANGE STREAM=S2,RATE(WT),VALUE=53067

CASESTUDY NEWCASE=21,OLDCASE=BASECASE
*TEMPERATURA REBOILER DESPENTANIZADORA C
CHANGE HX=PH-5,CTEMP,VALUE=150
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, CAUDAL LIGEROS KG/H E
CHANGE STREAM=S1,RATE(WT),VALUE=20546

CASESTUDY NEWCASE=22,OLDCASE=BASECASE
*RELACION DE REFLUJO A
CHANGE COLUMN=V-16,SPEC(1),VALUE=2
*TEMPERATURA REBOILER DESPENTANIZADORA C
CHANGE HX=PH-5,CTEMP,VALUE=150
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, CAUDAL LIGEROS KG/H E
CHANGE STREAM=S1,RATE(WT),VALUE=20546
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, CAUDAL PESADOS KG/H G
CHANGE STREAM=S2,RATE(WT),VALUE=53067

CASESTUDY NEWCASE=23,OLDCASE=BASECASE
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, TEMPERATURA B
CHANGE STREAM=S1,TEMP,VALUE=70
CHANGE STREAM=S2,TEMP,VALUE=70
*TEMPERATURA REBOILER DESPENTANIZADORA C
CHANGE HX=PH-5,CTEMP,VALUE=150
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, CAUDAL LIGEROS KG/H E
CHANGE STREAM=S1,RATE(WT),VALUE=20546
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, CAUDAL PESADOS KG/H G
CHANGE STREAM=S2,RATE(WT),VALUE=53067

CASESTUDY NEWCASE=24,OLDCASE=BASECASE
*RELACION DE REFLUJO A
CHANGE COLUMN=V-16,SPEC(1),VALUE=2
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, TEMPERATURA B
CHANGE STREAM=S1,TEMP,VALUE=70

```

```
CHANGE STREAM=S2,TEMP,VALUE=70
*TEMPERATURA REBOILER DESPENTANIZADORA C
CHANGE HX=PH-5,CTEMP,VALUE=150
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, CAUDAL LIGEROS KG/H E
CHANGE STREAM=S1,RATE(WT),VALUE=20546

CASESTUDY NEWCASE=25,OLDCASE=BASECASE
*PRESION DE OPERACION D
CHANGE COLUMN=V-16,PTOP,VALUE=1.7
CHANGE COLUMN=V-16,PCOND,VALUE=1.7
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, CAUDAL LIGEROS KG/H E
CHANGE STREAM=S1,RATE(WT),VALUE=20546

CASESTUDY NEWCASE=26,OLDCASE=BASECASE
*RELACION DE REFLUJO A
CHANGE COLUMN=V-16,SPEC(1),VALUE=2
*PRESION DE OPERACION D
CHANGE COLUMN=V-16,PTOP,VALUE=1.7
CHANGE COLUMN=V-16,PCOND,VALUE=1.7
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, CAUDAL LIGEROS KG/H E
CHANGE STREAM=S1,RATE(WT),VALUE=20546
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, CAUDAL PESADOS KG/H G
CHANGE STREAM=S2,RATE(WT),VALUE=53067

CASESTUDY NEWCASE=27,OLDCASE=BASECASE
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, TEMPERATURA B
CHANGE STREAM=S1,TEMP,VALUE=70
CHANGE STREAM=S2,TEMP,VALUE=70
*PRESION DE OPERACION D
CHANGE COLUMN=V-16,PTOP,VALUE=1.7
CHANGE COLUMN=V-16,PCOND,VALUE=1.7
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, CAUDAL LIGEROS KG/H E
CHANGE STREAM=S1,RATE(WT),VALUE=20546
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, CAUDAL PESADOS KG/H G
CHANGE STREAM=S2,RATE(WT),VALUE=53067

CASESTUDY NEWCASE=28,OLDCASE=BASECASE
*RELACION DE REFLUJO A
CHANGE COLUMN=V-16,SPEC(1),VALUE=2
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, TEMPERATURA B
CHANGE STREAM=S1,TEMP,VALUE=70
CHANGE STREAM=S2,TEMP,VALUE=70
*PRESION DE OPERACION D
CHANGE COLUMN=V-16,PTOP,VALUE=1.7
CHANGE COLUMN=V-16,PCOND,VALUE=1.7
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, CAUDAL LIGEROS KG/H E
CHANGE STREAM=S1,RATE(WT),VALUE=20546

CASESTUDY NEWCASE=29,OLDCASE=BASECASE
*TEMPERATURA REBOILER DESPENTANIZADORA C
CHANGE HX=PH-5,CTEMP,VALUE=150
*PRESION DE OPERACION D
CHANGE COLUMN=V-16,PTOP,VALUE=1.7
CHANGE COLUMN=V-16,PCOND,VALUE=1.7
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, CAUDAL LIGEROS KG/H E
CHANGE STREAM=S1,RATE(WT),VALUE=20546
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, CAUDAL PESADOS KG/H G
CHANGE STREAM=S2,RATE(WT),VALUE=53067

CASESTUDY NEWCASE=30,OLDCASE=BASECASE
*RELACION DE REFLUJO A
CHANGE COLUMN=V-16,SPEC(1),VALUE=2
*TEMPERATURA REBOILER DESPENTANIZADORA C
CHANGE HX=PH-5,CTEMP,VALUE=150
*PRESION DE OPERACION D
CHANGE COLUMN=V-16,PTOP,VALUE=1.7
CHANGE COLUMN=V-16,PCOND,VALUE=1.7
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, CAUDAL LIGEROS KG/H E
CHANGE STREAM=S1,RATE(WT),VALUE=20546
```

```

CASESTUDY NEWCASE=31,OLDCASE=BASECASE
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, TEMPERATURA      B
      CHANGE STREAM=S1,TEMP,VALUE=70
      CHANGE STREAM=S2,TEMP,VALUE=70
*TEMPERATURA REBOILER DESPENTANIZADORA           C
      CHANGE HX=PH-5,CTEMP,VALUE=150
*PRESION DE OPERACION                             D
      CHANGE COLUMN=V-16,PTOP,VALUE=1.7
      CHANGE COLUMN=V-16,PCOND,VALUE=1.7
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, CAUDAL LIGEROS KG/H E
      CHANGE STREAM=S1,RATE(WT),VALUE=20546

CASESTUDY NEWCASE=32,OLDCASE=BASECASE
*RELACION DE REFLUJO                              A
      CHANGE COLUMN=V-16,SPEC(1),VALUE=2
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, TEMPERATURA      B
      CHANGE STREAM=S1,TEMP,VALUE=70
      CHANGE STREAM=S2,TEMP,VALUE=70
*TEMPERATURA REBOILER DESPENTANIZADORA           C
      CHANGE HX=PH-5,CTEMP,VALUE=150
*PRESION DE OPERACION                             D
      CHANGE COLUMN=V-16,PTOP,VALUE=1.7
      CHANGE COLUMN=V-16,PCOND,VALUE=1.7
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, CAUDAL LIGEROS KG/H E
      CHANGE STREAM=S1,RATE(WT),VALUE=20546
*CONDICIONES DE LA ALIMENTACION, CAUDAL PESADOS KG/H G
      CHANGE STREAM=S2,RATE(WT),VALUE=53067

END

```

## Modelo Reformado Catalítico.

```

$ Generated by PRO/II Keyword Generation System <version 2.68 - 08-31-95>
$ Generated on: Tue Apr 14 23:18:49 1998
TITLE DATE=09/04/96
PRINT STREAM=NONE,INPUT=NONE,MBALANCE
$ PRINT STREAM=ALL, TBP,PERCENT=M
$ TOLERANCE STREAM=0.05,-1,0.05,0.04
TOLERANCE STREAM=0.003,-0.5,0.005,0.005, &
      TEMP=-0.02,PRES=0.001,DUTY=0.001,MISC=0.002

DIMENSION METRIC, STDTEMP=0, STDPRES=1.03323
$ SEQUENCE SIMSCI
SEQUENCE CA2,M6,M1,V-8,MV-8,SP1,V-9,MV-9,P1,E1,V-10,MV-10,CN1, &
      CA1,OPT,CA5
CALCULATION TRIALS=40, RVPBASIS=APIN, TVP=37.778, RECYCLE=ALL
COMPONENT DATA
LIBID 1,H2/2,METHANE/3,ETHANE/4,PROPANE/5,IBUTANE/6,BUTANE/ &
      7,IPENTANE/8,PENTANE/9,HEXANE/10,H2O/11,AIR
THERMODYNAMIC DATA
METHOD SYSTEM=SRK, TRANSPORT=PETR, SET=SRK01, DEFAULT
METHOD SYSTEM=SRKM, TRANSPORT=PETR, SET=SRKM01
STREAM DATA

PROPERTY STREAM=PLAT, TEMPERATURE=497.06, PRESSURE=23.47, PHASE=M, &
      RATE(WT)=40474, SET=DEFAULT, ASSAY=LV
D86 STREAM=PLAT, DATA=0,45/5,61/10,70/20,88/30,103/50,127/70,143/ &
      80,152/95,175/100,200, TEMP=C
SPGR STREAM=PLAT, AVERAGE=0.7917
PROPERTY STREAM=REC, TEMPERATURE=20, PRESSURE=23, REFSTREAM=H2, &

```



```
RATE(M)=3200
PROPERTY STREAM=H2, TEMPERATURE=500, PRESSURE=22, PHASE=M, &
  RATE(WT)=1033, COMPOSITION(M)=1,100
PROPERTY STREAM=C4, TEMPERATURE=500, PRESSURE=24, PHASE=M, &
  RATE(WT)=4563, COMPOSITION(M)=5,4.556/6,4.4519, NORMALIZE
PROPERTY STREAM=IC4, TEMPERATURE=500, PRESSURE=24, PHASE=M, &
  RATE(WT)=2250, COMPOSITION(M)=5,100
PROPERTY STREAM=NC4, TEMPERATURE=500, PRESSURE=24, PHASE=M, &
  RATE(WT)=2250, COMPOSITION(M)=6,100
PROPERTY STREAM=C5, TEMPERATURE=500, PRESSURE=24, PHASE=M, &
  RATE(WT)=5573, COMPOSITION(M)=7,5.506/8,3.7463, NORMALIZE
PROPERTY STREAM=IC5, TEMPERATURE=500, PRESSURE=24, PHASE=M, &
  RATE(WT)=3500, COMPOSITION(M)=7,100, NORMALIZE
PROPERTY STREAM=NC5, TEMPERATURE=500, PRESSURE=24, PHASE=M, &
  RATE(WT)=2500, COMPOSITION(M)=8,100, NORMALIZE
PROPERTY STREAM=C1, TEMPERATURE=500, PRESSURE=24, PHASE=M, &
  RATE(WT)=611, COMPOSITION(M)=2,100
PROPERTY STREAM=C2, TEMPERATURE=500, PRESSURE=24, PHASE=M, &
  RATE(WT)=2284, COMPOSITION(M)=3,100
PROPERTY STREAM=C3, TEMPERATURE=500, PRESSURE=24, PHASE=M, &
  RATE(WT)=4428, COMPOSITION(M)=4,100
NAME GASESTAB,GAS DE LA ESTABILIZADORA/LPGESTAB,PRODUCCION DE LPG/ &
  H2,produccion de hidrogeno/C4,butanos/C5,pentanos/C1,metano/ &
  C2,etano
UNIT OPERATIONS

CALCULATOR UID=CA2, NAME=Calculo Efluente Reactores e incrementos
DIMENSION C(100), P(100), R(200)
SEQUENCE STREAM = H2,C1,C2,C3,IC4,NC4,IC5,NC5,PLAT

PROCEDURE

IF (R(50).GT.1) GOTO 20

$ CASO ACTUAL
$ CONDICIONES PARA EL CALCULO DEL NUMERO DE OCTANO Y REESTRUCTURACION DE LA
$ CROMATOGRAFIA, SEGUNDA LINEA CONDICIONES 34870
$ C2F106
  R(51) = 41.37
$
  R(51) = 36.01588
$ C2A114
  R(52) = 871.5
$
  R(52) = 860.74
$ PLT742
  R(53) = 230.86
$
  R(53) = 231.78
$ PLU730
  R(54) = 497.4
$
  R(54) = 489.22
$ PLU736
  R(55) = 496.0
$
  R(55) = 489.4
$ PLF0101
  R(56) = 39.82
$
  R(56) = 39.72
$ PLU713
  R(57) = 200.33
$
  R(57) = 205.09
$ CAUDAL DE LPG CORREGIDO
  R(59) = 14.58
$
  R(59) = 17.5644
$ CAUDAL DE GAS ESTABILIZADORA CORREGIDO
  R(60) = 253
$
  R(60) = 17.3
$ CAUDAL DE GAS SEPARADOR CORREGIDO
  R(61)= 14243
$
  R(61)= 14166
```

```
$ CAUDAL DE GAS BOTELLON EXPANSIÓN CORREGIDO
  R(62) = 132.5
$ R(62) = 0.791
$ CAUDAL DE PLATFORMADA
  R(63) = 61.321
$ R(63) = 56.54
$ CAUDAL REFLUJO ESTABILIZADORA, M3/H, PLF147
  R(64) = 24
$ R(64) = 16.4
$ TEMPEARATURA V-8, PLU804
  R(65) = 27
$ R(65) = 27.6
$ TEMPERATURA CONDENSADOR ESTABILIZADORA, PLU758
  R(66) = 26
$ R(66) = 25.4
$ PRESION SEPARADOR V-8
  R(67) = 21.8
$ R(67) = 17.97
$ PRESION SEPARADOR V-9
  R(68) = 10
$ R(68) = 10
$ PRESION CABEZA ESTABILIZADORA, PLP150
  R(69) = 16.3
$ R(69) = 16.5
$ PRESION VAPOR FONDO ESTABILIZADORA, PLA102
  R(70) = 7.3
$ R(70) = 7.51
$ TEMPERATURA FONDO ESTABILIZADORA, PLU739
  R(71) = 213.9
$ R(71) = 216.4
$ TEMPERATURA CABEZA ESTABILIZADORA, PLU738
  R(72) = 72.1
$ R(72) = 85.43
$ DENSIDAD GAS DE RECICLO, PLA001
  R(73) = 0.353
$ R(73) = 0.359
$ GAS DE RECICLO CORREGIDO, GASREC
  R(74) = 73525
$ R(74) = 65525
$ NUMERO ACTUAL DE OCTANO
  R(75) = 97.2
$ R(75) = 97.9

20 CONTINUE

$ CONDICIONES BASE
$ C2F106
  R(151) = 41.37
$ C2A114
  R(152) = 871.5
$ PLT742
  R(153) = 230.86
$ PLU730
  R(154) = 497.4
$ PLU736
  R(155) = 496.0
$ PLF0101
  R(156) = 39.82
$ PLU713
  R(157) = 200.33

$ BIAS BASE PARA EL VALOR DE LOS CAUDALES Y COND. OPE. DE LA SIMULACION
$ PARA CALIBRACION DEL MODELO
  R(159) = 0
  R(160) = 0
  R(161) = 0
  R(162) = 0
```

```

R(163) = 0
R(164) = 0
R(165) = 0
R(166) = 0
R(167) = 0
R(168) = 0
R(169) = 0
R(170) = 0
R(171) = 0
R(172) = 0
R(173) = 0
R(174) = 0
$ FINAL BIAS

$CALCULO INCREMENTOS ACTUAL - BASE
DO 10 IX1=51,57
    R(IX1-50) = R(IX1) - R(IX1+100)
10 CONTINUE
DO 11 IX1=59,74
    R(IX1-50) = R(IX1) - R(IX1+100)
11 CONTINUE

$CALCULO DEL NUMERO DE OCTANO
R30 = -0.0173+0.0805*R7-0.166*R6+0.191*R5+0.161*R4+0.0476*R3+ &
    0.00932*R2+0.0141*R1
R101 = R30 + 97.2
$ PRESION ABSOLUTA SEPARADOR V-8
R102 = R17 + 1.033
$ PRESION ABSOLUTA SEPARADOR V-9
R103 = R18 + 1.033
$ PRESION ABSOLUTA V-10
R104 = R19 + 1.033
$ PESO MOLECULAR GAS RECICLO
R105 = R23 * 28.8

$ SE ALMACENAN LOS CAUDALES PARA INICIAR EL ALGORITMO DE OPTIMIZACION EN
$ BASE A LA INSTRUMENTACIÓN Y DE ACUERDO CON LA CROMATOGRAFIA MEDIA
$ CAUDAL DE PLAT M3/H, EQUIVALNTE AL 90% DEL CAUDAL DE PLATFORMADA
R118 = 0.9 * R63
CALL SRXSTR(SLVR,R(118),PLAT)
$ CAUDAL MOLAR IC5
R116 =( 0.045*R63* 787/98 + .014*R59* 521/46 ) *72
CALL SRXSTR(SWR,R(116),IC5)
$ CAUDAL MOLAR NC5
R117 =( 0.057*R63* 787/98 + .049*R59* 521/46 ) *72
CALL SRXSTR(SWR,R(117),NC5)
$ CAUDAL MOLAR IC4
R114 =( 0.008*R63* 787/98 + .220*R59* 521/46 + 0.06*R60*0.938*1.293/30+ &
    0.03*R62*0.597*1.293/15+ 0.02*R61*0.377*1.293/10) *58
CALL SRXSTR(SWR,R(114),IC4)
$ CAUDAL MOLAR NC4
R115 =( 0.006*R63* 787/98 + .206*R59* 521/46 + 0.04*R60*0.938*1.293/30+ &
    0.03*R62*0.597*1.293/15+ 0.02*R61*0.377*1.293/10) *58
CALL SRXSTR(SWR,R(115),NC4)
$ CAUDAL MOLAR C3
R113 = (
    .366*R59* 521/46 + 0.26*R60*0.938*1.293/30+ &
    0.10*R62*0.597*1.293/15+ 0.06*R61*0.377*1.293/10) *44
CALL SRXSTR(SWR,R(113),C3)
$ CAUDAL MOLAR C2
R112 = (
    .107*R59* 521/46 + 0.22*R60*0.938*1.293/30+ &
    0.11*R62*0.597*1.293/15+ 0.06*R61*0.377*1.293/10) *30
CALL SRXSTR(SWR,R(112), C2)
$ CAUDAL MOLAR C1
R111 = (
    0.014*R59* 521/46 + 0.06*R60*0.938*1.293/30+ &
    0.07*R62*0.597*1.293/15+ 0.05*R61*0.377*1.293/10) *16
CALL SRXSTR(SWR,R(111), C1)
$ CAUDAL MOLAR H2
R110 = (
    0.33*R60*0.938*1.293/30+ &

```

```

0.62*R62*0.597*1.293/15+ 0.76*R61*0.377*1.293/10)*2
CALL SRXSTR(SWR,R(110), H2)
RETURN

COLUMN UID=V-10
PARAMETER TRAY=20,IO=45 DAMPING=0.8
FEED S38,10
PRODUCT OVHD(M)=GASESTAB,10, LDRAW(WT)=LPGESTAB,1,7000, &
WATER(M)=S10,1, BTMS(M)=S3, SUPERSEDE=OFF
CONDENSER TYPE=MIX, TEST=30,PCOND=17.5
DUTY 1,1/2,20
PSPEC PTOP=17.5, DPCOLUMN=0.4
PRINT PROPTABLE=PART, ITERATION=ESTI, PROFILE=NONE
ESTIMATE MODEL=SIMPLE, CTEMP=30
SPEC REFLUX(LV,M3/H),MINUS,CALC=CA2,R(14),VALUE=0
SPEC TRAY=1, TEMPERATURE(C),MINUS,CALC=CA2,R(16), VALUE=0
$ SPEC COLUMN=V-10,TRAY=20,TEMPERATURE(C),MINUS,CALC=CA2,R(21), &
$ VALUE=0
SPEC COLUMN=V-10,TRAY=20,TEMP,VALUE=213.9
VARY DUTY=1,2
VARY DRAW=LPGESTAB
REBOILER TYPE=KETTLE
MVC UID=MV-10,NAME=COND_SEP_V-10
SPEC COLUMN=V-10,PRESS,TRAY=1,MINUS,CALC=CA2,R(104),VALUE=0,ATOL=0.001
SPEC COLUMN=V-10,PRESS,TRAY=2,MINUS,CALC=CA2,R(104),VALUE=0,ATOL=0.001
VARY COLUMN=V-10,PTOP
VARY COLUMN=V-10,PCOND
MVCPARAMETERS CYCL=30, NOSTOP,IPRINT=SUMMARY, SVSTEP=3, SVERROR=1E-8

CONTROLLER UID=CN1
SPEC STREAM=S3,RVP(D495),MINUS,CALC=CA2,R(20),VALUE=0
VARY COLUMN=V-10,SPEC(3)
CPARAMETER NOSTOP

CALCULATOR UID=CA5
SEQUENCE STREAM = H2,C1,C2,C3,IC4,NC4,IC5,NC5,PLAT,S3
DEFINE P(1) AS STREAM=H2,RATE(WT)
DEFINE P(2) AS STREAM=C1,RATE(WT)
DEFINE P(3) AS STREAM=C2,RATE(WT)
DEFINE P(4) AS STREAM=C3,RATE(WT)
DEFINE P(5) AS STREAM=IC4,RATE(WT)
DEFINE P(6) AS STREAM=NC4,RATE(WT)
DEFINE P(7) AS STREAM=IC5,RATE(WT)
DEFINE P(8) AS STREAM=NC5,RATE(WT)
DEFINE P(9) AS STREAM=PLAT,RATE(WT)

RESULT 1,REND_H2 /2,REND_C1 /3,REND_C2 /4,REND_C3 /5,REND_IC4 / &
6,REND_NC4 /7,REND_IC5 /8,REND_NC5 /9,REND_C6P / &
20,N / &
21,A /22,DENSCRG /23,IBP /24,D10 /25,D50 / &
26,D90 /27,D100 /28,LHSV /29,ERX /30,RONREAL / &
31,CASO

PROCEDURE
R(10) = 0
DO 10 IX1=1,9
R(10) = R(10) + P(IX1)
10 CONTINUE
DO 11 IX1=1,9
R(IX1) = P(IX1)/R(10)*100
11 CONTINUE

OPEN(FILE=MODELOPL,APPEND)
OUTPUT R(1:9),R(20:31)
RETURN

FLASH UID=V-8
FEED S4

```

```

PRODUCT V=S2, L=S22
ISO TEMPERATURE=27, PRESSURE=22.8
MVC UID=MV-8,NAME=COND_SEP_V-8
SPEC CALC=CA2,R(102),MINUS,FLASH=V-8,PRESS,VALUE=0
SPEC CALC=CA2,R(15),MINUS,FLASH=V-8,TEMP,VALUE=0
VARY FLASH=V-8,PRESS,MINI=13,MAXI=26
VARY FLASH=V-8,TEMP,MINI=15,MAXI=55
MVCPARAMETERS CYCL=30, NOSTOP,IPRINT=SUMMARY, SVSTEP=3, SVERROR=1E-8

FLASH UID=V-9
FEED S22
PRODUCT V=GEXP, L=S25
ADIABATIC PRESSURE=11
MVC UID=MV-9,NAME=COND_SEP_V-9
SPEC CALC=CA2,R(103),MINUS,FLASH=V-9,PRESS,VALUE=0
VARY FLASH=V-9,PRESS,MINI=5,MAXI=20
MVCPARAMETERS CYCL=30, NOSTOP,IPRINT=SUMMARY, SVSTEP=3, SVERROR=1E-8

HX UID=E1
COLD FEED=S5, M=S38
OPER CTEMP=152.4
MIXER UID=M1
FEED S1,REC
PRODUCT M=S4
MIXER UID=M6
FEED C1,H2,C2,C3,IC5,NC5,IC4,NC4,PLAT
PRODUCT M=S1

CALCULATOR UID=CA1
DIMENSION P(200), C(200), R(300)

SEQUENCE STREAM=LPGESTAB,GASESTAB,GEXP,REC,GAS,PLAT,S3

$ CONSTANTES DE AJUSTE DE PESOS EN FUNCION OBJETIVO
CONSTANT 1, 0/2, 0/3, 0/4, 0/5, 1/6, 0/7, 0/8, 0/9, 10/ &
10, 10/11, 0/12, 1/13, 1/14, 1/15,1/16, 0/17, 0/ &
$ CONSTANTES DE VARIACION MEDIA ESPERADA 10% DESV. STD
51, 1/52, 1/53, 1/54, 1/55,.05/56, 1/57, 1/58, 1/ &
59,0.01/60,0.01/61, 1/62,100/63,0.01/64, 10/65, 10/66, 1/ &
67, 1
$ VALORES RESULTADOS DE LA SIMULACION
DEFINE P(1) AS FLASH=V-8,PRESS
DEFINE P(2) AS FLASH=V-8,TEMP
DEFINE P(3) AS FLASH=V-9,PRESS
DEFINE P(4) AS COLUMN=V-10,TRAY=1,TEMP
DEFINE P(5) AS COLUMN=V-10,TRAY=2,TEMP
DEFINE P(6) AS COLUMN=V-10,P.TOP
DEFINE P(7) AS COLUMN=V-10,P.COND
DEFINE P(8) AS COLUMN=V-10,REFLUX(LV,M3/H)
DEFINE P(9) AS STREAM=S3,RVP(D495)
DEFINE P(10) AS STREAM=LPGESTAB,RATE(LV,M3/H)
DEFINE P(11) AS STREAM=GEXP,RATE(GV,M3/H)
DEFINE P(12) AS STREAM=GAS,RATE(GV,M3/H)
DEFINE P(13) AS STREAM=S3,RATE(LV,M3/H)
DEFINE P(14) AS STREAM=GASESTAB,RATE(GV,M3/H)
DEFINE P(15) AS STREAM=REC,MW
DEFINE P(16) AS STREAM=REC,RATE(GV,M3/H)
DEFINE P(17) AS COLUMN=V-10,TRAY=20,TEMP
$ VALORES PREVISTOS
DEFINE P(51) AS CALC=CA2,R(102)
DEFINE P(52) AS CALC=CA2,R(15)
DEFINE P(53) AS CALC=CA2,R(103)
DEFINE P(54) AS CALC=CA2,R(16)
DEFINE P(55) AS CALC=CA2,R(22)
DEFINE P(56) AS CALC=CA2,R(104)
DEFINE P(57) AS CALC=CA2,R(104)
DEFINE P(58) AS CALC=CA2,R(14)

```

```

DEFINE P(59) AS CALC=CA2,R(20)
DEFINE P(60) AS CALC=CA2,R(9)
DEFINE P(61) AS CALC=CA2,R(12)
DEFINE P(62) AS CALC=CA2,R(11)
DEFINE P(63) AS CALC=CA2,R(13)
DEFINE P(64) AS CALC=CA2,R(10)
DEFINE P(65) AS CALC=CA2,R(105)
DEFINE P(66) AS CALC=CA2,R(24)
DEFINE P(67) AS CALC=CA2,R(21)

$
RESULT 1,V8_TEMP /2,V8_PRESS/3,V9_PRESS /4,COND_TEMP/5,CV10_TEMP/ &
        6,V10_PTOP /7,PCOND /8,REFLUX /9,PVR /10,LPG /
&
        11,GEXP /12,GAS /13,PLAT /14,GASESTAB/15,GAS_PM
/ &
        16,GRECICLO /17,TFNDV10 / &
        110,OBJ

PROCEDURE
R(110) = 0
DO 10 IX1=1,17
R(IX1) = (P(IX1)-P(IX1+50))
R(IX1+50) = C(IX1)/C(IX1+50)
R(110) = R(110) + (R(IX1+50)*R(IX1))**2
10 CONTINUE
RETURN

OPT UID=OPT
OBJECTIVE CALC=CA1,R(110),MINI,RTOL=0.000001

$SPEC 1
$ SPEC COLUMN=V-10,TRAY=2,TEMP,MINUS,CALC=CA2,R(22),VALUE=0
$SPEC 2
$ SPEC STREAM=S3,RVP(D495),MINUS,CALC=CA2,R(20),VALUE=0

$ 1
VARY STREAM=H2, RATE(WT),MINI=500,MAXI=1200,RTOLER=0.00001,APERT=1, &
    STEPSIZE=10
$ 2
VARY STREAM=C1, RATE(WT),MINI=300,MAXI=800,RTOLER=0.00001,APERT=.5, &
    STEPSIZE=20
$ 3
VARY STREAM=C2, RATE(WT),MINI=100,MAXI=3000,RTOLER=0.00001,APERT=1, &
    STEPSIZE=100
$ 4
VARY STREAM=C3, RATE(WT),MINI=1000,MAXI=6000,RTOLER=0.00001,APERT=5, &
    STEPSIZE=100
$ 5
VARY STREAM=IC4, RATE(WT),MINI= 500,MAXI=6000,RTOLER=0.00001,APERT=5, &
    STEPSIZE=100
$ 6
VARY STREAM=NC4, RATE(WT),MINI= 500,MAXI=6000,RTOLER=0.00001,APERT=5, &
    STEPSIZE=100
$ 7
VARY STREAM=IC5, RATE(WT),MINI=500,MAXI=7000,RTOLER=0.00001,APERT=10, &
    STEPSIZE=200
$ 8
VARY STREAM=NC5, RATE(WT),MINI=500,MAXI=7000,RTOLER=0.00001,APERT=10, &
    STEPSIZE=200
$ 9
VARY STREAM=PLAT,RATE(WT),MINI=20000,MAXI=70000,RT
OLER=0.00001,APERT=100, &
    STEPSIZE=1000
    OPTPARAMETERS IPRINT=NONE,NOSTOP,DPRINT=NONE,OPRINT=NONE,CYCLES=40

PUMP UID=P1
FEED S25

```

```
PRODUCT M=S5
OPERATION PRESSURE=19
SPLITTER UID=SP1
FEED S2
PRODUCT M=GAS, M=REC
OPERATION OPTION=FULL
SPEC STREAM=REC, RATE (GV, M3/H), MINUS, CALC=CA2, R(24), VALUE=0
RECYCLE DATA
ACCELERATION TYPE=WEGSTEIN, START=3

END
```

---

---

## 10.2. Aplicación PLS en MATLAB

Junto con esta memoria se acompaña un disco en formato comprimido con los ficheros de cada programa y los datos correspondientes a cada apartado.

### Instalación

El PC para ejecutar esta Aplicación debe tener instalado MATLAB versión 5. Ejecutando el programa INSTALAR desde MSDOS o Windows se descomprimen los ficheros y se crea el sistema de directorio. En la línea de comando, junto con el nombre de programa, se ha de suministrar como argumento el directorio raíz para esta Aplicación, como por ejemplo:

**A:\INSTALAR C:\MATLAB\PLS**

El nombre que se utilizará por defecto es **C:\MATLAB\PLS**.

Los directorios que se crean en este caso serían:

**C:\MATLAB\PLS\DAT\S1**                      Unidad de Simulación

**C:\MATLAB\PLS\DAT\ESTAB** Sección Estabilizadora Cadu-2

**C:\MATLAB\PLS\DAT\PL**      Unidad de Reformado Catalítico

**C:\MATLAB\PLS\DAT\FOSTER**              Penetración Asfalto

Para que estos programas estén disponibles en el entorno de MATLAB, debe indicarse la ruta de concatenación junto con el resto de las Aplicaciones MATLAB instaladas, para lo cual se edita y modifica el fichero **MATLABRC** del directorio raíz o de arranque de MATLAB. En este fichero se especificará la ruta de búsqueda de la aplicación PLS como aparece en el siguiente ejemplo (se ha supuesto en el directorio "**C:\MATLAB\PLS**").

---



```
matlabpath([...
'c:\MATLAB\PLS',...
';c:\MATLAB\nlpls',...
';c:\MATLAB\dat',...
';c:\MATLAB\control',...
';c:\MATLAB\toolbox\local',...
';c:\MATLAB\toolbox\matlab\datafun',...
';c:\MATLAB\toolbox\matlab\elfun',...
';c:\MATLAB\toolbox\matlab\elmat',...
';c:\MATLAB\toolbox\matlab\funfun',...
';c:\MATLAB\toolbox\matlab\general',...
';c:\MATLAB\toolbox\matlab\color',...
';c:\MATLAB\toolbox\matlab\graphics',...
';c:\MATLAB\toolbox\matlab\iofun',...
';c:\MATLAB\toolbox\matlab\lang',...
';c:\MATLAB\toolbox\matlab\matfun',...
';c:\MATLAB\toolbox\matlab\ops',...
';c:\MATLAB\toolbox\matlab\plotxy',...
';c:\MATLAB\toolbox\matlab\plotxyz',...
';c:\MATLAB\toolbox\matlab\polyfun',...
';c:\MATLAB\toolbox\matlab\sounds',...
';c:\MATLAB\toolbox\matlab\sparsfun',...
';c:\MATLAB\toolbox\matlab\specfun',...
';c:\MATLAB\toolbox\matlab\specmat',...
';c:\MATLAB\toolbox\matlab\strfun',...
';c:\MATLAB\toolbox\matlab\dde',...
';c:\MATLAB\toolbox\matlab\demos',...
';c:\MATLAB\toolbox\nnet\examples',...
';c:\MATLAB\toolbox\nnet\nnet',...
]);
```

Para utilizar cualquier grupo de datos es necesario, una vez en MATLAB, situarse en el directorio correspondiente.

## Módulos Matlab

La relación de programas de MATLAB desarrollados se encuentra en el fichero **FICHERO.DOC** del disco que se acompaña a esta memoria. Los comandos principales de la aplicación en MATLAB y su significado puede visualizarse ejecutando dentro de MATLAB el programa **CONTENTS**.

---

Cada módulo tiene una ayuda que se activa en la línea de comando de MATLAB con la instrucción **HELP programa**, donde programa es el nombre del comando.

---

## 11. Índice alfabético

### A

ACS, ADVANCED CONTROL SYSTEM.....	34
algoritmo	
de backpropagation.....	88
de Hopfield.....	88
Algoritmo	
PLS	80
AMINA-RLPG.....	137
análisis	
de datos multivariante.....	60
Análisis	
de efectos.....	87
ANOVA.....	87

### B

Backpropagation.....	51
Base de Datos de Planta.....	161
BIAS.....	83
<i>Blending</i> .....	149

### C

CADU-2.....	131
Cálculo de Incentivos.....	52
Calibración Multivariante	
LR	
MLR	
PCR	
PLS	73
carga efluente.....	146
CCR.....	143
Centrado.....	63
coeficiente de regresión, r.....	59
<i>Coil</i> .....	133
Colinearidad.....	77
control	
descentralizado.....	39
Control	

Centralizado.....	41
Predictivo Multivariable....	111
Control de Procesos.....	29
<i>Control Digital Directo</i> .....	32
Controladores.....	29
Correlación.....	59
covarianza.....	58

### D

desalado.....	130
Despentanizadora.....	144
<i>desviación estándar</i> .....	58
DFT, Decentralized Failure	
Tolerance.....	48
Diseño	
de experimentos.....	84
factorial.....	85
Factorial Parcial.....	85
DMC.....	112

### E

Efecto	
Medio	86
Efectos	
confundidos.....	87
por Regresión.....	88
Principales.....	86
ENRAF.....	158
Escalado	
estandarización.....	64
<i>espacio</i>	
de componentes principales	62
de variables.....	60
estadística multivariante.....	59

### F

<i>factores de supresión de movimiento</i>	
.....	115
FCC.....	123

FOSTER-2 .....	132	LPG .....	130
<i>fuel</i> .....	123	<b>M</b>	
función sigmoide .....	89	Manual Override .....	31
<b>G</b>		<i>MASTER</i> .....	159
ganancia relativa .....	43	<b>matriz dinámica A</b> .....	115
Gasoil		Medidas de error .....	82
Ligero 130		Método	
Pesado .....	130	PRBS 103	
Gasoil		<i>Model Predictive Heuristic Control</i>	
Medio 130		( <i>MPHC</i> ) .....	117
GIC, Generic Inferential Control		Modelo	
.....	49	de componentes .....	69
<b>H</b>		Modelo dinámico	
HIDRO-1 .....	135	Estructura .....	104
HIDRO-2 .....	136	Modelos dinámicos	
hidrocracking .....	143	Análisis de correlación .....	105
Hidrodesulfuración .....	135, 145	Análisis del Espectro .....	106
<i>hidroskimming</i> .....	123	ARMAX .....	107
- <i>visbreaking</i> .....	123	ARX 107	
Horizonte de Control .....	114	Box-Jenkins .....	108
<i>horizonte de entrada</i> .....	115	Error de Salida, OE .....	108
<b>I</b>		Estimación de parámetros. 108	
IBM-RTPMS .....	159	Estructuras de error de	
IDCOM .....	117	predicción .....	106
IDCOM-M .....	118	FIR 107	
<i>Ideal Resting Values, IRV</i> .....	118	MÓDULOS DE APLICACIONES .....	35
Instrumentación .....	153	<b>N</b>	
Analógica .....	31	nafta	
Interacciones .....	86	estabilizada .....	130
Interpretación PLS .....	82	sin estabilizar .....	130
ISE .....	110	Nafta	
ITAE .....	110	pesada .....	130
<b>K</b>		Nivelación .....	75
Keroseno .....	130	<i>Non-linear Inferential Parallel</i>	
<b>L</b>		<i>Cascade Control, NIPCC</i> .....	49
Loadings		número .....	283
vectores .....	65	Número de componentes .....	71
Logica Difusa .....	46	número máximo de componentes	
		principales .....	63

<b>P</b>		Set Point Tracking.....	31
Parallel Cascade Control.....	49	Sistema	
PCA.....	60	de ganancia nula.....	96
Planta LPG .....	148	de primer orden.....	96
PLATFORMING.....	144	de respuesta inversa.....	96
PRESS.....	84	de segundo orden.....	96
<i>primer componente principal</i> .....	61	no autoregulado .....	96
PROCESO MEROX.....	139	Sistema de Control Avanzado	163
Puntos de Coincidencia.....	119	Sistema de Control BÁSICO e	
PVR.....	144	Instrumentación.....	153
<b>R</b>		Sistema de Control Distribuido	33
realización .....	125	Sistemas Abiertos .....	35
Reconciliación .....	47	Sistemas Expertos.....	46
Redes Neuronales.....	46, 88	<i>SLAVE</i> .....	159
Reformado Catalítico.....	140	<i>Soaker</i> .....	133
Régimen		SPC .....	33
Estacionario .....	92	Stripper.....	145
no estacionario .....	92	<b>T</b>	
Regresión		<i>Tags</i> .....	159
de componentes principales,		TDC-2000 .....	155
PCR.....	78	TDC-3000 .....	156
linear Múltiple, MLR.....	76	Test	
Linear, LR. Regresión		Método	
Univariante .....	76	de entrada en Escalón ...	96
por mínimos cuadrados		Planificación.....	94
parciales o proyección		Realización .....	95
de estructuras latentes,		trayectoria de referencia.....	118
PLS.....	79	<b>U</b>	
rendimiento.....	283	Unidades	
residuo.....	62	de Conversión.....	133
RMSEC.....	82	de Destilación .....	127
RMSEP .....	83	de Tratamiento.....	134
Ruido .....	59	Unifining.....	145
<b>S</b>		<b>V</b>	
<b>sala de control centralizada...</b>	152	Validación.....	74
Scores		cruzada.....	75
coordenadas .....	65	valores de descanso.....	118
Semiregenerative .....	143	varianza.....	58
SEP .....	84	Varianza	

de Calibración ..... 82  
de Validación..... 83  
VAX..... 160  
VISBREAKER..... 133

**Y**

YOKOGAWA..... 158