



NOVA TÉCNICA DE REDUÇÃO DE ORDEM DE MODELO BASEADA EM
RESÍDUOS PONDERADOS NO DOMÍNIO DISCRETO

Leonardo Dorigo Ribeiro

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Orientadores: Argimiro Resende Secchi.

Evaristo Chalbaud Biscaia Junior.

Rio de Janeiro,
Fevereiro de 2011

NOVA TÉCNICA DE REDUÇÃO DE ORDEM DE MODELO BASEADA EM
RESÍDUOS PONDERADOS NO DOMÍNIO DISCRETO

Leonardo Dorigo Ribeiro

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ
COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE) DA
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS
NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM
ENGENHARIA QUÍMICA.

Examinada por:

Prof. Evaristo Chalbaud Biscaia Junior, D.Sc.

Prof. Argimiro Resende Secchi, D.Sc.

Prof. Amaro Gomes Barreto Júnior, D.Sc.

Prof^a. Heloísa Lajas Sanches, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

FEVEREIRO DE 2011

Ribeiro, Leonardo Dorigo

Nova Técnica de Redução de Ordem de Modelo Baseada em Resíduos Ponderados no Domínio Discreto/ Leonardo Dorigo Ribeiro. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2011.

XIV, 112 p.: il.; 29,7 cm.

Orientador: Argimiro Resende Secchi

Evaristo Chalbaud Biscaia Junior.

Dissertação (mestrado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Química, 2011.

Referências Bibliográficas: p.87-94.

1. Introdução. 2. Revisão Bibliográfica. 3. Fundamentos Teóricos. 4. Metodologia da Técnica. 5. Resultados e Discussões. 6. Conclusões e Sugestões. I. Secchi, Argimiro Resende *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Química. III. Título.

Agradecimentos

A Deus por estar presente me ajudando em cada momento da minha vida.

A meus queridos pais, Jorge e Regina, por todo amor, apoio e carinho ao longo destes 26 anos de vida.

Aos meus orientadores, Argimiro Resende Secchi e Evaristo Chalbaud Biscaia Jr., pela orientação, apoio e confiança com que sempre pude confiar.

À minha namorada Marcelle por todo apoio, carinho e compreensão.

Ao professor Enrique Luis Lima pela confiança e amizade a mim fornecidas.

Aos amigos do Lades, pelo companheirismo ao longo de todos estes anos.

Aos grandes amigos que sempre estiveram ao meu lado nos momentos mais difíceis de minha vida.

A todos aqueles que participam da minha vida e não foram citados, o meu sincero muito obrigado.

Resumo da Dissertação apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

NOVA TÉCNICA DE REDUÇÃO DE ORDEM DE MODELO BASEADA EM RESÍDUOS PONDERADOS NO DOMÍNIO DISCRETO

Leonardo Dorigo Ribeiro

Fevereiro /2011

Orientadores: Argimiro Resende Secchi.

Evaristo Chalbaud Biscaia Jr.

Programa: Engenharia Química

Neste trabalho é apresentada uma nova técnica de redução de ordem de modelo aplicada a operações em estágios. O método proposto reduz a dimensão do sistema original baseado na anulação da soma dos resíduos ponderados dos balanços de massa e energia por estágio real. Os balanços nos equipamentos de fundo e topo (tais como condensador, refeedor e prato de alimentação de uma coluna de destilação) são considerados condições de contorno do sistema de equações algébrico-diferenciais de diferenças. O reescalamento da variável independente discreta relativa ao número de estágios foi fundamental para a implementação computacional do método proposto, evitando o acúmulo de erros de arredondamento presente na aproximação polinomial, mesmo de baixo grau, da variável discreta original. Simulações dinâmicas de exemplos de colunas de destilação foram realizadas para verificar o desempenho da técnica de redução de ordem proposta, explorando a natureza algébrico-diferencial das equações. Os resultados obtidos mostram a superioridade do novo procedimento em comparação com o método tradicional de colocação ortogonal discreta. Os custos computacionais das simulações dinâmicas foram menores com o uso do modelo de redução de ordem proposto, mantendo a capacidade preditiva próxima à do modelo completo, demonstrando que esta nova técnica pode ser usada em aplicações em tempo real.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

A NEW TECHNIQUE OF MODEL ORDER REDUCTION BASED ON WEIGHTED
RESIDUALS IN DISCRETE DOMAIN

Leonardo Dorigo Ribeiro

February/2011

Advisors: Argimiro Resende Secchi.

Evaristo Chalbaud Biscaia Jr.

Department: Chemical Engineering

In this work we present a new technique of model order reduction applied to stage operations. The proposed method reduces the dimension of the original system based on null values of moment-weighted sums of heat and mass balances residuals on real stages. Balances related to upstream and downstream devices (such as condenser, reboiler, and feed tray of a distillation column) are considered as boundary conditions of the corresponding difference-differential-algebraic equations system. Scaling of the discrete independent variable related with the stages was crucial for the computational implementation of the proposed method, avoiding accumulation of round-off errors presented even in low-degree polynomial approximations in the original discrete variable. Dynamical simulations of distillation columns were carried out to check the performance of proposed reduction technique and, the differential-algebraic nature of the equations was exploited. The obtained results show the superiority of the new procedure in comparison with the traditional discrete orthogonal collocation method. Lower computational costs were obtained in dynamic simulations with the proposed reduced models, maintaining the predictive capacity close to the complete model, revealing that this new technique can be used in real-time applications.

Índice

Capítulo 1	1
Introdução.....	1
Capítulo 2	4
Revisão Bibliográfica	4
Capítulo 3	13
Fundamentos Teóricos.....	13
3.1. Introdução	13
3.2. Polinômios Ortogonais	13
3.3. Interpolação Polinomial.....	18
3.4. Método dos resíduos ponderados.....	21
3.5. Métodos de quadratura.....	25
3.6. Coluna de Destilação	28
Capítulo 4	31
Metodologia da técnica.....	31
4.1. Introdução	31
4.2. Formulação matemática para o modelo completo da coluna.....	33
4.3. Formulação matemática para o modelo de colocação ortogonal modificada com inclusão dos extremos	37
4.4. Formulação matemática da técnica proposta de redução de ordem de modelo baseada nos resíduos ponderados	41
4.4.1. Exemplo Motivador.....	46
4.5. Formulação do problema de otimização	48
Capítulo 5	50
Resultados e Discussões	50
5.1. Introdução	50

5.2. Estudo de caso	50
5.2.1. Absorvedora Linear	50
5.2.2. Absorvedora não-linear	52
5.2.3. Sistema binário Propeno-Propano	53
5.2.4. Sistema ternário Benzeno – Tolueno – O-xileno	65
5.3. Estudo de otimização do processo	77
5.3.1. Otimização do sistema Propeno- Propano.....	77
5.3.2. Otimização do sistema Benzeno – Tolueno – O-xileno	81
Capítulo 6	85
Conclusão e sugestões	85
Referências bibliográficas	87
Apêndice1 -Adaptabilidade dos resíduos nulos	95
Apêndice2 - Reescalamento do polinômio ortogonal	99
Apêndice3 Desenvolvimento da metodologia proposta.....	100
Apêndice4 Publicações	104

Lista de Figuras

Figura 2.1 - Fluxograma de modelos de ordem reduzida (BENALLOU <i>et al.</i> , 1986).....	9
Figura 3.1 - Coluna de destilação fracionada industrial (WIKIPÉDIA, 2010).	28
Figura 4.1 - Esquema de uma coluna de destilação.....	32
Figura 4.2 - Representação de um estágio de equilíbrio.....	32
Figura 4.3 - Estrutura do problema de otimização	49
Figura 5.1 –Perfil de composição da fase líquida no estado estacionário da absorvedora linear com 32 estágios	51
Figura 5.2 - Perfis de composição da fase líquida no estado estacionário entre os modelos de redução de ordem para a absorvedora linear de 32 estágios	52
Figura 5.3 - Perfis de composição da fase líquida no estado estacionário da absorvedora não-linear com 32 estágios	53
Figura 5.4 - Perfis de composição da fase líquida no estado estacionário entre a colocação ortogonal tradicional e o modelo proposto para a absorvedora não-linear....	53
Figura 5.5 - Perfil de composição molar da fase líquida no estado estacionário do sistema de separação propeno-propano com 177 estágios	55
Figura 5.6 - Perfil de Temperatura no estado estacionário do sistema de separação propeno-propano com 177 estágios	55
Figura 5.7 - Perfis de composição molar da fase líquida e temperatura no estado estacionário do sistema de separação propeno-propano com 51 estágios	56
Figura 5.8 - Perfis de composição da fase líquida e temperatura no estado estacionário para os modelos proposto e completo	57
Figura 5.9 - Perfis de composição molar da fase líquida e temperatura para o estado estacionário do sistema propeno-propano com 101 estágios.....	58
Figura 5.10 - Perfis de composição da fase líquida e temperatura para os modelos de redução de ordem proposto e completo	59
Figura 5.11 - Dinâmica da variável-desvio da composição molar de propeno da fase líquida no topo da coluna de 51 estágios	60
Figura 5.12 - Dinâmica do valor absoluto da composição de propeno da fase líquida no topo da coluna de 51 estágios	61
Figura 5.13 - Dinâmica da variável-desvio de temperatura no topo da coluna com 51 estágios	61

Figura 5.14 - Dinâmica de temperatura no topo da coluna com 51 estágios de equilíbrio	62
Figura 5.15 - Dinâmica da variável-desvio da composição molar de propeno da fase líquida no fundo da coluna com 51 estágios	63
Figura 5.16 - Dinâmica da composição de propeno da fase líquida no fundo da coluna com 51 estágios	63
Figura 5.17 - Dinâmica da variável-desvio de temperatura no topo da coluna com 51 estágios	64
Figura 5.18 - Dinâmica da temperatura no fundo da coluna com 51 estágios	64
Figura 5.19 – Perfis estacionários de composição da fase líquida e temperatura para o sistema ternário com 22 estágios	66
Figura 5.20 - Perfil de O-xileno da fase líquida para o sistema de separação ternário com 22 estágios	66
Figura 5.21 – Perfis de composição da fase líquida e temperatura estacionários para uma variação na ordem de redução	67
Figura 5.22 - Perfis de composição de o-xileno da fase líquida.....	68
Figura 5.23 - Dinâmica da variável-desvio da composição molar de benzeno da fase líquida no topo da coluna com 22 estágios.....	69
Figura 5.24 - Dinâmica da composição molar de benzeno da fase líquida no topo da coluna com 22 estágios.....	70
Figura 5.25 - Dinâmica da variável-desvio da temperatura no topo da coluna com 22 estágios	70
Figura 5.26 - Dinâmica da temperatura no topo da coluna com 22 estágios.....	71
Figura 5.27 - Comportamento da dinâmica da composição de benzeno da fase líquida no topo para uma variação na redução da ordem do modelo	71
Figura 5.28 - Comportamento da composição de benzeno da fase líquida no topo para uma variação na redução da ordem do modelo	72
Figura 5.29 - Comportamento da dinâmica da temperatura de topo para uma variação na redução da ordem do modelo.....	72
Figura 5.30 - Comportamento da temperatura de topo para uma variação na ordem	73
Figura 5.31 - Comportamento da dinâmica da variável de controle da composição de O-xileno da fase líquida.....	73

Figura 5.32 - Dinâmica da composição molar de o-xileno da fase líquida no fundo da coluna com 22 estágios.....	74
Figura 5.33 - Dinâmica da variável-desvio da temperatura no fundo da coluna com 22 estágios	74
Figura 5.34 - Dinâmica de temperatura no fundo da coluna com 22 estágios	75
Figura 5.35 - Comportamento da dinâmica da composição de o-xileno da fase líquida no fundo.....	75
Figura 5.36 - Comportamento da composição molar de o-xileno da fase líquida no fundo para uma variação na redução da ordem do modelo	76
Figura 5.37 - Comportamento da dinâmica de temperatura no fundo para uma variação na redução da ordem do modelo.....	76
Figura 5.38 - Comportamento da temperatura de fundo para uma variação na redução da ordem do modelo	77
Figura 5.39 - Perfil de composição molar de propeno da fase líquida no topo para uma redução de 73 % na ordem do modelo completo.....	79
Figura 5.40 - Perfil de composição molar de propeno da fase líquida no topo para uma redução de 76 % na ordem do modelo completo.....	80
Figura 5.41 - Perfil de composição de propeno da fase líquida no topo para uma redução de 80 % na ordem do modelo completo	80
Figura 5.42 - Perfil de composição de o-xileno da fase líquida no topo para uma redução de 55 % na ordem do modelo completo	83
Figura 5.43 - Perfil de composição de o-xileno da fase líquida no topo para uma redução de 61 % na ordem do modelo completo	83
Figura 5.44 - Perfil de composição de o-xileno da fase líquida no topo para uma redução de 68 % na ordem do modelo completo	84

Lista de Tabelas

Tabela 3.1 - Polinômios Ortogonais no domínio discreto	17
Tabela 5.1 - Parâmetros do modelo linear da absorvedora.....	51
Tabela 5.2 - Parâmetros do modelo não-linear da absorvedora	52
Tabela 5.3 - Especificação dos parâmetros do sistema de separação propeno-propano	54
Tabela 5.4 –Resultados para o caso descrito por SERFERLIS & HRYMAK (1994)....	55
Tabela 5.5 -Desvio de composição e temperatura entre os modelos de redução 2 X 2 .	56
Tabela 5.6 - Soma dos erros do sistema binário para a temperatura e composição de Propeno.....	57
Tabela 5.7 - Desvio de composição e temperatura para uma redução 2 X 2.....	58
Tabela 5.8 - Soma dos erros absolutos para a temperatura e composição de propeno para uma variação na ordem da redução	59
Tabela 5.9 – Especificação dos parâmetros do sistema ternário	65
Tabela 5.10 -Desvios de composição e temperatura do sistema ternário com 22 estágios	67
Tabela 5.11 - Resultado da soma dos erros em cada estágio para a composição de benzeno e o-xileno.....	68
Tabela 5.12 –Soma dos erros em cada estágio para a temperatura	68
Tabela 5.13 - Especificação dos parâmetros para o estudo de otimização do ponto de alimentação de carga	78
Tabela 5.14 - Resultado da otimização do sistema de separação propeno - propano para os modelos de redução de ordem e completo	78
Tabela 5.15 - Especificação dos parâmetros de simulação para determinação do prato ótimo de alimentação de carga	81
Tabela 5.16 - Resultado da otimização do sistema ternário de componentes	82

Nomenclatura

y_m, y_n	Polinômio ortogonal
$W(x)$	Função peso
$P_n(x)$	Polinômio ortonormal de grau n
l_j	Polinômio interpolador de lagrange
$A_{i,j}^+, A_{i,j}^-$	Matrizes de discretização
M_i	Acumulo de massa na fase líquida do estágio i
x_i	Composição molar na fase líquida no estágio i
y_i	Composição molar na fase vapor no estágio i
V_i	Vazão molar na fase vapor do estágio i
L_i	Vazão molar na fase líquida do estágio i
W_i	Retirada lateral na fase vapor do estágio i
U_i	Retirada lateral na fase líquida do estágio i
H_i	Entalpia molar na fase vapor do estágio i
h_i	Entalpia molar na fase líquida do estágio i
h_{Fi}	Entalpia molar na fase líquida da alimentação no estágio i
K_i	Constante de equilíbrio do componente i no estágio j
Q_i	Carga térmica do estágio i
$H_i^k)^{ig}$	Entalpia na fase vapor do componente k no estágio i
considerando mistura de gás ideal	
$h_i^k)^{ig}$	Entalpia na fase líquida do componente k no estágio i
considerando solução ideal	
x_i	Composição molar de um componente no ponto de
interpolação i	
NR	Número de pontos de colocação na seção de retificação
NE	Número de pontos de colocação na seção de esgotamento

NT	Número de pontos de interpolação total
nc	Número de componentes
s_j	Variável representativa do estágio j reescalado
$s^{(j)}$	Ponto de interpolação j
$R^{(n+1)}(s^{(i)}, t)$	Resíduo de grau n+1 no ponto de interpolação $s^{(i)}$ devido à aproximação polinomial
$f[x^{n+1}(s^{(i)} - 1)]$	Diferença de primeira ordem positiva
$f[x^{n+1}(s^{(i)} + 1)]$	Diferença de primeira ordem negativa
$x_j^{completo}$	Composição molar de propeno no estágio j determinado pelo modelo completo
$x_j^{momento}$	Composição molar de propeno no estágio j determinado pelo modelo baseado no método dos momentos
$R_k^{(n+1)}(t)$	Soma dos resíduos ponderados para o momento k
w_j	Peso da quadratura no ponto de interpolação j
α	Volatilidade relativa
β	Razão entre a vazão molar na fase líquida e a vazão molar na fase vapor

Capítulo 1

Introdução

A engenharia química é repleta de processos de extrema complexidade. A alta interdependência entre as diversas variáveis presentes em um processo faz com que o comportamento da planta frente a perturbações seja de difícil previsão, daí a necessidade em modelar e simular esses processos.

Em processos que apresentam sistemas de grande dimensão, como os de separação por estágios, um grande número de equações algébrico-diferenciais deve ser resolvido, o que pode levar a um tempo de processamento computacional excessivo.

O elevado custo computacional para resolução desses sistemas de grande dimensão torna o uso de modelos de redução de ordem de fundamental importância para problemas de otimização e controle.

O objetivo da otimização de processos em tempo real é obter os *setpoints* das malhas de controle do processo de forma a aumentar os lucros (minimizar custos), obedecendo aos limites operacionais da planta. Para conseguir este ponto ótimo de operação é necessário um modelo matemático que descreva o processo com boa precisão. Porém, esses modelos têm por característica elevada dimensão, principalmente quando se trata de modelos de processo de separação por estágios, o que torna o tempo computacional muito elevado para determinação da condição ótima de operação da planta em estado estacionário, dificultando, ou em casos mais críticos até restringindo a sua implantação em tempo real (SIMÕES, 2000).

A estratégia do controle preditivo consiste em determinar a trajetória de uma variável controlada dentro de um horizonte de controle, através do conhecimento da dinâmica do processo em estudo. A determinação desta trajetória permite otimizar uma função objetivo em um horizonte de predição. Durante a otimização da função objetivo, é necessário solucionar o sistema de equações algébrico-diferenciais do modelo várias vezes, até a determinação da trajetória ótima da variável controlada em cada instante de

tempo. Modelos de processos de separação por estágio são descritos por um sistema de equações algébrico-diferenciais de elevada dimensão, o que pode induzir a um elevado esforço computacional para obtenção da solução do sistema a cada instante de tempo. Este fato pode impossibilitar a implantação do controle preditivo em situações que o tempo de cálculo para determinação da solução for maior que o tempo de amostragem, inviabilizando o uso da estratégia em tempo real (SIMÕES, 2000).

Uma das abordagens para reduzir a limitação do tempo computacional na etapa de simulação é o desenvolvimento de modelos de redução de ordem, que apresentam menor número de equações algébrico-diferenciais e conseguem descrever com exatidão o comportamento dinâmico do modelo completo.

O objetivo desta dissertação é apresentar uma nova técnica de redução de ordem de modelo de operações em estágios, descrito por um sistema de equações algébrico-diferenciais de diferenças, baseada no método dos resíduos ponderados, mostrando sua vantagem frente à técnica de colocação ortogonal discreta tradicional e sua utilização para aplicações em tempo real.

Essa técnica consiste na aplicação do método dos momentos seguido da aproximação da soma dos resíduos ponderados por Quadratura de Gauss-Lobatto, com a extensão dos resíduos nos contornos, para a redução do número de equações diferenciais de diferença do modelo. O atendimento às condições de contorno é garantido pela anulação dos resíduos nos respectivos contornos. Adicionalmente, para evitar a propagação dos erros de arredondamento observado nas técnicas de redução de ordem de sistemas discretos por aproximação polinomial, é proposta uma normalização no número de estágios e a correspondente adequação dos polinômios de Hahn para cômputo dos pontos nodais e pesos da quadratura.

Esta dissertação está organizada em cinco capítulos; incluindo esta introdução. O próximo capítulo, intitulado “Revisão Bibliográfica”, trata de um breve resumo dos métodos existentes de redução de ordem de modelo. No Capítulo 3; intitulado “Fundamentos Teóricos”, são descritos os fundamentos essenciais para a construção das metodologias de redução de ordem presentes no capítulo seguinte. No Capítulo 4 é

apresentada à metodologia da técnica de redução de ordem de modelo proposta. No Capítulo 5, intitulado “Resultados”, são ilustrados os resultados mais relevantes, acompanhados por uma análise e discussões. Finalmente, no Capítulo 6, são apresentadas as conclusões obtidas neste trabalho e sugestões para pesquisas futuras.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

Modelos matemáticos rigorosos de processos de separação por estágios, com balanços de massa e energia, resultam em um conjunto de equações algébrico-diferenciais de diferenças de dimensão elevada, tornando-os impraticáveis para aplicações em tempo real.

O desafio para reduzir o custo computacional de tais sistemas motivou o desenvolvimento de várias técnicas de redução de ordem, tais como os modelos compartimentais (ESPAÑA e LANDAU, 1978; BENALLOU *et al.*, 1986; MUSCH e STEINER, 1993) e suas variantes de modelagem agregada (LÉVINE e ROUNCHON, 1991; LINHART e SKOGESTAD, 2009) e separação de escalas de tempo (KUMAR e DAOUTIDIS, 2003) baseadas na análise de perturbações singulares, propagação de onda não-linear (MARQUART, 1986; KIENLE, 2000), linearização de modelo (WAHL e HARRIOT, 1970; GEORGAKIS e STOEVEER, 1982) e colocação ortogonal (WONG e LUUS, 1980; CHO e JOSEPH, 1983; STEWART *et al.*, 1985; PINTO e BISCAIA, 1987; SEFERLIS e HRYMAK, 1994).

Os primeiros modelos de redução de ordem de processos de separação por estágios foram os modelos linearizados de WAHL e HARRIOT (1970). Ao estudarem o modelo de separação de um sistema binário, os autores propuseram a substituição do sistema de equações diferenciais de diferenças, que descrevem o balanço de massa por estágio, por uma única equação diferencial de diferença que descreve o balanço de massa da média das composições em cada estágio da coluna. Através de linearização ao redor de um ponto de operação no estado estacionário e posterior aplicação da transformada de Laplace nesta equação, um modelo de ordem reduzida é obtido, onde os pólos e zeros desta função de transferência são determinados pelo conhecimento das condições no estado estacionário. Seguindo essa metodologia, GEORGAKIS e STOEVEER (1982) propuseram modelos linearizados de estágios agregados dos processos de separação. Estes agregados são constituídos por um número especificado de estágios adjacentes de tamanho uniforme, apresentando comportamento dinâmico

similar ao de um estágio individual. Porém esses modelos são de aplicação bastante restrita, devido à validade apenas em pequenas regiões próximas ao ponto de linearização (SIMÕES, 2000).

ESPAÑA e LANDAU (1975) propuseram o uso de modelos bilineares de redução de ordem, substituindo os modelos lineares restritos à aplicação em pequenas regiões ao redor dos pontos de linearização. Estes modelos quando aplicados em coluna de destilação têm dimensão correspondente ao número de estágios de separação, o que torna o problema complexo para sistemas com elevado número de estágios. Objetivando contornar este problema ESPAÑA e LANDAU (1978) consideraram que sistemas de separação por estágios podem ser representados por sistemas compartimentais, divididos em três seções: condensador, seção de retificação e seção de esgotamento; sendo descrito por 3 variáveis de estado e 8 parâmetros. Porém, esta estratégia de redução tem o inconveniente de necessitar do conhecimento do modelo completo para identificação dos parâmetros, que só têm validade nas regiões de operação próximas aos pontos de estimação. Além disso, esta técnica só fornece informações da relação entre a variável de saída (concentração no topo) e as variáveis de entrada (vazão de alimentação, razão de refluxo e carga térmica do refeedor). Este modelo de redução de ordem apresentou boa eficácia em reproduzir a dinâmica do modelo completo de uma coluna de destilação simples, com apenas uma alimentação.

A aplicação da técnica de colocação ortogonal para resolução de problemas de valor no contorno descritos por equações diferenciais no domínio contínuo é uma metodologia bem desenvolvida (VILLADSEN e MICHELSEN, 1978). OSBORNE (1971) transformou o modelo de equações diferenciais de diferenças, para processos por estágio, em equações diferenciais parciais ao tratar a variável discreta do número de estágios como variável contínua associada à altura da coluna. WONG e LUUS (1980) foram os primeiros a aplicarem a colocação ortogonal para a redução de ordem de sistemas de separação por estágios. Seguindo a idéia de OSBORNE (1971), os autores transformaram as equações diferenciais de diferenças em equações diferenciais parciais com posterior aplicação do método da colocação ortogonal no domínio contínuo, sendo as raízes do polinômio ortogonal de Jacobi os pontos de colocação. A técnica, apesar de reduzir bastante o número de equações a serem resolvidas, não preserva o balanço de massa no estado estacionário. Estes autores concluíram que a metodologia é eficiente

para colunas de recheio, porém inadequada para coluna de pratos, pois o sistema não mantém a natureza discreta das equações que descrevem o modelo completo.

CHO e JOSEPH (1983, 1984) mostraram que é possível aplicar o método da colocação ortogonal diretamente no domínio discreto pela seleção adequada dos polinômios.

Trabalhos posteriores propostos por SRIVASTAVA e JOSEPH (1985, 1987) apresentaram aspectos mais específicos da colocação, como determinação dos pesos e família dos polinômios, e assim como CHO e JOSEPH (1983, 1984) demonstraram que é possível aplicar o método da colocação ortogonal sem a necessidade da transformação do sistema de equações diferenciais de diferenças em equações diferenciais parciais.

Posteriormente, STEWART *et al.* (1985) mostraram que a família dos polinômios de Hahn apresenta resultados melhores frente à família dos polinômios de Jacobi, usados por CHO e JOSEPH (1983, 1984), para obtenção de modelos de ordem reduzida confiáveis. Esses polinômios, quando aplicados em processos de separação por estágios com zonas de pequeno enriquecimento por estágio (zona de *pinch*), tal como ocorre em zonas com produto de alta pureza e pequena razão de refluxo, obtiveram baixa eficiência na aproximação polinomial, sugerindo estudos de funções polinomiais mais flexíveis.

Nesse trabalho STEWART *et al.* (1985) apresentaram critérios de comparação entre os métodos de redução de ordem. Os critérios propostos são:

- O método de redução de ordem deverá preservar a estrutura do modelo completo;
- O método deverá convergir para a solução do modelo completo de separação por estágio;
- O método deverá prever o estado de qualquer estágio. Isto é essencial para aplicações de controle de processo;
- O modelo reduzido deverá ter seus parâmetros ajustados de forma otimizada para reproduzir o modelo completo com a menor ordem possível;
- O ajuste dos parâmetros do modelo deverá ser feito de forma explícita, não deixando nenhum parâmetro para ser ajustado por tentativa e erro;

- O método não deverá necessitar do conhecimento da solução do modelo completo;
- O método deverá aceitar problemas não-lineares e multicomponentes de forma direta;
- O método deverá permitir a escolha livre de rotinas termodinâmicas;
- O método deverá permitir o uso de eficiência local por estágios.

O método apresentado por STEWART *et al.* (1985) apresenta todas essas características.

SWARTZ e STEWART (1986) demonstraram o uso da técnica de colocação ortogonal aplicada em elementos finitos com condições de contorno definidas pelas discontinuidades das fases. Os pontos de discontinuidades seriam determinados por critério termodinâmico e incluídos no sistema de equações a serem resolvidos pelo algoritmo global de Newton.

Adotando a linha de estudo elaborada por SWARTZ e STEWART (1986), HUSS e WESTERBERG (1996) apresentaram modelos de redução de ordem baseados na técnica de colocação ortogonal aplicada em elementos finitos com o uso de duas transformações de variáveis, uma transformação exponencial no número de pratos e uma transformação para tangente hiperbólica na composição molar. A presença das transformações nas variáveis evita problemas na determinação de perfis assintóticos que aparecem nos extremos da coluna, em separações de alta pureza, quando as composições se aproximam de 0 ou 1.

PINTO e BISCAIA (1987) apresentaram quatro estratégias diferentes de redução de ordem para tratar das discontinuidades que ocorrem entre as seções de estágios de um processo de separação. Os resultados apresentados por essas estratégias identificaram uma dificuldade no uso de um único polinômio ortogonal para descrever o perfil de composição da coluna, isso se deve ao fato da função polinomial não conseguir descrever a discontinuidade que ocorre no prato de alimentação da coluna. Além disso, os autores observaram que uma aproximação por uma função polinomial para a entalpia molar e para os fluxos molares internos, apenas ocasionaria perda de precisão sem grande redução de esforço computacional.

SECCHI (1988) realizou uma extensão do estudo desenvolvido por PINTO e BISCAIA (1987) relativa aos métodos de redução de ordem de modelos de separação em estágios, adotando a aproximação polinomial por seção, sem extrapolação. Este modelo foi utilizada na estratégia de controle adaptativo off-line, que consiste em obter as ações de controle para o sistema real a partir das estimativas dos parâmetros feitas sobre o modelo de ordem reduzida.

ALMEIDA (1987) realizou um estudo visando a incorporar uma relação entre a formulação geral do método dos resíduos ponderadas e as características particulares de cada problema da engenharia química. Este trabalho levou o autor a concluir que existe uma estreita relação entre as características das equações diferenciais que descrevem o problema estudado e a construção da metodologia para aplicação do método dos resíduos ponderados. Portanto, torna-se fundamental uma análise criteriosa do resíduo, e conseqüente identificação e geração dos polinômios ortogonais mais apropriados, ocasionando com isso, um aumento significativo na eficiência da aplicação e na qualidade dos resultados obtidos.

SOLLETI (1990) dando continuidade aos estudos de PINTO e BISCAIA (1987) desenvolveu modelos de ordem reduzida baseados na colocação ortogonal para simular uma coluna de destilação no estado estacionário com diferentes configurações de alimentação e retirada de carga. Esta coluna foi dividida em várias seções, que foram aproximadas por polinômios ortogonais discretos sem extrapolação. Os resultados mostram que o método é eficiente e preciso em reproduzir os perfis estacionários de colunas de grande dimensão, e que a aproximação por seção sem extrapolação, com a utilização de polinômios no domínio discreto apresenta melhores resultados que os obtidos por RAVAGNANI (1989), que utilizou a aproximação global no domínio contínuo.

BENALLOU et al. (1986) sumarizaram na Figura 2.1 as técnicas de geração de modelos reduzidos existentes na época em função das hipóteses consideradas e da estrutura inicial do modelo (linear, bilinear, não-linear, contínuo) e apresentaram uma técnica alternativa de modelo compartimental. O modelo compartimental para processos de separação por estágios foi desenvolvido com base na idéia de que os estágios de separação da coluna possam ser agregados formando compartimentos de estrutura

equivalente a um estágio original. Isso garante a preservação do balanço de massa do sistema e a determinação exata do modelo completo no estado estacionário. O modelo proposto apresentou resultados exatos para o estado estacionário, enquanto o modelo de redução baseado na técnica de colocação apresentou um desvio do estado estacionário do modelo de ordem elevada. Porém, a comparação feita entre as respostas transientes dos modelos de redução apresentou maior precisão para o modelo de colocação frente ao modelo compartmental.

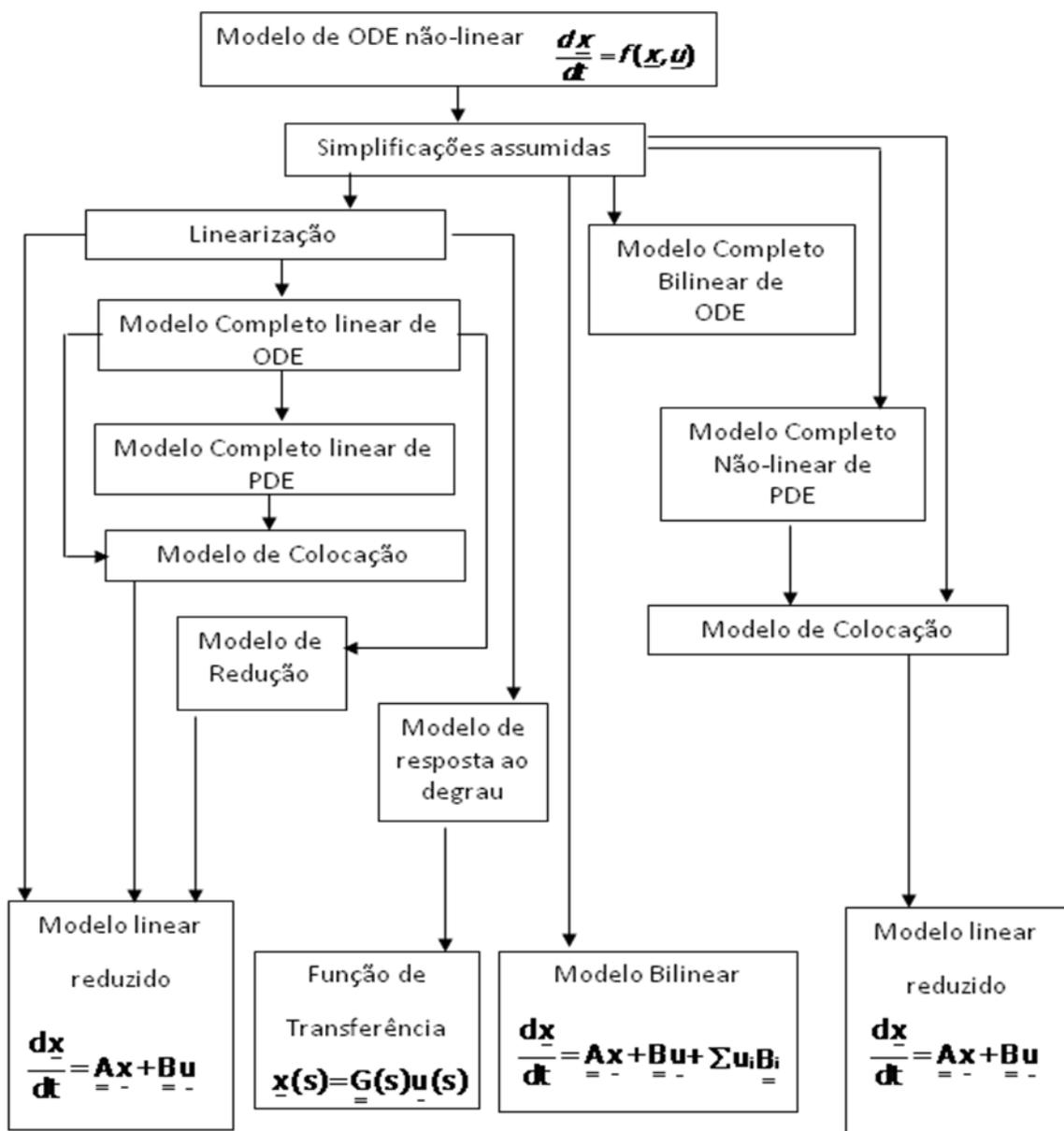


Figura 2.1 - Fluxograma de modelos de ordem reduzida (BENALLOU *et al.*, 1986).

SIMÕES (2000) utilizou a técnica da colocação ortogonal, utilizando como pontos de colocação as raízes do polinômio ortogonal de Hahn, em uma coluna de destilação propeno-propano no estado estacionário. Os resultados das simulações comprovaram viabilidade na aplicação da estratégia de redução, com a vantagem de uma redução de 97% no tempo computacional gasto pelo modelo completo.

MUSCH e STEINER (1993) apresentaram uma extensão do modelo compartimental proposto por BENALLOU *et al.* (1986), este modelo compartimental modificado mantém as equações diferenciais de diferença de composição em cada estágio, com isso a dinâmica de cada componente por prato não é alterada. As condições de contorno por compartimento são aplicadas para o balanço de massa total, para as equações termodinâmicas e hidrodinâmicas. A técnica foi aplicada em uma coluna de destilação binária, e os resultados apresentaram melhor desempenho em relação ao compartimental tradicional.

ROCHA (1998) desenvolveu uma metodologia para aplicação da colocação ortogonal spline em elementos finitos móveis para resolução de equações diferenciais parciais. Os resultados obtidos demonstraram que este método é superior ao método dos elementos finitos móveis, quando aplicados às equações com moderados gradientes. Para gradientes maiores ou ondas de choque, a colocação ortogonal spline em elementos finitos móveis obteve resultados inadequados.

KIENLE (2000) propôs um método de redução de ordem de modelo baseado na teoria de propagação de onda. Este método consiste em determinar o perfil de composição e temperatura nos estágios de separação através do comportamento de propagação de onda, no qual todos os parâmetros da onda são calculados diretamente pelas condições de operação. De acordo com KIENLE (2000), o método obteve bons resultados para mistura de componentes ideais ou moderadamente não-ideais e, para o caso de misturas altamente não-ideais, com formação de azeótropos, a estimação do parâmetro de inclinação da onda mostrou-se inadequada.

KUMAR e DAOUTIS (2003) identificaram que modelos de redução de ordem de processos de separação por estágios com elevada razão de refluxo apresentavam dinâmicas diferentes no comportamento individual dos estágios e no comportamento do

processo como um todo. Este fato ocasionava uma perturbação singular - descontinuidade no modelo - o que dificultava a sintonia do controlador baseada no modelo de ordem reduzida do processo. Este comportamento originou modelos com escalas de tempo diferentes, uma escala de tempo com dinâmica rápida para os estágios e outra com dinâmica lenta para o processo de separação. Os resultados obtidos demonstraram um excelente desempenho e robustez para estes controladores, sintonizados a partir de modelos não-lineares.

ZHANG e LINNINGER (2004) apresentaram um trabalho onde o perfil de temperatura é determinado pela aplicação da técnica de colocação em elementos finitos. Esta estratégia mostrou-se robusta e confiável nas proximidades das regiões de pinch, possibilitando com isso a determinação das razões de refluxo máxima e mínima de uma coluna simples, com apenas uma alimentação, utilizada para separação de um sistema quaternário.

Modelos completos baseados em equações de balanço de massa e energia por estágios são muito complexos para serem incorporados diretamente em estratégias de otimização, como as existentes no controle preditivo não-linear. Para contornar o problema. MEGAN *et al* (2005) aplicaram a técnica de redução de ordem baseada nos modelos compartimentais propostos por BENALLOU *et al.* (1986) para colunas de destilação de alta pureza presentes em plantas de separação de ar criogênico. Os resultados do uso desta estratégia demonstraram que o estado estacionário e a dinâmica do modelo reduzido estão de acordo com o modelo completo, porém não houve redução significativa no tempo de simulação em malha aberta. Portanto, o mais importante na aplicação desta estratégia foi a produção de um sistema de equações diferenciais por diferenças esparso (DAE) que pode ser resolvido simultaneamente com o problema de otimização do controle preditivo.

SEFERLIS e HRYMAK (2004) trataram todos os estágios com descontinuidades como estágios discretos e aplicaram a redução de ordem somente para as seções entre estes estágios discretos, usando a técnica de colocação ortogonal em elementos finitos com diferentes polinômios de Hahn para as fases líquida e vapor.

PROIOS e PISTIKOPOULOS (2006) utilizaram a redução de ordem de modelo baseada na técnica de colocação ortogonal para representar o modelo rigoroso do processo de separação por estágios presentes no problema de otimização do gasto energético de um sistema integrado de colunas de separação e trocadores de calor. Segundo os autores, estes modelos de redução de ordem representaram com boa acurácia o modelo completo do balanço de massa e energia do sistema de separação.

Estudos realizados por LINHART e SKOGESTAD (2009) comprovaram que os modelos agregados (LÉVINE E ROUNCHON, 1991) e compartimental (BENALLOU *et al.*, 1986) reduzem o tempo computacional por um fator de 5 a 10 vezes, quando comparados ao modelo completo.

Os resultados obtidos por BENALLOU *et al.* (1986) demonstraram a superioridade de modelos de ordem reduzida baseados na colocação ortogonal frente aos modelos compartimentais para predição do comportamento dinâmico do processo, além disso, as restrições presentes nos modelos lineares e bilineares que impossibilitam sua aplicação em grandes faixas de operação. Todos estes fatos, associados aos bons resultados apresentados por PINTO e BISCAIA (1987) ao utilizarem modelos de redução baseados na colocação ortogonal para determinar o perfil de composição e temperatura dos estágios no estado estacionário, conduziram a elaboração deste trabalho em técnicas de redução de ordem fundamentadas na colocação ortogonal.

Seguindo essa linha de pesquisa o presente trabalho apresenta uma nova técnica de redução de ordem que consiste na aproximação da soma dos resíduos ponderados pelos momentos por quadratura de Gauss-Lobatto para redução do número de equações diferenciais de diferenças do modelo.

Capítulo 3

Fundamentos Teóricos

3.1. Introdução

Esse capítulo está destinado a apresentar alguns conceitos e definições sobre polinômios ortogonais no domínio contínuo e sua extensão para o domínio discreto, o método dos resíduos ponderados, os métodos de quadratura e os fundamentos teóricos do processo de separação por estágios.

3.2. Polinômios Ortogonais

As funções $y_n(x)$ e $y_m(x)$ participantes do conjunto de funções $\{y_k(x)\}$ são denominadas ortogonais em relação a uma função peso $w(x)$ se obedecerem às condições a seguir para qualquer n no intervalo $[a, b]$:

$$\int_a^b w(x) y_n(x) y_m(x) dx = 0 \quad (n \neq m) \quad (3.1)$$

$$\int_a^b w(x) [y_n(x)]^2 dx > 0 \quad (n = m) \quad (3.2)$$

Sendo o conjunto $\{y_k(x)\}$ infinito e ortogonal, toda função real arbitrária pertencente a este espaço amostral pode ser redefinida através de uma soma de funções pertencentes a este conjunto:

$$f_n(x) = a_0 y_0(x) + a_1 y_1(x) + \dots + a_n y_n(x) + \dots \quad (3.3)$$

$$a_n = \frac{\int_a^b f(x) y_n(x) w(x) dx}{\int_a^b w(x) [y_n(x)]^2 dx} \quad (3.4)$$

Devido à propriedade de ortogonalidade de $p_n(x)$ tem-se para os primeiros n momentos:

$$\int_a^b w(x) x^j p_n(x) dx = 0 \quad j = 0, 1, 2 \dots n \quad (3.5)$$

Um conjunto de polinômios $\{p_n(x)\}$ é definido e descrito pelas condições a seguir:

- Coeficiente de x^n positivo.
- O conjunto destes polinômios é ortogonal.

Portanto, o conjunto de polinômios $\{p_n(x)\}$ faz parte de uma família de polinômios ortogonais, em relação à integral no intervalo $[a, b]$, associado à função peso $w(x)$. Uma propriedade importante das raízes destes polinômios é que são reais distintas e pertencentes ao intervalo $[a, b]$.

Aplicando estes conceitos para o domínio discreto, as famílias de polinômios ortogonais podem ser divididas em duas classes:

- Ortogonais em relação à integração (domínio contínuo)
- Ortogonais em relação à soma (domínio discreto)

As funções $\phi_n(s)$ e $\phi_m(s)$ pertencentes ao conjunto de funções reais $\{\phi_k(s)\}$ no domínio discreto (a, b) , finito ou infinito, será dito ortogonal em relação à função peso positiva $w(s)$ no intervalo discreto (a, b) se obedecer às condições presentes nas Equações (3.6) e (3.7):

$$\sum_{s=a}^b w(s) \phi_n(s) \phi_m(s) = 0 \quad (n \neq m) \quad (3.6)$$

$$\sum_{s=a}^b w(s) [\phi_n(s)]^2 > 0 \quad (n = m) \quad (3.7)$$

Portanto, podem-se construir famílias de polinômios ortogonais, em relação à soma, associadas à função peso $w(s)$.

Estas funções quando ortogonais em relação à integração são aplicadas na resolução de equações diferenciais, domínio contínuo, e quando ortogonais em relação à soma podem ser aplicadas para obtenção da solução de equações de diferenças, domínio discreto.

Alguns exemplos de polinômios ortogonais no domínio contínuo, presentes na literatura, com seus intervalos de validação, função peso e relação de recorrência:

➤ Polinômio de Jacobi

$$a = 0, \quad b = 1, \quad w(x) = x^\beta (1-x)^\alpha \quad (3.8)$$

$$\alpha > -1, \quad \beta > -1$$

$$p_n(x) = \frac{p_n^{(\alpha, \beta)}(x) [\Gamma(n+1)]^2}{[\Gamma(2n+1)]} \quad (3.9)$$

$$p_n(x) = (x - g_n) p_{n-1}(x) - h_n p_{n-2}(x) \quad (3.10)$$

$$p_0(x) = 1, \quad p_{-1}(x) \text{ arbitrário} \quad (3.11)$$

$$g_n = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\alpha^2 - \beta^2}{(2n + \alpha + \beta - 1)^2 - 1} \right] \quad (3.12)$$

$$h_n = \frac{(n-1)(n+\alpha-1)(n+\beta-1)(n+\alpha+\beta-1)}{(2n+\alpha+\beta-1)(2n+\alpha+\beta-3)(2n+\alpha+\beta-2)^2} \quad (3.13)$$

➤ Polinômio de Legendre

$$a = -1, \quad b = 1, \quad w(x) = 1 \quad (3.14)$$

$$p_n(x) = \left(\frac{2n-1}{n} \right) x p_{n-1}(x) - \left(\frac{n-1}{n} \right) p_{n-2}(x) \quad (3.15)$$

$$p_0(x) = 1, \quad p_1(x) \text{ arbitrário}$$

➤ Polinômio de Laguerre

$$a = 0, \quad b = +\infty, \quad w(x) = e^{-x} x^m \quad (3.16)$$

$$L_n^m(x) = \frac{n(2n-x-m-1)}{n} L_{n-1}^m(x) - \frac{n(n-1)^2}{n-m} L_{n-2}^m(x) \quad (3.17)$$

$$L_n^m(x) = 0, \quad m > n \quad (3.18)$$

$$L_n^m(x) = (-1)^n n!, \quad m = n \quad (3.19)$$

➤ Polinômio de Chebyshev

$$a = -1, \quad b = 1, \quad w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \quad (3.20)$$

$$p_n(x) = 2x T_{n-1}(x) - T_{n-2}(x) \quad (3.21)$$

$$T_0(x) = 1, \quad T_1(x) = x \quad (3.22)$$

➤ Polinômio de Hermite

$$a = -\infty, \quad b = +\infty, \quad w(x) = e^{-x^2} \quad (3.23)$$

$$H_n(x) = 2x H_{n-1}(x) - 2(n-1) H_{n-2}(x) \quad (3.24)$$

$$H_0(x) = 1, \quad H_{-1}(x) \text{ arbitrário} \quad (3.25)$$

Para o domínio discreto existem na literatura alguns polinômios ortogonais em relação à soma, alguns destes polinômios encontram-se listados na Tabela 3.1 (SOLETTI, 1990):

Tabela 3.1 - Polinômios Ortogonais no domínio discreto

$F_n(x)$	Nome do polinômio	a	b	$w(s)$
$Q_n(x)$	Hahn	0	$N-1$	$\frac{\begin{bmatrix} \alpha + s \\ s \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta + \alpha - s - 1 \\ N - s - 1 \end{bmatrix}}{\begin{bmatrix} N + \alpha + \beta \\ N + 1 \end{bmatrix}}$
$t_n(s)$	Chebyshev	0	$N-1$	1
$M_n(s)$	Chalier	0	∞	$\frac{e^{-a} a^s}{s!}$
$M_n(s)$	Meixner	0	∞	$\frac{c^s \Gamma(b+s)}{\Gamma(b) s!}$
$K_n(s)$	Krawtchouk	0	N	$p^s q^{n-s} \binom{N}{s}$

PINTO e BISCAIA (1988) propuseram uma família de polinômios ortogonais análoga a família de polinômios de Jacobi, domínio contínuo. A ortogonalidade destes polinômios, associada à função peso na Equação (3.6), é verificada no intervalo de 1 à N:

$$w(s) = (s-1)^\beta (N-s)^\alpha \quad (3.26)$$

Esta família de polinômios é similar aos polinômios de Chebishev no domínio discreto, quando $\alpha = \beta = 0$.

Existem fórmulas de recorrência para os polinômios ortogonais no domínio contínuo, como no domínio discreto. Esta relação é descrita por quaisquer três polinômios consecutivos em uma família de polinômios ortogonais qualquer. O desenvolvimento desta fórmula de recorrência é apresentado pelas Equações (3.27) à (3.34).

$$a = 1, \quad b = N, \quad w(s) = (s-1)^\beta (N-s)^\alpha \quad (3.27)$$

$$p_n^{(\alpha, \beta)} = (s - g_n) p_{n-1}^{(\alpha, \beta)}(s) - h_n p_{n-2}^{(\alpha, \beta)}(s) \quad (3.28)$$

$$h_n = \frac{S_n}{S_{n-1}} \quad (3.29)$$

$$g_n = \frac{R_n - h_n R_{n-1}}{S_n} \quad (3.30)$$

$$S_n = \sum_{s=a}^b w(s) s^{n-1} p_{n-1}^{(\alpha, \beta)}(s) \quad (3.31)$$

$$R_n = \sum_{s=a}^b w(s) s^n p_{n-1}^{(\alpha, \beta)}(s) \quad (3.32)$$

$$R_n = \sum_{s=a}^b w(s) s^n p_{n-1}^{(\alpha, \beta)}(s) \quad (3.33)$$

$$p_0^{(\alpha, \beta)}(s) = 1, \quad p_{-1}^{(\alpha, \beta)}(s) = 0, \quad h_1 = 0 \quad (3.34)$$

3.3. Interpolação Polinomial

Admitindo que uma função $y = f(x)$ seja uma função contínua e diferenciável n vezes, podendo ser descrita pelos pares ordenados $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$. Pode-se demonstrar que existe um polinômio $P_{n-1}(x)$ de grau $n-1$ que possui os mesmos valores de $f(x)$ em cada um dos n pontos.

$$p_{n-1}(x_k) = f(x_k) \quad k = 1, 2, 3 \dots n \quad (3.35)$$

Neste caso a solução é única e pode ser escrita com uma expansão em série de funções reais:

$$p_{n-1}(x_k) = \sum_{j=1}^n l_j(x_k) f(x_j) \quad (3.36)$$

Onde

$$l_j = \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^n \frac{(x - x_i)}{(x_j - x_i)} \quad (3.37)$$

é o polinômio interpolador de Lagrange de grau n-1, que satisfaz a seguinte propriedade.

$$l_j(x_i) = \delta_{i,j} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad (3.38)$$

Podendo ser reescrito pela fórmula:

$$l_j = \frac{P_{NT}(x)}{(x - x_j) P_{NT}'(x)} \quad (3.39)$$

Onde

$$P_{NT}(x) = \prod_{i=1}^n (x - x_i) \quad (3.40)$$

Existe um erro ocasionado pela aproximação da função $f(x)$ por um polinômio $P_{n-1}(x)$ que é igual à função apenas nos pontos nodais $x_i(x)$ com $(i=1, 2, 3, \dots, n)$.

$$f(x) = p_{n-1}(x) + \mathfrak{R}(x) \quad (3.41)$$

$$\mathfrak{R}(x) = \frac{1}{n!} \left. \frac{d^n f(t)}{dt^n} \right|_{t=\xi} p_{NT}(x) \quad (3.42)$$

$$x_i < \xi < x_n$$

Para aplicação da interpolação lagrangeana no domínio discreto é necessário apenas conhecer a função e/ou suas diferenças em determinados pontos:

$$f(s) = \sum_{j=1}^n l_j(s) f(s^{(j)}) \quad (3.43)$$

$$f(s \pm k) \cong \sum_{j=1}^n l_j(s \pm k) f(s^{(j)}) \quad (3.44)$$

Os valores destas diferenças devem ser calculados nos pontos nodais para determinação das matrizes de discretização $\underline{\mathbf{A}}$ e $\underline{\mathbf{B}}$, assim como descrito por MICHELSEN & VILLADSEN (1978). As Equações (3.45) à (3.52) definem a forma das matrizes de discretização $\underline{\mathbf{A}}$ e $\underline{\mathbf{B}}$:

$$A_{i,j}^+ = l_j(s^{(i)} + 1) \quad (3.45)$$

$$A_{i,j}^- = l_j(s^{(i)} - 1) \quad (3.46)$$

$$B_{i,j}^+ = l_j(s^{(i)} + 2) \quad (3.47)$$

$$B_{i,j}^- = l_j(s^{(i)} - 2) \quad (3.48)$$

$$f(s^{(i)} + 1) \cong \sum_{j=1}^n A_{i,j}^+ f(s^{(j)}) \quad (3.49)$$

$$f(s^{(i)} - 1) \cong \sum_{j=1}^n A_{i,j}^- f(s^{(j)}) \quad (3.50)$$

$$f(s^{(i)} + 2) \cong \sum_{j=1}^n B_{i,j}^+ f(s^{(j)}) \quad (3.51)$$

$$f(s^{(i)} - 2) \cong \sum_{j=1}^n B_{i,j}^- f(s^{(j)}) \quad (3.52)$$

3.4. Método dos resíduos ponderados

CRANDALL (1956) agrupou todos os métodos que utilizam soluções aproximadas de equações diferenciais (FINLAYSON e SCRIVEN, 1966) sobre o nome de método dos resíduos ponderados, também denominado de princípio da distribuição de erro por AMES e COLLATZ.

A técnica dos resíduos ponderados é fundamentada na aproximação da variável dependente da equação por expansões em séries de funções conhecidas, onde seus coeficientes são determinados anulando a média ponderada do resíduo, obtido através da substituição da variável dependente pela função tentativa no domínio do problema.

Existe um conjunto de métodos baseados nos fundamentos da metodologia dos resíduos ponderados. Cada um dos métodos pertencentes a este grupo é diferenciado pela forma como a ponderação é realizada para o cômputo da média ponderada do resíduo.

Seja $f(x)$ a solução de uma equação diferencial e $f(s)$ a solução de uma equação de diferenças:

$$g[x, f(x), f'(x), \dots] = 0 \quad (3.53)$$

ou

$$g[s, f(s), f'(s \pm 1), \dots] = 0 \quad (3.54)$$

VILLADSEN e STEWART (1967) sugeriram aproximar a variável dependente do problema, $f(x)$, através da aproximação por polinômio de Lagrange de grau n em x (domínio contínuo):

$$f(x) \cong f_n(x) = \sum_{j=1}^n l_j(x) f(x_j) \quad (3.55)$$

Que estendida para o domínio discreto resulta em:

$$f(s) \cong f_n(s) = \sum_{j=1}^n l_j(s) f(s^{(j)}) \quad (3.56)$$

A substituição da aproximação polinomial na equação diferencial ou de diferença resulta na expressão do resíduo:

$$g[x, f_n(c, x), f_n'(c, x), \dots] = \mathfrak{R}(c, x) \quad (3.57)$$

ou

$$g[s, f_n(c, s), f_n'(c, s \pm 1), \dots] = \mathfrak{R}(c, s) \quad (3.58)$$

O método dos mínimos resíduos ponderados consiste em encontrar a aproximação que minimizam as seguintes funções objetivos:

$$J_j(c) = \int_a^b w_j(x) \mathfrak{R}(c, x) dx \quad (3.59)$$

$$J_j(c) = \sum_{s=a}^b w_j(s) \mathfrak{R}(c, s) ds \quad (3.60)$$

para $j = 1, 2, 3 \dots n$ e $\underline{c} = [c_0 \ c_1 \ \dots \ c_n]^T$

em relação aos coeficientes \underline{c} da aproximação

Os diferentes critérios utilizados para escolha da função peso $w(x)$ ou $w(s)$ levam aos seguintes métodos:

➤ Método dos Subdomínios

O método do subdomínio foi desenvolvido por BIENZO e KOCH em 1923 (FINLAYSON e SCRIVEN, 1966). O critério do método consiste em dividir o domínio

em subdomínios, e anular o resíduo médio em cada uma destas partes menores, que compõem a região do problema.

$$w_j(x) \text{ ou } w_j(s) = \begin{cases} 1 & \text{dentro da subregião } j \\ 0 & \text{fora da subregião } j \end{cases} \quad (3.61)$$

➤ Método de Galerkin

Os primeiros registros da aplicação da técnica dos resíduos ponderados foram feitos por Galerkin em 1915. Em seus estudos utilizou coeficientes constantes, este trabalho originou o método conhecido nos dias de hoje por método de Galerkin (FINLAYSON e SCRIVEN, 1966).

$$w_j(x) \text{ ou } w_j(s) = \frac{\partial f_n}{\partial c_j}, \quad j = 1, 2, \dots, n + 1 \quad (3.62)$$

➤ Método dos mínimos quadrados

O método dos mínimos quadrados foi desenvolvido em 1928 por PICONE (FINLAYSON e SCRIVEN, 1966). Os pesos da ponderação são calculados pela derivada da expressão dos resíduos em relação a cada um dos coeficientes da função tentativa, com isso o resíduo médio quadrático ao longo do domínio do problema é minimizado.

$$w_j(x) = \frac{\partial \mathfrak{R}(c, x)}{\partial c_j}, \quad j = 1, 2, \dots, n + 1 \quad (3.63)$$

$$w_j(s) = \frac{\partial \mathfrak{R}(c, s)}{\partial c_j}, \quad j = 1, 2, \dots, n + 1 \quad (3.64)$$

➤ Método dos momentos

O método dos momentos foi desenvolvido em 1947 por YAMADA (FINLAYSON e SCRIVEN, 1966). As funções peso utilizadas na ponderação são

expressas por x^j ou s^j , contínuo ou discreto, respectivamente. Este tipo de ponderação consiste em anular os sucessivos momentos do resíduo no domínio de interesse.

$$w_j(x) = x^{j-1}, \quad j = 1, 2, \dots, n + 1 \quad (3.65)$$

$$w_j(s) = s^{j-1}, \quad j = 1, 2, \dots, n + 1 \quad (3.66)$$

➤ Método da colocação

O método da colocação foi desenvolvido em 1937 por FRAZER, JONES e SKAN (FINLAYSON e SCRIVEN, 1966). Este método utiliza a função de Dirac como ponderação. O que faz com que o resíduo seja nulo em diferentes e arbitrários pontos do domínio.

$$w_j(x) = \delta(x - x_j), \quad j = 1, 2, \dots, n + 1 \quad (3.67)$$

$$w_j(s) = \delta(s - s^{(j)}), \quad j = 1, 2, \dots, n + 1 \quad (3.68)$$

➤ Método da colocação ortogonal

O método da colocação ortogonal foi desenvolvido por VILLADSEN e STEWART (1967). Este método reúne a elevada precisão dos métodos dos momentos e de Galerkin com a simplicidade de aplicação do método da colocação. Este método é uma continuidade do método da colocação tradicional com a diferença apenas no critério de seleção dos pontos de colocação, que não é mais de forma aleatória e sim através das raízes de um polinômio ortogonal.

Este método é diferente dos demais métodos da classe dos resíduos ponderados. Pois, o resíduo não é diretamente ortogonalizado e sim aproximado por um polinômio ortogonal de grau $n+1$ e peso $\beta(x)$ ou $\beta(s)$ que é anulado nos pontos de colocação.

$$\mathfrak{R}(x) = \beta(x) p_{NT}(x) \quad (3.69)$$

$$\Re(s) = \beta(s) p_{NT}(s) \quad (3.70)$$

3.5. Métodos de quadratura

A quadratura de Gauss é utilizada para obtenção de uma aproximação da integral definida de $y(x)$, por um número finito e arbitrário de avaliações de $f(x)$, ao longo do domínio normalizado do problema.

$$I = \int_0^1 y(x)dx = \sum_{i=ni}^{nf} w_i y(x_i) + E \quad (3.71)$$

Os métodos de quadratura também podem ser aplicados no domínio discreto para obtenção de uma aproximação do somatório de $y(s)$ através da determinação de uma quantidade finita e arbitrária de $f(s)$ no domínio do problema.

$$I = \sum_{i=0}^N y(s^{(i)}) = \sum_{j=ni}^{nf} w_j y(s^{(j)}) + E \quad , N > nf \quad e \quad ni > 0 \quad (3.72)$$

Onde:

E – Erro do procedimento de aproximação numérica no domínio contínuo ou discreto.

x_i – Pontos de quadratura no domínio contínuo.

$s^{(j)}$ – Pontos de quadratura no domínio discreto.

w_i ou w_j - Pesos da quadratura (domínio contínuo ou discreto).

Os métodos de quadraturas são divididos em três classes distintas: métodos de quadraturas com apenas pontos internos (quadratura de Gauss-Jacobi), métodos de quadratura com pontos internos e adição de uma das extremidades (quadratura de Gauss-Radau com inclusão da extremidade inferior ou superior) e métodos de quadraturas com adição de ambas as extremidades (quadratura de Gauss-Lobatto)

(RICE e DO, 1995). Todas estas classes de métodos podem ser usadas em ambos os domínios, discreto e contínuo.

➤ Quadratura de Gauss-Jacobi

A quadratura de Gauss-Jacobi é descrita pela expressão a seguir:

$$I = \int_0^1 y(x)dx \approx \sum_{i=1}^N w_i y(x_i) \quad (3.73)$$

$$I = \sum_{i=0}^N y(s^{(i)}) \approx \sum_{j=ni}^{nf} w_j y(s^{(j)}) \quad (3.74)$$

Este tipo de quadratura necessita de N pontos internos de quadraturas e N pesos de quadraturas totalizando 2N parâmetros a determinar. Com os parâmetros calculados pode-se ajustar um polinômio de grau 2N-1, ou seja, é possível calcular integrais ou somatórios exatos de funções polinomiais de grau até 2N-1.

➤ Quadratura de Gauss-Radau

A quadratura de Gauss-Radau utiliza a inclusão de um ponto extremo. A expressão da quadratura com inclusão do ponto extremo inferior $x = 0$ é:

$$I = \int_0^1 y(x)dx \approx w_0 y(0) + \sum_{i=1}^N w_i y(x_i) \quad (3.75)$$

$$I = \sum_{i=0}^N y(s^{(i)}) \approx w_0 y(0) + \sum_{j=ni}^{nf} w_j y(s^{(j)}) \quad (3.76)$$

A expressão com inclusão do ponto extremo superior $x = 1$ é:

$$I = \int_0^1 y(x)dx \approx \sum_{i=1}^N w_i y(x_i) + w_{n+1} y(1) \quad (3.77)$$

$$I = \sum_{i=0}^N y(s^{(i)}) \approx \sum_{j=ni}^{nf} w_j y(s^{(j)}) + w_{nf+1} y(N) \quad (3.78)$$

Este tipo de quadratura necessita de N pontos internos de quadratura, uma vez que o ponto na extremidade já é especificado, e N+1 pesos de quadratura totalizando 2N+1 parâmetros necessários. Com a obtenção destes parâmetros é possível ajustar um polinômio de grau 2N, ou seja, é possível calcular integrais ou somatórios exatos de funções polinomiais de grau até 2N.

➤ Quadratura de Gauss-Lobatto

A quadratura de Gauss-Lobatto inclui dois pontos adicionais que representam as extremidades do domínio, $x = 0$ e $x = 1$, sendo representada pela expressão a seguir:

$$I = \int_0^1 y(x) dx \approx w_0 y(0) + \sum_{i=1}^N w_i y(x_i) + w_{n+1} y(1) \quad (3.79)$$

$$I = \sum_{i=0}^N y(s^{(i)}) \approx w_0 y(0) + \sum_{j=ni}^{nf} w_j y(s^{(j)}) + w_{nf+1} y(N) \quad (3.80)$$

Este tipo de quadratura necessita de N pontos internos de quadraturas uma vez que os pontos que representam as extremidades são especificados, e N+2 pesos de quadraturas totalizando 2N+2 parâmetros a determinar. Após a determinação destes parâmetros é possível ajustar um polinômio de grau 2N+1, ou seja, é possível calcular integrais ou somatórios exatos de funções polinomiais de grau até 2N+1.

VILLADSEN e STEWART (1967, 1978), em seu artigo de colocação, demonstraram que as raízes de um polinômio ortogonal são o melhor critério para escolha dos pontos da quadratura. Em seu livro os autores descrevem o critério de decisão para obtenção dos pontos e cálculo dos pesos da quadratura.

3.6. Coluna de Destilação

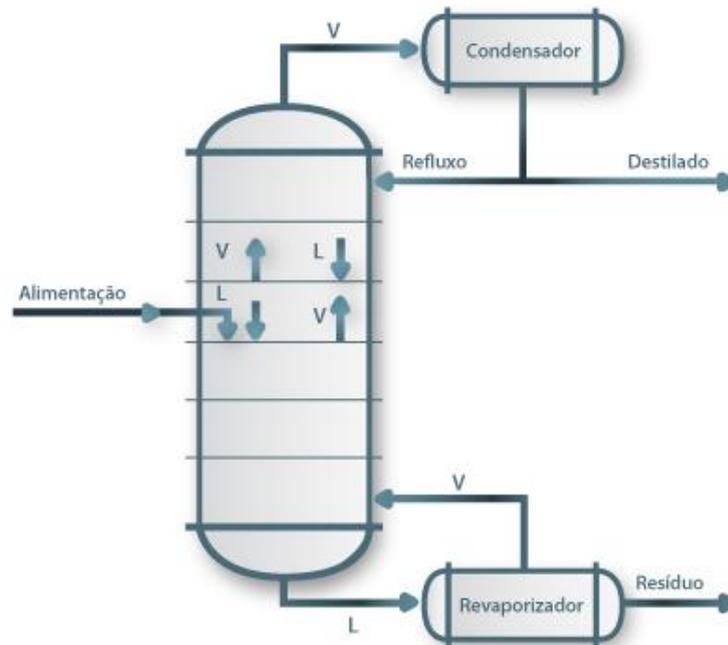


Figura 3.1 - Coluna de destilação fracionada industrial (WIKIPÉDIA, 2010).

A configuração convencional de uma torre de destilação consiste em uma única alimentação de carga e duas retiradas, no topo (destilado) e no fundo (produto de fundo). O prato de alimentação separa a coluna em duas seções: seção de retificação (enriquecimento) que envolve o destilado e seção de esgotamento, englobando o produto de fundo.

Colunas de maior complexidade têm características peculiares que as diferem da configuração anterior. Estas colunas apresentam mais de uma alimentação e/ou mais retiradas laterais. Neste tipo de configuração a adição de uma alimentação induz à formação de uma seção intermediária as seções de absorção e esgotamento.

➤ Descrição do processo de separação por estágios (coluna de destilação convencional)

A carga ao ser introduzida na coluna pode ter um dos três comportamentos distintos que dependem do seu estado térmico:

1. Carga líquida ($T \leq T_{\text{bolha}}$) – A carga desce para o prato inferior adjacente pertencente à seção de esgotamento, se misturando com o líquido (refluxo interno) que desce da seção de absorção.
2. Carga vapor ($T \geq T_{\text{bolha}}$) – A carga sobe para o prato superior adjacente pertencente à seção de absorção, se misturando com o líquido (refluxo interno) que desce pela torre.
3. Carga parcialmente vaporizada (líquido + vapor) – A parte líquida desce para o prato superior da seção de esgotamento se associando ao refluxo interno que desce da seção de absorção. A parte vapor sobe, borbulhando através do líquido que escoou do prato inferior da seção de absorção.

O vapor que sai de um prato da torre encontra-se no ponto de saturação em uma determinada temperatura e composição. Este vapor entra em contato com o líquido proveniente do prato imediatamente superior, que está com composição mais rica no teor de leves (componentes mais voláteis) e menor temperatura. Este vapor sofre condensação preferencial dos seus componentes menos voláteis. A entalpia de condensação dos componentes mais pesados da fase vapor ocasiona uma transferência de calor para a fase líquida em contato, ocasionando, com isso, a vaporização dos seus componentes mais leves (mais voláteis).

Portanto, a transferência de calor que ocorre da fase vapor para a fase líquida em contato ocasiona uma transferência de massa entre elas, onde o vapor cede seus componentes mais pesados para o líquido, enquanto que este transfere seus componentes mais leves para o vapor. Conclui-se, com isso, que as transferências de massa e calor existentes entre as fases em contato geram um vapor saindo do prato com menor temperatura e mais rico em componentes mais voláteis que o vapor que chega nele, paralelamente a este efeito o líquido que abandona o prato está mais rico em componentes menos voláteis e com maior temperatura que o líquido que chegou do prato imediatamente acima.

O vapor à medida que sobe na torre vai sofrendo sucessivas transferências de massa e calor ao passar pelos estágios da coluna, com isso ele vai tornando-se cada vez mais frio e mais concentrado no teor de componentes mais voláteis. Paralelamente ao vapor, o líquido que desce pela torre também vai sofrendo trocas de calor e massa que o tornam cada vez mais quente e com maior concentração nos componentes menos voláteis. Resumidamente, o topo da torre é o lugar de menor temperatura, menor pressão e com maior teor de leves (componentes mais voláteis). O outro extremo da coluna tem a maior temperatura, maior pressão e maior concentração de pesados.

O perfil de temperatura entre o topo e o fundo da coluna é determinado pela vazão de refluxo no topo da torre. A razão de refluxo externa determina a vazão de retorno para a coluna, e por consequência delimita a razão de refluxo interna, que é responsável pela variação de composição e temperatura ao longo dos pratos. Um aumento na razão de refluxo externa produz um acréscimo na vazão de retorno que é repassado para a vazão interna de líquido. Este aumento na vazão de líquido que desce pela torre faz com que haja uma maior remoção dos compostos menos voláteis presente no vapor. Isso ocasionará uma melhora na eficiência de fracionamento. Este efeito tem maior influencia na seção de absorção.

Na seção de esgotamento, o objetivo é retirar os compostos mais leves da fase líquida. Esta remoção é determinada pela vazão de vapor da seção. Esta vazão é definida pela quantidade de calor fornecida para torre através do refeedor.

Capítulo 4

Metodologia da técnica

4.1. Introdução

Neste capítulo será apresentada a modelagem para sistemas de separação por estágios. Inicialmente será desenvolvido o modelo completo. Em seguida, será feito o desenvolvimento da técnica de redução de ordem baseada na colocação ortogonal com inclusão dos extremos, e a proposição de uma modificação nesta técnica para tratar de descontinuidades entre seções do sistema de separação, incluindo a normalização na variável independente. Finalmente, será descrita a metodologia proposta de redução de ordem de modelo baseada em resíduos ponderados pelos momentos no domínio discreto.

Sem prejudicar o objetivo deste trabalho, que é avaliar os resultados da técnica proposta e compará-lo com os resultados obtidos por uma metodologia tradicional consolidada pela literatura, algumas premissas simplificadoras foram adotadas para o desenvolvimento dos modelos de separação por estágios, mantendo algumas características não lineares.

As simplificações feitas durante a modelagem foram:

- Mistura perfeita em ambas as fases;
- Não existência de zonas de dispersão, zonas mortas ou caminhos preferenciais;
- Retenção de líquido constante e igual em todos os pratos, podendo ser diferente no condensador e no refeedor.
- Retenção de vapor desprezível.
- Estágios adiabáticos ($Q_i = 0$, $1 < i < NF$, $NF < i < N$);
- Balanço de energia quase-estacionário;
- Equilíbrio termodinâmico entre as correntes que saem de cada prato;

- Formação de soluções ideais nas fases;
- Coluna composta de:
 - N-2 pratos internos (incluindo o de alimentação)
 - Condensador e refeedor em equilíbrio termodinâmico;

A partir destas premissas, a coluna de destilação e o estágio de separação i representados nas Figuras 4.1 e 4.2, respectivamente, serão modelados pelas metodologias apresentadas a seguir.

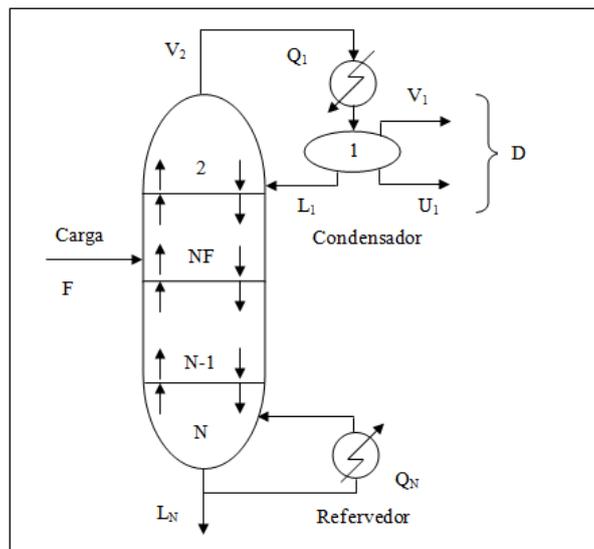


Figura 4.1 - Esquema de uma coluna de destilação.

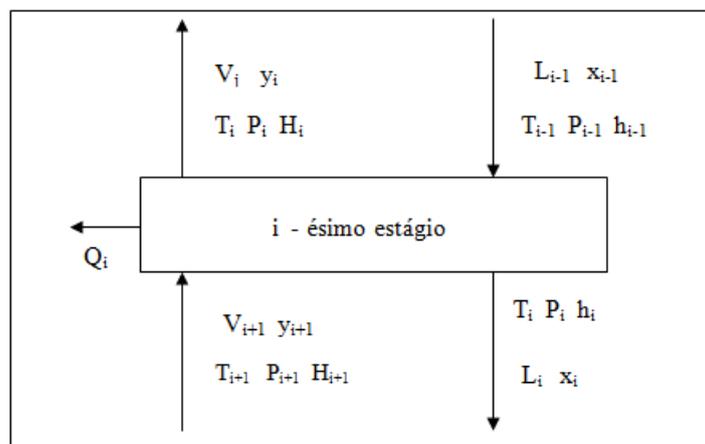


Figura 4.2 - Representação de um estágio de equilíbrio

4.2. Formulação matemática para o modelo completo da coluna

A modelagem matemática é composta pelas equações de balanço de massa, balanço de energia e equilíbrio de fases em cada estágio de equilíbrio, no condensador e no refeedor. Equações algébricas adicionais, representando o somatório das composições molares em cada estágio e o cálculo de propriedades termodinâmicas, também fazem parte do modelo.

1) Balanço de massa

Condensador:

$$D = V_1 + U_1 \quad (4.1)$$

$$R = \frac{L_1}{D} \quad (4.2)$$

$$V_2 - L_1 - V_1 - U_1 = 0 \quad (4.3)$$

$$m_1 \frac{dx_1}{dt} = V_2 y_2 - (L_1 + U_1) x_1 - V_1 y_1 \quad (4.4)$$

A representação de um prato interno por um estágio genérico i , mostrado na Figura 4.2, pode ser descrita por um sistema de equações linearmente independentes. A modelagem matemática deste estágio i é demonstrada por:

$$L_{i-1} + V_{i+1} - L_i - V_i = 0 \quad (4.5)$$

$$m_i \frac{dx_i}{dt} = L_{i-1} x_{i-1} + V_{i+1} y_{i+1} - L_i x_i - V_i y_i \quad (4.6)$$

Prato de alimentação:

$$L_{NF-1} + V_{NF+1} + F - L_{NF} - V_{NF} = 0 \quad (4.7)$$

$$m_{NF} \frac{dx_{NF}}{dt} = L_{NF-1}x_{NF-1} + V_{NF+1}y_{NF+1} + Fz_{NF} - L_{NF}x_{NF} - V_{NF}y_{NF} \quad (4.8)$$

Refervedor:

$$L_{N-1} - L_N - V_N = 0 \quad (4.9)$$

$$m_N \frac{dx_N}{dt} = L_{N-1}x_{N-1} - L_Nx_N - V_Ny_N \quad (4.10)$$

2) Balanço de energia

Condensador:

$$V_2H_2 - (L_1 + U_1)h_1 - V_1H_1 - Q_1 = 0 \quad (4.11)$$

Prato interno representando um estágio de equilíbrio:

$$L_{i-1}h_{i-1} + V_{i+1}H_{i+1} - L_ih_i - V_iH_i = 0 \quad (4.12)$$

Prato de alimentação:

$$L_{NF-1}h_{NF-1} + V_{NF+1}H_{NF+1} + Fh_F - L_{NF}h_{NF} - V_{NF}H_{NF} = 0 \quad (4.13)$$

Refervedor:

$$L_{N-1}h_{N-1} - L_Nh_N - V_NH_N - Q_N = 0 \quad (4.14)$$

3) Relações de Equilíbrio:

$$y_i = E_i K_i x_i \quad (4.15)$$

4) Relações hidrodinâmicas:

$$E_i^M = 1 \quad (4.16)$$

$$M_i = 0 \quad (4.17)$$

$$m_1 = cte1 \quad (4.18)$$

$$m_i = cte2 \quad (4.19)$$

$$m_N = cte3 \quad (4.20)$$

$$P_i = cte \quad (4.21)$$

1) Propriedades Termodinâmicas:

Para o cálculo das entalpias da fase líquida e da fase vapor para cada componente k no estágio i foram usadas as equações abaixo:

$$H_i^k = H_i^k)^{ig} + \int_{\infty}^{V_i^k} \left[T_i \left(\frac{\partial P_i}{\partial T_i} \right)_{V_i^k, N_k} + V_i^k \left(\frac{\partial P_i}{\partial V_i^k} \right)_{T_i, N_k} \right] dV_i^k \quad (4.22)$$

$$h_i^k = h_i^k)^{ig} + \int_{\infty}^{V_i^k} \left[T_i \left(\frac{\partial P_i}{\partial T_i} \right)_{V_i^k, N_k} + V_i^k \left(\frac{\partial P_i}{\partial V_i^k} \right)_{T_i, N_k} \right] dV_i^k \quad (4.23)$$

$$H_i = \sum_{k=1}^{NC} y_i^k H_i^k \quad (4.24)$$

$$h_i = \sum_{k=1}^{NC} x_i^k h_i^k \quad (4.25)$$

6) Modelo completo no estado estacionário

Processos de separação por estágios no estado estacionário são modelados por um sistema de equações não lineares. Um dos métodos mais tradicionais, presente na literatura, para obtenção da solução destes sistemas é o método BP (*Bubble-Point*) desenvolvido por WANG e HENKE (1966).

O método BP tem esta denominação porque em cada iteração, a temperatura do estágio é determinada através da equação do ponto de bolha do sistema. Segundo WANG e HENKE (1966), o critério de convergência somente nas temperaturas é adequado para o método. O uso do método é sugerido para sistemas de componentes com volatilidades próximas, porque nesta situação a temperatura não é muito sensível à composição.

O balanço de massa do modelo completo da coluna de destilação no estado estacionário pode ser escrito na forma tridiagonal por:

$$L_i = V_{i+1} + \sum_{k=2}^i (F_k - U_k - W_k) - D \quad , \quad i \geq 2 \quad (4.26)$$

$$A_i x_{i-1} + B_i x_i + C_i x_{i+1} = D_i \quad (4.27)$$

Onde

$$A_i = V_i + \sum_{k=2}^i (F_k - U_k - W_k) - D \quad , \quad 2 \leq i \leq N$$

$$B_i = -[V_{i+1} + \sum_{k=2}^i (F_k - U_k - W_k) - D + U_i + (V_i + W_i)K_i] \quad , \quad 1 \leq i \leq N$$

$$C_i = V_{i+1}K_{i+1} \quad , \quad 1 \leq i \leq N \quad (4.28)$$

$$D_i = -F_i z_i \quad , \quad 1 \leq i < N \quad (4.29)$$

$$x_0 = V_{N+1} = U_N = W_1 = 0 \quad (4.30)$$

As composições podem ser obtidas pelo algoritmo de Thomas:

$$x_N = q_N \quad (4.31)$$

$$x_{i-1} = q_{i-1} - p_{i-1}x_i \quad (4.32)$$

Onde

$$p_i = \frac{C_i}{B_i - A_i p_{i-1}} \quad (4.33)$$

$$q_i = \frac{D_i - A_i q_{i-1}}{B_i - A_i p_{i-1}} \quad (4.34)$$

Os valores de V_i são encontrados pelas equações do balanço de energia.

4.3. Formulação matemática para o modelo de colocação ortogonal modificada com inclusão dos extremos

Aplica-se a técnica de colocação ortogonal por seção, sem extrapolação. Esta técnica de redução de ordem foi sugerida por PINTO e BISCAIA (1988) que aplicaram em um modelo bastante simplificado de uma coluna com uma única alimentação, sem retiradas laterais e sem considerar o balanço de energia.

O modelo consiste em aproximar ambas as seções de retificação e de esgotamento por polinômios distintos assumindo o mesmo valor no prato de alimentação. A seção de retificação é representada por um polinômio nodal cujas raízes são os NR pontos de colocação internos, mais o condensador e o prato de alimentação. Similarmente à seção de retificação, um polinômio nodal é sugerido para a seção de esgotamento cujas raízes são os NE pontos de colocação internos, mais o prato de alimentação e o refeedor.

Os resíduos de colocação anulam-se em todos os pontos, exceto no prato de alimentação. Neste ponto, determina-se o balanço de massa de cada componente utilizando-se os polinômios interpoladores de cada seção. Com isso, os polinômios interpoladores assumem os mesmos valores no ponto de descontinuidade. As funções peso, geralmente utilizadas, para os polinômios são:

Seção de Retificação

$$w(s) = (s - I)^\beta (NF - s)^\alpha \quad (\alpha \text{ e } \beta > -1) \quad (4.35)$$

Seção de Esgotamento

$$w(s) = (s - NF)^\beta (N - s)^\alpha \quad (\alpha \text{ e } \beta > -1) \quad (4.36)$$

1) Balanço de massa

Os perfis de composição molar das fases líquida e vapor são aproximados por funções polinomiais como segue:

$$\hat{x}(s^{(i+1)}, t) \cong x^{(n+1)}(s^{(i+1)}, t) = \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j}^+ x^{(n+1)}(s^{(j)}, t) = \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j}^+ x_j(t) \quad (4.37)$$

$$\hat{x}(s^{(i-1)}, t) \cong x^{(n+1)}(s^{(i-1)}, t) = \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j}^- x^{(n+1)}(s^{(j)}, t) = \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j}^- x_j(t) \quad (4.38)$$

$$\hat{y}(s^{(i+1)}, t) \cong y^{(n+1)}(s^{(i+1)}, t) = \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j}^+ k_j x^{(n+1)}(s^{(j)}, t) = \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j}^+ k_j x_j(t) \quad (4.39)$$

Onde por simplicidade de notação usou-se $x^{(n+1)}(s^{(j)}, t) \equiv x_j(t)$

Condensador:

$$m_1 \frac{dx_1}{dt} = (L_1 + U_1 + V_1 k_1) x_1(t) + V_2 \sum_{j=1}^{NR+2} A_{1,j}^+ k_j x_j(t) \quad (4.40)$$

Prato interno representando um estágio de equilíbrio i :

$$m_i \frac{dx_i}{dt} = L_{i-1} \sum_{j=a}^b A_{i,j}^- x_j(t) - (L_i + V_i k_i) x_i(t) + V_{i+1} \sum_{j=a}^b A_{i,j}^+ k_j x_j(t) \quad (4.41)$$

Para $1 < i < NR+2$: $a = 1, b = NR+2$ e

$A_{i,j}^+, A_{i,j}^-$ são originários do polinômio da seção de retificação

Para $NR+2 < i < NT$: $a = NR+2, b = NT = NR+NE+3$ e

$A_{i,j}^+, A_{i,j}^-$ são originários do polinômio da seção de esgotamento

Prato de alimentação:

$$m_{NR+2} \frac{dx_{NR+2}}{dt} = L_{NR+1} \sum_{j=1}^{NR+2} A_{NR+2,j}^- x_j(t) - (L_{NR+2} + V_{NR+2} k_{NR+2}) x_{NR+2}(t) + \quad (4.42)$$

$$V_{NR+3} \sum_{j=NR+2}^{NT} A_{NR+2,j}^+ k_j x_j(t) + F_{NR+2} z_{NR+2}$$

Refervedor:

$$m_{NT} \frac{dx_{NT}}{dt} = L_{NT-1} \sum_{j=NR+2}^{NT} A_{NT,j}^- x_j(t) - (L_{NT} + V_{NT} k_{NT}) x_{NT}(t) \quad (4.43)$$

2) Balço de energia:

Similarmente ao balanço de massa, as estimativas dos termos de diferença ($x_{i+1}, y_{i+1}, h_{i-1}, H_{i+1}$), por interpolação lagrangeana.

Sendo:

$$H_{i+1} = H(\underline{y}_{i+1}, T_{i+1}, P_{i+1}) \quad (4.44)$$

e

$$h_{i-1} = h(\underline{x}_{i-1}, T_{i-1}, P_{i-1}) \quad (4.45)$$

Existe a necessidade de se determinarem todas estas variáveis, apesar da pressão ser considerada constante ao longo da coluna. No caso de relações hidrodinâmicas mais rigorosas faz-se necessária uma aproximação polinomial de P_i

A Equação (4.39) pode ser calculada de outra forma como segue:

$$\hat{y}(s^{(i+1)}, t) \cong k_{i+1} \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j}^+ x_j(t) \quad (4.46)$$

A composição na fase vapor é calculada por equilíbrio termodinâmico. Segundo SECCHI (1988) a desvantagem desta estratégia, é que, pequenos erros na estimativa da composição do prato posterior ao ponto de colocação são propagados no cálculo da constante de equilíbrio e, por conseqüência, na composição de vapor que chega a ele, ocasionando maiores acúmulos de erro. A aplicação direta da aproximação polinomial na composição da fase vapor Equação. (4.39) leva a resultados bem mais precisos.

Estudos comprovam que o cálculo de $T(s^{(i)+1})$ e $T(s^{(i)-1})$ através da aproximação polinomial, Equações (4.47) e (4.48), não produz alterações significativas nos perfis de composição e temperatura em comparação aos valores obtidos através das relações de equilíbrio termodinâmico, e apresenta um menor esforço computacional (SECCHI, 1988).

$$T_{i+1}(t) = \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j}^+ T_j(t) \quad (4.47)$$

e

$$T_{i-1}(t) = \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j}^- T_j(t) \quad (4.48)$$

Os valores de V_i são obtidos pelos balanços de energia e L_i são determinados pelo balanço de massa global aplicado de uma das extremidades da coluna até o estágio $s^{(i)}$.

3) Modelo de colocação ortogonal modificada no estado estacionário

$$[V_2 + (k_1 - I)V_1]x_1 - V_2 \sum_{j=1}^{NR+2} A_{1,j}^+ k_j x_j(s) = 0 \quad (4.49)$$

$$[V_{i+1} - D + V_i k_i]x_i - \sum_{j=1}^{NR+2} [(V_i - D)A_{i,j}^- - V_{i+1}A_{i,j}^+ k_j]x_j = 0 \quad , \quad 1 < i < NR+2 \quad (4.50)$$

$$(V_{NR+2} - D) \sum_{j=1}^{NR+2} A_{NR+2,j}^- x_j - (V_{NR+3} - D + F + V_{NR+2} k_{NR+2})x_{NR+2} + V_{NR+3} \sum_{j=NR+2}^{NT} A_{NR+2,j}^+ k_j x_j + F_{NR+2} z_{NR+2} = 0 \quad (4.51)$$

$$-[V_{i+1} - D + V_i k_i]x_i + \sum_{j=NR+2}^{NT} [(V_i - D + F)A_{i,j}^- + V_{i+1}A_{i,j}^+ k_j]x_j = 0 \quad NR+2 < i < NT \quad (4.52)$$

$$-[V_{NT} - D + F] \sum_{j=NR+2}^{NT} A_{NT,j}^- x_j - (F - D + V_{NT} k_{NT})x_{NT} = 0 \quad (4.53)$$

4.4. Formulação matemática da técnica proposta de redução de ordem de modelo baseada nos resíduos ponderados

Com o objetivo de introduzir as modificações propostas na técnica de colocação ortogonal tradicional e na técnica proposta de redução de ordem de modelo baseada nos resíduos ponderados pelos momentos, adotou-se uma representação genérica de uma seção de um sistema de estágio de separação descrito pelas seguintes equações diferenciais de diferenças:

$$\frac{d\hat{x}_i(t)}{dt} = f[\hat{x}_{i-1}(t)] + g[\hat{x}_i(t)] + h[\hat{x}_{i+1}(t)] \quad , i = 1, 2, 3 \dots N \quad (4.54)$$

Com as condições de contorno:

$$\hat{x}_0(t) = p(t) \quad e \quad \hat{x}_{N+1}(t) = q(t) \quad (4.55)$$

Aplicando a aproximação polinomial de grau $n+1$ na variável de estado $x_i(t)$, usando o seguinte reescalonamento para a variável independente representativa dos estágios do sistema:

$$s_i = \frac{i-1}{N} \quad (4.56)$$

E considerando os pontos internos $0 < s^{(1)} < s^{(2)} < \dots < s^{(n)} < 1$ e os pontos extremos $s^{(0)} = -\frac{1}{N}$ e $s^{(n+1)} = 1 + \frac{1}{N}$ como pontos de interpolação, o polinômio pode ser escrito como:

$$\hat{x}(s, t) \cong x^{(n+1)}(s, t) = \sum_{j=0}^{n+1} \ell_j(s) \hat{x}(s^{(j)}, t) = \sum_{j=0}^{n+1} \ell_j(s) x_j(t) \quad (4.57)$$

Os $\ell_j(s)$ são os polinômios interpoladores de Lagrange e utilizou-se a seguinte notação $x_j(t) \equiv \hat{x}(s^{(j)}, t)$ para simplificação.

Para cada ponto de interpolação, $i = 0, 1, 2, \dots, n+1$, as seguintes funções resíduos são definidas:

$$\mathfrak{R}^{(n+1)}(s^{(i)}, t) = \frac{dx_i(t)}{dt} - f \left[x^{(n+1)}(s^{(i)} - 1, t) \right] - g \left[x_i(t) \right] - h \left[x^{(n+1)}(s^{(i)} + 1, t) \right] \quad (4.58)$$

As diferenças de primeira ordem positiva e negativa são calculadas como:

$$f \left[x^{(n+1)}(s^{(i)} - 1, t) \right] = \sum_{j=0}^{n+1} \ell_j(s^{(i)} - 1) f \left[x_j(t) \right] = \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j}^- f \left[x_j(t) \right] \quad (4.59)$$

$$h \left[x^{(n+1)}(s^{(i)} + 1, t) \right] = \sum_{j=0}^{n+1} \ell_j(s^{(i)} + 1) h \left[x_j(t) \right] = \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j}^+ h \left[x_j(t) \right] \quad (4.60)$$

No método de colocação ortogonal discreta tradicional, $x_i(t)$ são encontrados quando os resíduos nos pontos internos, $i = 1, 2, \dots, n$, são anulados (pontos de colocação):

$$\mathfrak{R}^{(n+1)}(s^{(i)}, t) = 0 = \frac{dx_i(t)}{dt} - \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j}^- f \left[x_j(t) \right] - g \left[x_i(t) \right] - \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j}^+ h \left[x_j(t) \right] \quad (4.61)$$

E as condições de contorno $x_0(t) = p(t)$ e $x_{n+1}(t) = q(t)$ completam o sistema de $n + 2$ equações. A fim de contornar as descontinuidades que possam ocorrer nos contornos, uma aproximação similar à de SEFERLIS e HRYMAK (1994) pode ser aplicada no método tradicional através da adição de dois pontos extras de colocação representando os extremos da seção de estágios do sistema de separação, e para estes pontos os resíduos são definidos como:

$$\mathfrak{R}^{(n+1)}(s^{(0)}, t) = 0 = \frac{dx_0(t)}{dt} - f \left[x_{-1}(t) \right] - g \left[x_0(t) \right] - \sum_{j=0}^{n+1} A_{0,j}^+ h \left[x_j(t) \right] \quad (4.62)$$

$$\mathfrak{R}^{(n+1)}(s^{(n+1)}, t) = 0 = \frac{dx_{n+1}(t)}{dt} - g \left[x_{n+1}(t) \right] - \sum_{j=0}^{n+1} A_{n+1,j}^- f \left[x_j(t) \right] - h \left[x_{n+2}(t) \right] \quad (4.63)$$

Onde as condições de contorno são $x_{-1}(t) = p(t)$ e $x_{n+2}(t) = q(t)$. Entretanto, essa modificação na aproximação tem a desvantagem de aumentar o tamanho do sistema, ou

reduzir o grau do polinômio ortogonal por 2 se for mantido o tamanho do sistema do método tradicional.

No método proposto, $x_i(t)$ são encontrados pela anulação da soma dos resíduos ponderados pelos momentos para os n primeiros momentos:

$$\mathfrak{R}_k^{(n+1)}(t) = \sum_{j=1}^N \left(\frac{j-1}{N} \right)^{k-1} \mathfrak{R}^{(n+1)} \left(\frac{j-1}{N}, t \right) = 0 \quad k = 1, 2, \dots, n \quad (4.64)$$

A soma dos resíduos ponderados é aproximada pelo uso da forma discreta da quadratura de Gauss-Lobatto:

$$\mathfrak{R}_k^{(n+1)}(t) = \sum_{i=0}^{n+1} \omega_i (s^{(i)})^{k-1} \mathfrak{R}^{(n+1)}(s^{(i)}, t) = \sum_{i=0}^{n+1} M_{k,i} \mathfrak{R}^{(n+1)}(s^{(i)}, t) = 0 \quad (4.65)$$

Onde $M_{k,i} = \omega_i (s^{(i)})^{k-1}$ e ω_i são os pesos da quadratura. Essa quadratura é exata para uma função polinomial de grau até $2n + 1$, o qual ocorre sempre para o caso linear, porque $\mathfrak{R}^{(n+1)}(s, t)$ é um polinômio de grau $n + 1$.

Como as n equações em (4.65) são lineares, elas podem ser reescritas com a seguinte forma abaixo:

$$\mathfrak{R}^{(n+1)}(s^{(i)}, t) + V_{i,0} \mathfrak{R}^{(n+1)}(s^{(0)}, t) + V_{i,1} \mathfrak{R}^{(n+1)}(s^{(n+1)}, t) = 0, \quad i = 1, \dots, n \quad (4.66)$$

Onde $\mathbf{V}_0 = \tilde{\mathbf{M}}^{-1} \mathbf{b}_0$ e $\mathbf{V}_1 = \tilde{\mathbf{M}}^{-1} \mathbf{b}_1$ com $b_{i,0} = M_{i,0}$, $b_{i,1} = M_{i,1}$ e $\tilde{\mathbf{M}}$ é a matriz quadrada pela remoção da primeira e última coluna de \mathbf{M} .

Substituindo a Equação (4.58) na Equação (4.66), a seguinte expressão pode ser encontrada:

$$\frac{dX_i(t)}{dt} = \sum_{j=0}^{n+1} B_{i,j}^- f[x_j(t)] + G[x_i(t)] + \sum_{j=0}^{n+1} B_{i,j}^+ h[x_j(t)] , i = 1, \dots, n \quad (4.67)$$

Onde

$$X_i(t) = x_i(t) + V_{i,0} x_0(t) + V_{i,l} x_{n+1}(t) \quad (4.68)$$

$$B_{i,j}^- = A_{i,j}^- + V_{i,0} A_{0,j}^- + V_{i,l} A_{n+1,j}^- \quad (4.69)$$

$$B_{i,j}^+ = A_{i,j}^+ + V_{i,0} A_{0,j}^+ + V_{i,l} A_{n+1,j}^+ \quad (4.70)$$

$$G[x_i(t)] = g[x_i(t)] + V_{i,0} g[x_0(t)] + V_{i,l} g[x_{n+1}(t)] \quad (4.71)$$

O desenvolvimento para obtenção da Equação (4.67) a partir das Equações (4.58) e (4.66) encontra-se no apêndice 3.

As condições no contorno $x_0(t) = p(t)$ e $x_{n+1}(t) = q(t)$ completam o sistema de $n + 2$ equações. Observe que a colocação ortogonal tradicional é reproduzida pela adoção de $V_{i0}=0$ e $V_{il} = 0$. Para ambos os casos, $s^{(1)}, s^{(2)}, \dots, s^{(n)}$ são as raízes do polinômio de Hahn de grau n .

Usando a proposta de reescalonamento da variável independente discreta, as raízes do polinômio de Hahn são obtidas com alta exatidão para qualquer grau, visto que um grande acúmulo de erros de arredondamento era observado, mesmo para o caso de polinômios de baixa ordem, na variável original.

É preciso enfatizar que os balanços globais são obedecidos no método proposto, que são dados pelo momento de ordem zero. Além disso, no método de colocação ortogonal tradicional os pontos onde os resíduos são cancelados são fixos ($s^{(1)}, s^{(2)}, \dots, s^{(n)}$), e no método proposto os pontos de colocação obtidos são variáveis, caracterizando uma natureza adaptativa desejável para este tipo de aproximação.

4.4.1. Exemplo Motivador

Neste t3pico ser3 apresentada a modelagem de uma coluna absorvedora. Algumas hip3teses simplificadoras foram consideradas de forma a simplificar a modelagem da coluna, mas sem prejudicar as caracter3sticas do modelo completo. As considera3es feitas para a modelagem foram:

- Volatilidade constante ao longo da coluna (caso linear);
- Volatilidade relativa constante ao longo da coluna (caso n3o-linear);
- Vaz3es molares de l3quido e g3s constantes ao longo de toda a se33o de transfer3ncia de massa da torre absorvedora;
- Mistura perfeita em ambas as fases;
- Reten33o de vapor desprez3vel em cada est3gio;
- Reten33o de l3quido constante e igual em todos os est3gios;
- Equil3brio termodin3mico entre as correntes que saem de cada est3gio;

A modelagem descrita a seguir demonstra a aplica33o da t3cnica proposta para resolu33o do sistema de equa33es diferenciais de diferen3as representados pela Equa33o (4.72):

$$M \frac{d\hat{x}_i(t)}{dt} = L \hat{x}_{i-1}(t) - [L \hat{x}_i(t) + V \hat{y}_i(t)] + V \hat{y}_{i+1}(t) , i = 1, 2, \dots, N \quad (4.72)$$

Dividindo a express3o acima por V resulta:

$$\frac{d\hat{x}_i(t)}{dt} = \beta \hat{x}_{i-1}(t) - [\beta \hat{x}_i(t) + \hat{y}_i(t)] + \hat{y}_{i+1}(t) , i = 1, 2, \dots, N \quad (4.73)$$

Onde:

$$\beta = \left(\frac{L}{V} \right) \text{ e } \tau = t \cdot \left(\frac{V}{M} \right) \quad (4.74)$$

Sendo o equilíbrio termodinâmico dado por:

➤ Modelo linear

$$\hat{y}_i(t) = y_{eq}[\hat{x}_i(t)] = \alpha \hat{x}_i(t) \quad , \quad i = 0, 2, \dots, N+1 \quad (4.75)$$

➤ Modelo não-linear:

$$\hat{y}_i(t) = y_{eq}[\hat{x}_i(t)] = \frac{\alpha \hat{x}_i(t)}{1 + (\alpha - 1) \hat{x}_i(t)} \quad , \quad i = 0, 2, \dots, N+1 \quad (4.76)$$

Condições de contorno:

$$\hat{x}_0(t) = x_{feed}(t) \quad e \quad \hat{y}_{N+1}(t) = y_{feed}(t) \quad (4.77)$$

Onde α é a volatilidade relativa e β a razão dos fluxos molares líquido/gás, sendo parâmetros do modelo. Reescrevendo a Eq.(4.73) na forma da Eq. (4.54) obtemos os termos $f[\hat{x}_{i-1}(t)] = \beta \hat{x}_{i-1}(t)$, $g[\hat{x}_i(t)] = -\beta \hat{x}_i(t) - y_{eq}[\hat{x}_i(t)]$, e $h[\hat{x}_{i+1}(t)] = y_{eq}[\hat{x}_{i+1}(t)]$. Portanto, o modelo de redução de ordem baseado no método proposto, dado pela Equação (4.67), pode ser escrito na forma:

$$\frac{dX_i(t)}{dt} = \beta \sum_{j=0}^{n+1} B_{i,j}^- x_j(t) - [\beta X_i(t) + Y_i(t)] + \sum_{j=0}^{n+1} B_{i,j}^+ y_j(t) \quad , \quad i = 1, \dots, n \quad (4.78)$$

Onde

$$X_i(t) = x_i(t) + V_{i,0} x_0(t) + V_{i,1} x_{n+1}(t)$$

$$Y_i(t) = y_i(t) + V_{i,0} y_0(t) + V_{i,1} y_{n+1}(t)$$

$$y_i(t) = y_{eq}[x_i(t)] = \alpha \hat{x}_i(t)$$

E o modelo de redução de ordem baseado no método da colocação ortogonal tradicional, dado pela Equação (4.61), pode ser escrito na forma:

$$\frac{dx_i(t)}{dt} = \beta \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j}^- x_j(t) - [\beta x_i(t) + y_i(t)] + \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j}^+ y_j(t) \quad , \quad i = 1, \dots, n \quad (4.79)$$

4.5. Formulação do problema de otimização

Um dos objetivos presentes na indústria petrolífera é a maximização da produção de um determinado produto com maior valor agregado em detrimento de outros produtos de menor importância, denominados de subprodutos.

Para alcançar este objetivo é necessário projetar os equipamentos da planta de modo a operarem da forma mais eficiente possível. Neste cenário enquadram-se as torres de destilação, equipamento primordial no processo de refino do petróleo para obtenção de produtos de maior valor de mercado. Neste contexto é de suma importância durante o projeto da torre a determinação do prato ótimo de inserção de carga, assim como, o ponto ótimo de operação da torre determinado pela razão de refluxo e cargas térmicas fornecidas no refeedor e condensador.

Neste tópico será descrito o problema de otimização e a metodologia adotada para solução do problema. A plataforma de simulação utilizada para o desenvolvimento do problema foi o MATLAB.

A estrutura do problema de otimização esta ilustrada na Figura 4.3. A camada mais externa fornece uma variável contínua (estágio de alimentação) para a camada intermediária, esta variável é discretizada nesta camada e é repassada para o núcleo da figura, que representa a simulação estática do modelo de redução de ordem. A variável otimizada escolhida foi a composição de um dos componentes de topo da coluna, através da determinação do estágio ótimo de alimentação de carga, sujeito às restrições no número de estágios de cada seção, no número total de estágios de equilíbrio da torre e na razão de refluxo de topo.

$$f_{\text{objetivo}} = D^{\text{topo}} x_j \quad j = \text{Produto}$$

Sujeito as restrições:

$$NT - NF \geq Np^{ESG}$$

$$NF \geq Np^{RET}$$

$$NT \text{ e } Rr = \text{Constante}$$

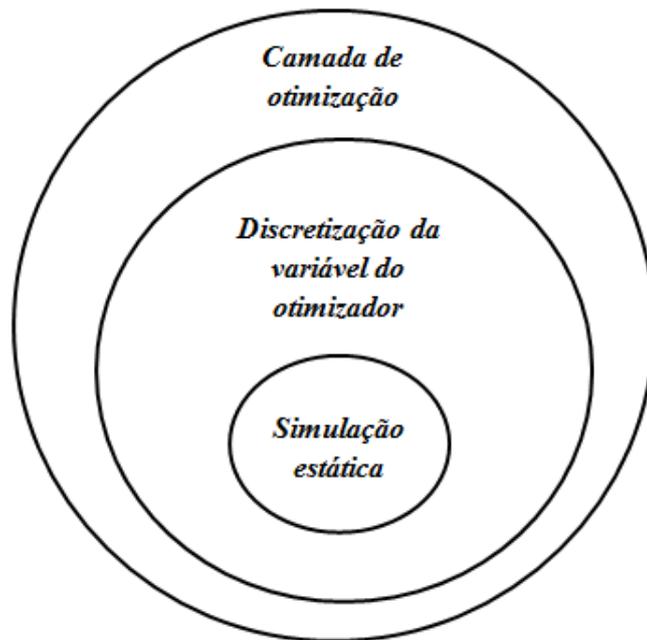


Figura 4.3 - Estrutura do problema de otimização

A função objetivo formulada é univariável com características não-lineares sujeita a restrições. Os limites são impostos de forma que o número de estágios por seção seja sempre maior ou igual ao número de pontos de interpolação, o número total de estágios da coluna seja fixo e a razão de refluxo seja mantida constante. O método de otimização utilizado para solução do problema foi o algoritmo da seção áurea com interpolação parcial descrito em FORSYTHE *et al.* (1976) e BRENT *et al.* (1973).

Capítulo 5

Resultados e Discussões

5.1. Introdução

Neste capítulo serão apresentados e discutidos os resultados sobre a técnica proposta de redução de ordem. O capítulo é organizado em estudos de casos de processos de separação por estágios no estado estacionário e dinâmico e na aplicação da técnica no projeto de colunas de destilação otimizadas.

Os casos simulados foram utilizados para validar a técnica proposta, mostrando sua superioridade quando comparada com o modelo de redução de ordem baseado na colocação ortogonal tradicional, sem a inclusão dos extremos, (no exemplo das colunas absorvedoras) ou na colocação ortogonal modificada, com a inclusão dos extremos (no caso das colunas de destilação). Em todas as técnicas de redução a variável independente foi normalizada. Para realizar a implementação de todos os modelos e técnicas de redução de ordem foi utilizado o simulador EMSO. Neste ambiente de simulação os métodos de integração e de solução de equações algébricas não-lineares podem ser especificados, junto com seus parâmetros de sintonia (tolerância relativa e absoluta). Para as simulações realizadas foi escolhida a DASSLC como método de integração com tolerância relativa de 10^{-6} e absoluta de 10^{-8} .

5.2. Estudo de caso

5.2.1. Absorvedora Linear

O modelo linear da absorvedora foi simulado para ilustrar a simplicidade da aplicação do método e sua eficácia na reprodução dos resultados obtidos na simulação do modelo completo no estado estacionário. A descrição do modelo da absorvedora linear encontra-se no exemplo motivador do Capítulo 4.

Nas Figuras 5.1 e 5.2 são apresentados os resultados em estado estacionário da aplicação da técnica proposta e da colocação ortogonal para as especificações da Tabela 5.1. A Figura 5.1 apresenta uma variação na ordem da aproximação de 1 e 3 pontos internos e seus efeitos na determinação do perfil de composição, onde é possível identificar que uma redução de 84% na ordem do modelo reproduz com precisão o perfil dado pelo modelo completo. Nesta figura não foi apresentado o resultado obtido pelo modelo de redução baseado na colocação ortogonal modificada, com inclusão dos extremos, pois neste nível de redução o perfil é similar ao obtido pela técnica baseada nos momentos.

A Figura 5.2 ilustra uma comparação entre os perfis obtidos pela colocação ortogonal tradicional, sem a inclusão dos extremos, e a técnica de redução baseada nos momentos, ambas com 3 pontos internos, onde verifica-se uma grande superioridade da técnica proposta em reproduzir o perfil do modelo completo.

➤ Estado estacionário

Tabela 5.1 - Parâmetros do modelo linear da absorvedora

<i>Dados Operacionais</i>	
Pontos de colocação:	3
Número de estágios:	32
α	0,75
β	1,55

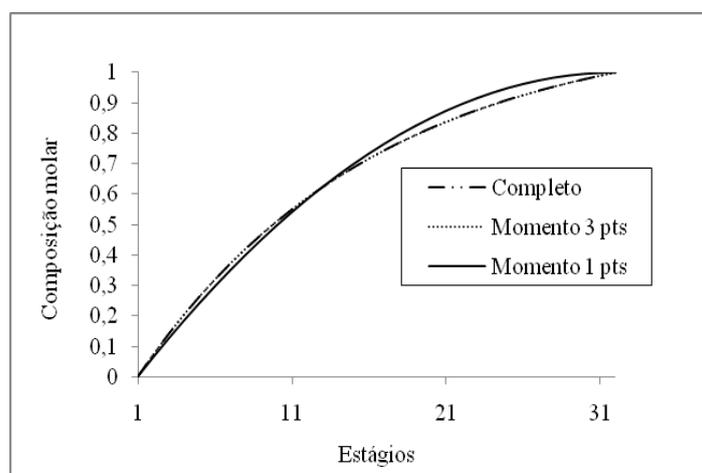


Figura 5.1 –Perfil de composição da fase líquida no estado estacionário da absorvedora linear com 32 estágios

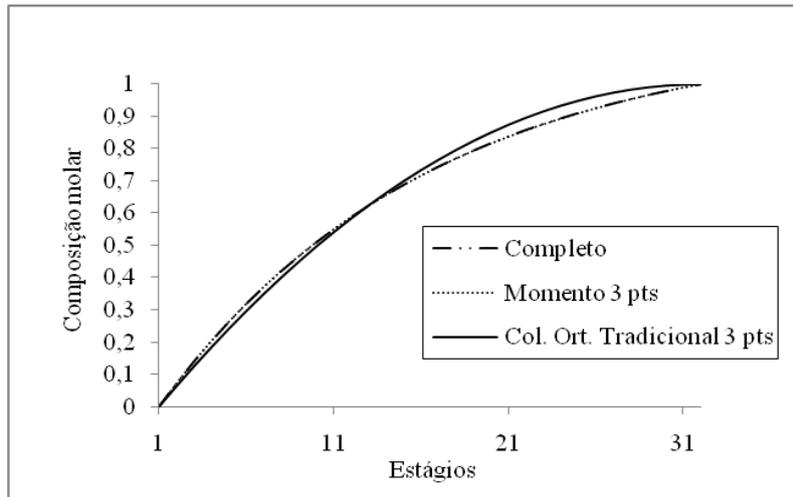


Figura 5.2 - Perfis de composição da fase líquida no estado estacionário entre os modelos de redução de ordem para a absorvedora linear de 32 estágios

5.2.2. Absorvedora não-linear

O modelo não-linear é descrito no exemplo motivador do Capítulo 4. Nas Figuras 5.3 e 5.4 são apresentados os resultados da aplicação da técnica proposta e da colocação ortogonal para as especificações presentes na Tabela 5.2. Similarmente ao caso linear foram realizados estudos da influência da ordem da redução no perfil de composição obtido, usando 5 e 7 pontos internos, assim como uma comparação entre a colocação ortogonal tradicional e o método proposto, ambos com 7 pontos internos.

A Figura 5.3 mostra a boa reprodutibilidade do perfil apresentado pelo modelo completo para uma redução de 72 %, enquanto que a Figura 5.4, assim como no caso linear, ilustra a superioridade da técnica proposta sobre a colocação ortogonal tradicional para uma mesma ordem de redução.

Tabela 5.2 - Parâmetros do modelo não-linear da absorvedora

<i>Dados Operacionais</i>	
Pontos de colocação:	5
Número de estágios:	32
α	0,75
β	1,55

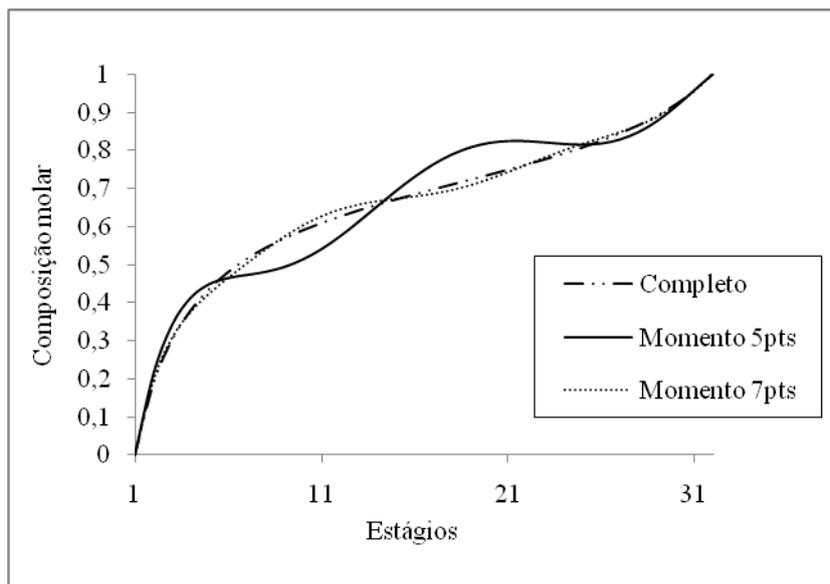


Figura 5.3 - Perfis de composição da fase líquida no estado estacionário da absorvedora não-linear com 32 estágios

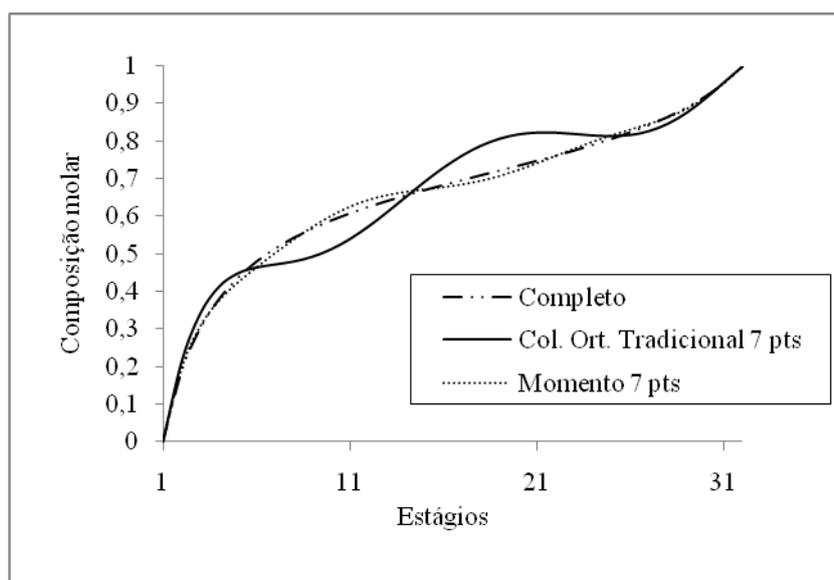


Figura 5.4 - Perfis de composição da fase líquida no estado estacionário entre a colocação ortogonal tradicional e o modelo proposto para a absorvedora não-linear

5.2.3. Sistema binário Propeno-Propano

Nesta seção do capítulo serão descritos os resultados obtidos pela simulação de uma coluna de destilação de alta pureza, representando um processo de separação por estágios de um sistema binário de componentes com volatilidades muito próximas.

➤ Estado estacionário

A Tabela 5.3 apresenta as especificações do estudo de caso do sistema binário propeno-propano com uma variação no tamanho do sistema de equações diferenciais de diferenças (variação no número de estágios). A coluna com 177 estágios é descrita por SERFERLIS & HRYMAK (1994).

SIMÕES (2000) apresentou uma estratégia de redução de ordem de modelos de separação por estágios baseada na colocação ortogonal, e aplicou esta metodologia no sistema descrito por SERFERLIS & HRYMAK (1994). Este mesmo sistema foi simulado no presente trabalho com o viés de comparar os resultados obtidos pela nova técnica proposta com os resultados apresentados pela literatura.

Os resultados apresentados nas Figuras 5.5 e 5.6 para uma redução de 93% mostram-se superiores aos apresentados por SIMÕES (2000) para uma redução de 90%. Além disso, os gráficos apresentados nestas figuras em conjunto com os resultados presentes na Tabela 5.4 ilustram um comparativo, entre as técnicas de redução de ordem baseada nos momentos e na colocação ortogonal modificada com inclusão dos extremos, que mostra uma grande superioridade do método baseado nos momentos. Na Tabela 5.4, os erros foram calculados pela expressão abaixo.

$$Erro_i = abs(X_i^{completo} - X_i^{momento}) \quad i = 1, 2, \dots, n \text{ estágios} \quad (5.1)$$

Tabela 5.3 - Especificação dos parâmetros do sistema de separação propeno-propano

Dados Operacionais			
Número de estágios:	51	101	177
Componentes:	Propeno e Propano		
Vazão de alimentação (kmol/h):	44,725		
Temperatura da carga (K):	319,26		
Composição de carga:	(0,8973 0,1027)		
Pressão na coluna (atm):	18,3627		
Razão de Refluxo:	19,7		
Modelo termodinâmico :	Peng - Robinson		

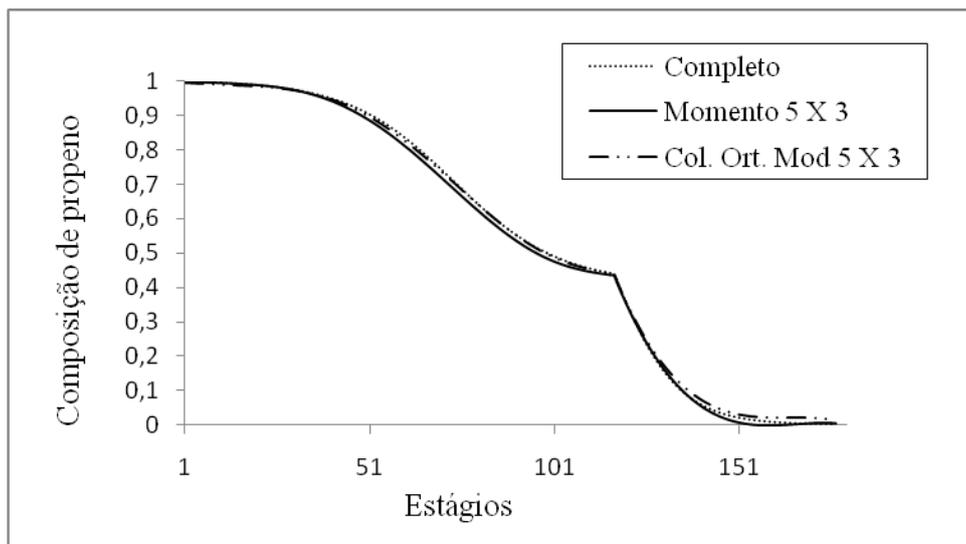


Figura 5.5 - Perfil de composição molar da fase líquida no estado estacionário do sistema de separação propeno-propano com 177 estágios

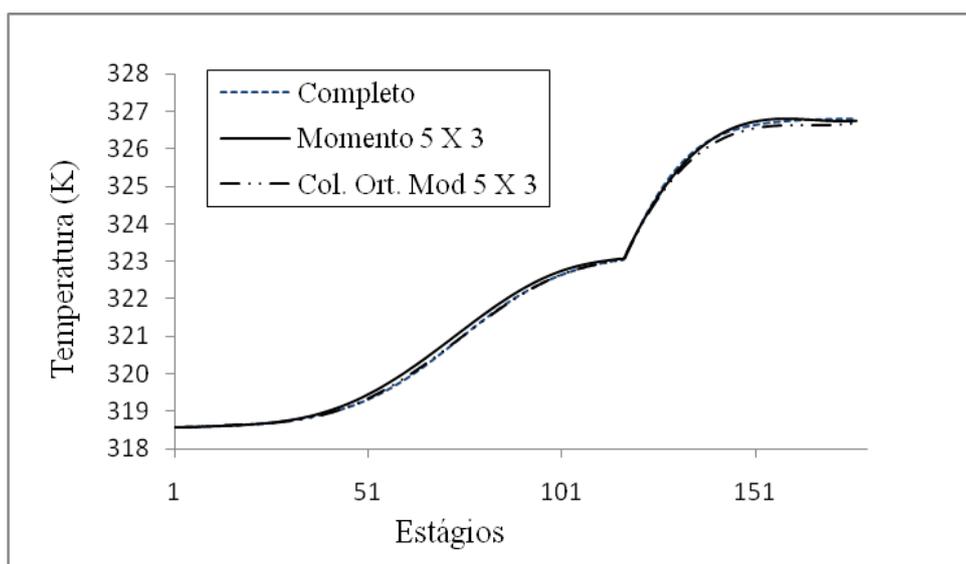


Figura 5.6 - Perfil de Temperatura no estado estacionário do sistema de separação propeno-propano com 177 estágios

Tabela 5.4 – Resultados para o caso descrito por SERFERLIS & HRYMAK (1994).

Erro Absoluto	Composição de Propeno		Temperatura	
	Momento	Col. Ort. Mod.	Momento	Col. Ort. Mod.
Soma	0,8014	1,1692	6,3570	10,0030
Máximo	0,0248	0,0206	0,1990	0,1800
Topo	0,0005	0,0015	0,0040	0,0120
Carga	0,0044	0,0015	0,0370	0,0130
Fundo	0,0048	0,0137	0,0420	0,1210

Os resultados para a coluna com 51 estágios apresentados na Figura 5.7 e os erros absolutos determinados pela Equação (5.1), presentes na Tabela 5.5, ilustram a superioridade da técnica proposta em reproduzir os perfis de composição e temperatura no estado estacionário do modelo completo em comparação com o método de colocação ortogonal modificado para uma redução de 84 % no número de equações diferenciais de diferença.

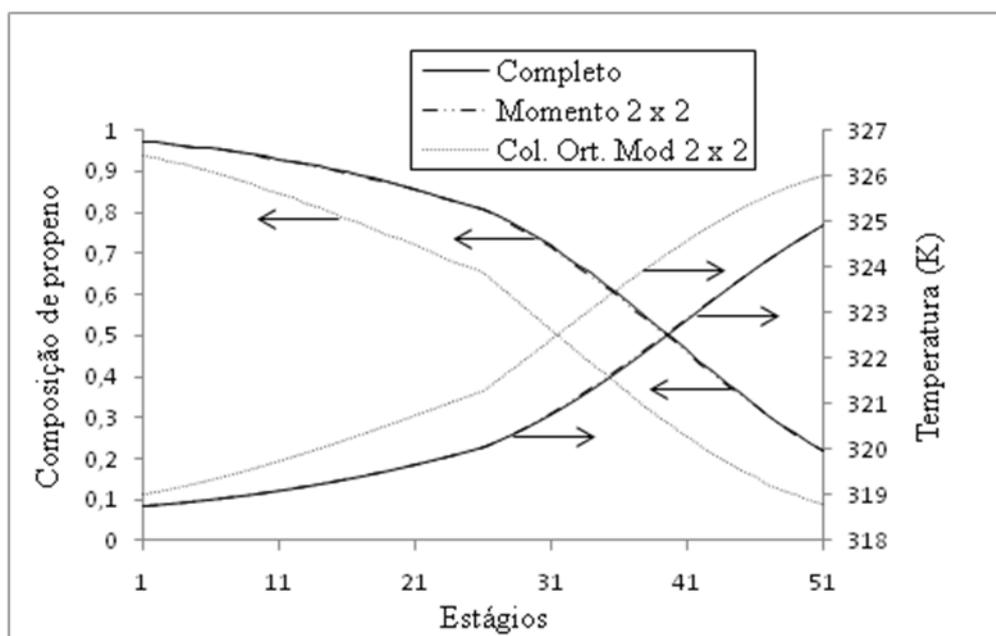


Figura 5.7 - Perfis de composição molar da fase líquida e temperatura no estado estacionário do sistema de separação propeno-propano com 51 estágios

Tabela 5.5 -Desvio de composição e temperatura entre os modelos de redução 2 X 2

Erro Absoluto	Composição de Propeno		Temperatura	
	Momento	Col. Ort. Mod	Momento	Col. Ort. Mod
Global	0,1068	7,3308	0,8730	60,1150
Máximo	0,0069	0,2220	0,0590	1,8450
Topo	0,0002	0,0340	0,0010	0,2650
Carga	0,0002	0,1533	0,0310	1,6640
Fundo	0,0015	0,1293	0,0130	1,1190

A Figura 5.8 ilustra a eficácia do método proposto em reproduzir o modelo completo para uma redução de 80% no sistema de equações, para esta redução de ordem, ambas as estratégias de colocação ortogonal, com inclusão dos extremos, e

momentos obtiveram a mesma precisão em determinar o perfil do modelo completo, mas é preciso ressaltar que a colocação ortogonal utiliza dois pontos a mais por estágios.

A Tabela 5.6 mostra o valor dos erros absolutos de composição molar e temperatura, calculados pela Equação (5.1), e como a variação no número de pontos internos influencia estes resultados. Pode-se observar com esta análise que para altas reduções na ordem do modelo o método proposto apresenta larga vantagem sobre o método baseado na colocação ortogonal modificada, ao passo que esta superioridade vai naturalmente diminuindo com o aumento no número de pontos internos.

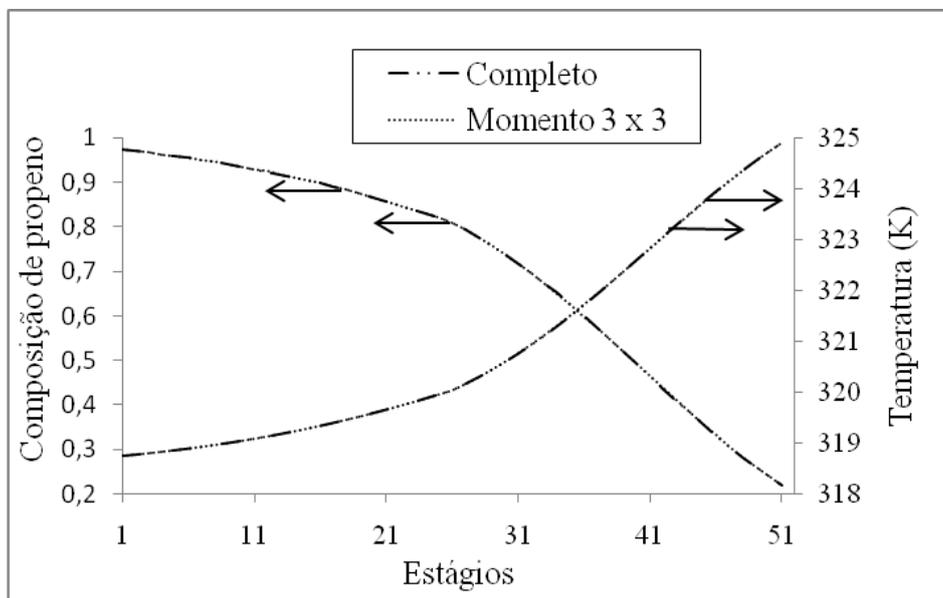


Figura 5.8 - Perfis de composição da fase líquida e temperatura no estado estacionário para os modelos proposto e completo

Tabela 5.6 - Soma dos erros do sistema binário para a temperatura e composição de Propeno

Soma do erro	Composição molar de Propeno		Temperatura (K)	
	3 x 3	8 x 8	3 x 3	8 x 8
Momento	$2,4 \times 10^{-2}$	$1,4 \times 10^{-5}$	0,196	10^{-8}
Col. Ort. Mod.	0,109339	$5,559 \times 10^{-4}$	0,885	5×10^{-3}

Com o objetivo de simular um sistema com tamanho intermediário e analisar o comportamento da redução pela aplicação da técnica baseada nos momentos e na fundamentada na colocação ortogonal modificada, o exemplo estudado foi simulado para uma coluna de pureza elevada com 101 estágios de separação.

Os resultados presentes na Figura 5.9 e Tabela 5.7 mostram a fragilidade da técnica de redução de ordem fundamentada na colocação ortogonal para altas reduções, enquanto que a técnica proposta apresentou resultados muito mais próximos do modelo completo, quando estipulada uma redução de 93% no sistema.

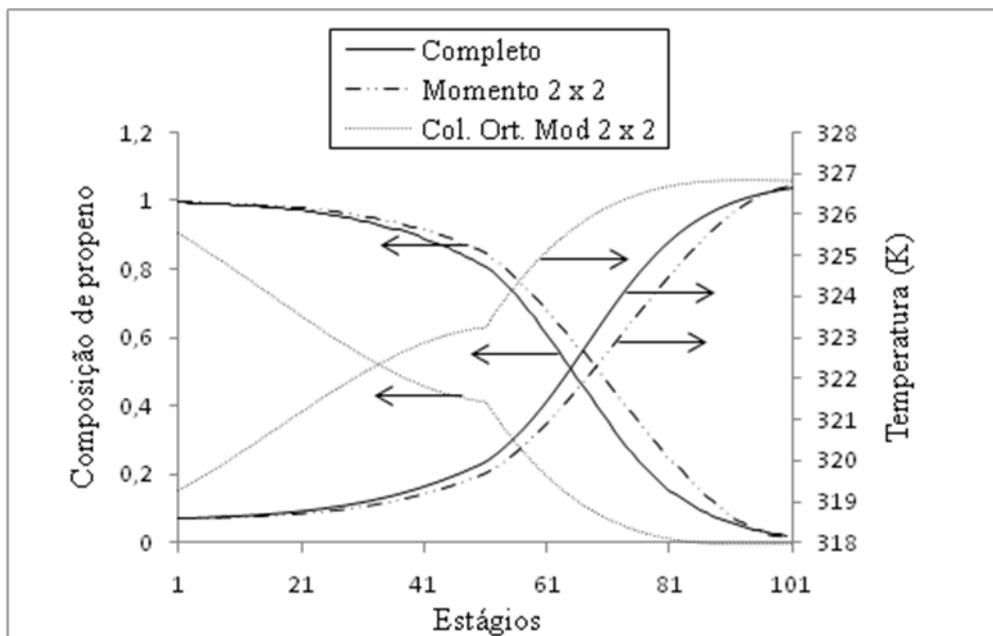


Figura 5.9 - Perfis de composição molar da fase líquida e temperatura para o estado estacionário do sistema propeno-propano com 101 estágios

Tabela 5.7 - Desvio de composição e temperatura para uma redução 2 X 2

Erro absoluto	Composição de Propeno		Temperatura	
	Momento	Col. Ort. Mod	Momento	Col. Ort. Mod
Global	3,8852	28,0084	32,1220	229,6430
Máximo	0,1156	0,4519	0,9630	3,7560
Topo	0,0007	0,0887	0,0050	0,6910
Carga	0,0338	0,4125	0,2670	3,3570
Fundo	0,0063	0,0232	0,0550	0,2040

A Figura 5.10 mostra a qualidade do método proposto baseado nos momentos em reproduzir o modelo completo para uma redução de 90% no sistema de equações.

A Tabela 5.8 apresenta os erros absolutos de composição molar e temperatura, calculados pela Equação (5.1), para uma variação na redução da ordem do modelo completo. Assim como, no sistema de menor dimensão descrito anteriormente o método proposto foi superior ao baseado na colocação ortogonal com extremos inclusos.

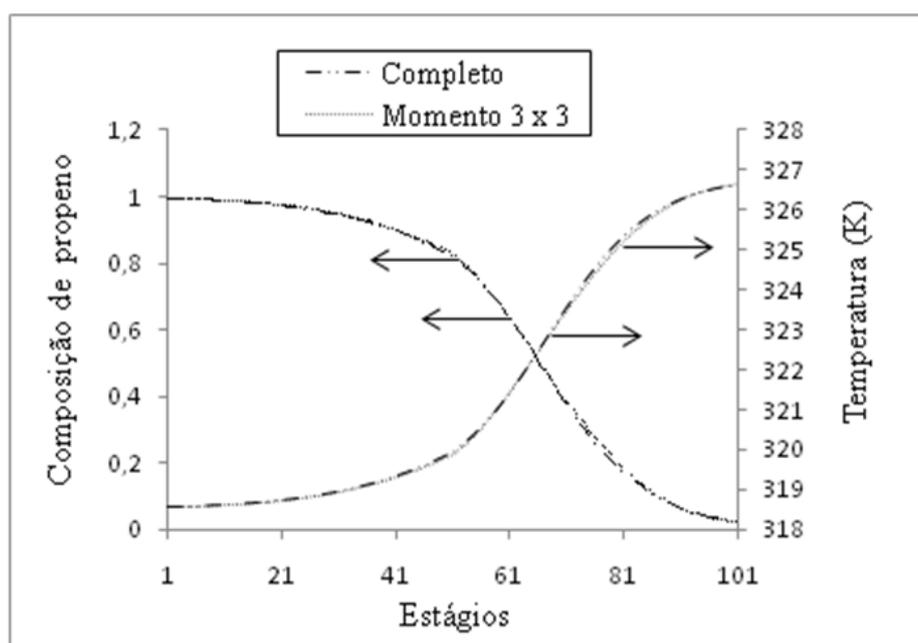


Figura 5.10 - Perfis de composição da fase líquida e temperatura para os modelos de redução de ordem proposto e completo

Tabela 5.8 - Soma dos erros absolutos para a temperatura e composição de propeno para uma variação na ordem da redução

Soma do erro	Composição molar de Propeno		Temperatura (K)	
	2 x 2	10 x 10	2 x 2	10 x 10
Momento	3,885	$2,67 \times 10^{-4}$	32,122	0,005
Col. Ort. Mod.	28,008	0,043	229,643	0,354

➤ Estado dinâmico

Simulações dinâmicas foram realizadas para avaliar a capacidade dos modelos de redução de ordem em reproduzir o comportamento dinâmico do modelo completo do

sistema de separação com 51 estágios de equilíbrio. As condições operacionais são as mesmas da Tabela 5.3.

As Figuras 5.11 e 5.13 apresentam o comportamento dinâmico das variáveis de topo composição e temperatura em termos de desvio (Equação (5.2)) para um degrau de 11%, de 19.7 a 22, na razão de refluxo. O comportamento do topo foi escolhido devido a sua presença na maioria das estratégias de controle. Os gráficos presentes nestas figuras ilustram bons resultados do modelo baseado nos momentos em reproduzir a dinâmica e o ganho do modelo completo para as variáveis de controle composição e temperatura, quando aplicada uma redução de 84 % na ordem do modelo completo. Por outro lado, o modelo de redução de ordem baseado na colocação ortogonal modificada apresentou dinâmica e ganhos muito diferentes do modelo completo, o que dificultaria o seu uso para estratégia de controle neste grau de redução. Reduções de ordem menores, como por exemplo, 80%, ambos os modelos apresentaram bons resultados em descrever a dinâmica e o ganho destas variáveis de topo e poderiam ser utilizados para controle.

$$\bar{X} = X(t) - X_{ss} \quad (5.2)$$

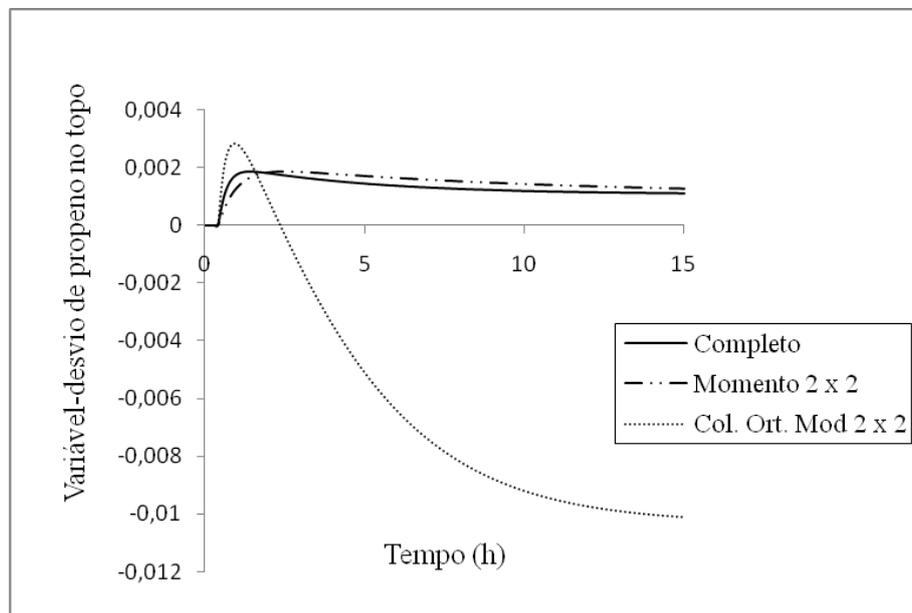


Figura 5.11 - Dinâmica da variável-desvio da composição molar de propeno da fase líquida no topo da coluna de 51 estágios

As Figuras 5.12 e 5.14 descrevem o comportamento da dinâmica das variáveis de topo composição e temperatura em valores absolutos. Estes resultados nos permitem

concluir que reduções da ordem de 84% são aceitáveis para quantificar produção quando utilizada à estratégia de redução de ordem baseada nos momentos, enquanto que, o modelo de redução de ordem fundamentado na colocação ortogonal modificada não apresentou resultados satisfatórios para este objetivo neste nível de redução. Apenas para reduções menores, como de 80%, ambos os modelos de redução podem ser aplicados.

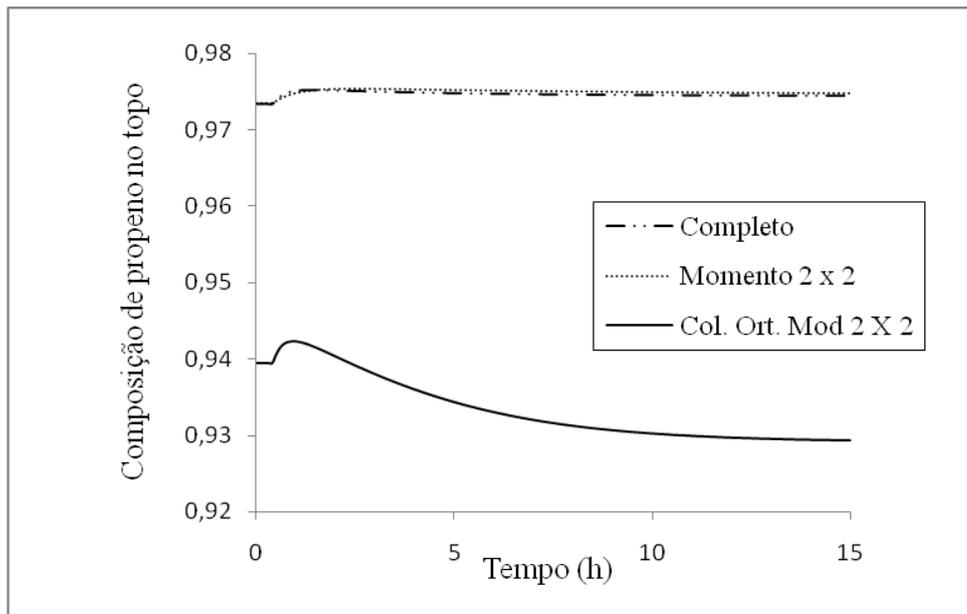


Figura 5.12 - Dinâmica do valor absoluto da composição de propeno da fase líquida no topo da coluna de 51 estágios

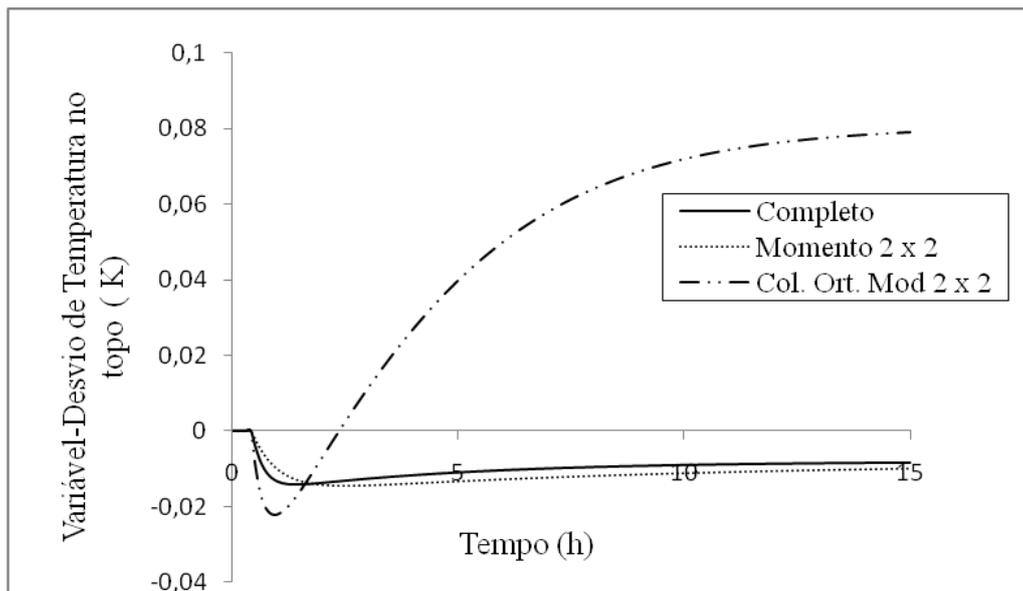


Figura 5.13 - Dinâmica da variável-desvio de temperatura no topo da coluna com 51 estágios

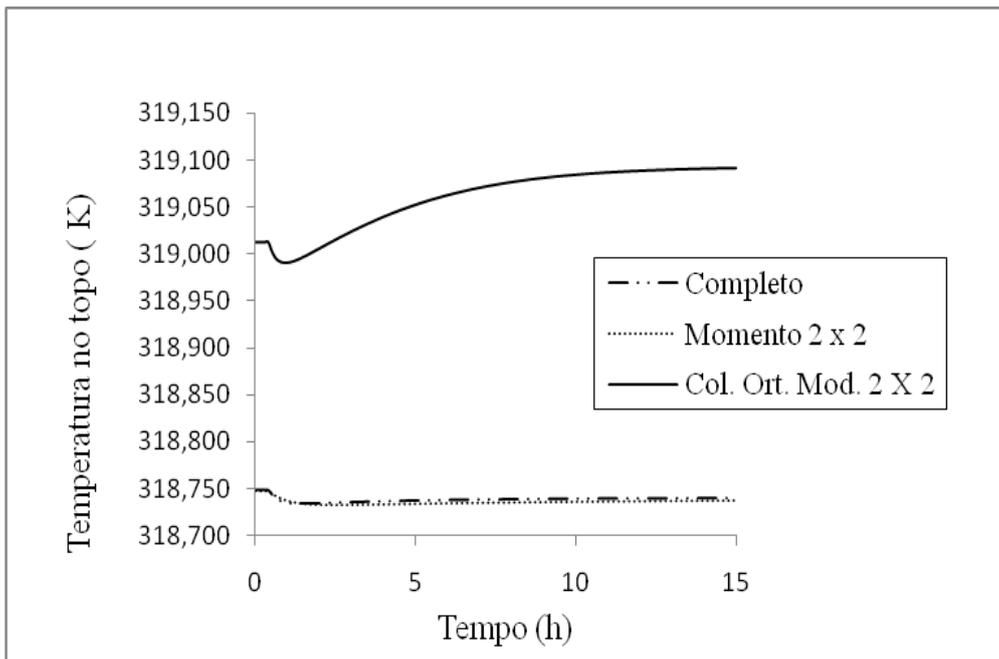


Figura 5.14 - Dinâmica de temperatura no topo da coluna com 51 estágios de equilíbrio

Assim como o topo, o fundo de uma coluna de destilação é utilizado em inúmeras estratégias de controle. As Figuras 5.15 e 5.17 ilustram o comportamento da composição e da temperatura em termos de variáveis de controle, e assim como o topo a estratégia de redução baseada nos momentos apresentou dinâmica e ganhos similares ao apresentado pelo modelo completo, o que permite sua utilização sem comprometer o desempenho do controle no fundo da coluna, fato não verificado na estratégia fundamentada na colocação ortogonal modificada. Portanto, assim como no controle de topo, apenas em reduções menores, ambas as estratégias podem ser implementadas sem comprometer o fundo.

Os gráficos presentes nas Figuras 5.16 e 5.18 ilustram as variáveis de fundo, composição e temperatura em termos absolutos. Estes resultados nos permitem concluir que reduções da ordem de 84%, apenas o modelo de redução baseado nos momentos pode ser utilizado, e que em reduções menores, ambas as estratégias tornam-se viáveis para determinação destas variáveis, que são de extrema importância para quantificar o produto de fundo produzido e os gastos energéticos com o refeedor da coluna.

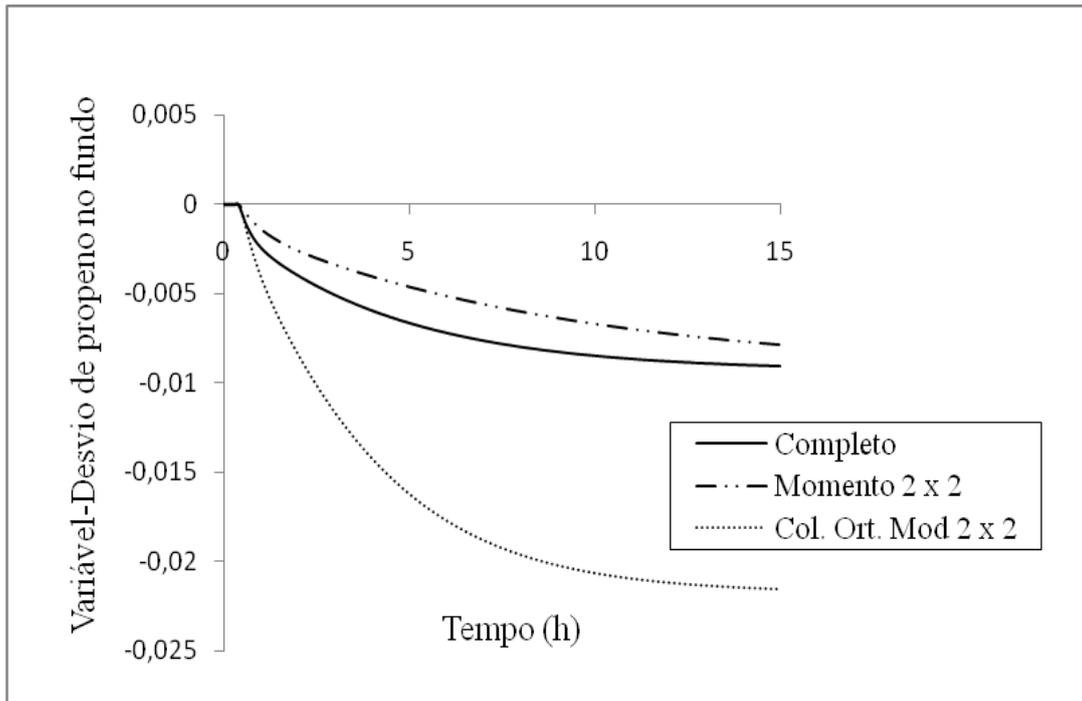


Figura 5.15 - Dinâmica da variável-desvio da composição molar de propeno da fase líquida no fundo da coluna com 51 estágios

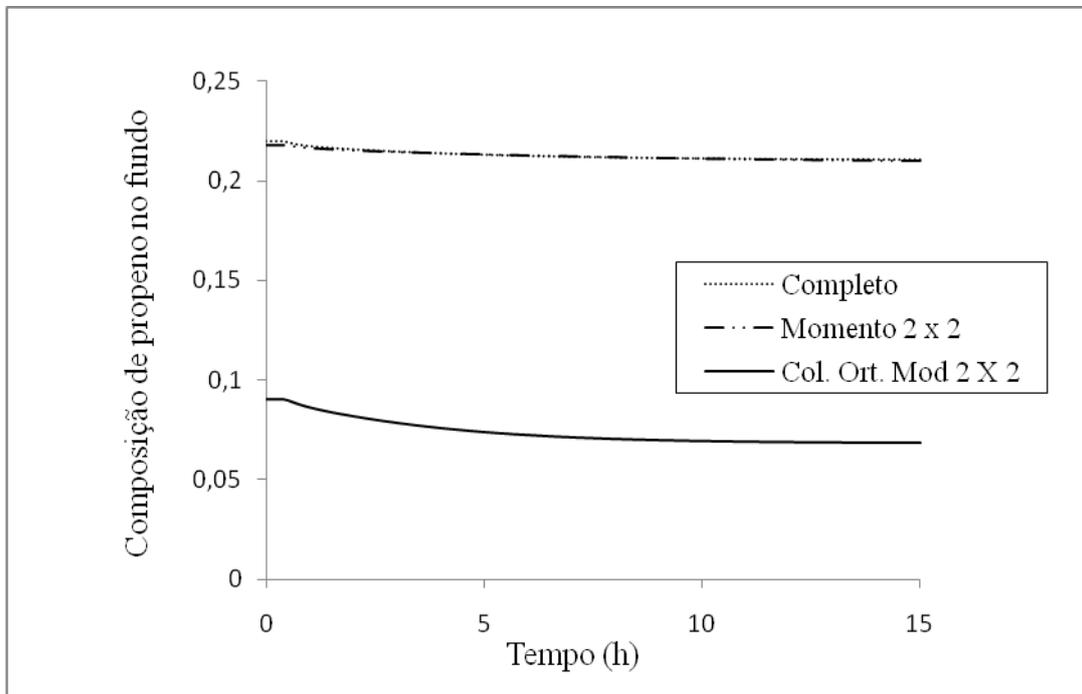


Figura 5.16 - Dinâmica da composição de propeno da fase líquida no fundo da coluna com 51 estágios

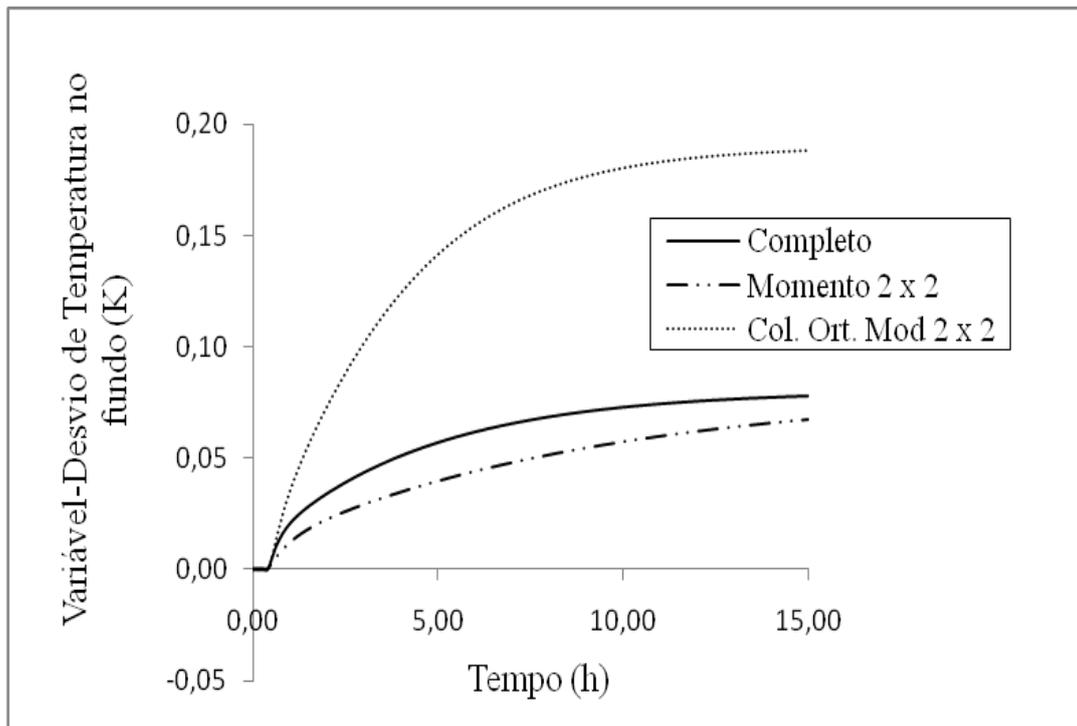


Figura 5.17 - Dinâmica da variável-desvio de temperatura no topo da coluna com 51 estágios

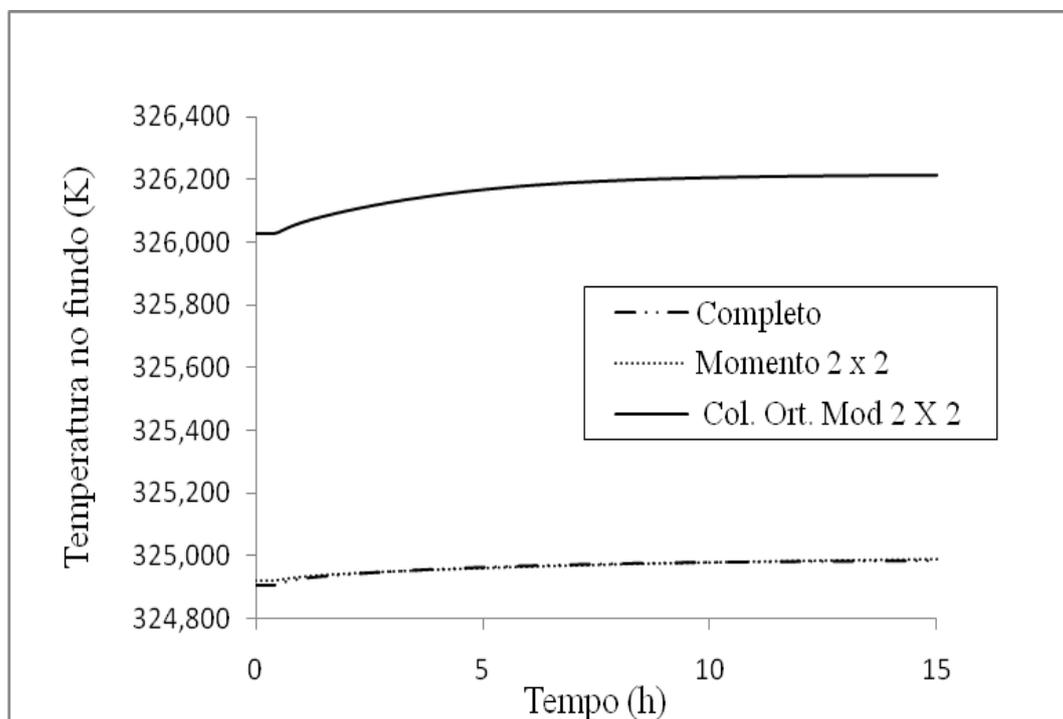


Figura 5.18 - Dinâmica da temperatura no fundo da coluna com 51 estágios

5.2.4. Sistema ternário Benzeno – Tolueno – O-xileno

Nesta seção são apresentados os resultados obtidos pela simulação de um processo de separação por estágios de um sistema ternário, Benzeno – Tolueno – O-xileno. Este sistema foi escolhido, para demonstrar a eficácia e superioridade do método proposto frente à colocação ortogonal para um sistema mais complexo de separação multicomponentes.

➤ Estado estacionário

A Tabela 5.9 apresenta as especificações do estudo de caso do sistema ternário Benzeno – Tolueno - O-xileno. Os resultados presentes nas Figuras 5.19 e 5.20 associados aos erros calculados pela Equação (5.1) e apresentados na Tabela 5.10, comprovam a superioridade da técnica baseada nos momentos em reproduzir os perfis estacionários de composição e temperatura do modelo completo frente ao método de colocação ortogonal modificado, para uma redução de 63% no número de equações diferenciais de diferença.

Tabela 5.9 – Especificação dos parâmetros do sistema ternário

Dados Operacionais	
Número de estágios	22
Componentes	Benzeno / Tolueno / O-xileno
Prato de alimentação	11
Vazão de alimentação (Kmol/h)	100
Temperatura da carga (K)	410
Composição de carga	(0,15 0,25 0,6)
Pressão na coluna (atm)	20
Razão de refluxo:	5
Modelo Termodinâmico	Peng - Robinson

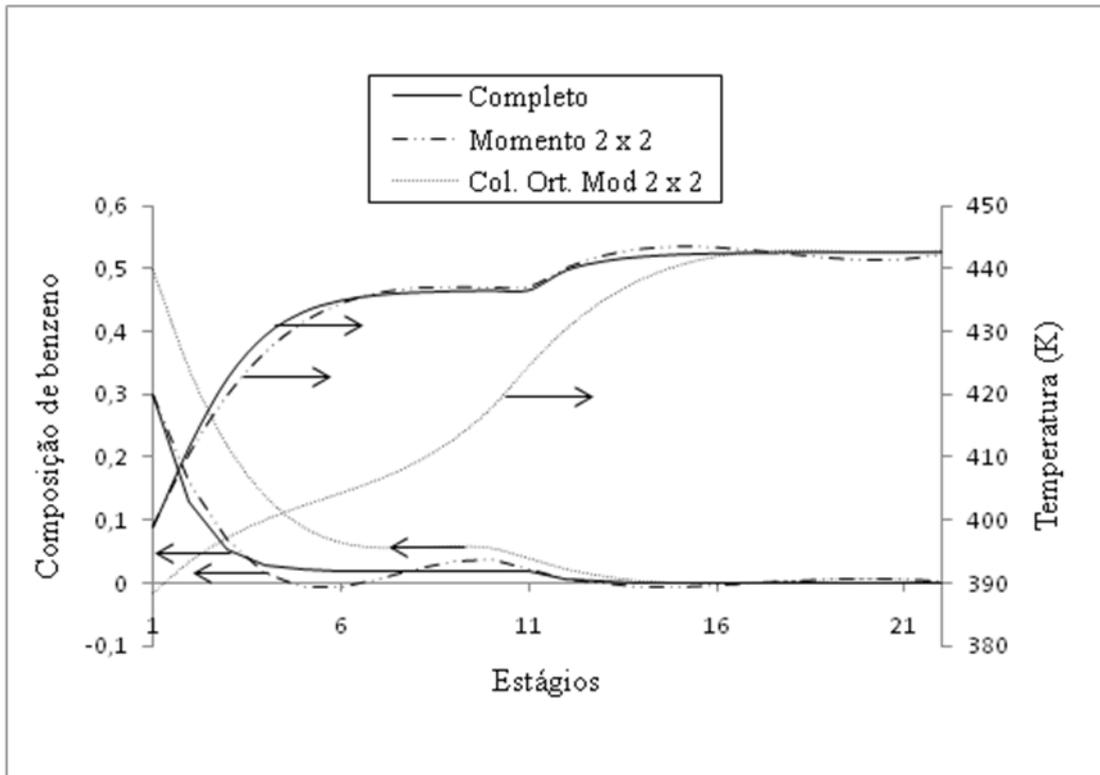


Figura 5.19 – Perfis estacionários de composição da fase líquida e temperatura para o sistema ternário com 22 estágios

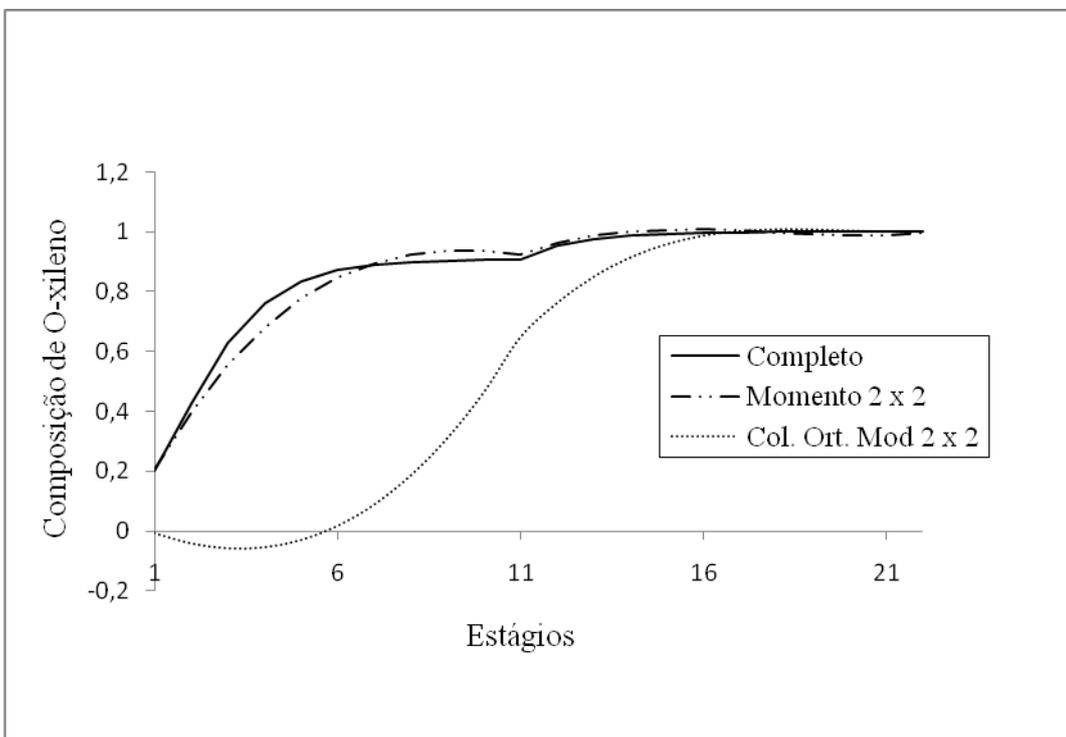


Figura 5.20 - Perfil de O-xileno da fase líquida para o sistema de separação ternário com 22 estágios

Tabela 5.10 -Desvios de composição e temperatura do sistema ternário com 22 estágios

Erro absoluto	Composição de Benzeno		Composição de O-xileno		Temperatura	
	Momento	Col. Ort	Momento	Col. Ort	Momento	Col. Ort
Global	0,4618	1,4707	1,1414	7,6299	20,6100	280,9810
Máximo	0,0328	0,2063	0,0953	0,8085	2,7040	30,9740
Topo	0,0017	0,1975	0,0020	0,0080	0,1450	10,5740
Carga	0,0044	0,0227	0,0233	0,2344	0,5270	12,2820
Fundo	0,0017	0,0015	0,0020	0,0038	0,3430	0,0110

As Figuras 5.21 e 5.22 mostram que o método proposto é capaz de reproduzir o modelo completo para uma redução de 55% no número de equações diferenciais de diferenças, e neste caso, ambas as estratégias, colocação ortogonal com inclusão dos extremos e momentos, obtiveram a mesma eficácia em obter o perfil de composição e temperatura do modelo completo no estado estacionário. Os resultados da colocação ortogonal não foram apresentados nas figuras por serem equivalentes aos momentos.

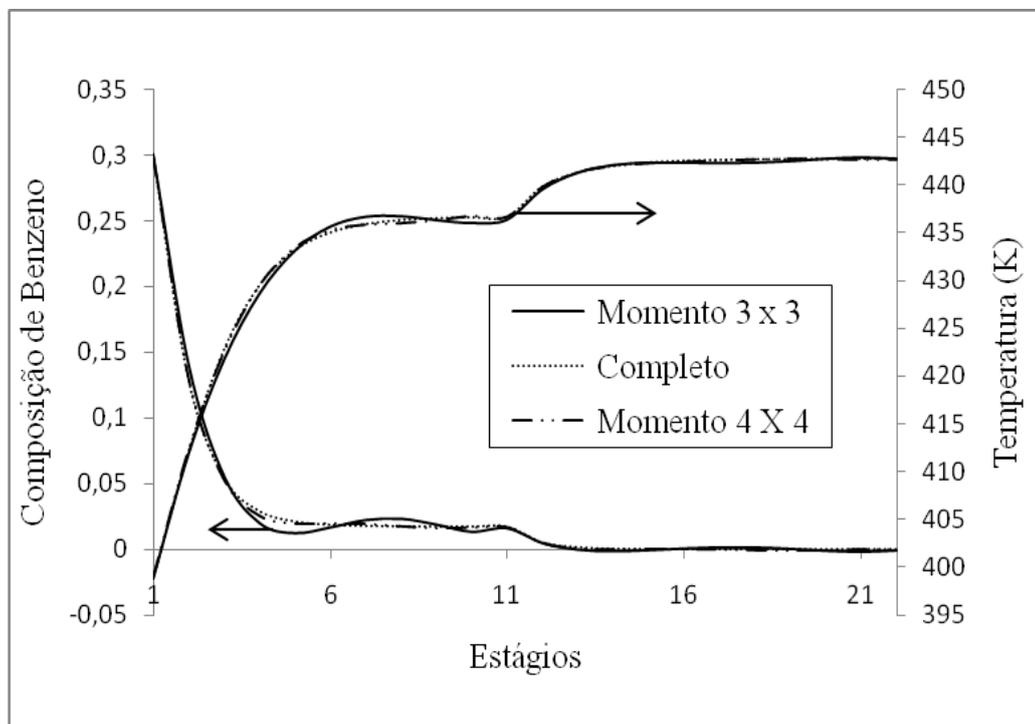


Figura 5.21 – Perfis de composição da fase líquida e temperatura estacionários para uma variação na ordem de redução

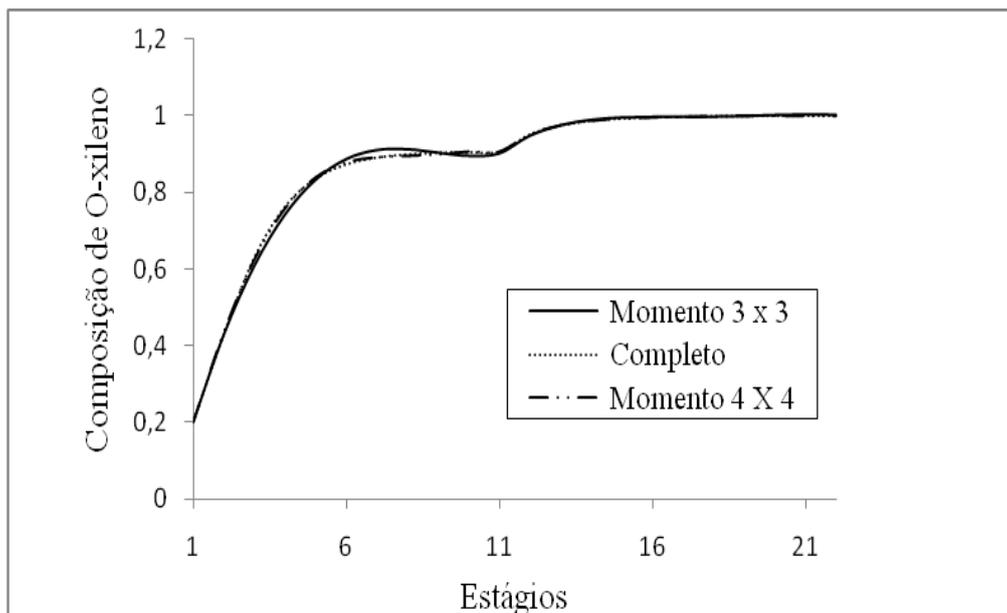


Figura 5.22 - Perfis de composição de o-xileno da fase líquida

As Tabelas 5.11 e 5.12 mostram o valor dos erros de composição e temperatura, respectivamente, calculados pela Equação (5.1), e como a variação no número de pontos de colocação influencia estes resultados. Podemos concluir de forma similar a análise do sistema binário, que para reduções de ordem maiores, a estratégia baseada na colocação ortogonal enfrenta maior dificuldade em obter o perfil do modelo completo que a fundamentada nos momentos, isso confirma a maior robustez da metodologia proposta.

Tabela 5.11 - Resultado da soma dos erros em cada estágio para a composição de benzeno e o-xileno

Soma do erro	Fração molar de Benzeno		Fração molar de O-xileno	
	3 x 3	5 x 5	3 x 3	5 x 5
Momento	$6,2 \times 10^{-2}$	$4,2 \times 10^{-3}$	0,1308	$1,25 \times 10^{-2}$
Col. Ort. Mod.	$6,36 \times 10^{-2}$	$4,4 \times 10^{-3}$	0,2432	$1,32 \times 10^{-2}$

Tabela 5.12 – Soma dos erros em cada estágio para a temperatura

Soma do erro	Temperatura	
	3 X 3	5 X 5
Momento	$6,2 \times 10^{-2}$	$4,2 \times 10^{-3}$
Col. Ort. Mod.	$6,36 \times 10^{-2}$	$4,4 \times 10^{-3}$

➤ Estado Dinâmico

Simulações dinâmicas para este estudo de caso foram realizadas para avaliar a capacidade dos modelos de redução de ordem em reproduzir a dinâmica do modelo completo do sistema de separação com 22 estágios de equilíbrio. As condições operacionais são as mesmas apresentadas pela Tabela 5.9.

As Figuras 5.23 a 5.26 apresentam o comportamento dinâmico das variáveis de topo, composição e temperatura, em termos de desvio (Equação (5.2)) para um degrau de 100%, de 5 a 10, na razão de refluxo. Assim como no sistema binário, estas variáveis foram selecionadas devido a sua utilização na maioria das estratégias de controle presentes em colunas de destilação. Os resultados destas figuras mostram que o modelo de ordem reduzida baseado nos momentos reproduz a dinâmica das variáveis com boa qualidade, mas o ganho apresenta um pequeno desvio em relação ao modelo completo para uma redução de ordem de 55 %. Com este mesmo grau de redução o modelo fundamentado na colocação ortogonal modificada apresentou comportamento dinâmico de qualidade similar ao modelo proposto, porém seus ganhos apresentaram desvios maiores que os presentes no método baseado nos momentos. Portanto, para este estudado de caso, concluímos que o método proposto tem maiores vantagens em ser utilizado para controle.

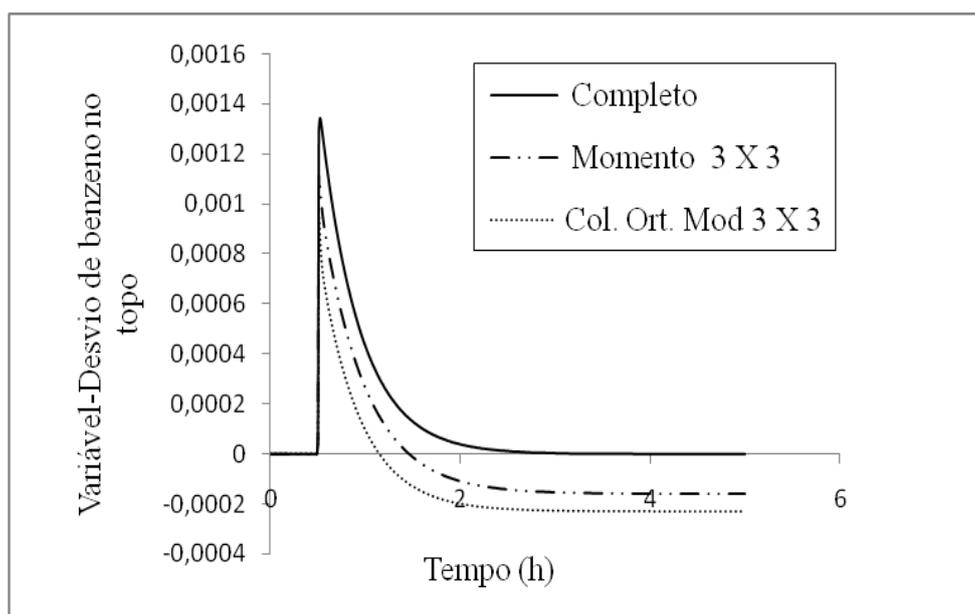


Figura 5.23 - Dinâmica da variável-desvio da composição molar de benzeno da fase líquida no topo da coluna com 22 estágios

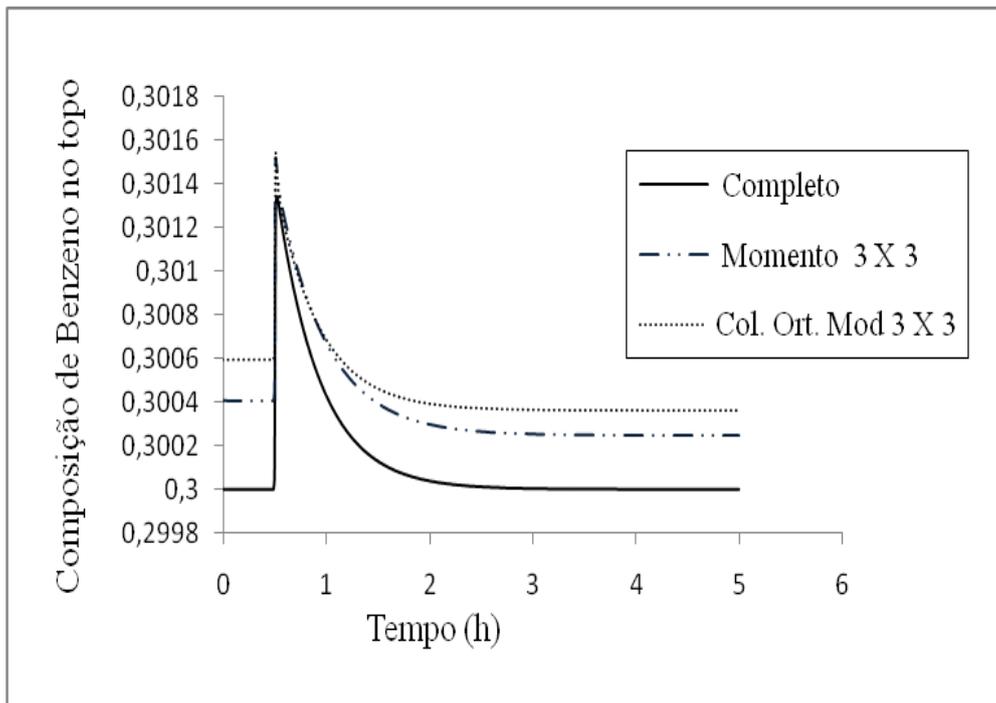


Figura 5.24 - Dinâmica da composição molar de benzeno da fase líquida no topo da coluna com 22 estágios

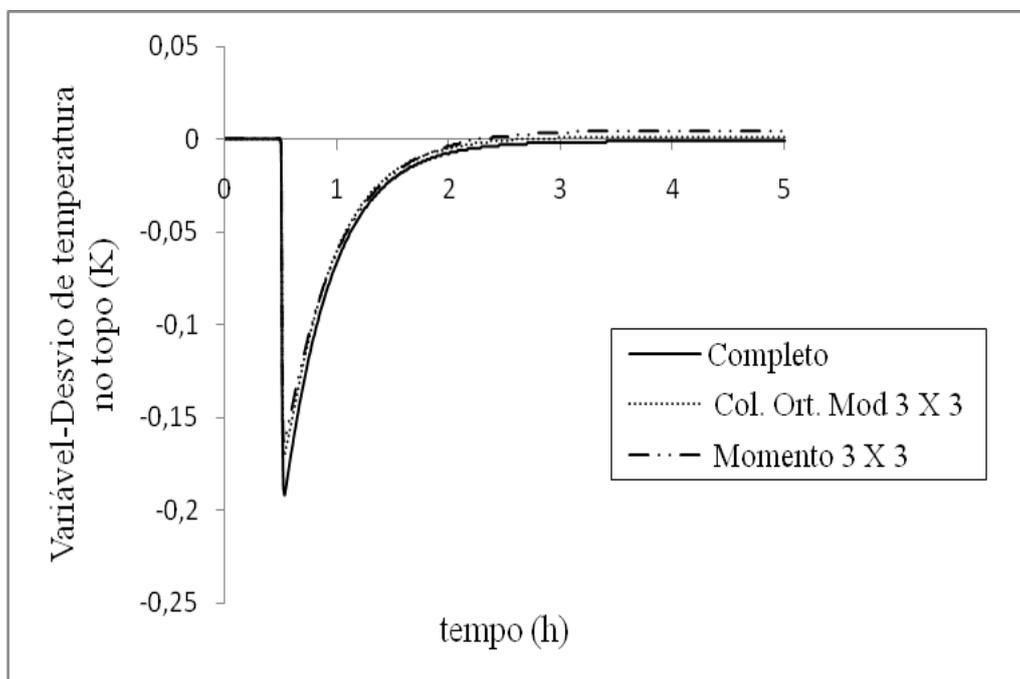


Figura 5.25 - Dinâmica da variável-desvio da temperatura no topo da coluna com 22 estágios

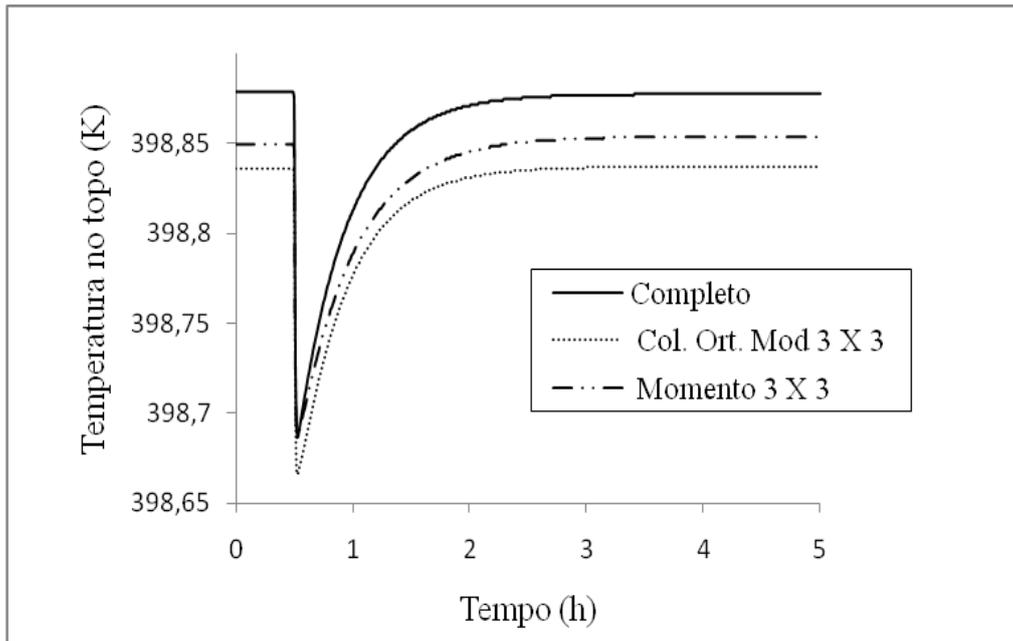


Figura 5.26 - Dinâmica da temperatura no topo da coluna com 22 estágios

As Figuras 5.27 a 5.30 apresentam reduções de ordem menores, como de 41%, neste caso ambos os modelos apresentaram bons resultados em determinar o comportamento das principais variáveis de topo, podendo com isso serem usados para controle e para quantificar produção.

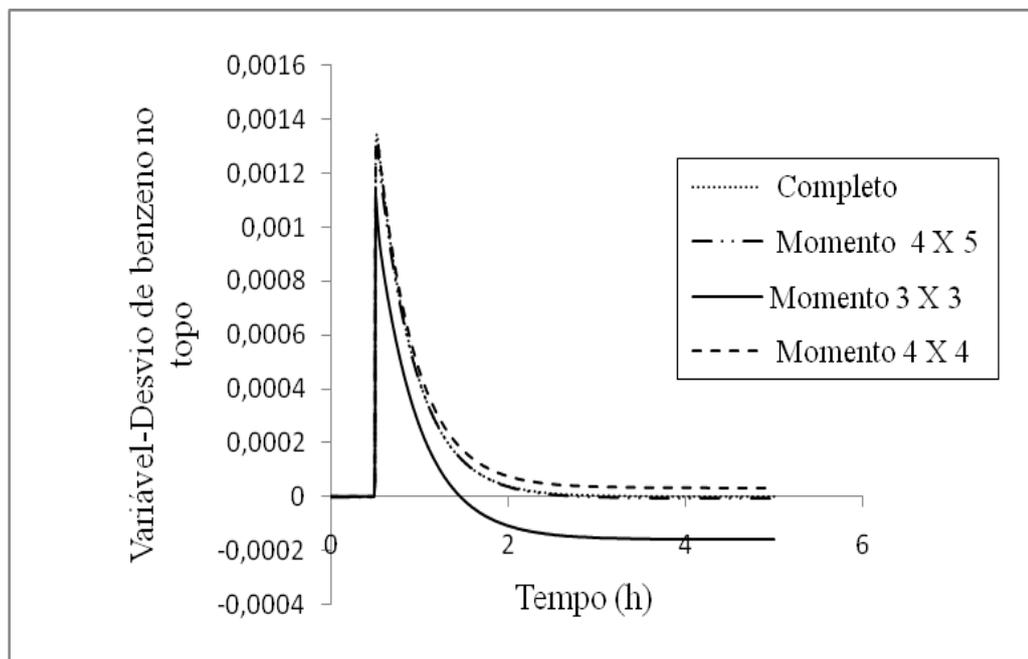


Figura 5.27 - Comportamento da dinâmica da composição de benzeno da fase líquida no topo para uma variação na redução da ordem do modelo

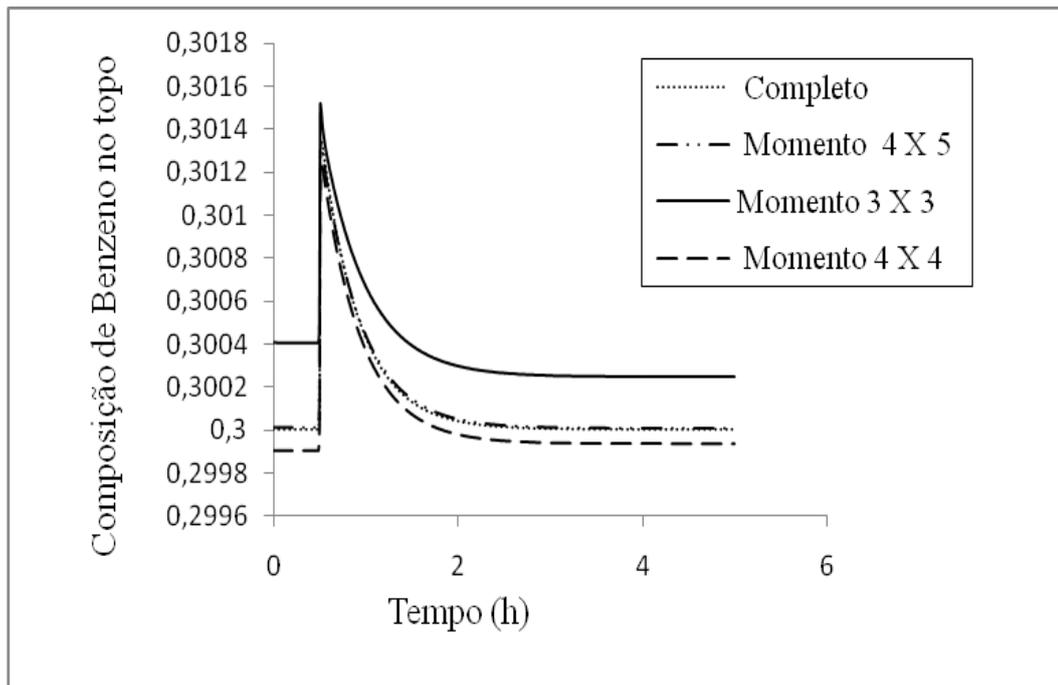


Figura 5.28 - Comportamento da composição de benzeno da fase líquida no topo para uma variação na redução da ordem do modelo

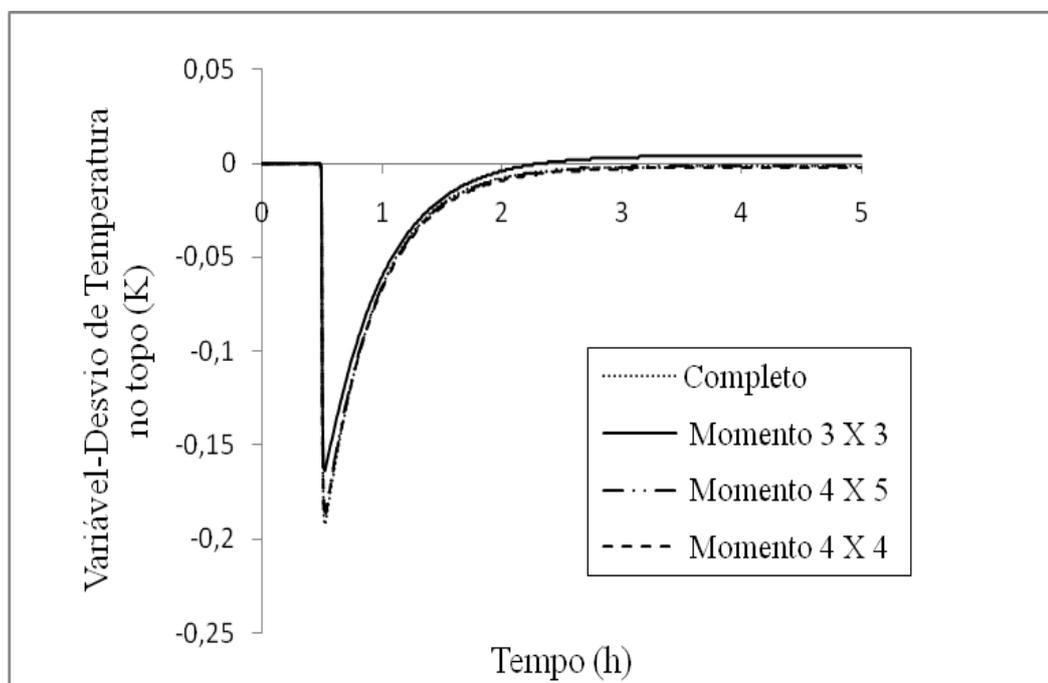


Figura 5.29 - Comportamento da dinâmica da temperatura de topo para uma variação na redução da ordem do modelo

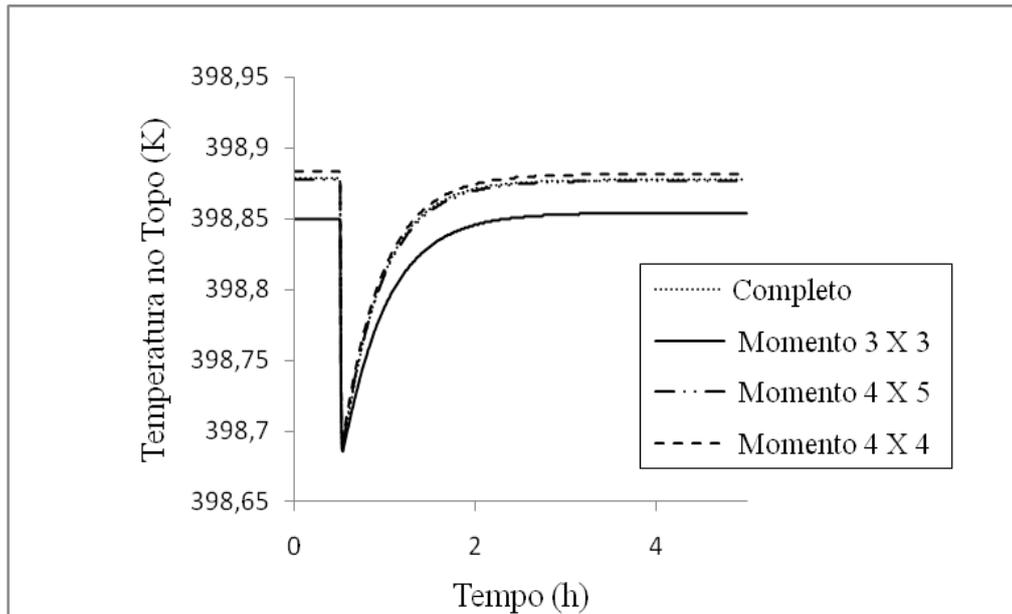


Figura 5.30 - Comportamento da temperatura de topo para uma variação na ordem

As Figuras 5.31 a 5.34 ilustram que nenhum dos modelos de redução de ordem conseguiu obter para as variáveis de controle no fundo o mesmo desempenho obtido na determinação da dinâmica e do ganho das variáveis de controle no topo, de tal forma que usar reduções desta magnitude comprometeriam o controle do processo e dificultariam a quantificação do produto de fundo.

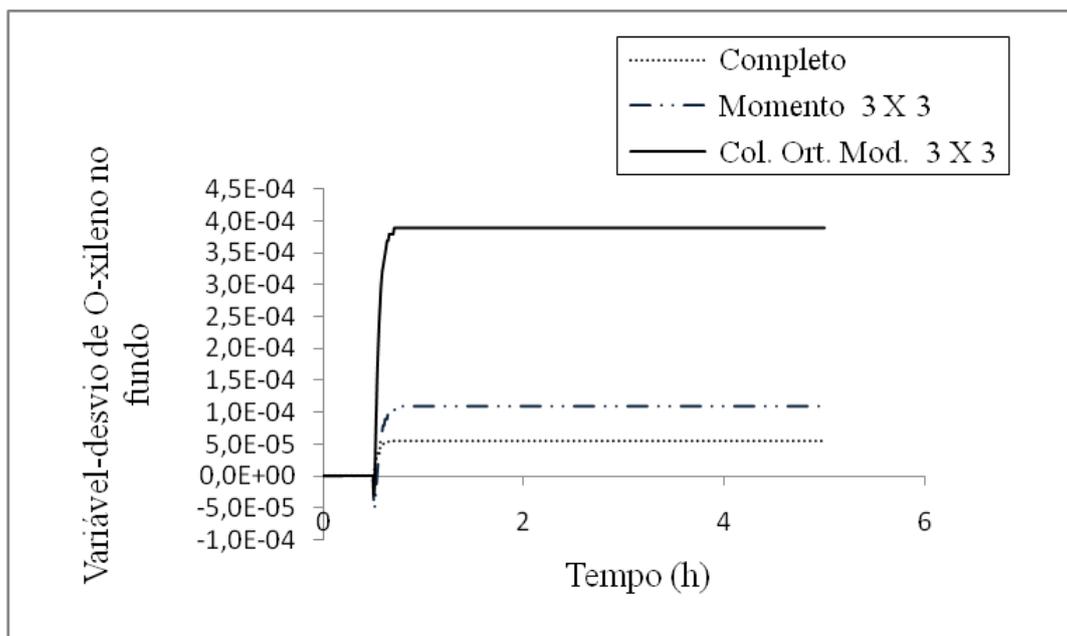


Figura 5.31 - Comportamento da dinâmica da variável de controle da composição de O-xileno da fase líquida

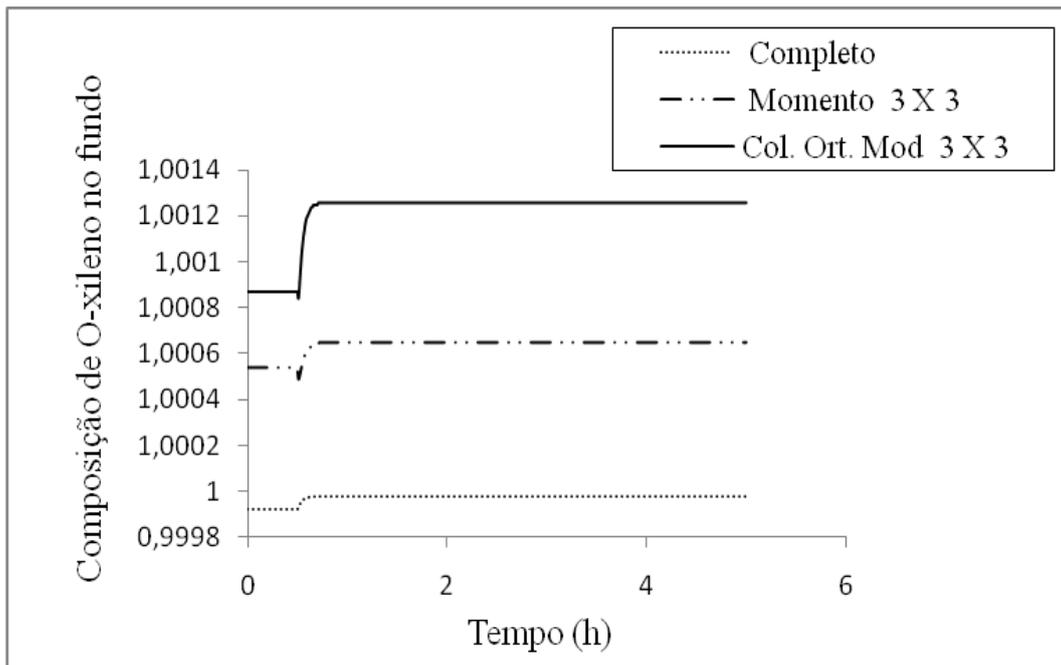


Figura 5.32 - Dinâmica da composição molar de o-xileno da fase líquida no fundo da coluna com 22 estágios

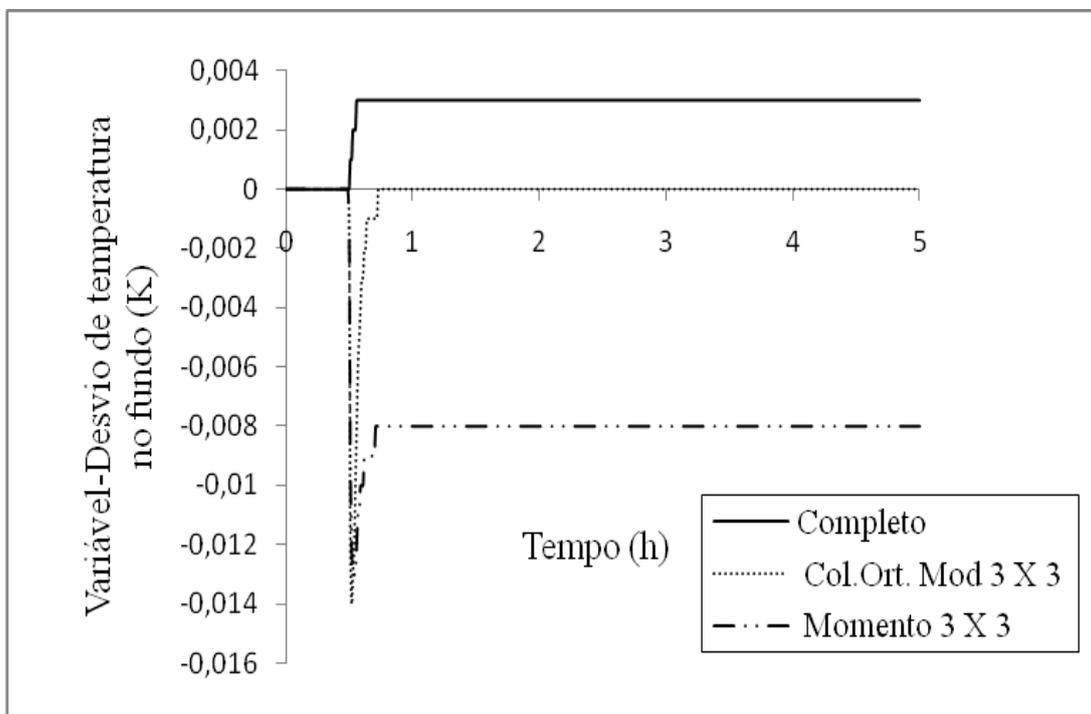


Figura 5.33 - Dinâmica da variável-desvio da temperatura no fundo da coluna com 22 estágios

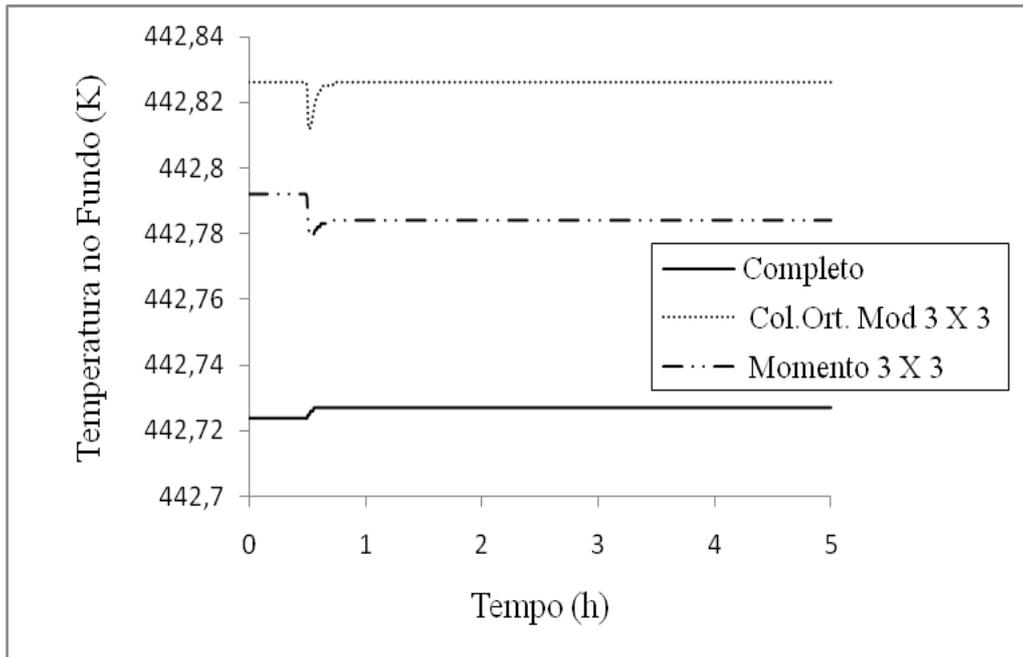


Figura 5.34 - Dinâmica de temperatura no fundo da coluna com 22 estágios

Os resultados presentes nas Figuras 5.35 a 5.38 apresentam uma diminuição na redução de ordem do modelo completo, de 55% para 41%. Com isso, ambas as técnicas, momentos e colocação ortogonal com inclusão dos extremos, apresentaram bons resultados, o que permite a aplicação de ambas para este nível de redução, tanto para estratégias de controle, quanto para quantificar o produto de fundo.

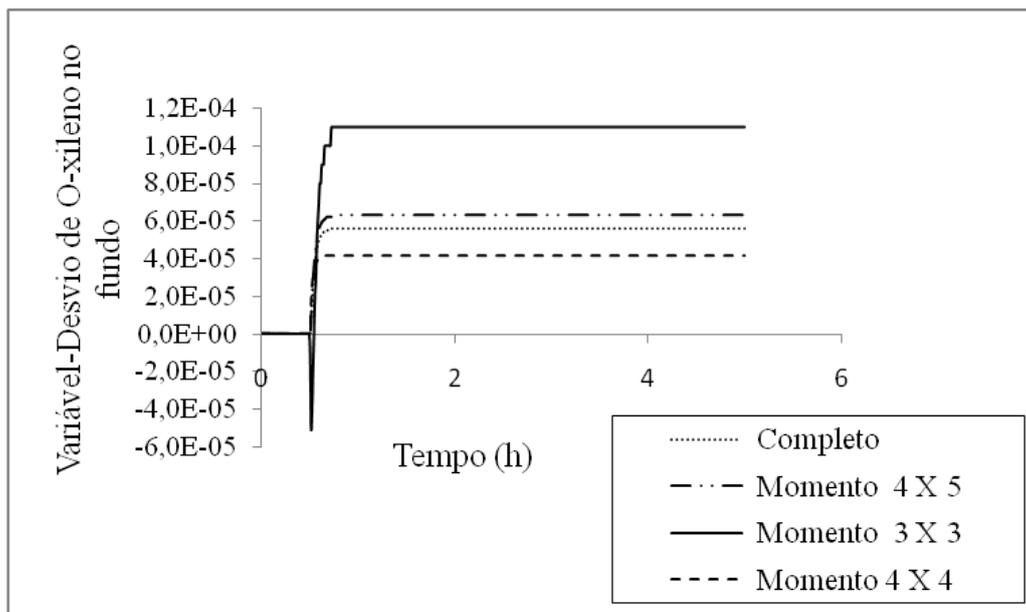


Figura 5.35 - Comportamento da dinâmica da composição de o-xileno da fase líquida no fundo

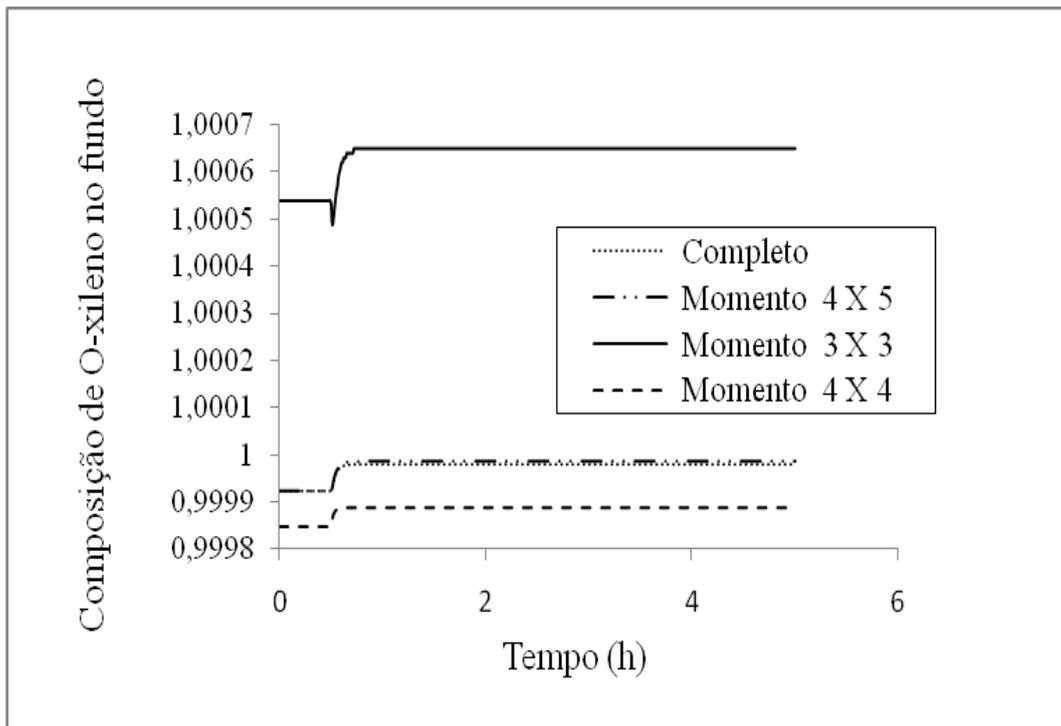


Figura 5.36 - Comportamento da composição molar de o-xileno da fase líquida no fundo para uma variação na redução da ordem do modelo

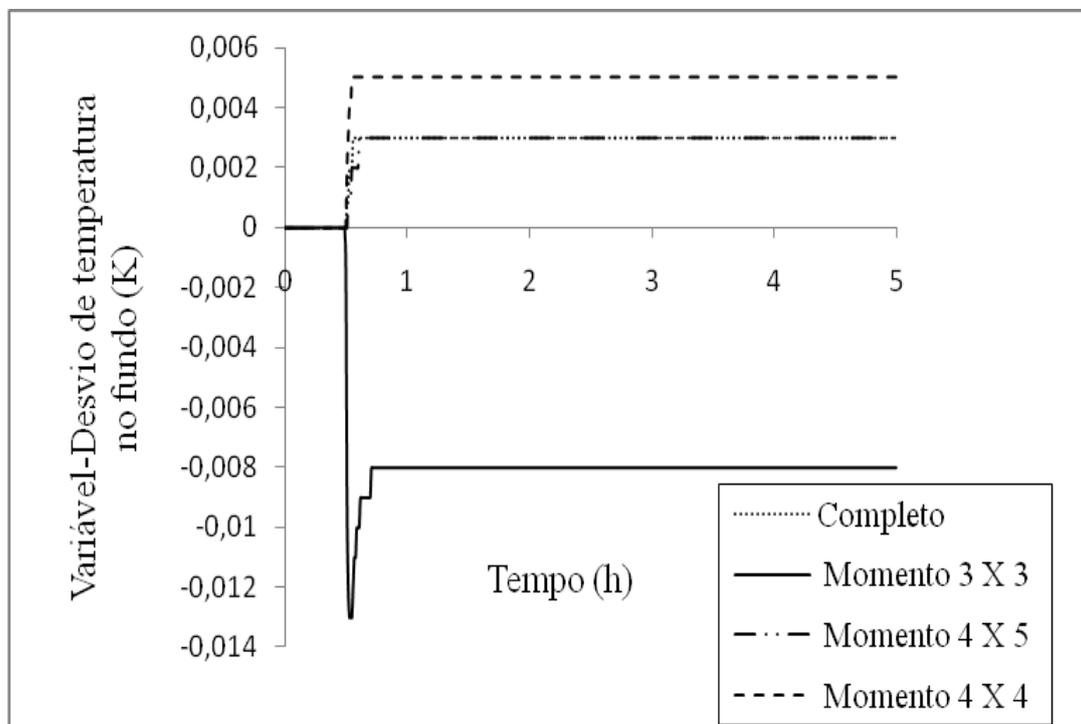


Figura 5.37 - Comportamento da dinâmica de temperatura no fundo para uma variação na redução da ordem do modelo

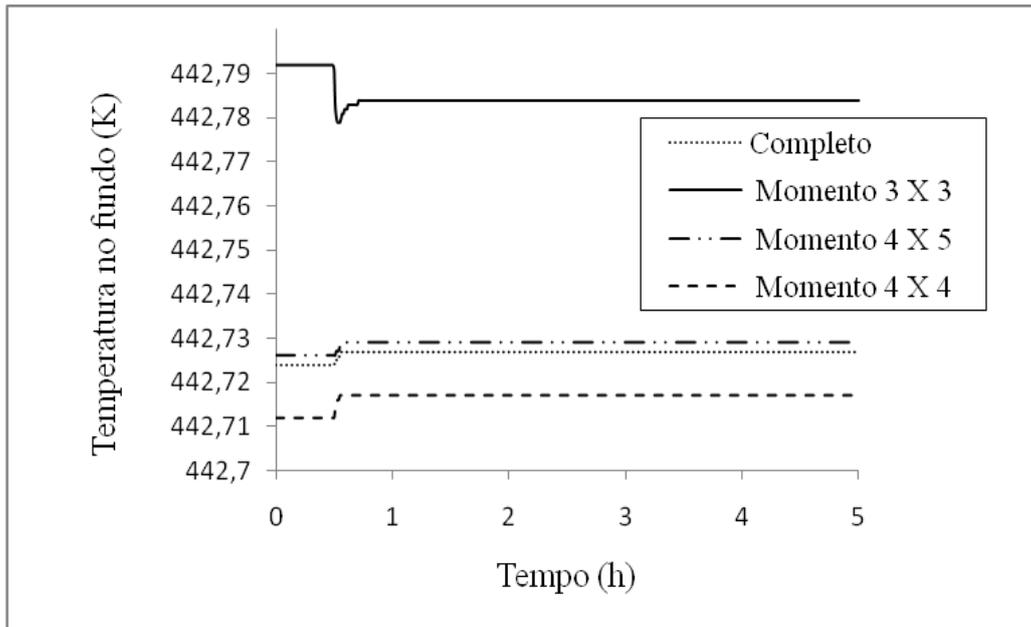


Figura 5.38 - Comportamento da temperatura de fundo para uma variação na redução da ordem do modelo

5.3. Estudo de otimização do processo

Um estudo de otimização foi realizado para avaliar a eficácia do método proposto de redução de ordem para determinar o ponto ótimo de alimentação de carga. Neste tipo de problema é de extrema importância o tempo computacional para determinação da solução do problema. Foram realizados dois estudos de caso de otimização, onde o número de estágios da coluna é fixo, enquanto o número de estágios por seção é variável, de forma a se alcançar uma vazão de produto de topo ótima.

5.3.1. Otimização do sistema Propeno - Propano

Neste tópico são apresentados os resultados da otimização de um sistema de separação binária no estado estacionário, através da determinação do ponto ótimo de alimentação de carga que maximiza a quantidade de propeno no produto de topo. O estudo de caso foi desenvolvido no ambiente de simulação do MATLAB. As condições de operação utilizadas são apresentadas na Tabela 5.13.

Tabela 5.13 - Especificação dos parâmetros para o estudo de otimização do ponto de alimentação de carga

Dados Operacionais	
Número de estágios:	51
Componentes:	Propeno / Propano
Prato de alimentação:	Otimizado
Vazão de alimentação (kmol/h):	44,725
Temperatura da carga (K):	319,26
Composição de carga:	(0,8973 0,1027)
Pressão na coluna (atm):	18,3627
Razão de Refluxo:	19,7
Modelo termodinâmico:	Ideal

A otimização consiste em determinar a solução ótima de um problema de maximização, univariável com restrição, da quantidade de propeno na vazão de destilado, onde a variável de decisão é a posição do prato de alimentação. O número total de estágios da coluna e de pontos de colocação por seção são fixos. Logo, o prato de alimentação define o tamanho de cada seção, portanto as restrições consistem no prato de entrada da alimentação, de tal forma que nenhuma seção tenha o número de estágios menor que seu número de pontos de colocação, definido durante a etapa de sintonia do método. A estrutura por camadas do problema de otimização está descrita na Seção 4.5 do capítulo 4.

Tabela 5.14 - Resultado da otimização do sistema de separação propeno - propano para os modelos de redução de ordem e completo

<i>RESULTADO DA OTIMIZAÇÃO</i>							
	<i>PROPENO - PROPANO</i>						Completo
	5 x 5		4 x 4		3 x 3		
	Momento	Col.Ort	Momento	Col.Ort	Momento	Col.Ort.	
Estágio ótimo	20	23	19	24	15	N/A	20
Propeno (topo)	0,9932	0,993	0,9932	0,9958	0,9939	N/A	0,9932
Tempo de simulação	0,8038	0,6759	0,5367	0,5074	0,4734	N/A	7,8480
N ^o de Iterações	9	8	9	10	9	N/A	10

A Tabela 5.14 apresenta os resultados da solução ótima do prato de alimentação encontrados pelo modelo completo e para os modelos de redução de ordem proposto e de colocação ortogonal com inclusão dos extremos. Os resultados apresentados nesta tabela comprovam a superioridade da técnica de redução baseada nos momentos frente à colocação ortogonal com inclusão dos extremos. Para uma redução de 73 %, o método de redução baseado nos momentos conseguiu obter a mesma solução ótima, prato de alimentação e composição de propeno no topo, do modelo completo com uma diminuição no tempo computacional de 89,75%, enquanto o modelo de redução fundamentado na colocação ortogonal apresentou uma solução com erros de 15% e 2,9% na localização do prato e composição de propeno, respectivamente.

As Figuras 5.39 a 5.41 ilustram através das curvas da função objetivo os problemas de convergência, em altas reduções, que o modelo de colocação ortogonal modificada teve em determinar a composição no topo para alguns pontos de alimentação de carga. Para a redução de 80% (Figura 5.41) não foi possível obter a função objetivo da estratégia de redução baseada na colocação ortogonal devido a não convergência do método de Newton. Este fato impossibilitou a obtenção do estado estacionário do modelo. Por outro lado, a técnica de redução proposta conseguiu reproduzir adequadamente a curva da função objetivo do modelo completo para todos os graus de redução estudados, 73%, 76% e 80%.

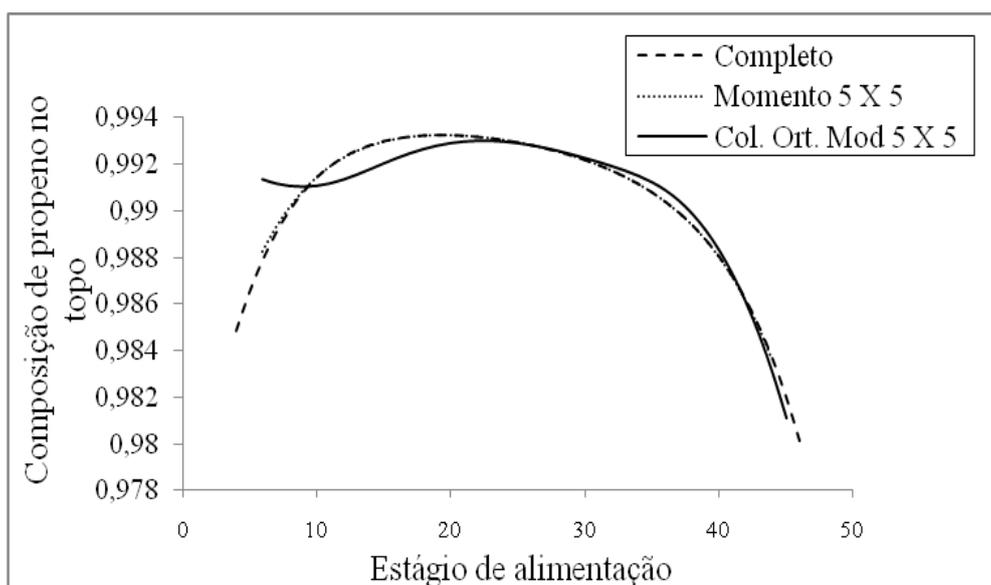


Figura 5.39 - Perfil de composição molar de propeno da fase líquida no topo para uma redução de 73 % na ordem do modelo completo

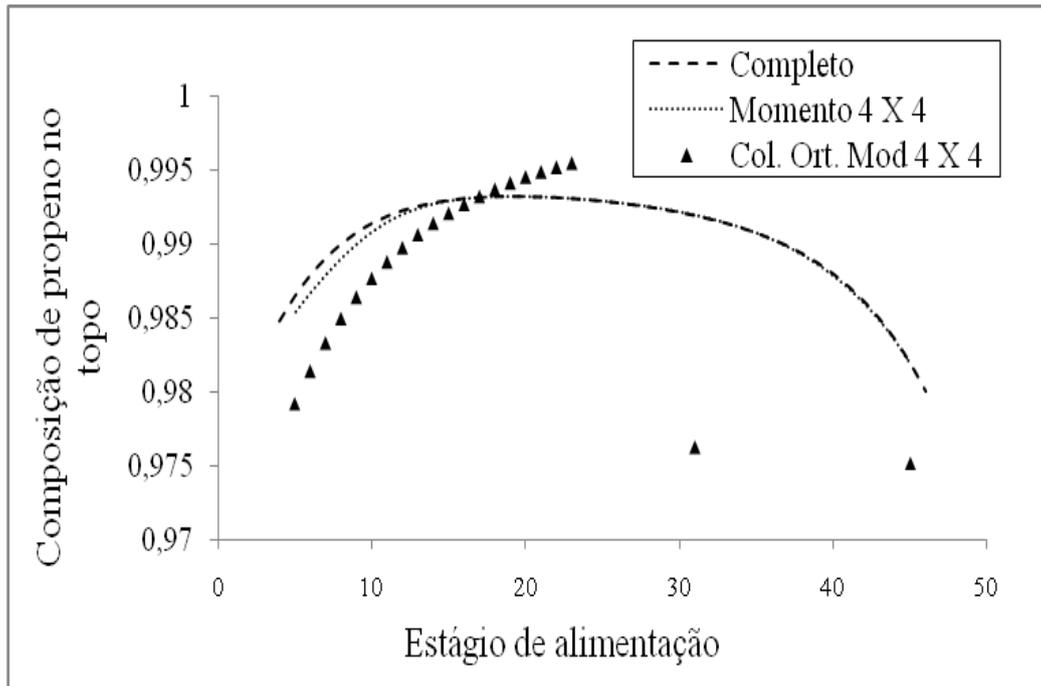


Figura 5.40 - Perfil de composição molar de propeno da fase líquida no topo para uma redução de 76 % na ordem do modelo completo

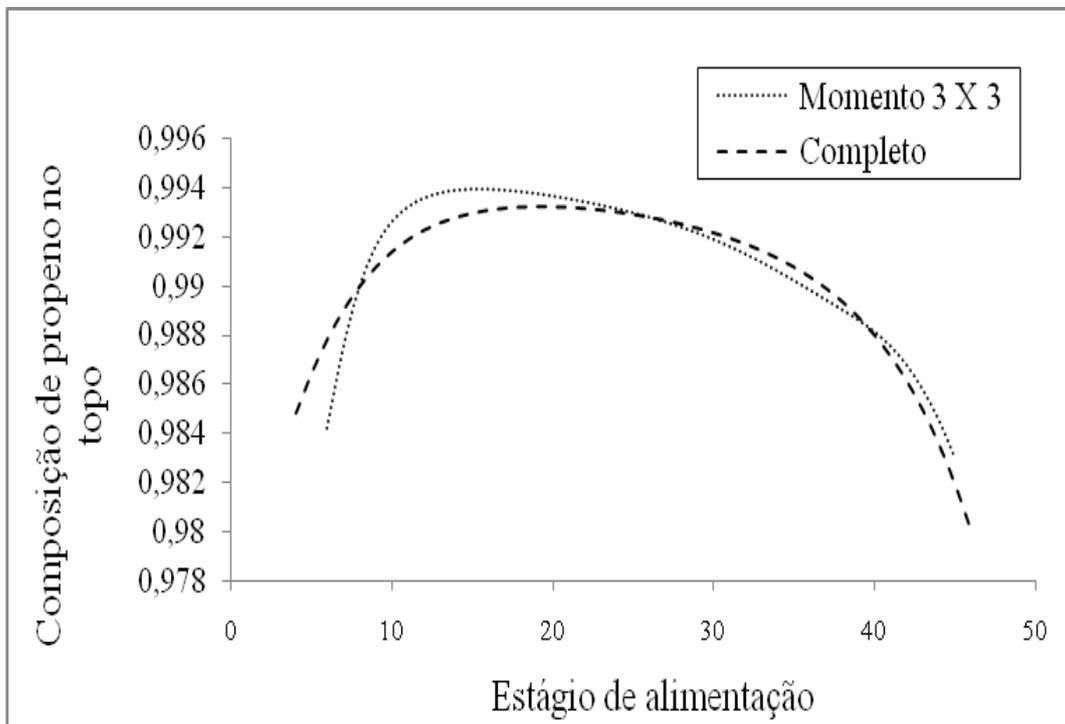


Figura 5.41 - Perfil de composição de propeno da fase líquida no topo para uma redução de 80 % na ordem do modelo completo

5.3.2. Otimização do sistema Benzeno – Tolueno – O-xileno

Nesta seção são apresentados os resultados da otimização de um sistema ternário no estado estacionário. O objetivo da otimização é minimizar a quantidade de o-xileno no produto de topo através da determinação do prato ótimo de alimentação de carga.

A finalidade deste estudo de caso é apresentar a robustez e a superioridade da técnica de redução de ordem baseada nos momentos frente à técnica de colocação ortogonal modificada, para obtenção da solução de um problema de otimização de maior dimensão e complexidade, devido ao maior número de componentes presentes no sistema de separação. As condições de operação são apresentadas na Tabela 5.15. A formulação do problema de otimização é similar a apresentada no estudo de caso anterior, ambos têm a mesma estrutura de otimização descrita no Capítulo 4.

Tabela 5.15 - Especificação dos parâmetros de simulação para determinação do prato ótimo de alimentação de carga

Dados Operacionais	
Número de estágios:	31
Componentes:	Benzeno / Tolueno / O-xileno
Prato de alimentação:	Otimizado
Vazão de alimentação (kmol/h):	100
Temperatura da carga (k):	410
Composição de carga:	(0,15 0,25 0,6)
Pressão na coluna (atm):	20
Razão de Refluxo:	5
Modelo termodinâmico:	Ideal

A Tabela 5.16 mostra os resultados da solução ótima do prato de alimentação encontrado pelos modelos completo e de redução de ordem. Este sistema exige um esforço computacional maior devido à maior dimensão do sistema de equações

diferenciais de diferenças a serem resolvidas e a maior complexidade do equilíbrio termodinâmico, por ser tratar de um sistema ternário.

Tabela 5.16 - Resultado da otimização do sistema ternário de componentes

<i>RESULTADO DA OTIMIZAÇÃO</i>							
	<i>BENZENO - TOLUENO – O-XILENO</i>						
	5 X 5		4 X 4		3 X 3		Completo
	Momento	Col.Ort	Momento	Col.Ort	Momento	Col.Ort	
Estágio Ótimo	13	13	13	16	14	15	13
O-xileno (topo)	0,010	0,009	0,010	0,007	0,015	0,001	0,010
Tempo de simulação	1,7242	1,5081	1,34051	1,0772	7,2598	6,3866	8,9821
N ^o de iterações	9	9	9	12	100	101	19

Com uma redução de 55% observamos que ambos os modelos de redução de ordem apresentam o mesmo prato ótimo de alimentação do modelo completo, porém o método de colocação ortogonal com inclusão dos extremos teve um resultado inferior na determinação da composição devido a um erro de 10 %. Para uma maior redução de ordem, de 61%, o modelo baseado nos momentos determinou com exatidão o estágio ótimo e a composição, enquanto a técnica baseada na colocação ortogonal teve erros de 23% e 30%, na localização do prato ótimo e na composição de o-xileno no topo, respectivamente. Para uma redução ainda maior, de 68%, ambos os resultados não foram satisfatórios.

As Figuras 5.42 a 5.44 mostram as curvas da função objetivo para os três graus de redução. Concluímos através dos resultados da Figura 5.44 que o otimizador apresentou dificuldades, neste nível de redução, em determinar o ponto ótimo do prato de alimentação para ambas as estratégias de redução de ordem, isso se deve aos problemas de convergência na determinação do estado estacionário para alimentações próximas aos estágios de fundo da coluna. Além disso, o método da colocação ortogonal modificada apresentou função objetivo com maior desvio em relação às construídas pelo modelo completo para alimentações em estágios intermediários da

coluna, isto é justificado pela dificuldade deste modelo de redução em descrever o perfil do modelo completo para elevado grau de redução.

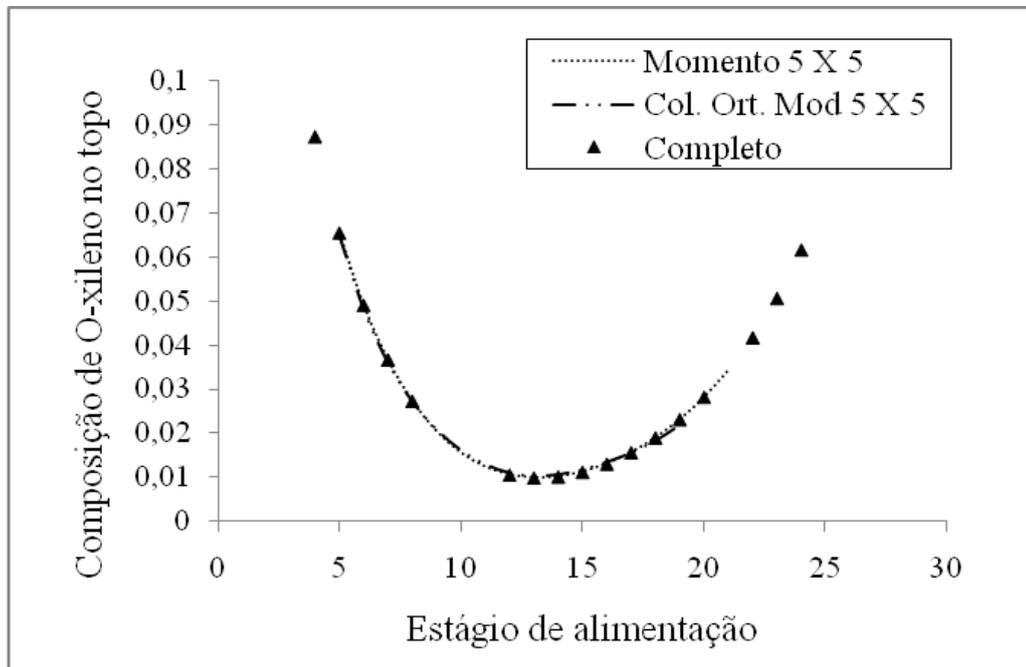


Figura 5.42 - Perfil de composição de o-xileno da fase líquida no topo para uma redução de 55 % na ordem do modelo completo

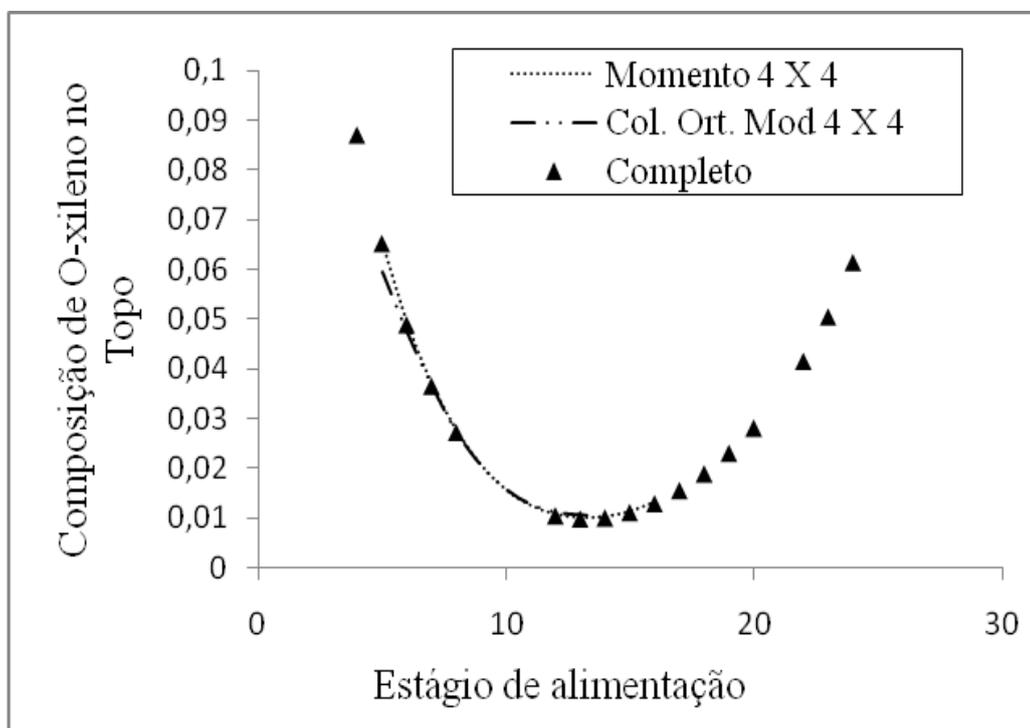


Figura 5.43 - Perfil de composição de o-xileno da fase líquida no topo para uma redução de 61 % na ordem do modelo completo

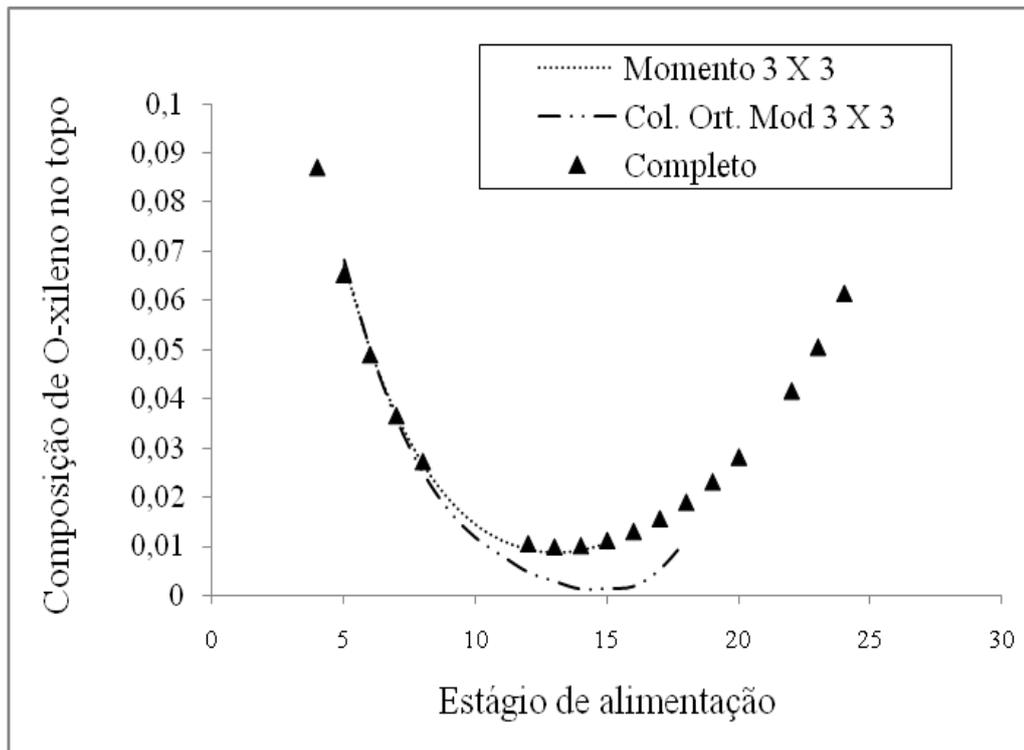


Figura 5.44 - Perfil de composição de o-xileno da fase líquida no topo para uma redução de 68 % na ordem do modelo completo

Capítulo 6

Conclusão e sugestões

A técnica proposta de redução de ordem de modelos de sistemas de separação por estágios baseado na soma dos resíduos ponderados pelos momentos mostrou ser superior ao método tradicional da colocação ortogonal aplicado no domínio discreto.

Os balanços de massa e energia global são sempre satisfeitos nesse novo método. Além disso, no método tradicional de colocação ortogonal os pontos onde os resíduos são nulos são fixos, enquanto no método proposto os pontos obtidos da colocação são variáveis, caracterizando uma natureza desejável de adaptação desta técnica.

O reescalonamento da variável independente discreta foi crucial para a exatidão no cálculo das raízes do polinômio de Hahn.

Uma redução dos custos computacionais das simulações dinâmicas foi obtida com o uso do modelo de ordem reduzida, mantendo uma capacidade preditiva compatível com a do modelo completo, mostrando que esta nova técnica pode ser usada em aplicações em tempo real.

Um estudo de otimização foi realizado para avaliar as vantagens que a nova técnica poderia trazer em termos de precisão e de tempo computacional para altas reduções de ordem. Os resultados apresentados pela técnica proposta mostraram-se superiores ao da colocação ortogonal modificada pela inclusão dos extremos, demonstrando a característica adaptativa do modelo.

Portanto, este trabalho contribuiu no sentido de propor uma nova técnica de redução de ordem de modelos mais robusta e precisa de forma a reduzir o custo computacional na solução de sistemas de equações diferenciais de diferenças que estão presentes em diversos problemas de engenharia química.

Como sugestão para trabalhos futuros, seria interessante aplicar a técnica para problemas em tempo real, como em aplicações de inferências e controle preditivo; além de avaliar sistemas de maior dimensão e complexidade, comparando a técnica proposta, baseada nos momentos, com outros modelos de redução de ordem presentes na literatura.

Referências bibliográficas

- ALGUSANE, T.Y., PROIOS, P., GEORGIADIS, M.C., PISTIKOPOULOS, E.N., 2005, Hybrid Generalized Modular/Collocation Framework for Distillation Column Synthesis, *AIChE Journal*, v.52, n.3, p.1038-1056.
- ALMEIDA, A., 1987. *Avaliação do Método de Resíduos Ponderados na Resolução de Problemas de Engenharia Química*. Dissertação de Mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- AMUDSON, N.R., 1966, *Mathematical Methods in Chemical Engineering: Matrices and Their Application*. New Jersey, Prentice Hall.
- ASKEY, R., 1975, *Orthogonal Polynomials and Special Functions*, SIAM, Philadelphia.
- BENALLOU, A., SEBORG, D.E., MELLICHAMP, D.A., 1986, Dynamic Compartmental Models for Separation Processes, *AIChE Journal*., v.32, pp. 1067-1078.
- BENALLOU, A., SEBORG, D.E., MELLICHAMP, D.A., 1982, Low Order, Physically Lumped Dynamic Models for Distillation Column Control, Paper 9e, *AIChE Annual Meeting*., Los Angeles.
- BIAN, S., KHOWINIJ, S., HENSON, M.A, BELANGER, P., MEGAN, L., 2005, Compartmental Modeling of High Purity Air Separation Columns, *Computers & Chemical Engineering*, v.29 , pp.2096 - 2109.
- BRENT, RICHARD, P., *Algorithms for Minimization without Derivatives*, 1973, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey.

- BOSLEY, M.J., LEES, F.P., 1973, The Reduction of The Order of State Variables Models Using The Method of Moments, *Chemical Engineering Science*, v. 28, pp. 2071-2074.
- CABALLERO, J.A., GROSSMANN, I.E., 1999, Aggregated models for integrated distillation systems, *AIChE Journal*, v.38, pp. 2330-2344.
- CAREY, C.F., FINLAYSON, B.A., 1975, Orthogonal Collocation on Finite Elements, *Chemical Engineering Science*, v. 30, pp. 587-596.
- CHO, Y.S., JOSEPH, B., 1983a, Reduced-Order Steady-State and Dynamic Models for Separation Processes – I, *AIChE Journal*, v.29 , pp.261-269.
- CHO, Y.S., JOSEPH, B., 1983b, Reduced-Order Steady-State and Dynamic Models for Separation Processes – II, *AIChE Journal*, v.29 , pp. 270-276.
- CHO, Y.S., JOSEPH, B., 1984, Reduced-Order Steady-State and Dynamic Models for Separation Processes – III, *Computers & Chemical Engineering*, v.8 , pp.81 - 90.
- DROZDOWICZ, B., MARTINEZ, E., 1988, Reduced Models for Separation Processes in Real-Time Simulators, *Computers & Chemical Engineering*, v.12 , pp. 547-560.
- ECKERT, E., HLAVACEK, V., 1978, Calculation of Multicomponent Distillation of Nonideal Mixture by Shortcut Methods, *Chemical Engineering Science*, v.33, pp. 77-81.
- EDGAR, T.F., HIMMELBLAU, D.M., 1988, *Optimization of Chemical Processes*. 1 ed. New York, McGrawHill.
- ESPAÑA, A., LANDAU, L.D., 1975, Bilinear Approximation of the Distillation Processes, *Automatica*, v.6, pp. 1-10.

- ESPAÑA, A., LANDAU, L.D., 1978, Reduced Order Bilinear Models for Distillation Columns, *Automatica*, v.14, pp. 345-355.
- FINLAYSON, B. A, 1971, Packed Bed Reactor Analysis by Orthogonal Collocation, *Chemical Engineering Science*, v. 26, pp. 1081-1091.
- FINLAYSON, B. A., 1972, *The Method of Weighted Residuals and Variational Principles*. 1 ed. USA, Academic Press.
- FINLAYSON, B. A., SCRIVEN, L.E., 1966, The Method of Weighted Residuals – A review, *Applied Mechanics Review*, v. 19, n. 9 (Sep), pp. 735-748.
- FORSYTHE, G.E., MALCOLM, M.A., MOLER, C.B., *Computer Methods for Mathematical Computations*, 1976, Prentice-Hall.
- GEORGAKIS, C., STOEVER, M.A., 1982, Time Domain Order Reduction of Tridiagonal Dynamics of Staged Processes – I. Uniform Lumping, *Chemical Engineering Science*, v.37, pp. 687-697.
- GEORGAKIS, C., STOEVER, M.A., 1982, Time Domain Order Reduction of Tridiagonal Dynamics of Staged Processes – II. Nonuniform Lumping, *Chemical Engineering Science*, v.37, pp. 699-705.
- GILLES, E.D., RETZBACH, B., 1983, Reduced Models and Control of Distillation Columns with Sharp Temperature Profile, *IEEE Transaction Automatic Control*, v.28, pp. 628-630.
- HENLEY, E.J., SEADER, J.D., 1981, *Equilibrium-Stage Separation Operations in Chemical Engineering*. 1 ed. New York, John Wiley & Sons.
- HOLLAND, C.D., 1981, *Fundamentals of Multicomponent Distillation*. 1 ed. New York, McGrawHill.

- HOLLAND, C.D., LIAPIS, A.I., 1983, *Computer Methods for Solving Dynamic Separation Problems*. 1 ed. New York, McGrawHill.
- HUANG, W., RUSSEL, R. D., 1996, A moving Collocation Method for Solving Time Dependent Partial Differential Equation, *Applied Numerical Mathematics*, v. 20, pp.101-116.
- HUSS, R.S, WESTERBERG, A.W., 1996, Collocation Methods for Distillation Design. 1. Model Description, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v.35 , pp. 1603-1610.
- KAMATH, R.S., GROSSMANN, I.E., BIEGLER, L.T., 2010, Aggregate models based on improved group methods for simulation and optimization of distillation systems, *Computers & Chemical Engineering*, v.12 , pp. 821-831.
- KHOWINIJ, S., BIAN, M.A., HENSONA, E.C., BELANGERB, P., MEGANB, L., 2005, Compartmental Modeling of High Purity Air Separation Columns, *Computers & Chemical Engineering*, v. 29 , pp.2096-2109.
- KIENLE, A., 2000, Low-Order Dynamic Models for Ideal Multicomponent Distillation Processes Using Nonlinear Wave Propagation Theory, *Chemical Engineering Science*, v.55, pp.1817-1828.
- KUMAR, A., DAOUTIDIS, P., 2003, Nonlinear Model Reduction and Control for High-Purity Distillation Columns, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 42, pp. 4495-4505.
- LEMOS, E. M., 1989, *Implementação dos Métodos de Resíduos Ponderados por Quadraturas Gaussianas*. Dissertação de Mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- LÉVINE, J., ROUCHON, P., 1991, Quality Control of Binary Distillation Columns via Nonlinear Aggregated Models, *Automatica*, v. 27, pp.463-480.

- LINHART, A., 2009, *An Aggregation Model Reduction Method for One-Dimensional Distributed Systems*. Tese de Doutorado, Norwegian.
- LINHART, A., SKOGESTAD, S., 2009, Computational Performance of Aggregated Distillation Models, *Computers & Chemical Engineering*, v.33, pp. 296–308.
- LUYBEN, W B., 1989, *Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers*. 2 ed. London. McGraw-Hill.
- MARQUARDT, W., 1986, Nonlinear Model Reduction for Binary Distillation, *In IFAC Symposium Dyn. and Control of Chemical Reactors and Distillation Columns*, pp. 123-128, Bournemout, UK.
- MARSIGLIA, M.E.P.L., 1994. *Simulação Estática e Dinâmica de Colunas de Destilação Utilizando Aproximações Funcionais Adaptativas*. Dissertação de Mestrado., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- MICHELSEN, M. L., VILLADESEN, J, 1972, A Convenient Computation Procedure for Collocation Constants, *The Chemical Engineering Journal*, v. 4, pp. 64-68.
- MUSCH, H.E., STEINER, M., 1993, Order Reduction of Rigorous Dynamic Models for Distillation Columns, *Computers & Chemical Engineering*, v.17, pp. 311-316.
- OHMURA, S., HIRATA, M., KASHARA, S., 1965, A Simplified Model for the Transient Behavior of Distillation Columns, *AICHE – ICE Symposium*, v.1 , pp.84-90.
- OHMURA, S., HIRATA, M., KASHARA, S., 1979, New Distillation Calculation Methods Utilizing Salient Feature of Both Shortcut and Tray-by-Tray Methods, *AICHE – ICE Symposium*, v.56 , pp.51-56.
- OSBORN , A., 1971, The Calculations of Unstead State Multicomponent Distillation Using Partial Differential Equations, *AICHE Journal*, v.17, n.3, p.696-703.

- PINTO, J.C., BISCAIA, E.C., 1987, Order Reduction Strategies for Models of Staged Separation Systems, *Computers & Chemical Engineering*, v.12 , pp. 821-831.
- RICE, R.G., DO, D.D., 1994, *Applied Mathematics for Chemical Engineers*, 2 ed. John Wiley & Sons.
- ROCHA, L. H. R., 1998, *Avaliação de Um Método de Colocação Ortogonal Spline em Elementos Finitos Móveis*. Dissertação de Mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- RAVAGNANI, S. P., 1989, *Modelos de Ordem Reduzida para Processos de Separação por Destilação Multicomponente em colunas de prato. Aplicação a sistemas complexos*. Tese de Doutorado, USP, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- SEBORG, D. E., EDGAR, T. F., MELLICHAMP, D. A., 1989, *Process Dynamics and Control*. 2 ed. New York, John Wiley & Sons.
- SECCHI, A. R., 1988, *Controle Adaptativo de Colunas de Destilação Utilizando Modelos Reduzidos*. Dissertação de Mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- SERFELIS, P., HRYMAK, A.N., 1994, Adaptive Collocation on Finite Elements Models for Optimization of Multistage Distillation Units, *Chemical Engineering Science*, v. 49 , pp. 1369-1382.
- SERFELIS, P., HRYMAK, A.N., 1994, Optimization of Distillation Units Using Collocation Models, *AIChE Journal*, v. 18 , pp. 704-712.
- SIMÕES, A. R., 2000, *Modelos de Ordem Reduzida e Simulação em Colunas de Destilação*. Dissertação de Mestrado, UNICAMP, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- SKOGESTAD, S., 1997, Simple Analytic Rules for Model Reduction and PID Controller, *Journal of Process Control*, v.13 , pp.291-300.

- SMITH, J.M., VAN NESS, H.C., ABBOTT, M.M., 2000, *Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química*. 5 ed. Rio de Janeiro, LTC.
- SOLETTI, J.I., 1990, *Avaliação da Técnica de Redução de Ordem Na Simulação Estacionária de Colunas de Destilação*. Dissertação de Mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- SRIVASTAVA, W.E., JOSEPH, B., 1985, Reduced-Order Steady-State and Dynamic Models for separation Processes - V, *Computers & Chemical Engineering*, v.9, pp.601-613.
- SRIVASTAVA, W.E., JOSEPH, B., 1987a, Reduced-Order Models Steady Models for Staged separation Columns - IV, *Computers & Chemical Engineering*, v.11, pp.159-164.
- SRIVASTAVA, W.E., JOSEPH, B., 1987b, Reduced-Order Models Steady Models for Staged separation Columns - VI, *Computers & Chemical Engineering*, v.11, pp.165-176.
- STEWART, W.E., LEVIEN, K.L., MORARI, M., 1985, Simulation of Fractionation by Orthogonal Collocation, *Chemical Engineering Science*, v.40, pp. 409-421.
- SWARTZ, C.L.E., STEWART, W.E., 1987, Finite-elements Steady State Simulation of Multiphase Distillation”, *AIChE Journal*, v.33, pp. 1977-1985.
- VAN DEN BERG, J., 2005, *Model Reduction for Dynamic Real Time Optimization for Chemical Processes*. Tese de Doutorado, TU Delft.
- VILLADSEN, J.V., MICHELSEN, M.L., 1978, *Solution of Differential Equation Models by Polynomial Approximation*. 1 ed. New Jersey, Prentice Hall.
- VILLADSEN, J.V., STEWART, W.E., 1968, Solution of Boundary-value Problems by Orthogonal Collocation. *Chemical Engineering Science*, v. 22, pp. 1483-1501.

- VILLADSEN, J.V., SORENSEN, J. P., 1969, Solution of Parabolic Partial Differential Equations by a Double Collocation Method, *Chemical Engineering Science*, v. 24, pp. 1337-1349.
- WAHL, E.F., HARRIOT, P., 1970, Understanding and Prediction of the Dynamic Behavior of Distillation Column, *Industrial & Engineering Chemistry Process Design Development*, v.9, n.3, pp. 396-407.
- WANG, J.C., HENKE, G.E., 1966, *Hydrocarbon Processing*, vol.45, n.8, pp. 155-163.
- WEIGAND, W.A., JHAWAR, A.K., WILLIAMS, T.J., 1972, Calculation Method for the Response Time to Step Inputs for Aproximate Dynamic Models of Distillation Columns, *AICHE Journal*, v.18, n.1, pp.243 -250.
- WONG, K.T., LUUS, R., 1980, Model Reduction of High-Order Multistage Systems by the Method of Orthogonal Collocation, *Canadian Journal of Chemical Engineering*, v.58, pp. 382-388.

Apêndice 1-Adaptabilidade dos resíduos nulos

As Figuras A.1.1 a A.1.7 ilustram a adaptabilidade dos pontos de interpolação nos quais os resíduos se anulam, este fato fornece uma vantagem do método baseado nos momentos em se adaptar a novas condições durante o regime transiente do processo. O método baseado na colocação ortogonal com inclusão dos extremos tem uma menor flexibilidade devida aos resíduos se anularem nos pontos fixos de colocação o que impede de ter uma maior adaptabilidade a novas condições operacionais.

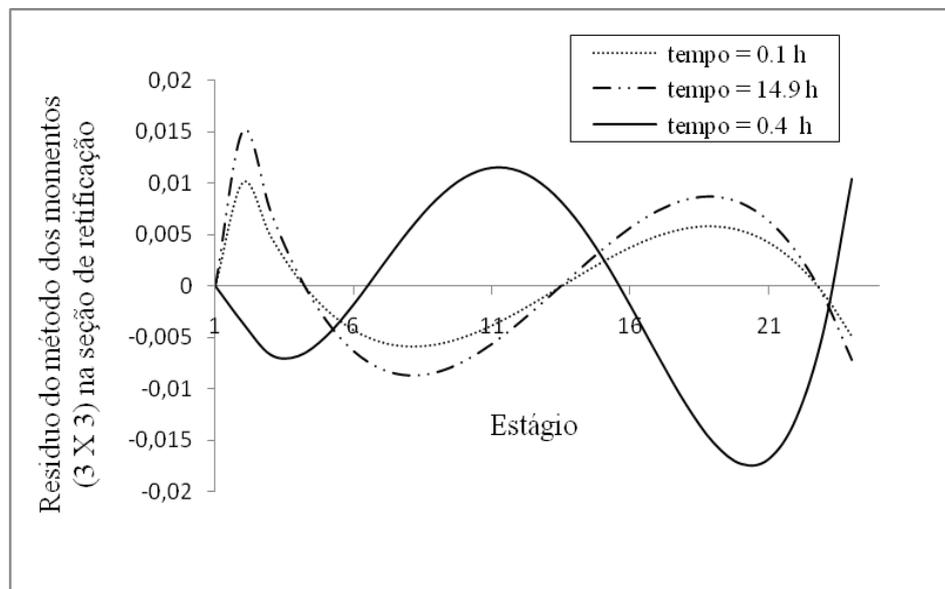


Figura A.1.1 – Adaptabilidade dos 3 pontos de interpolação

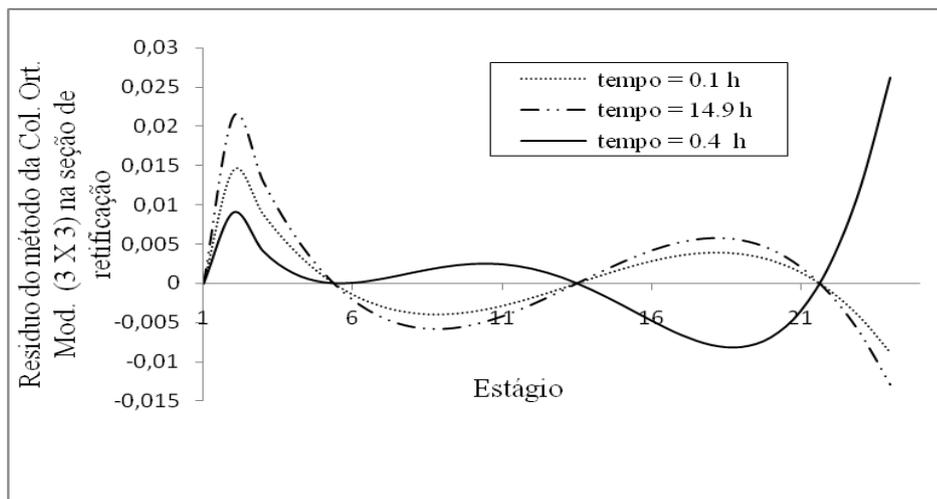


Figura A.1.2 - Adaptabilidade dos 3 pontos de interpolação

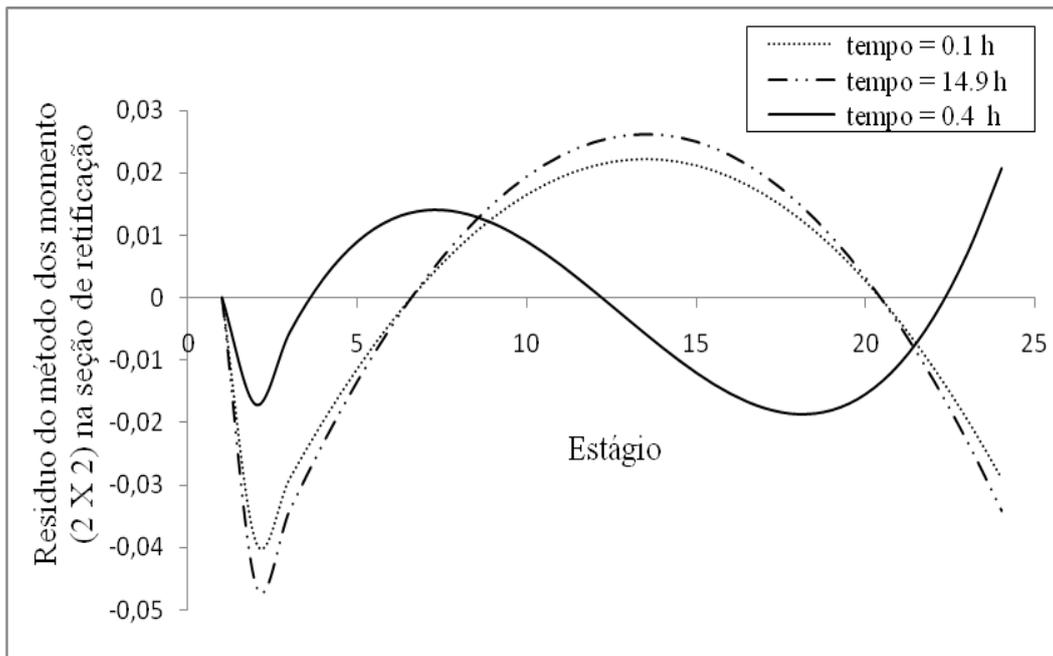


Figura A.1.3 – Adaptabilidade dos 2 pontos de interpolação

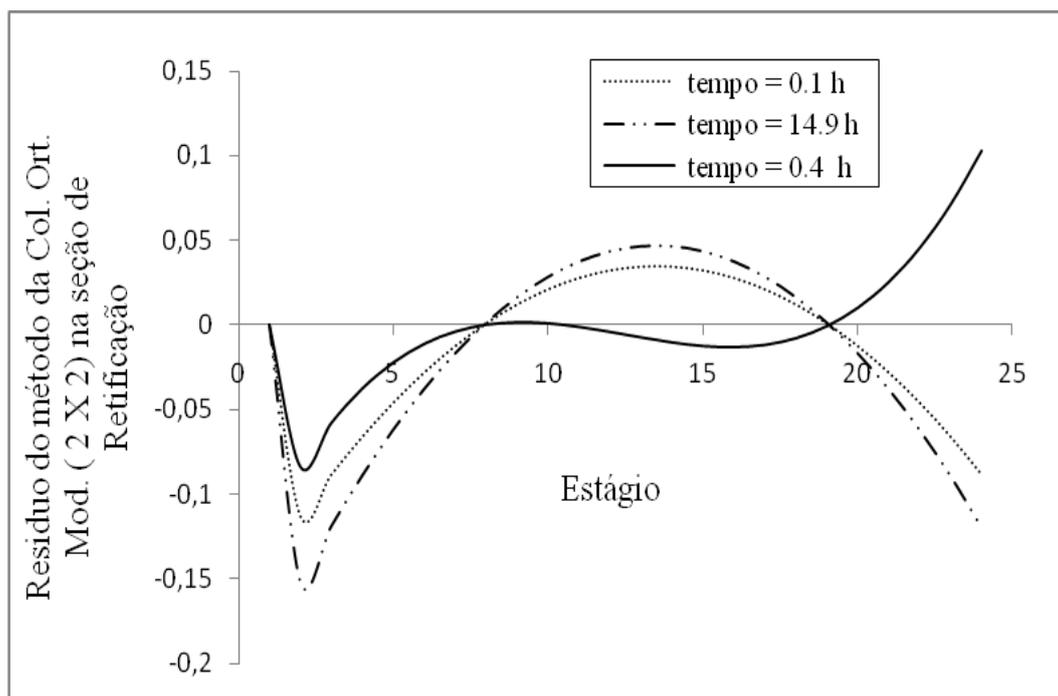


Figura A.1.4 - Adaptabilidade dos 2 pontos de interpolação

A Tabela A.1.1 fornece os valores numéricos dos pontos de interpolação nos quais os resíduos se anulam para variados instantes de tempo, estes dados em paralelo

com as Figuras A.1.5 a A.1.7 nos dão a mobilidade do polinômio em se ajustar a novas condições durante o regime transiente.

Tabela A.1.1 – Comportamento dinâmico dos pontos de interpolação onde os resíduos se anulam

MOMENTO 3 X 3			
Tempo	Ponto1	Ponto2	Ponto3
0,1	4,23333	13,75	22,6
0,4	6,55556	15,6522	23,3172
0,6	3,06897	8,86667	17,625
0,8	5,75	15,3333	23,1064
1	4,78261	14,4706	22,9615
1,6	4,35	13,3043	22,881
2	4,22727	13,4167	22,5455
14,9	4,22222	13,6667	22,9773
COL ORT MOD 3 X 3			
Tempo	Ponto1	Ponto2	Ponto3
0,1	5,45714	13,8333	21,7143

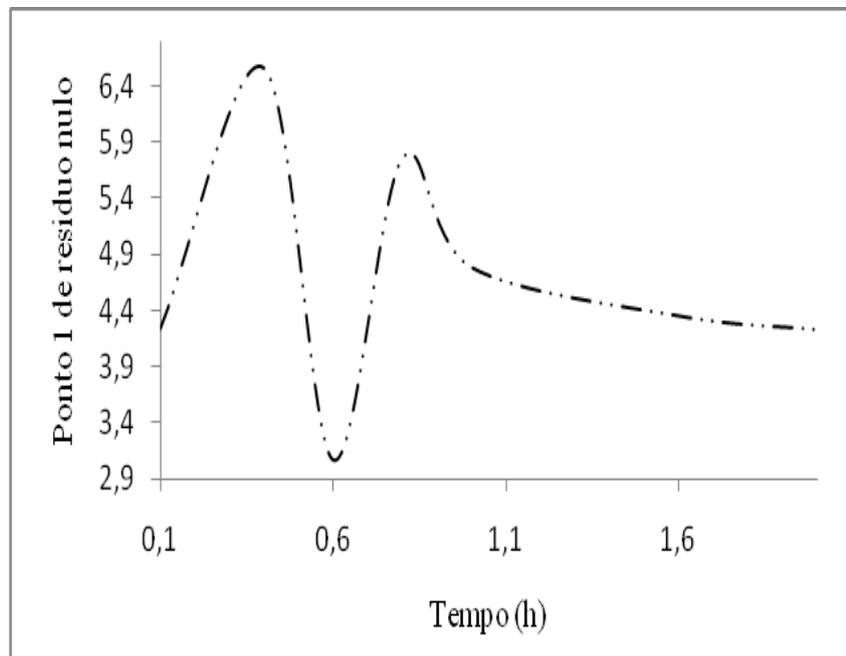


Figura A.1.5 – Dinâmica do primeiro ponto de interpolação que anula o resíduo

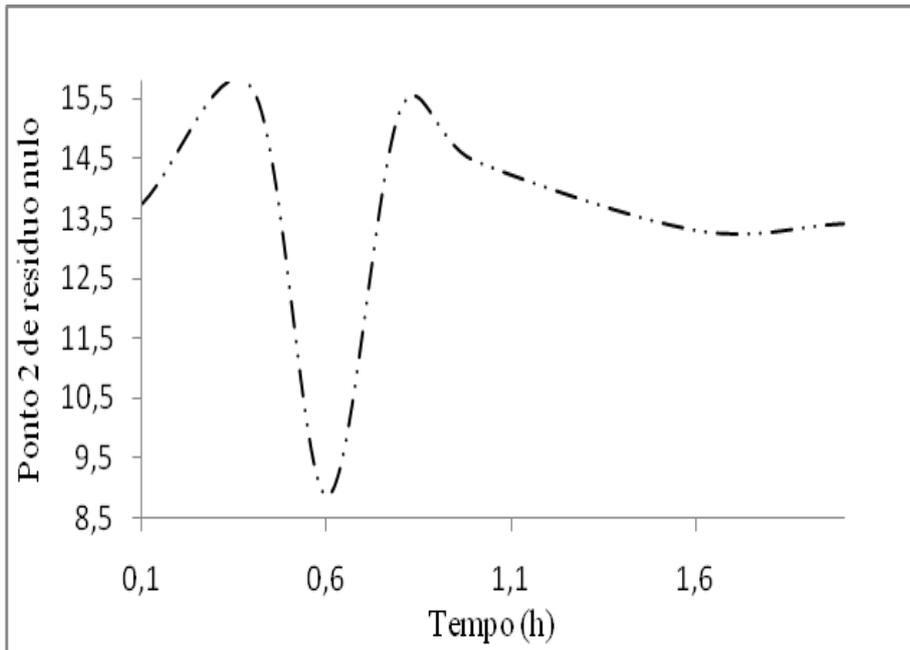


Figura A.1.6 – Dinâmica do segundo ponto de interpolação que anula o resíduo

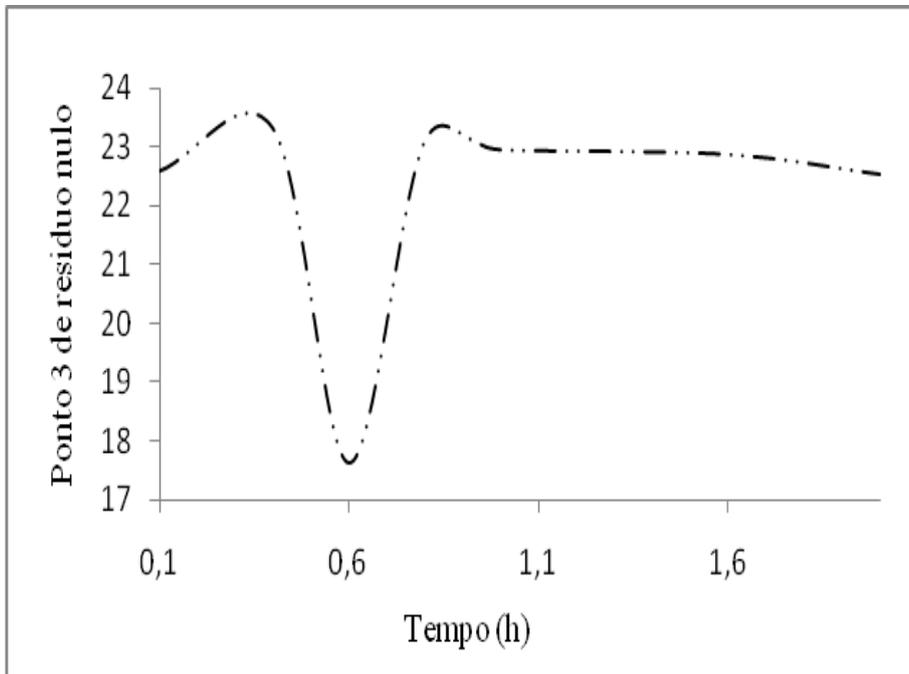


Figura A.1.7 – Dinâmica do segundo ponto de interpolação que anula o resíduo

Apêndice 2 - Reescalonamento do polinômio ortogonal

Com o objetivo de evitar acúmulo de erros na determinação das raízes do polinômio ortogonal para sistemas de grande dimensão foi sugerido o reescalonamento do polinômio de forma a melhorar a convergência do cálculo de determinação das raízes.

O gráfico da Figura A.2.1 ilustra que para sistemas com mais de 100 pontos o polinômio não reescalonado apresenta problemas de convergência e não consegue obter as raízes, enquanto o polinômio reescalonado conseguiu trabalhar com sistemas de ordem até 4 vezes maior.



Figura A.2.1 – Somatório do erro absoluto entre o valor real da variável e o calculado pelo polinômio ortogonal para sistemas de diferentes dimensões

$$Soma\ do\ erro = \sum_{i=1}^{npts} |X_i^{real} - X_i^{raiz}| \quad (A.2.1)$$

Apêndice 3 - Desenvolvimento da metodologia proposta

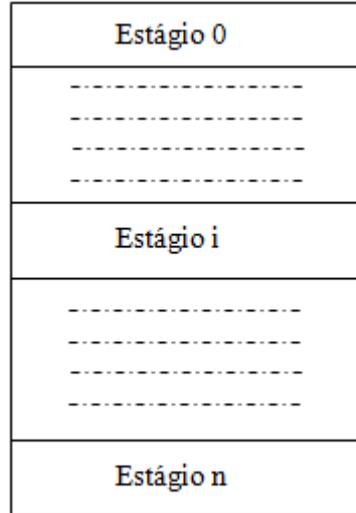


Figura A.3.1 – Representação de uma seção de separação por estágios

➤ Balço de massa no extremo superior da seção:

$$\mathfrak{R}^{(n+1)}(s^{(0)}, t) = \frac{dx_o(t)}{dt} - f[x^{(n+1)}(s^{(0)} - I, t)] - g[x_o(t)] - h[x^{(n+1)}(s^{(0)} + I, t)] \quad (\text{A.3.1})$$

Onde :

$$h[x^{(n+1)}(s^{(0)} + I, t)] = V_l y_l(t) = V_l k_l x_l(t) = \sum_{k=0}^{n+1} A_{0,k}^+ V_k k_k x_k(t)$$

$$g[x_o(t)] = -L_o x_o(t) - V_o y_o(t) = -L_o x_o(t) - V_o k_o x_o(t)$$

Modelagem do extremo superior como um estágio interno à seção

$$f[x^{(n+1)}(s^{(0)} - I, t)] = L_{-l} x_{-l}(t) = \sum_{k=0}^{n+1} A_{0,k}^- L_k x_k(t)$$

Modelagem real do extremo superior a seção

$$f \left[x^{(n+1)}_{(s^{(0)} - l, t)} \right] = 0$$

➤ Balço de massa no extremo inferior da seção:

$$\begin{aligned} \mathfrak{R}^{(n+1)}_{(s^{(n+1)}, t)} &= \frac{dx_{n+1}(t)}{dt} - f \left[x^{(n+1)}_{(s^{(n+1)} - l, t)} \right] - g \left[x_{n+1}(t) \right] \\ &- h \left[x^{(n+1)}_{(s^{(n+1)} + l, t)} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.3.2})$$

Onde:

$$f \left[x^{(n+1)}_{(s^{(n+1)} - l, t)} \right] = L_n x_n(t) = \sum_{k=0}^{n+1} A_{n+1,k}^- L_k x_k(t)$$

$$g \left[x_{n+1}(t) \right] = -L_{n+1} x_{n+1}(t) - V_{n+1} y_{n+1}(t) = -L_{n+1} x_{n+1}(t) - V_{n+1} k_{n+1} x_{n+1}(t)$$

Modelagem do extremo inferior como um estágio interno à seção

$$h \left[x^{(n+1)}_{(s^{(n+1)} + l, t)} \right] = V_{n+2} y_{n+2}(t) = \sum_{k=0}^{n+1} A_{n+1,k}^+ V_k k_k x_k(t)$$

Modelagem real do extremo inferior a seção

$$h \left[x^{(n+1)}_{(s^{(n+1)} + l, t)} \right] = 0$$

➤ Balço de massa em um ponto interno da seção:

$$\mathfrak{R}^{(n+1)}_{(s^{(i)}, t)} = \frac{dx_i(t)}{dt} - f \left[x^{(n+1)}_{(s^{(i)} - l, t)} \right] - g \left[x_i(t) \right] - h \left[x^{(n+1)}_{(s^{(i)} + l, t)} \right]$$

(A.3.3)

Onde :

$$f \left[x^{(n+I)}(s^{(i)} - I, t) \right] = L_{i-1} x_{i-1}(t) = \sum_{k=0}^{n+I} A_{i,k}^- L_k x_k(t)$$

$$h \left[x^{(n+I)}(s^{(i)} + I, t) \right] = V_{i+1} y_{i+1}(t) = \sum_{k=0}^{n+I} A_{i,k}^+ V_k k_k x_k(t)$$

$$g \left[x_i(t) \right] = -L_i x_i(t) - V_i y_i(t) = -L_i x_i(t) - V_i k_i x_i(t)$$

Substituindo as Equações (A.3.1), (A.3.2) e (A.3.3) na Equação (A.3.4) obtemos a equação (A.3.5) através das manipulações matemáticas abaixo:

$$\mathfrak{R}^{(n+I)}(s^{(i)}, t) + V_{i,0} \mathfrak{R}^{(n+I)}(s^{(0)}, t) + V_{i,I} \mathfrak{R}^{(n+I)}(s^{(n+I)}, t) = 0 \quad (\text{A.3.4})$$

$$\left[\frac{dx_i(t)}{dt} - \sum_{k=0}^{n+I} A_{i,k}^- L_k x_k(t) + L_i x_i(t) + V_i k_i x_i(t) - \sum_{k=0}^{n+I} A_{i,k}^+ V_k k_k x_k(t) \right] + V_{i,0} \left[\frac{dx_0(t)}{dt} -$$

$$\sum_{k=0}^{n+I} A_{0,k}^- L_k x_k(t) + L_0 x_0(t) + V_0 k_0 x_0(t) - \sum_{k=0}^{n+I} A_{0,k}^+ V_k k_k x_k(t) \right] + V_{i,I} \left[\frac{dx_{n+I}(t)}{dt} -$$

$$\sum_{k=0}^{n+I} A_{n+I,k}^- L_k x_k(t) + L_{n+I} x_{n+I}(t) + V_{n+I} k_{n+I} x_{n+I}(t) - \sum_{k=0}^{n+I} A_{n+I,k}^+ V_k k_k x_k(t) \right] = 0$$

$$\left[\frac{dx_i(t)}{dt} + V_{i,0} \frac{dx_0(t)}{dt} + V_{i,I} \frac{dx_{n+I}(t)}{dt} \right] - \left[\sum_{k=0}^{n+I} A_{i,k}^- L_k x_k(t) + V_{i,0} \sum_{k=0}^{n+I} A_{0,k}^- L_k x_k(t) +$$

$$V_{i,I} \sum_{k=0}^{n+I} A_{n+I,k}^- L_k x_k(t) \right] - \left[\sum_{k=0}^{n+I} A_{i,k}^+ V_k k_k x_k(t) + V_{i,0} \sum_{k=0}^{n+I} A_{0,k}^+ V_k k_k x_k(t) +$$

$$V_{i,I} \sum_{k=0}^{n+I} A_{n+I,k}^+ V_k k_k x_k(t) \right] + \left[(L_i x_i(t) + V_i k_i x_i(t)) + V_{i,0} (L_0 x_0(t) + V_0 k_0 x_0(t)) +$$

$$V_{i,I} (L_{n+I} x_{n+I}(t) + V_{n+I} k_{n+I} x_{n+I}(t)) \right] = 0$$

$$\left[\frac{d(x_i(t) + V_{i,0}x_0(t) + V_{i,l}x_{n+1}(t))}{dt} \right] - \left[\sum_{k=0}^{n+1} (A_{i,k}^- + V_{i,0}A_{0,k}^- + V_{i,l}A_{n+1,k}^-) L_k x_k(t) \right] -$$

$$\left[\sum_{k=0}^{n+1} (A_{i,k}^+ + V_{i,0}A_{0,k}^+ + V_{i,l}A_{n+1,k}^+) V_k k_k x_k(t) \right] + \left[(L_i x_i(t) + V_i k_i x_i(t)) + \right.$$

$$\left. V_{i,0} (L_0 x_0(t) + V_0 k_0 x_0(t)) + V_{i,l} (L_{n+1} x_{n+1}(t) + V_{n+1} k_{n+1} x_{n+1}(t)) \right] = 0$$

$$\left[\frac{dX_i(t)}{dt} \right] - \left[\sum_{k=0}^{n+1} B_{i,k}^- L_k x_k(t) \right] + \left[g[x_i(t)] + V_{i,0}g[x_0(t)] + V_{i,l}g[x_{n+1}(t)] \right] -$$

$$\left[\sum_{k=0}^{n+1} B_{i,k}^+ V_k k_k x_k(t) \right] = 0$$

$$\frac{dX_i(t)}{dt} = \sum_{j=0}^{n+1} B_{i,j}^- f[x_j(t)] + G[x_i(t)] + \sum_{j=0}^{n+1} B_{i,j}^+ h[x_j(t)] \quad (\text{A.3.5})$$

Apêndice 4 Publicações

- Artigo publicado no ESCAPE (European Symposium Computer Aided Process Engineering)

A New Technique of Model Order Reduction Based on Weighted Residuals in Discrete Domain

L. D. Ribeiro, A. R. Sechi, E. C. Biscaia Jr

Chemical Engineering Program - PEQ/COPPE - Universidade Federal do Rio de Janeiro, Av. Horácio Macedo, 2030 - CT - G116 CP.68502 - Ilha do Fundão - 21941-972 - Rio de Janeiro, RJ – Brazil {ldorigo, evaristo, argej@peq.coppe.ufrj.br}

Abstract

In this work we present a new technique of model order reduction applied to staged processes. The proposed method reduces the dimension of the original system based on null values of moment-weighted sums of heat and mass balances residuals on real stages. To compute these sums of weighted residuals a discrete form of Gauss-Lobatto quadrature is developed, allowing a high degree of accuracy on these calculations. Balances related to upstream and downstream devices (such as condenser, reboiler, and feed tray of a distillation column) are considered as boundary conditions of the corresponding difference-differential equations system. The chosen number of moments is the dimension of the reduced model being much lower than the dimension of the complete model and do not depend on the size of the original model. Scaling of the discrete independent variable related with the stages was crucial for the computational implementation of the proposed method, avoiding accumulation of round-off errors presented even in low-degree polynomial approximations in the original discrete variable. Dynamical simulations of distillation columns were carried out to check the performance of proposed reduction technique and, the differential-algebraic nature of the equations was exploited. The obtained results show the superiority of the new procedure in comparison with traditional orthogonal collocation method. Global heat and mass balances are fulfilled in this new method. Moreover, in traditional orthogonal

collocation method the points where the residuals are canceled are fixed, and in the new method moving collocation points are obtained, characterizing a desirable adaptive nature of this technique. Lower computational costs were obtained in dynamic simulations with reduced models, maintaining predictive capacity of the complete model, revealing that this new technique can be used in real-time applications.

Keywords: Model order reduction, discrete domain, weighted residuals, orthogonal collocation, distillation column.

1. Introduction

Rigorous dynamic mathematical models of staged separation systems with mass and energy balances lead to a large set of differential-algebraic equations, making them impractical for real-time applications. The challenge to reduce the computational cost of such systems motivated the development of different model order reduction techniques, such as compartmental models (España and Landau, 1978; Benallou et al., 1986; Musch and Steiner, 1993) and its variants aggregated modeling (Lévine and Rouchon, 1991; Linhart and Skogestad, 2009) and time-scale separation (Kumar and Daoutidis, 2003) based on singular perturbation analysis, nonlinear wave propagation (Marquardt, 1986; Kienle, 2000), model linearization (Georgakis and Stoeber, 1982), and orthogonal collocation.

Wong and Luus (1980) were the first to apply orthogonal collocation for order reduction of staged separation systems, by transforming the difference-differential equations into partial differential equations with subsequent application of the orthogonal collocation method in a continuous domain. Cho and Joseph (1983) showed that is possible to apply the orthogonal collocation method directly in the discrete domain by adequate selection of polynomials, and further Stewart et al. (1985) showed the Hahn's polynomials are the best choice for better results as well as more reliable reduced models. Following this approach, Pinto and Biscaia (1987) presented four different order reduction strategies dealing with the discontinuities that happen between the sections of staged separation systems, whereas Seferlis and Hrymak (1994) treated all discontinuous stages as discrete stages and applied order reduction for each section between these discrete stages using orthogonal collocation on finite elements technique with different polynomials for the vapor and liquid phases.

In this work we present a new technique of model order reduction of staged separation systems based on null values of moment-weighted sums of heat and mass balances residuals on real stages. To compute these sums of weighted residuals a discrete form of Gauss-Lobatto quadrature is developed, allowing a high degree of accuracy on these calculations. Balances related to upstream and downstream devices (such as condenser, reboiler, and feed tray of a distillation column) are considered as boundary conditions of the corresponding difference-differential equations system, dealing nicely with the discontinuities that may occur at these points using only one polynomial for each section. Scaling of the discrete independent variable related with the stages is also introduced in this work, which was a drawback for applying discrete orthogonal collocation methods, avoiding accumulation of round-off errors presented even in low-degree polynomial approximations in the original discrete variable.

2. Order Reduction Technique

In order to introduce the proposed model order reduction technique, let us consider a generic section of a staged separation system described by the following difference-differential equations:

$$\frac{dx_i}{dt} = f(x_{i-1}) + g(x_i) + h(x_{i+1}) \quad , \quad j = 1, 2, \dots, N \quad (1)$$

with the boundary conditions $x_0(t) = p(t)$ e $x_{N+1}(t) = q(t)$. Applying a polynomial approximation of degree $n + 1$ in the state variables $x_i(t)$, using the following scaled independent variable representing the stages of the system:

$$s_i = \frac{i-1}{N} \quad (2)$$

and considering the internal points $0 < s^{(1)} < s^{(2)} < \dots < s^{(n)} < 1$ and the extreme points

$s^{(0)} = -\frac{1}{N}$ and $s^{(n+1)} = \frac{N+1}{N}$ as interpolation points, the polynomial can be written as:

$$x(s, t) \cong x^{(n+1)}(s, t) = \sum_{j=0}^{n+1} \ell_j(s) x(s^{(j)}, t) = \sum_{j=0}^{n+1} \ell_j(s) x_j(t) \quad (3)$$

where $\ell_j(s)$ are the Lagrange interpolating polynomials and for the sake of notation $x_j(t) \equiv x(s^{(j)}, t)$. For each interpolating points, $i = 0, 1, 2, \dots, n + 1$, the following residual function are defined:

$$\mathfrak{R}^{(n+1)}(s^{(i)}, t) = \frac{dx_i(t)}{dt} - f[x^{(n+1)}(s^{(i)} - 1, t)] - g[x_i(t)] - h[x^{(n+1)}(s^{(i)} + 1, t)] \quad (4)$$

where the first-order negative and positive differences are evaluated as:

$$f[x^{(n+1)}(s^{(i)} - 1, t)] = \sum_{j=0}^{n+1} \ell_j(s^{(i)} - 1) f[x_j(t)] = \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j}^- f[x_j(t)] \quad (5)$$

$$h[x^{(n+1)}(s^{(i)} + 1, t)] = \sum_{j=0}^{n+1} \ell_j(s^{(i)} + 1) h[x_j(t)] = \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j}^+ h[x_j(t)] \quad (6)$$

In the traditional method of discrete orthogonal collocation, $x_i(t)$ are find such that the residuals at the internal points, $i = 1, 2, \dots, n$, are canceled (collocation points):

$$\mathfrak{R}^{(n+1)}(s^{(i)}, t) = 0 = \frac{dx_i(t)}{dt} - \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j}^- f[x_j(t)] - g[x_i(t)] - \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j}^+ h[x_j(t)] \quad (7)$$

and the boundary conditions $x_0(t) = p(t)$ e $x_{n+1}(t) = q(t)$ complete the system of $n + 2$ equations. In order to skip the discontinuities that may occur in the boundaries, a similar approach of Seferlis and Hrymak (1994) can be applied in the traditional method by adding two extra collocation points at the extreme stages of the section of the separation system, and for these points the residuals are defined as:

$$\mathfrak{R}^{(n+1)}(s^{(0)}, t) = 0 = \frac{dx_0(t)}{dt} - f[x_{-1}(t)] - g[x_0(t)] - \sum_{j=0}^{n+1} A_{0,j}^+ h[x_j(t)] \quad (8)$$

$$\mathfrak{R}^{(n+1)}(s^{(n+1)}, t) = 0 = \frac{dx_{n+1}(t)}{dt} - \sum_{j=0}^{n+1} A_{n+1,j}^- f[x_j(t)] - g[x_{n+1}(t)] - h[x_{n+2}(t)] \quad (9)$$

where the boundary conditions are $x_{-1}(t) = p(t)$ e $x_{n+2}(t) = q(t)$. However, this modified approach has the disadvantage of increasing the size of the system, or reducing the degree of the orthogonal polynomial by two if keeping the same size of the traditional method.

In the proposed method, $x_i(t)$ are find such that sum of the moment-weighted residuals are canceled for the first n moments:

$$\mathfrak{R}_k^{(n+1)}(t) = \sum_{j=1}^N \left(\frac{j-1}{N} \right)^{k-1} \mathfrak{R}^{(n+1)} \left(\frac{j-1}{N}, t \right) = 0, \quad k = 1, 2, \dots, n \quad (10)$$

These sums of weighted residuals are evaluated using a discrete form of Gauss-Lobatto quadrature:

$$\mathfrak{R}_k^{(n+1)}(t) = \sum_{i=0}^{n+1} \omega_i (s^{(i)})^{k-1} \mathfrak{R}^{(n+1)}(s^{(i)}, t) = \sum_{i=0}^{n+1} M_{k,i} \mathfrak{R}^{(n+1)}(s^{(i)}, t) = 0, \quad k = 1, \dots, n \quad (11)$$

where $M_{k,i} = \omega_i (s^{(i)})^{k-1}$ and ω_i are the quadrature weights. This quadrature is exact for polynomial functions up to degree $2n + 1$, which is always the case for the linear case because $\mathfrak{R}^{(n+1)}(s, t)$ is a polynomial of degree $n + 1$.

As the n equations in (11) are linear, they can be rewritten in the following form:

$$\mathfrak{R}^{(n+1)}(s^{(i)}, t) + V_{i,0} \mathfrak{R}^{(n+1)}(s^{(0)}, t) + V_{i,1} \mathfrak{R}^{(n+1)}(s^{(n+1)}, t) = 0, \quad i = 1, \dots, n \quad (12)$$

where $\mathbf{V}_0 = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{b}_0$ and $\mathbf{V}_1 = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{b}_1$ with $b_{i,0} = M_{i,0}$, $b_{i,1} = M_{i,1}$ and \mathbf{M} is the square matrix by removing the first and the last columns. By substituting Eq. (4) in Eq. (12), the following expression can be derived:

$$\frac{dX_i(t)}{dt} = \sum_{j=0}^{n+1} B_{i,j}^- f[x_j(t)] + G[x_i(t)] + \sum_{j=0}^{n+1} B_{i,j}^+ h[x_j(t)] , \quad i = 1, \dots, n \quad (13)$$

where $X_i(t) = x_i(t) + V_{i,0} x_0(t) + V_{i,1} x_{n+1}(t)$, $B_{i,j}^- = A_{i,j}^- + V_{i,0} A_{0,j}^- + V_{i,1} A_{n+1,j}^-$,
 $B_{i,j}^+ = A_{i,j}^+ + V_{i,0} A_{0,j}^+ + V_{i,1} A_{n+1,j}^+$ and $G[x_i(t)] = g[x_i(t)] + V_{i,0} g[x_0(t)] + V_{i,1} g[x_{n+1}(t)]$.

The boundary conditions $x_0(t) = p(t)$ e $x_{n+1}(t) = q(t)$ complete the system of $n + 2$ equations. Note that the traditional orthogonal collocation is reproduced by setting $V_{i0} = 0$ and $V_{i1} = 0$. In both cases, $s^{(1)}, s^{(2)}, \dots, s^{(n)}$ are the roots of the Hahn's polynomial of degree n .

Using the proposed scaled discrete independent variable, the roots of the Hahn's polynomial are obtained with high accuracy for any degree, whereas high accumulation of round-off errors are observed in the original discrete variable, even for low-degree polynomials.

It must be emphasized that global heat and mass balances are fulfilled in the proposed method, which are given by the zero-order moment. Moreover, in traditional orthogonal collocation method the points where the residuals are canceled are fixed ($s^{(1)}, s^{(2)}, \dots, s^{(n)}$), and in the proposed method moving collocation points are obtained, characterizing a desirable adaptive nature of this technique.

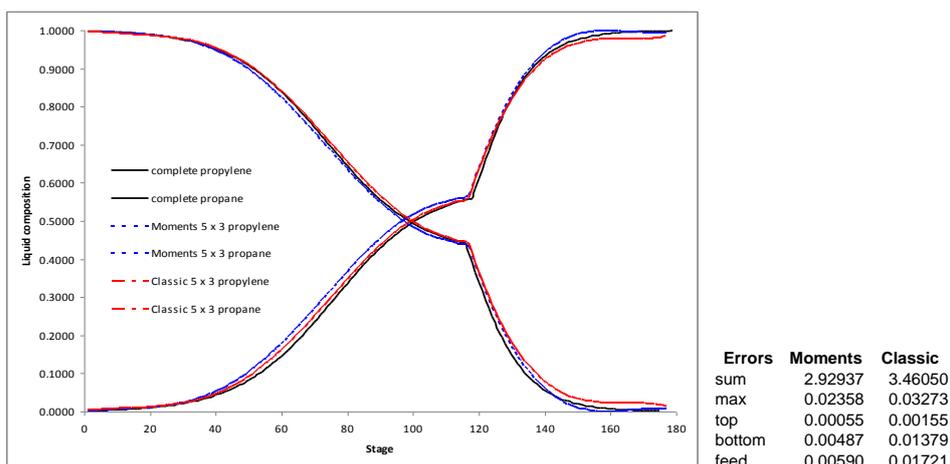
3. Illustrative Example

In order to illustrate the application of the proposed method, a distillation column to separate propane and propylene was used, as described in Seferlis and Hrymak (1994) and with the specifications given in Table 1.

Table 1. Distillation column specifications

number of trays	175
feed tray	116
feed composition (propylene, propane)	[0.8973, 0.1027]
feed flow rate (kmol/d)	1073.4
feed temperature	46.11
operating pressure (kPa)	1860.60
reflux ratio	19.7
distillate flow rate (kmol/d)	965

The Peng-Robinson equation of state was used for evaluation of the thermodynamic properties. In the reduced models, for the rectifying section 5 internal points were used, and for the stripping section only 3 points, i.e., a reduction of 95%. In Figure 1, the liquid molar fraction and temperature steady-state profiles for the complete model and for the reduced models using the proposed method and the traditional orthogonal collocation method are presented, where the superiority of the new approach in comparison with traditional method can be observed for the downstream variables, mainly at the bottom of the column. These results are better visualized in the tables presented in Figure 1, where the absolute square errors relative to the complete model are given for (1) sum of these errors over all stages, (2) maximum error, (3) condenser error, (4) reboiler error, and (5) feed tray.



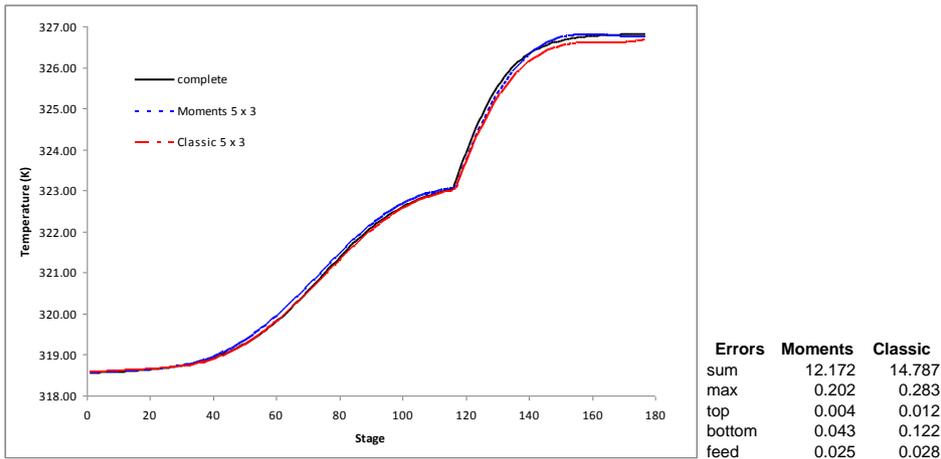


Figure 1. Steady-state profiles for complete model, proposed method, and orthogonal collocation.

In order to illustrate the dynamic behavior a step function was applied in the reflux ratio at 0.4 h changing from 19.7 to 22, starting the simulation at the steady-state condition. In Figure 2, the step response of the propylene composition and the temperature in the distillate are presented, showing the predictive capacity of the reduced model even for the transient behavior.

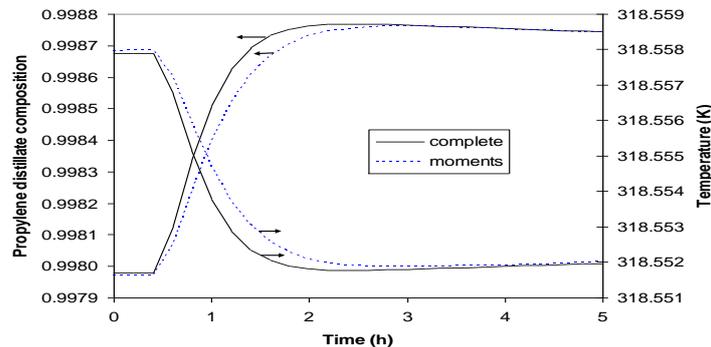


Figure 2. Distillate temperature and composition step response for complete and reduced models.

4. Conclusion

The proposed technique of model order reduction of staged separation systems based on the sum of moment-weighted residuals showed to be superior to the traditional orthogonal collocation method on discrete domain. The scaling of the discrete independent variable was crucial for the accuracy of the roots of Hahn's polynomials. Dynamical simulations results of distillation columns showed the technique can be applied for control purposes and other real-time applications.

5. Acknowledgements

We want to thanks CNPq for the financial support.

References

- A. Benallou, D.E. Seborg and D.A. Mellichamp, 1986, Dynamic Compartmental Models for Separation Processes, *AIChE J.*, 32, 1067-1078.
- Y.S. Cho and B. Joseph, 1983, Reduced-Order Steady-State and Dynamic Models for separation Processes, *AIChE J.*, 29 (2) 261-276.
- C. Georgakis, M.A. Stoever, 1982, Time Domain Order Reduction of Tridiagonal Dynamics of Staged Processes – I. Uniform Lumping, *Chem. Engng. Sci.*, 37 (5) 687-697.
- A. España and L.D. Landau, 1978, Reduced Order Bilinear Models for Distillation Columns, *Automatica*, 14, 345-355.
- A. Kienle, 2000, Low-Order Dynamic Models for Ideal Multicomponent Distillation Processes Using Nonlinear Wave Propagation Theory, *Chem. Engng. Sci.*, 55, 1817-1828.
- A. Kumar and P. Daoutidis, 2003, Nonlinear Model Reduction and Control for High-Purity Distillation Columns, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 42, 4495-4505.
- J. Lévine and P. Rouchon, 1991, Quality Control of Binary Distillation Columns via Nonlinear Aggregated Models, *Automatica*, 27, 463-480.
- A. Linhart and S. Skogestad, 2009, Computational Performance of Aggregated Distillation Models, *Comp. Che. Engng.*, 33, 296–308.
- W. Marquardt, 1986, Nonlinear Model Reduction for Binary Distillation, In *IFAC Symposium Dyn. and Control of Chemical Reactors and Distillation Columns*, Bournemouth, UK, 123-128.
- H.-E. Musch and M. Steiner, 1993, Order Reduction of Rigorous Dynamic Models for Distillation Columns, *Comput. Chem. Engng.*, 17 (S1) 311-316.
- J.C. Pinto and E.C. Biscaia, 1987, Order Reduction Strategies for Models of Staged Separation Systems, *Comput. Chem. Engng.*, 12 (8) 821-831.
- P. Seferlis and A.N. Hrymak, 1994, Adaptive Collocation on Finite Elements Models for Optimization of Multistage Distillation Units, *Chem. Engng. Science*, 49 (9) 1369-1382.
- W.E. Stewart, K.L. Levien and M. Morari, 1985, Simulation of Fractionation by Orthogonal Collocation. *Chem. Engng. Sci.* 40, 409-421.
- K.T. Wong and R. Luus, 1980, Model Reduction of High-Order Multistage Systems by the Method of Orthogonal Collocation, *Can. J. Chem. Engng.*, 58, 382-388.