



ANÁLISE DE MODELOS REDUZIDOS DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO PARA
APLICAÇÕES EM TEMPO REAL

Antonio José Valleriote Nascimento

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 Jr.

Rio de Janeiro
Fevereiro de 2013

ANÁLISE DE MODELOS REDUZIDOS DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO PARA
APLICAÇÕES EM TEMPO REAL

Antonio José Valleriote Nascimento

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. Maurício Bezerra de Souza Júnior, D.Sc.

Prof. Eduardo Rocha de Almeida Lima, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

FEVEREIRO DE 2013

Nascimento, Antonio José Valleriote

Análise de Modelos Reduzidos de Colunas de Destilação para Aplicações em Tempo Real / Antonio José Valleriote Nascimento. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2013.

XIV, 94 p.: il.; 29,7 cm.

Orientadores: Argimiro Resende Secchi

Evaristo Chalbaud Biscaia Junior

Dissertação (mestrado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Química, 2013.

Referências Bibliográficas: p. 83-87.

1. Modelos Reduzidos. 2. Colunas de Destilação. 3. Otimização Dinâmica. I. Secchi, Argimiro Resende. 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 minha mãe, Nelcia, por todo amor, apoio e carinho ao longo destes 29 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 Lívia por todo apoio, carinho e compreensão.

Ao professor Eduardo Moreira de Lemos pela confiança e amizade a mim fornecidas.

Aos amigos do PEQ, 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.)

ANÁLISE DE MODELOS REDUZIDOS DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO PARA
APLICAÇÕES EM TEMPO REAL

Antonio José Valleriote Nascimento

Fevereiro/2013

Orientadores: Argimiro Resende Secchi
Evaristo Chalbaud Biscaia Junior

Programa: Engenharia Química

Este trabalho tem como objetivo demonstrar a aplicabilidade e eficiência do uso dos modelos reduzidos para aplicações em tempo real em colunas de destilação. São abordados problemas de simulação estacionária e dinâmica de colunas de destilação, análise da resposta do sistema a perturbações e casos de otimização estacionária e otimização dinâmica da partida de colunas de destilação. A fim de demonstrar a exatidão da solução obtida e a redução dos custos computacionais, comparam-se os resultados obtidos com os modelos reduzidos com os resultados do modelo fenomenológico completo. Além disso, são feitas comparações entre a técnica de redução de ordem implementada nesta dissertação, que é baseada na anulação da soma dos resíduos ponderados das equações de balanço, com outras técnicas de redução de ordem demonstrando a superioridade da técnica desenvolvida sobre as demais.

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

ANALIZES OF REDUCED MODELS FOR REAL-TIME APPLICATIONS IN
DISTILLATION COLUMNS

Antonio José Valleriote Nascimento

February/2013

Advisors: Argimiro Resende Secchi

Evaristo Chalbaud Biscaia Junior

Department: Chemical Engineering

In this work, the applicability and effectiveness of using the reduced models for real-time applications in distillation columns are demonstrated. Problems of stationary and dynamic simulation of distillation columns, analysis of the system response to disturbances, and cases of stationary optimization and dynamic optimization of distillation columns start-up are analyzed. The results of the reduced models are compared with the full model in order to demonstrate the accuracy of the solution and the reduction of computational costs. Besides, comparisons are made between the use of the technique of model order reduction based on weighted residuals in discrete domain and others techniques of models order reduction to are the greater robustness of this method.

Índice

CAPÍTULO 1: INTRODUÇÃO	1
Capítulo 2: Revisão Bibliográfica	5
2.1- Coluna de Destilação	5
2.2- Redução de Ordem	9
CAPÍTULO 3: TÉCNICAS DE REDUÇÃO	19
3.1- Colocação Ortogonal	20
3.2- Modelo Agregado	25
3.3- Método dos Momentos	28
CAPÍTULO 4: ESTUDOS DE CASOS	33
4.1- Objetivos Gerais	33
4.2- Caso 1 – Modelos de Coluna de PINTO e BISCAIA (1987)	34
4.3- Caso 2 – Modelo de Coluna de LINHART e SKOGESTAD (2011)	44
4.4- Caso 3 – Colunas Multicomponentes	49
4.5- Caso 4 – Prato Ótimo de Carga	56
4.6- Caso 5 – Otimização das Condições de Operação	60
4.7- Caso 6 – Redução do Tempo de Regime Transiente	65
4.8- Caso 7 – Otimização da Partida (SCHRODER e MENDES, 1999)	67
4.9- Caso 8 – Otimização da Partida usando o Matlab acoplado ao EMSO	72
CAPÍTULO 5: CONCLUSÃO	80
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	83
APÊNDICE I - PUBLICAÇÕES	88

Lista de Figuras

Figura 1 - Esquema de uma Coluna de Destilação.....	6
Figura 2 - Esquema de uma coluna de absorção com N estágios.....	20
Figura 3 - Perfil de composição no estado estacionário para os estágios da coluna do exemplo 1 de PINTO e BISCAIA (1987) nos Estados Inicial e Final.....	37
Figura 4 – Perfil da composição do produto de topo obtido com a simulação dinâmica do exemplo 1 de PINTO e BISCAIA (1987).	38
Figura 5 - Perfil de composição no estado estacionário para os estágios da coluna do exemplo 2 de PINTO e BISCAIA (1987) nos Estados Inicial e Final.....	39
Figura 6 - Perfil da composição do produto de topo obtido com a simulação dinâmica do exemplo 2 de PINTO e BISCAIA (1987).	40
Figura 7 - Perfil de composição no estado estacionário para os estágios da coluna do exemplo 3 de PINTO e BISCAIA (1987) no Estado Inicial.	41
Figura 8 - Perfil de composição no estado estacionário para os estágios da coluna do exemplo 3 de PINTO e BISCAIA (1987) no Estado Final.	42
Figura 9 - Perfil da composição obtido com a simulação dinâmica do exemplo 3 de PINTO e BISCAIA (1987).	43
Figura 10 - Perfil da composição do produto de topo no estado estacionário para a coluna de LINHART e SKOGESTAD (2011).	45
Figura 11 – Perfil obtido com a simulação dinâmica da coluna de LINHART e SKOGESTAD (2011).	47
Figura 12 - Resposta do sistema a um degrau positivo de 10% na vazão de alimentação e, posteriormente, um degrau negativo de igual magnitude.....	48
Figura 13 - Perfil da composição nos estágios da coluna do exemplo 3 de KAMATH <i>et. al.</i> (2010) no estado estacionário.....	51
Figura 14 – Perfil de composição do produto de topo obtido com a simulação dinâmica da coluna do exemplo 3 de KAMATH <i>et. al.</i> (2010).....	53

Figura 15 - Perfil da composição do produto de topo do estado estacionário da 3ª coluna de DORNEANU et. al. (2008).	54
Figura 16 - Perfil obtido com a simulação dinâmica da 3ª coluna de DORNEANU et. al. (2008).	56
Figura 17 – Composição obtida para o produto de topo de acordo o estágio de alimentação escolhido.....	58
Figura 18 – Composição obtida para o produto de fundo de acordo com o estágio de alimentação escolhido.....	60
Figura 19 – Comparação dos perfis da composição do produto de topo com a utilização de valores constantes para D e RR e com a utilização dos valores de D e RR que levam ao lucro zero.	66
Figura 20 – Comparação do perfil de composição obtido com a simulação do modelo completo contínuo com o modelo completo discreto no tempo com 20 passos de discretização.	69
Figura 21 - Comparação do perfil de composição obtido com a simulação do modelo reduzido contínuo com o modelo reduzido discreto no tempo com 20 passos de discretização.....	69
Figura 22 – Estratégia obtida para a razão de refluxo a fim de minimizar o tempo de partida da coluna de SCHRODER e MENDES (1999).	70
Figura 23 – Perfil de composição do produto de topo quando utilizada a estratégia ótima obtida para a razão de refluxo.....	71
Figura 24 – Estratégia ótima da razão de refluxo para a partida da coluna.....	76
Figura 25 - Perfil de composição durante a partida da coluna com a adoção de uma RR constante (12,15) e com a adoção da estratégia ótima.	78

Lista de Tabelas

Tabela 1: Especificações da coluna de destilação apresentada no exemplo 1 de PINTO e BISCAIA (1987)	35
Tabela 2: Especificações da coluna de destilação apresentada no exemplo 2 de PINTO e BISCAIA (1987)	35
Tabela 3: Especificações da coluna de destilação apresentada no exemplo 3 de PINTO e BISCAIA (1987)	35
Tabela 4: Erros obtidos com a utilização do modelo reduzido na simulação estacionária dos estados inicial e final do exemplo 1 de PINTO e BISCAIA (1987)	37
Tabela 5: Erro obtido com a utilização do modelo reduzido na simulação dinâmica da transição entre os estados do exemplo 1 de PINTO e BISCAIA (1987)	38
Tabela 6: Erros obtidos com a utilização do modelo reduzido na simulação estacionária dos estados inicial e final do exemplo 2 de PINTO e BISCAIA (1987)	39
Tabela 7: Erro obtido com a utilização do modelo reduzido na simulação dinâmica da transição entre os estados do exemplo 2 de PINTO e BISCAIA (1987)	40
Tabela 8: Erros obtidos com a utilização do modelo reduzido na simulação estacionária do estado inicial do exemplo 3 de PINTO e BISCAIA (1987)	41
Tabela 9: Erros obtidos com a utilização do modelo reduzido na simulação estacionária do estado final do exemplo 3 de PINTO e BISCAIA (1987)	42
Tabela 10: Erro obtido com a utilização do modelo reduzido na simulação dinâmica da transição entre os estados do exemplo 3 de PINTO e BISCAIA (1987)	43
Tabela 11: Especificações da coluna de destilação de LINHART e SKOGESTAD (2011)	44
Tabela 12: Erro obtido com a utilização dos modelos reduzidos na simulação do estado estacionário da coluna de LINHART e SKOGESTAD (2011)	46
Tabela 13: Erros obtidos com a utilização dos modelos reduzidos na simulação dinâmica da coluna de LINHART e SKOGESTAD (2011)	47

Tabela 14: Erros obtidos com a utilização dos modelos reduzidos na predição da resposta do sistema a uma perturbação na vazão de alimentação _____	48
Tabela 15: Especificações da coluna de destilação apresentada no exemplo 3 de KAMATH et al. (2010) _____	50
Tabela 16: Especificações da 3ª coluna de destilação apresentada em DORNEANU et al. (2008) _____	50
Tabela 17: Erros obtidos com o uso dos modelos reduzidos na simulação do estado estacionário da coluna do exemplo 3 de KAMATH et al. (2010) _____	52
Tabela 18: Erros obtidos com o uso dos modelos reduzidos na simulação dinâmica da coluna do exemplo 3 de KAMATH et. al. (2010) _____	53
Tabela 19: Erros obtidos com a utilização dos modelos reduzidos na simulação do estado estacionário da 3ª coluna de DORNEANU et. al. (2008) _____	55
Tabela 20: Erros obtidos com a utilização dos modelos reduzidos na simulação dinâmica da 3ª coluna de DORNEANU et. al. (2008) _____	56
Tabela 21: Especificações da coluna de destilação apresentada no exemplo 1 de KAMATH et al. (2010) _____	57
Tabela 22: Resultados obtidos com o uso dos modelos reduzidos na otimização do prato de carga da coluna do exemplo 1 de KAMATH et al. (2010) _____	58
Tabela 23: Resultados obtidos com o uso dos modelos reduzidos na otimização do prato de carga da coluna do exemplo 2 de KAMATH et al. (2010) _____	60
Tabela 24: Resultados obtidos com a otimização das variáveis de controle para a operação em regime estacionário da coluna de destilação do exemplo 1 de KAMATH et. al. (2010) _____	62
Tabela 25: Resultados obtidos com a otimização das variáveis de controle para a operação em regime estacionário da coluna de destilação do exemplo 1 de PINTO e BISCAIA (1987) _____	63
Tabela 26: Resultados obtidos com a otimização das variáveis de controle para a operação em regime estacionário da coluna de destilação do exemplo 2 de PINTO e BISCAIA (1987) _____	64
Tabela 27: Especificações da coluna de destilação de SCHRODER e MENDES (1999) _____	67
Tabela 28: Restrições às Variáveis de Controle (kmol/min) _____	68

Tabela 29: Resultados da otimização da estratégia da razão de refluxo para minimizar o tempo de partida da coluna de SCHRODER e MENDES (1999)	71
Tabela 30: Erro obtido com a utilização do modelo reduzido na predição da composição durante a partida da coluna de SCHRODER e MENDES (1999)	72
Tabela 31: Especificações da coluna de destilação utilizada na otimização da estratégia de partida	73
Tabela 32: Valores desejados para as Variáveis de Controle no Estado Estacionário	75
Tabela 33: Resultados obtidos pela otimização da estratégia da RR para a partida da coluna	76
Tabela 34: Comparação entre os valores da F_{obj} quando simulados os dois modelos com ambas as estratégias obtidas pelas otimizações	77
Tabela 35: Erro obtido utilizando o modelo reduzido para a predição do perfil de composição durante o regime transiente	78

Nomenclatura

$A_{i,j}^+, A_{i,j}^-$	Matrizes de discretização
D	Vazão de Destilado
f	Relações termodinâmicas
h_F	Entalpia molar na fase líquida na alimentação
H_i	Entalpia molar na fase vapor do estágio i
h_i	Entalpia molar na fase líquida do estágio i
$H_{i,j}$	Entalpia na fase vapor do componente j no estágio i
$h_{i,j}$	Entalpia na fase líquida do componente j no estágio i
$K_{i,j}$	Constante de equilíbrio do componente j no estágio i
L_i	Vazão molar na fase líquida do estágio i
l_j	Polinômio interpolador de Lagrange
m_i	Acumulo de massa na fase líquida do estágio i
$n_{componentes}$	Número de componentes
$N_{estágios}$	Número de estágios
NE	Número de pontos de colocação na seção de esgotamento
NF	Estágio de alimentação da coluna
NR	Número de pontos de colocação na seção de retificação
NT	Número de pontos de interpolação total
P_i	Pressão total no estágio i
$p(t)$	Perfil da composição na corrente de líquido que entra na absorvedora
Q_i	Carga térmica do estágio i
$q(t)$	Perfil da composição na corrente de vapor que entra na absorvedora

$Res^{(n+1)}(s_j, t)$	Resíduo de grau $n+1$ no ponto de colocação s_j devido à aproximação polinomial
$Res_k(t)$	Soma dos resíduos ponderados para o momento k
RR	Razão de Refluxo
s_j	Ponto de colocação j
$s^{(j)}$	Variável representativa do estágio j reescalado
T_i	Temperatura no estágio i
U_i	Retirada lateral na fase líquida do estágio i
V_i	Vazão molar na fase vapor do estágio i
W_k	Peso da quadratura no ponto de interpolação
$x_{i,j}$	Composição molar na fase líquida do componente j no estágio i
$x^{(n+1)}(s_k, t)$	Composição molar de um componente no ponto de interpolação i
$y_{i,j}$	Composição molar na fase vapor do componente j no estágio i
$z_{F,j}$	Composição do componente j na alimentação

Letras Gregas:

α	Volatilidade relativa
β	Razão entre vazão molar na fase líquida e a vazão molar na fase vapor
$\rho_n(x)$	Polinômio ortogonal de grau n
Ψ_i	Matriz obtida através dos pesos da quadratura
Ω_i	Elemento de agregação

CAPÍTULO 1: INTRODUÇÃO

Processos descritos por modelos matemáticos de dimensão elevada, como os processos de separação por estágio, estão presentes em todas as áreas de atuação do engenheiro químico. E, como no caso das colunas de destilação, podem ser consideradas como sendo o coração de algumas plantas industriais, como por exemplo, uma planta de refino de petróleo.

Em algumas indústrias, as colunas de destilação constituem uma grande fração do investimento fixo e dos custos operacionais (ALFRADIQUE, 2003). O bom funcionamento e a otimização destas unidades constituem, sob o ponto de vista econômico, fatores de grande importância. A indústria do petróleo, por exemplo, tornou-se a maior empregadora de engenheiros químicos (RICARDO, 2008). Este fato é especialmente relevante nos tempos recentes em virtude de as destilações simples dos anos iniciais da indústria terem sido substituídas, em geral, por procedimentos de refinação mais sofisticados, envolvendo numerosas operações físicas e conversões químicas, ou processos químicos unitários, muitas vezes de grande complexidade e de grande porte.

Entretanto, industrialmente torna-se inviável aplicar fisicamente determinadas perturbações com a finalidade de avaliar o comportamento do processo. Desta forma, a modelagem destes equipamentos é tema de estudo há muito tempo, sendo que os primeiros métodos práticos para a solução das equações do modelo foram os métodos gráficos de McCabe e Thiele e de Ponchon e Savarit (apud HENLEY e SEADER, 1981). Os trabalhos base para os modelos rigorosos atuais foram os de Thiele e Guedes e de Lewis e Matheson (apud HENLEY e SEADER, 1981), que, apesar de ainda serem métodos rudimentares, são uma generalização dos métodos gráficos para misturas multicomponentes. Hoje os modelos desenvolvidos podem ser utilizados tanto para avaliação do desempenho do processo como para treinamento de pessoal. Juntamente com o avanço dos computadores e da necessidade econômica de manter os vários produtos dentro de faixas restritas, os modelos matemáticos

dos processos vêm se tornando cada vez mais complexos e rigorosos. Sendo possível descrever de forma bastante realista o comportamento físico-químico do processo. (MENEGUELO, ROQUEIRO e MACHADO, 2004). No entanto, devido principalmente à alta interdependência entre as diversas variáveis presentes em um processo, a previsão do comportamento da planta se torna difícil e, a fim de contornar este problema, pode-se utilizar a modelagem e simulação computacional dos processos.

No caso da simulação dinâmica de uma coluna de destilação, um grande número de equações algébrico-diferenciais deve ser resolvido, levando a um alto esforço computacional na tentativa de obter a solução das equações do sistema em cada instante de tempo. Quando o resultado da resolução destes modelos matemáticos deve ser aplicado em tempo real, como é o caso da otimização em tempo real e do controle preditivo, o custo computacional é um dos fatores limitantes para se tornar viável.

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 os limites operacionais da planta. Para conseguir este ponto ótimo de operação é necessário um modelo matemático que descreva o processo com boa exatidão. Porém, esses modelos têm por característica elevada dimensão, principalmente quando se tratam 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 manipulada 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 manipulada 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 em 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).

Neste contexto, os modelos de ordem reduzida surgem como uma excelente opção para a obtenção de soluções de sistemas de ordem elevada com uma significativa redução do custo computacional mantendo a capacidade preditiva da solução do modelo completo. Tais modelos podem também assumir papel relevante no tratamento de problemas de otimização, controle e demais aplicações em tempo real.

O objetivo desta dissertação é investigar a aplicabilidade e eficiência do uso de modelos de ordem reduzida em problemas de coluna de destilação, tendo em vista sua implementação em tempo real.

Serão realizadas simulações estacionárias e dinâmicas, análises das respostas do sistema a perturbações, otimizações estacionárias e otimizações dinâmicas da estratégia de partida de colunas.

A fim de demonstrar a exatidão das soluções e a redução dos custos computacionais alcançados serão comparados os resultados obtidos com o uso dos modelos de ordem reduzida e com o uso do modelo fenomenológico completo. Serão também feitas comparações entre o método de redução de ordem baseado na anulação da soma dos resíduos ponderados com outros métodos de redução, a fim de demonstrar a maior robustez e adaptabilidade deste método.

No Capítulo 2, intitulado de Revisão Bibliográfica, discute-se um pouco sobre os métodos de redução de ordem existentes na literatura e que vêm sendo aplicados em trabalhos da literatura.

No Capítulo 3 a discussão terá seu foco voltado para o método de redução utilizado nas análises feitas no presente trabalho, que é o método baseado na anulação da soma dos resíduos ponderados. Também será feito um pequeno resumo dos métodos da colocação ortogonal e de estágios agregados.

No Capítulo 4, intitulado Estudos de Casos, são apresentados os problemas abordados neste trabalho, fazendo uma descrição detalhada dos modelos de colunas utilizados e dos objetivos específicos de cada simulação, bem como a estratégia utilizada na busca das soluções. São apresentados também, os resultados obtidos e a discussão sobre estes resultados.

No Capítulo 5 é realizada a conclusão deste trabalho, destacando-se as principais contribuições do mesmo.

CAPÍTULO 2: REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1- Coluna de Destilação

O equipamento que promove a transferência de massa e calor entre correntes de líquido e de vapor é a conhecida Coluna de Destilação. Esta é constituída por um recipiente cilíndrico dentro do qual se encontra uma série de pratos internos entre os quais circulam vapor e líquido em contracorrente. As duas fases presentes em cada estágio sofrem transferência de massa e calor e considera-se que se encontram em equilíbrio ao deixar o estágio. No topo da coluna existe, geralmente, um condensador que condensa o vapor proveniente da coluna, sendo parte do condensado, designado por refluxo, reenviado para o prato superior. Denomina-se por razão de refluxo (RR) a razão entre o a corrente reenviada e a corrente produzida no topo, que deixa a coluna, o destilado. Na base da coluna encontra-se um refeedor que vaporiza parte da corrente de líquido da base, para o prato inferior, onde entra sob a forma de vapor. A corrente retirada na base da coluna designa-se por resíduo ou produto de fundo. Na Figura 1 apresenta-se um esquema de uma coluna de destilação.

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.

Algumas simplificações foram adotadas para o desenvolvimento dos modelos da coluna de destilação, no entanto sem que estas prejudiquem o objetivo do trabalho (CARVALHO, 1996).

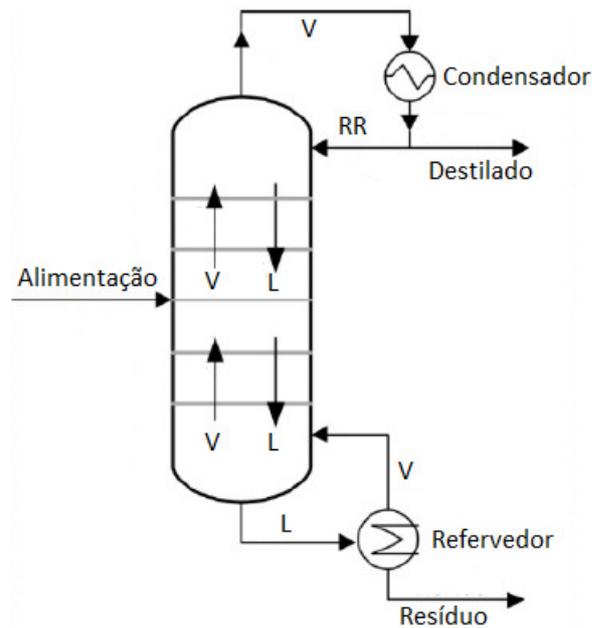


Figura 1 - Esquema de uma Coluna de Destilação

As simplificações feitas durante a modelagem foram:

- Coluna composta de:
 - $N-2$ pratos internos (incluindo o de alimentação),
 - Condensador e refeedor em equilíbrio termodinâmico.
- Balanço de energia quase-estacionário;
- Equilíbrio termodinâmico entre as correntes que saem de cada prato;
- Estágios adiabáticos ($Q_i = 0, 1 < i < NF, NF < i < N$);
- 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.

2.1.1 - Balanços de Massa e Energia

Com $i = 1, \dots, N_{estágios}$ e $j=1, \dots, n_{componentes}$ tem-se:

a) Condensador:

$$V_2 = D + L_1 \quad (1)$$

$$RR = \frac{L_1}{D} \quad (2)$$

$$m_1 \cdot \frac{dx_{1,j}}{dt} = V_2 \cdot y_{2,j} - (L_1 + D) \cdot x_{1,j} \quad (3)$$

$$V_2 \cdot H_2 - D \cdot h_1 - V_1 \cdot H_1 - Q_1 = 0 \quad (4)$$

b) Prato interno:

$$L_{i-1} + V_{i+1} - L_i - V_i = 0 \quad (5)$$

$$m_i \cdot \frac{dx_{i,j}}{dt} = L_{i-1} \cdot x_{i-1,j} + V_{i+1} \cdot y_{i+1,j} - L_i \cdot x_{i,j} - V_i \cdot y_{i,j} \quad (6)$$

$$L_{i-1} \cdot h_{i-1} + V_{i+1} \cdot H_{i+1} - L_i \cdot h_i - V_i \cdot H_i = 0 \quad (7)$$

c) Prato de Alimentação:

$$L_{NF-1} + V_{NF+1} + F - L_{NF} - V_{NF} = 0 \quad (8)$$

$$m_{NF} \cdot \frac{dx_{NF,j}}{dt} = L_{NF-1} \cdot x_{NF-1,j} + V_{NF+1} \cdot y_{NF+1,j} + F \cdot z_{NF,j} - L_{NF} \cdot x_{NF,j} - V_{NF} \cdot y_{NF,j} \quad (9)$$

$$L_{NF-1} \cdot h_{NF-1} + V_{NF+1} \cdot H_{NF+1} + F \cdot h_F - L_{NF} \cdot h_{NF} - V_{NF} \cdot H_{NF} = 0 \quad (10)$$

d) Refervedor:

$$L_{N-1} - L_N - V_N = 0 \quad (11)$$

$$m_N \cdot \frac{dx_{N,j}}{dt} = L_{N-1} \cdot x_{N-1,j} - L_N \cdot x_{N,j} - V_N \cdot y_{N,j} \quad (12)$$

$$L_{N-1} \cdot h_{N-1} - L_N \cdot h_N - V_N \cdot H_N - Q_N = 0 \quad (13)$$

e) Relações de Equilíbrio:

$$y_{i,j} = K_{i,j} \cdot x_{i,j} \quad (14)$$

f) Relações Algébricas:

$$m_{i,j} = M_i \cdot x_{i,j} \quad (15)$$

$$\sum_{j=1}^{n_{componentes}} x_{i,j} = \sum_{j=1}^{n_{componentes}} y_{i,j} = 1 \quad (16)$$

$$M_i = cte \quad (17)$$

$$P_i = cte \text{ ou perfil linear, dependendo do caso.} \quad (18)$$

g) Relações Termodinâmicas:

$$K_{i,j}(T_i) \cdot f_i^V(T_i, P_i, y_{i,j}) = f_i^L(T_i, P_i, x_{i,j}) \quad (19)$$

$$H_{i,j} = F(T_i, P_i, y_{i,j}) \quad (20)$$

$$H_i = \sum_{j=1}^{n_{componentes}} y_{i,j} \cdot H_{i,j} \quad (21)$$

$$h_{i,j} = f(T_i, P_i, x_{i,j}) \quad (22)$$

$$h_i = \sum_{j=1}^{n_{componentes}} x_{i,j} \cdot h_{i,j} \quad (23)$$

Todas as variáveis termodinâmicas envolvidas nos modelos foram calculadas através do pacote termodinâmico *VRTherm* (Portal VRTech) acoplado ao simulador de processos *EMSO - Environment for Modeling, Simulation, and Optimization* (SOARES e SECCHI, 2003) e (Projeto *ALSOC - Ambiente Livre para Simulação, Otimização e Controle*), utilizando-se das respectivas equações de estado que descrevem o comportamento termodinâmico dos modelos adotados em cada exemplo abordado neste trabalho.

2.2- Redução de Ordem

Como já dito no capítulo anterior, a modelagem matemática rigorosa de processos de separação resulta na necessidade de se resolver um sistema de equações de dimensão elevada. Além disso, problemas de otimização desses processos demandam a resolução repetitiva do modelo. Esses fatores levam a um esforço computacional bastante elevado, o que, muitas vezes, acaba inviabilizando a aplicação do modelo fenomenológico completo na resolução de aplicações em tempo real.

Logo, a necessidade de se obter sistemas de menores dimensões, que utilizem menores recursos computacionais, mantendo a exatidão e a confiabilidade da solução do

modelo completo, levou a uma intensificação do desenvolvimento das chamadas técnicas de redução de ordem.

Os modelos de ordem reduzida são sistemas de baixa ordem de equações diferenciais ordinárias ou algébrico-diferenciais. Em outras palavras a redução de ordem é a aproximação de um sistema com um grande número de equações por um sistema ‘menor’ do que o original. No entanto, é importante que sejam mantidas, mesmo que de maneira aproximada, as principais características do sistema mais complexo. É desejável que o modelo reduzido consiga prover uma solução próxima à solução do modelo completo e que o sistema obtido pela redução de ordem seja um sistema de resolução mais simples.

Inúmeros artigos são encontrados na literatura descrevendo alguns métodos de redução de ordem e suas diversas adaptações e aperfeiçoamentos. A seguir, são comentados alguns dos mais importantes trabalhos que guiaram esta dissertação.

A resolução de problemas de valor de contorno através de método baseado na técnica de colocação ortogonal foi apresentada por VILLADSEN e STEWART (1967). Os autores aproximam o resíduo por um polinômio ortogonal e, através de uma escolha apropriada da função peso, foi possível conseguir uma boa precisão para método. Os pontos de colocação escolhidos são os pontos ótimos da quadratura para a integração numérica da solução ao longo da mesma região.

WAHL e HARRIOT (1970) foram os pioneiros na utilização de redução de ordem na resolução de problemas de separação por estágio. No trabalho, os autores aproximaram o comportamento dinâmico do sistema de separação binário por uma única equação diferencial, caracterizada por dois parâmetros dependentes do tempo. Através da linearização da equação em torno de um ponto do estado estacionário, a função de transferência do sistema pode ser obtida. Baseando-se no conhecimento das condições de estado estacionário, os polos e zeros de tal função de transferência puderam ser encontrados.

A ideia de tratar as colunas de destilação como sistemas compartimentados foi apresentada em ESPAÑA e LANDAU (1975). Eles, ao considerarem a concentração de um dos componentes da mistura como uma variável de saída, assumiram que a coluna de destilação pode ser considerada como um sistema compartimentado, com três compartimentos, cada um deles substituindo um conjunto de pratos de destilação. Estas considerações permitem uma caracterização da coluna de destilação por um modelo bilinear com apenas três variáveis de estado, uma concentração para cada compartimento, e oito parâmetros estruturais. Um algoritmo para a identificação do modelo de ordem reduzida bilinear é apresentado e é baseado na minimização do erro da saída. Os resultados obtidos no trabalho demonstraram a validade da abordagem proposta, bem como o desempenho do método de identificação. O modelo de ordem reduzida bilinear obtido é robusto e válido para grandes variações das entradas.

WONG e LUUS (1980) introduziram a técnica da colocação ortogonal para a redução de sistemas de separação por estágio. Eles propuseram que o sistema original poderia ser transformado em um sistema de equações diferenciais parciais e que, então, o método da colocação ortogonal fosse aplicado para se obter um modelo reduzido de baixa ordem. Os autores garantiram que o modelo reduzido obtido pode ser aplicado em problemas de controle e ilustraram o procedimento em uma absorvedora com 20 estágios, reduzindo-os a cinco estágios.

CHO e JOSEPH (1983 a, 1983 b, 1984) apresentam uma discussão a respeito da seleção adequada dos pesos e das famílias dos polinômios a serem usados na aproximação da solução. Assim, eles mostraram ser possível a aplicação do método da colocação ortogonal no conjunto original de equações diferenciais, gerando assim, uma evolução em relação ao trabalho de WONG e LUUS (1980). O modelo foi testado em problemas de absorção simples (CHO e JOSEPH, 1983 a) e sistema de destilação multicomponente (CHO e JOSEPH, 1983 b).

STEWART *et al.* (1985) exploraram as características discretas dos modelos de redução de ordem e concluíram que os resultados da redução são mais confiáveis quando os

polinômios ortogonais utilizados para a aproximação também forem definidos dentro do domínio discreto. Com a resolução de problemas estacionários e dinâmicos, os autores demonstraram que a família dos polinômios de Hahn é capaz de alcançar resultados bem mais refinados. Os autores também propuseram alguns critérios para o uso dos métodos de redução de ordem:

- Preservação da estrutura do modelo completo;
- Convergência para a solução do modelo completo;
- Predição dos estados em qualquer estágio;
- Ajustes dos parâmetros de forma otimizada para reproduzir o modelo completo com a menor ordem possível;
- Ajuste dos parâmetros do modelo deverá ser feito de forma explícita, não deixando parâmetro algum para ser ajustado por tentativa e erro;
- Capacidade de aplicação a problemas não lineares e multicomponentes de forma direta;
- Permitir a livre escolha de rotinas termodinâmicas;
- Permitir o uso de eficiência local por estágios.

Uma técnica de modelagem de baixa ordem para processos de separação foi desenvolvida por BENALLOU *et al.* (1986) considerando uma coluna como um sistema compartimentado no qual um certo número de fases são aglomeradas de modo a formar uma fase equivalente. Este método leva a modelos de baixa ordem de processos de separação e sem linearização. Além disso, as variáveis e parâmetros dos modelos resultantes têm significado físico. A análise compartimental garante a preservação dos balanços materiais e dos estados estacionários para mudanças arbitrárias nas variáveis de entrada. Os autores fazem uma comparação da análise compartimental com uma técnica de

redução baseada na colocação ortogonal e demonstram a eficácia e a robustez do método compartimental.

PINTO e BISCAIA (1987) utilizaram o método de colocação ortogonal, e apresentaram quatro estratégias para a redução de ordem de modelos de sistemas de separação por estágio: colocação ortogonal por seção sem extrapolação; colocação ortogonal por seção com extrapolação, colocação ortogonal "spline"; e colocação ortogonal global. As estratégias foram aplicadas a três exemplos de colunas destilação. Os autores concluíram que a estratégia da colocação ortogonal por seção sem extrapolação apresentou bons resultados e um bom potencial para a aplicação em problemas onde há uma grande descontinuidade da composição ao redor do prato de alimentação, já a colocação ortogonal global apresentou bons resultados em problemas onde a descontinuidade no prato de alimentação foi pequena.

Partindo-se dos resultados alcançado por PINTO e BISCAIA (1987), a estratégia de redução de ordem baseada na colocação ortogonal por seção sem extrapolação foi utilizada para a resolução de problemas de controle adaptativo em colunas de destilação por SECCHI (1988).

Um novo método de redução, usando uma combinação do método de colocação ortogonal e o conceito de aproximação polinomial bimodular (MPA) foi apresentado por KIM *et al.* (1989). O modelo foi avaliado em dois exemplos de colunas de destilação (binário e ternário). O trabalho apresentou uma redução do tempo de processamento de cerca de 40% e com uma precisão comparável à dos métodos rigorosos. Os autores concluíram, também, que o método proposto pode reproduzir bem as variações das variáveis nas seções próximas à alimentação.

Baseando-se no modelo apresentado por KIM *et al.* (1989), um outro método de redução foi apresentado por CHOI *et al.* (1991). No entanto, para fazer a aproximação eles utilizaram funções do tipo *spline* cúbicas. O trabalho demonstra que essa abordagem foi

capaz de obter soluções mais próximas ao modelo completo do que com o uso das funções interpoladoras de Lagrange.

Um método para a redução da ordem de modelos dinâmicos de colunas de destilação foi apresentado por MUSCH e STEINER (1993). A abordagem feita, foi uma modificação e ampliação dos modelos compartimentais apresentados em BENALLOU *et al.* (1986), formulando as equações algébricas e as equações diferenciais para o balanço global dos compartimentos, mas mantendo as equações diferenciais para a concentração para cada estágio. A eficiência de prato de Murphree foi usada para aumentar a precisão da resposta. O modelo resultante é de ordem substancialmente inferior e quando aplicados a uma coluna de destilação binária, mostrou boa conformidade na simulação dinâmica e na previsão do estado estacionário, quando comparado com o modelo completo rigoroso.

CARVALHO (1996) estende a aplicação do método da colocação ortogonal à solução de equações de diferenças, a partir do desenvolvimento de uma metodologia que unifica o uso da colocação ortogonal tanto para a solução de equações diferenciais quanto para a de equações de diferenças. O autor reescreve as equações de balanço de massa e energia do modelo prato a prato original na forma de equações de diferenças finitas e em seguida essas diferenças são aproximadas por técnicas de colocação ortogonal discreta. A divisão de cada seção da coluna em elementos finitos mostrou-se bastante adequada para representar o comportamento de colunas onde os perfis de concentração apresentam regiões onde a variação de composição é bem pequena e outras regiões onde a variação é bastante acentuada. O trabalho mostra que é possível conseguir uma boa redução dos custos computacionais ao mesmo tempo em que mantém uma boa concordância dos resultados com o modelo prato a prato.

CABALLERO e GROSSMANN (1999) apresentaram uma representação agregada para colunas de destilação. Um modelo agregado foi apresentado para as seções de enriquecimento e retificação de colunas de destilação. O modelo é baseado em balanços de massa e equilíbrio de fases expressos em termos de fluxos, concentrações de entrada, e recuperações. O balanço de energia foi dissociado do balanço de massa. O modelo proposto

teve seu desempenho em termos de robustez e tempo de processamento ilustrado com vários exemplos.

Utilizando a técnica da colocação ortogonal, SCHRODER e MENDES (1999) obtiveram um modelo de ordem reduzida para uma coluna de destilação e o aplicaram em um problema de otimização do tempo de transição durante a partida de colunas. Os autores propuseram um algoritmo de otimização misto como uma alternativa para superar a lentidão do IDP (Iterative Dynamic Programming) e a pobre robustez dos algoritmos SQP (Sequential Quadratic Programming) para este tipo de problemas. Os autores demonstraram que, uma vez que os algoritmos IDP e SQP são fortemente afetados pela ordem do sistema, o uso do modelo reduzido se mostrou eficiente para este tipo de problema. Foi possível concluir também que a estratégia mista levou a um algoritmo robusto e rápido, capaz de resolver problemas de otimização de grande dimensão e partindo-se de condições iniciais relativamente ruins.

Baseando-se na teoria de propagação de onda, KIENLE (2000) obteve um método de redução de ordem. Os parâmetros da onda foram calculados através das condições de operação e as variáveis dependentes puderam ser calculadas em cada estágio através do comportamento de propagação da onda. Quando aplicado a misturas com comportamentos próximos a idealidade ou um pouco não ideais, o método se mostrou eficiente e capaz de prever com boa qualidade os perfis de concentração e temperatura.

RAMASWANY e SARAF (2002) apresentaram um modelo de ordem reduzida para uma coluna de destilação de petróleo cru. O modelo foi comparado com o modelo completo e com os dados experimentais de uma refinaria em funcionamento. O modelo reduzido apresentado no trabalho, que representa apenas o estado estacionário da unidade, apresentou ótimos resultados e, quando comparado com o modelo rigoroso, se revelou mais flexível para o ajuste com os dados do sistema e também mais tolerante para medições de ruído.

O uso de dois modelos reduzidos, compartimentado e onda não linear, em problemas de controle preditivo de colunas com alta pureza na separação foi comparado por KHOWINIJ *et al.* (2004). Os autores demonstram que o modelo de ondas não foi capaz de produzir previsões precisas sobre as condições de funcionamento da coluna. As previsões foram ruins quando um degrau positivo foi aplicado à vazão de alimentação. A principal limitação do modelo de onda foi o pressuposto de que o perfil de onda tinha um perfil constante. Por outro lado, o modelo de ordem reduzida com cinco compartimentos se mostrou capaz de produzir resultados bastante satisfatórios em relação ao modelo completo.

A aplicação dos modelos reduzidos em problemas de controle de plantas de processos foi demonstrada por DORNEANU *et al.* (2008). O trabalho propõe uma abordagem para a obtenção de modelos de ordem reduzida de processos químicos com aplicação em projetos de sistemas de controle. A abordagem baseia-se na estrutura inerente, que existe em uma planta química e identifica as unidades ou grupos de unidades que determinam o comportamento do estado estacionário e dinâmico da planta. Técnicas de redução específicas e com precisões diferentes são aplicadas a cada uma das unidades (a separação de iso-butano, buteno, propano e dodecano é avaliada em três colunas de destilação com parâmetros de operação e condições de alimentação distintas), seguido pelo acoplamento dos modelos reduzidos, de acordo com a estrutura do fluxograma do processo. Por meio de um estudo de caso, a avaliação das estruturas de controle de processos de fábrica, para a planta de alquilação iso-butano-buteno, prova a eficácia da abordagem. Além disso, mostra-se que o método é capaz de reter a não linearidade do modelo da planta original.

WELZ *et al.* (2008) apresentaram um modelo reduzido, com a aplicação da colocação ortogonal em um modelo completo de coluna empacotada, construído com foco em descontinuidade na alimentação, que foi tratada como um flash adiabático. Os autores definiram uma função objetivo, através de uma combinação dos graus de liberdade, como sendo a solução do modelo. Esta definição permite que soluções múltiplas possam ser encontradas. Posteriormente, a solução ideal pode ser encontrada usando-se uma rotina de otimização. A construção da função objetivo assegura a existência de uma solução para o

problema. O modelo de ordem reduzida resultante pode ser aplicado a colunas de destilação com pratos.

O uso de modelos de estágios agregados para a solução de diversos problemas envolvendo colunas de destilação foi abordado por KAMATH et al. (2010). O modelo de estágios agregados foi implementado em três etapas. Primeiro os autores consideraram os números de estágios em cada seção como uma variável contínua, de forma a suavizar o problema a ser resolvido. Feito isso, os valores encontrados foram arredondados para os valores inteiros mais próximos. Posteriormente, um algoritmo é usado para se obter a melhor solução dentre os valores inteiros possíveis. Os autores introduzem modelo agregado modificado e demonstram a boa capacidade de predição e de redução do tempo computacional, aplicando-o a problemas de simulação e otimização. No artigo, é demonstrado também que a aplicação do método em três etapas leva a melhores resultados.

LINHART e SKOGESTAD (2011) apresentaram um método para se obter modelos dinâmicos reduzidos de sistemas espacialmente discretos. Os modelos reduzidos são sistemas de equações diferenciais ordinárias ou algébrico-diferencial de baixa ordem. O método baseia-se no conceito de agregação, que foi utilizado por L'EVINE e ROUCHON (1991) para deduzir modelos reduzidos de destilação. Neste método, o conhecimento da resposta do modelo completo é necessária para a escolha dos pontos de agregação e para o cálculo dos parâmetros que modificam a dinâmica do sistema nos pontos de agregação. Os autores mostraram que este método pode ser utilizado para aumentar a velocidade de simulação em várias vezes, e estenderam o método para modelos mais complexos de destilação. Neste caso, o método é apresentado como uma alternativa aos outros métodos de redução para este tipo de processos unidimensionais de separação, tais como métodos de colocação ortogonal e propagação de ondas.

RIBEIRO (2011) apresentou uma nova técnica de redução de ordem de modelos baseada nos resíduos ponderados no domínio discreto. Neste método, os perfis de concentração e temperatura são encontrados pela anulação da soma dos resíduos ponderados pelos momentos para os n primeiros momentos. No método, os pontos de

colocação são as raízes do polinômio ortogonal de Hanh. No trabalho, é evidenciada a maior adaptabilidade do método, devida principalmente ao fato de que os pontos de colocação não serem fixos. O autor demonstrou a superioridade da sua técnica frente à colocação ortogonal clássica em problemas estacionários e dinâmicos envolvendo torres de absorção e destilação.

Tendo em vista as diversas técnicas de redução de ordem presentes na literatura, o presente trabalho tem como finalidade investigar a aplicabilidade dos modelos reduzidos em problemas práticos de coluna de destilação.

O trabalho tem o foco voltado, principalmente, para o modelo reduzido desenvolvido por RIBEIRO (2011), a fim de investigar a exatidão e confiabilidade da solução quando comparada com o modelo fenomenológico completo e também a maior robustez, adaptabilidade e menor esforço computacional quando comparado com outros modelos de ordem reduzida. No trabalho de RIBEIRO (2011), foi abordada a superioridade do método dos momentos frente a colocação ortogonal clássica em problemas de simulação estacionária, dinâmica e casos de otimização do prato de carga. Na presente dissertação, o método proposto por RIBEIRO (2011) será comparado com a colocação ortogonal e com o modelo de estágios agregados apresentado em LINHART e SKOGESTAD (2011) e KAMATH *et al.* (2010) para uma variedade maior de problemas.

Os modelos reduzidos foram utilizados em problemas de simulação estacionária e dinâmica, analisando as respostas dos sistemas a perturbações, em problemas de otimização estacionária, visando diminuir os custos da operação e em problemas de otimização dinâmica da partida de colunas de destilação, em que o objetivo é a diminuição do tempo de regime transiente.

CAPÍTULO 3: TÉCNICAS DE REDUÇÃO

Neste trabalho o foco principal é a comparação de alguns modelos reduzidos, principalmente o método baseado na anulação dos resíduos ponderados dos momentos apresentado em RIBEIRO (2011), com o modelo fenomenológico completo e com outros modelos de redução de ordem, principalmente o método da colocação ortogonal (PINTO e BISCAIA, 1987) e o método dos estágios agregados (LINHART e SKOGESTAD, 2011) e (KAMATH *et al.*, 2010). O objetivo é comprovar a redução dos custos computacionais alcançada com o uso dos modelos reduzidos, sem perder a confiabilidade e exatidão da solução e, também, mostrar a maior adaptabilidade e robustez do método baseado na anulação dos resíduos ponderados frente aos demais métodos de redução de ordem.

A seguir, é feita uma breve descrição dos métodos da colocação ortogonal e dos estágios agregados, a fim de fazer uma sucinta explanação sobre os métodos. Para um aprofundamento nos métodos, os trabalhos originais devem ser consultados, PINTO e BISCAIA (1987) e LINHART e SKOGESTAD (2011), respectivamente.

A técnica de redução de ordem de modelo baseada nos resíduos ponderados pelos momentos está mais detalhada na seção 3.2.3. No entanto, para um melhor entendimento do método sugere-se a leitura dos apêndices 1, 2 e 3 do trabalho original de RIBEIRO (2011). Visando apresentar as técnicas de redução de forma mais simples nos itens a seguir, considerou-se como modelo teste uma coluna de absorção de N estágios de equilíbrio envolvendo uma mistura binária, operando isotermicamente, com uma relação de equilíbrio entre as composições das fases simples e linear e na qual as duas composições de alimentação são funções conhecidas da variável tempo. A Figura 2 ilustra o exemplo descrito anteriormente:

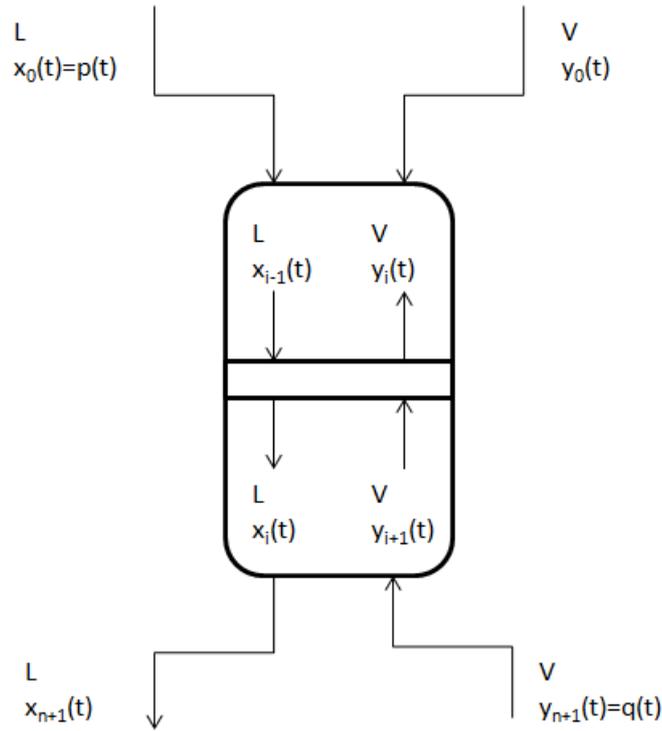


Figura 2 - Esquema de uma coluna de absorção com N estágios

3.1- Colocação Ortogonal

O método considera que, para que o sistema de equações diferenciais seja resolvido, as variáveis dependentes podem ser aproximadas por uma função polinomial das variáveis independentes, de forma que as equações sejam satisfeitas nos pontos de colocação, que são as raízes de certa família de polinômios ortogonais.

No caso de uma coluna de absorção com retenções (*holdup*, m) nos estágios e vazões molares (L e V) constantes, um estágio i é descrito pela equação abaixo:

$$m \cdot \frac{dx_i(t)}{dt} = L \cdot x_{i-1}(t) + V \cdot y_{i+1}(t) - L \cdot x_i(t) - V \cdot y_i(t)$$

$$\text{para } i = 1, \dots, N \text{ com } x_0(t) = p(t) \text{ e } y_{N+1}(t) = q(t) \quad (24)$$

Considerando que a composição x_i pode ser aproximada por uma função polinomial do tipo:

$$x_i(t) \cong x^{(n+1)}(s_i, t) = \sum_{j=0}^{n+1} l_j(s_i) \cdot x^{(n+1)}(s_j, t) \quad (25)$$

$$s_0 = 0, s_{n+1} = N + 1$$

$0 < s_1 < s_2 \dots < s_n < N + 1$ são os pontos de interpolação internos

$$e l_j(s) = \prod_{\substack{m=0 \\ m \neq j}}^{n+1} \left(\frac{s - s_m}{s_j - s_m} \right) \quad (26)$$

Neste modelo não existem condensador, refeedor e prato de alimentação – é uma simples sequência de estágios de equilíbrio em que a composição de alimentação da fase líquida do primeiro prato é uma função conhecida do tempo: $x^{(n+1)}(s_0, t) = x_0(t) = p(t)$ e a composição da fase gás no último estágio também é conhecida: $y^{(n+1)}(s_{n+1}, t) = y_{n+1}(t) = q(t)$. Os valores das composições de alimentação nos primeiro e último estágio (x_0 e y_{N+1}) devem ser considerados na aproximação polinomial do perfil de composição e, em decorrência, os estágios 0 (zero $s_0 = 0$) e $N+1$ ($s_{n+1} = N + 1$) devem ser adotados como pontos de interpolação do perfil além dos n pontos internos $0 < s_1 < s_2 \dots < s_n < N + 1$.

A aplicação do perfil polinomial da composição nos balanços de massa em cada estágio dá origem à expressão do resíduo:

$$\begin{aligned} Res^{(n+1)}(s, t) = & m \cdot \frac{\partial x^{(n+1)}(s, t)}{\partial t} - L \cdot x^{(n+1)}(s - 1, t) - V \cdot y^{(n+1)}(s + 1, t) \\ & + L \cdot x^{(n+1)}(s, t) + V \cdot y^{(n+1)}(s, t) \end{aligned} \quad (27)$$

Caso a relação de equilíbrio entre as fases seja uma relação de equilíbrio linear, isto é: $y_i(t) = a \cdot x_i(t) + b$, o resíduo da aproximação polinomial é também um polinômio de grau $n + 1$ em s e pode ser expresso por:

$$Res^{(n+1)}(s, t) = \sum_{k=0}^{n+1} l_k(s) \cdot Res^{(n+1)}(s_k, t) \quad (28)$$

Em que:

$$Res^{(n+1)}(s_k, t) = m \cdot \frac{dx^{(n+1)}(s_k, t)}{dt} - L \cdot x^{(n+1)}(s_k - 1, t) - V \cdot y^{(n+1)}(s_k + 1, t) \\ + L \cdot x^{(n+1)}(s_k, t) + V \cdot y^{(n+1)}(s_k, t) \quad (29)$$

Considerando a soma dos resíduos nos estágios reais ponderado pelas n primeiras potências da variável espacial s , tem-se o *Método dos Momentos* que é expresso por:

$$\sum_{i=1}^n i^m \cdot Res^{(n+1)}(i, t) = 0 \text{ para } m = 0, \dots, (n - 1) \quad (30)$$

O grau do termo interno do somatório é um polinômio em i de no máximo grau $2n$ que poderia ser calculado exatamente por quadratura tipo Lobatto para domínio discreto segundo:

$$\sum_{i=1}^n i^m \cdot Res^{(n+1)}(i, t) = \sum_{k=0}^{n+1} W_k \cdot Res^{(n+1)}(s_k, t) = 0 \quad (31)$$

Sendo s_k para $k = 1, \dots, n$ as raízes do polinômio ortogonal no domínio discreto:

$$\sum_{i=1}^n i^k \cdot (n + 1 - i) \cdot \rho_n(i) = 0 \text{ para } k = 1, \dots, n \quad (32)$$

A família desses polinômios ortogonais no domínio discreto são os polinômios de Hahn, cujas propriedades podem ser encontradas em CARVALHO (1996).

Caso o somatório fosse calculado por quadratura tipo Gauss (que é exata apenas até o grau $2n-1$ em i) ter-se-ia a expressão:

$$\sum_{i=1}^n i^m \cdot Res^{(n+1)}(i, t) \cong \sum_{k=1}^n W_k \cdot s_k^m \cdot Res^{(n+1)}(s_k, t) = 0 \Rightarrow Res^{(n+1)}(s_k, t) = 0 \quad (33)$$

Sendo s_k para $k = 1, \dots, n$ as raízes do polinômio ortogonal no domínio discreto:

$$\sum_{i=1}^n i^{k-1} \cdot \rho_n(i) = 0 \text{ para } k = 1, \dots, n \quad (34)$$

Que seria a extensão do método clássico de colocação ao domínio discreto. Em trabalhos encontrados na literatura, como por exemplo, STEWART *et. al.* (1985) e RIBEIRO (2011), geralmente adota-se como pontos de colocação as raízes do polinômio de Hahn de grau n , sendo esses pontos idênticos aos pontos internos da quadratura de Lobatto apresentada anteriormente.

Para calcular os resíduos nos pontos da quadratura os valores de $x^{(n+1)}(s_k - 1, t)$ e $y^{(n+1)}(s_k + 1, t)$ devem ser calculados e em vista das aproximações:

$$x^{(n+1)}(s, t) = \sum_{j=0}^{n+1} l_j(s) \cdot x^{(n+1)}(s_j, t) \quad (35)$$

Como a relação de equilíbrio considerada é linear, tem-se também:

$$y^{(n+1)}(s, t) = \sum_{j=0}^{n+1} l_j(s) \cdot y^{(n+1)}(s_j, t) \quad (36)$$

Assim:

$$x^{(n+1)}(s_k - 1, t) = \sum_{j=0}^{n+1} l_j(s_k - 1) \cdot x^{(n+1)}(s_j, t) \quad (37)$$

e

$$y^{(n+1)}(s_k + 1, t) = \sum_{j=0}^{n+1} l_j(s_k + 1) \cdot y^{(n+1)}(s_j, t) \quad (38)$$

Sugerindo as definições $A_{k,j}^+ = l_j(s_k + 1)$ e $A_{k,j}^- = l_j(s_k - 1)$, resultando em:

$$x^{(n+1)}(s_k - 1, t) = \sum_{j=0}^{n+1} A_{k,j}^- \cdot x^{(n+1)}(s_j, t), \quad (39)$$

$$y^{(n+1)}(s_k + 1, t) = \sum_{j=0}^{n+1} A_{k,j}^+ \cdot y^{(n+1)}(s_j, t) \quad e \quad (40)$$

$$Res^{(n+1)}(s_k, t) = m \cdot \frac{dx^{(n+1)}(s_k, t)}{dt} - L \cdot \sum_{j=0}^{n+1} A_{k,j}^- \cdot x^{(n+1)}(s_j, t) -$$

$$V \cdot \sum_{j=0}^{n+1} A_{k,j}^+ \cdot y^{(n+1)}(s_j, t) + L \cdot x^{(n+1)}(s_k, t) + V \cdot y^{(n+1)}(s_k, t) \quad (41)$$

Como $Res^{(n+1)}(s_k, t) = 0$ para $k = 1, \dots, n$ no método da colocação, obtém-se:

$$m \cdot \frac{dx_k(t)}{dt} = L \cdot \sum_{j=0}^{n+1} A_{k,j}^- \cdot x_j(t) + V \cdot \sum_{j=0}^{n+1} A_{k,j}^+ \cdot y_j(t) - L \cdot x_k(t) - V \cdot y_k(t) \quad (42)$$

para $k = 1, \dots, n$

Sendo $x_j(t) = x^{(n+1)}(s_j, t)$ e $y_j(t) = y^{(n+1)}(s_j, t) = a \cdot x_j(t) + b$ para $k = 1, \dots, n$

$x_0(t) = x_0(t) = p(t)$ e $y_{n+1}(t) = y_{n+1}(t) = q(t)$.

Nesta dissertação, foram usados para comparação, não só os resultados obtidos por PINTO e BISCAIA (1988) como também resultados próprios obtidos quando da implementação de modelos reduzidos obtidos através da técnica da colocação ortogonal clássica.

3.2- Modelo Agregado

O método é baseado na escolha de vários "pontos de agregação" no domínio espacial do sistema distribuído. Para cada um destes pontos de agregação, "elementos de agregação" dinâmicos são atribuídos. Os sistemas discretos distribuídos que estão nos intervalos entre pontos de agregação adjacentes são tratados como no estado estacionário. Os valores nos contornos do sistema em estado estacionário, que aparecem nas equações dinâmicas da agregação dos elementos adjacentes, são calculados como junções dos estados dos elementos de agregação em ambos os lados de cada sistema em estado estacionário. O sistema assim obtido é discreto e de baixa ordem. (LINHART e SKOGESTAD, 2011)

O princípio do método é o de substituir o transporte através do sistema por um transporte instantâneo através dos intervalos em estado estacionário a partir de elementos de agregação onde a dinâmica é considerada pelas grandes capacidades dos elementos de agregação.

Para que o procedimento de redução possa ser explicado e explicitado, o procedimento é aplicado à coluna de absorção semelhante à apresentada no item anterior, que pode ser representada genericamente pelas equações:

$$m_1 \cdot \frac{dx_1(t)}{dt} = f_1[t, p(t), x_1(t), x_2(t)] \quad (43)$$

$$m_i \cdot \frac{dx_i(t)}{dt} = f_i[t, x_{i-1}(t), x_i(t), x_{i+1}(t)] \text{ para } i = 2, \dots, N - 1 \quad (44)$$

$$m_N \cdot \frac{dx_N(t)}{dt} = f_N[t, x_{N-1}(t), x_N(t), q(t)] \quad (45)$$

Sendo x_i a composição na fase líquida do estágio i , m_i o acúmulo de massa no estágio i ; f_i representa o balanço de massa transiente no estágio i e $x_0(t) = p(t)$ e $y_{N+1} = q(t)$.

(a) Seleção de pontos de agregação

No domínio espacial do sistema, n "pontos de agregação" são escolhidos. Para sistemas discretos, estes são os n índices distintos de unidades $s_j, j = 1, \dots, n$. O número e a posição dos pontos de agregação irá afetar a qualidade da aproximação dinâmica do sistema reduzido, mas não os estados estacionários, e todas as escolhas levarão a um sistema consistente.

(b) Introdução dos elementos de agregação

Em cada ponto de agregação, um "elemento de agregação" é posicionado. No caso discreto, estes elementos são apenas as unidades nos pontos de agregação com uma "capacidade" modificada Ω . Olhando para as equações 43-45, isso seria o equivalente a multiplicar o parâmetro m_i por uma constante Ω_i . No caso da coluna de absorção isso representaria um estágio com um acúmulo de massa modificado. Em LINHART e SKOGESTAD (2011), os autores apresentam duas formas de calcular o parâmetro Ω_i . Uma escolha de parâmetros 'igualmente distribuída', na qual os Ω_i são calculados dividindo-se o número total de estágios em estado estacionário existentes entre cada ponto de agregação e os pontos de agregação adjacentes por dois e somando-se um a este resultado. E, uma escolha 'otimizada' dos parâmetros, onde os Ω_i são determinados, ajustando-se a trajetória da concentração do produto de topo do modelo reduzido à trajetória do modelo completo.

(c) Aproximação dos estados estacionários entre os elementos de agregação

As equações dos outros pontos, que não os de agregação, são tratadas como em estado estacionário. No caso discreto, os termos de acumulação de todas as equações que não são representativas dos pontos onde são colocados os elementos de agregação são definidas como 0. Isto resulta em sistemas de equações algébricas que dependem das variáveis das equações dos pontos de agregação vizinhos.

Após esses passos, o seguinte sistema é obtido

$$\Omega_1 \cdot m_1 \cdot \frac{dx_1(t)}{dt} = f_1[t, p(t), x_1(t), x_2(t)] \quad (46)$$

$$\Omega_j \cdot m_{s_j} \cdot \frac{dx_{s_j}(t)}{dt} = f_{s_j} [t, x_{s_{j-1}}(t), x_{s_j}(t), x_{s_{j+1}}(t)] \text{ para } j = 2, \dots, n - 1 \quad (47)$$

$$0 = f_i[t, x_{i-1}(t), x_i(t), x_{i+1}(t)] \text{ para } i = 2, \dots, N - 1 \text{ e } i \neq s_j, j = 1, \dots, n \quad (48)$$

$$\Omega_N \cdot m_N \cdot \frac{dx_N(t)}{dt} = f_N[t, x_{N-1}(t), x_N(t), q(t)] \quad (49)$$

Em comparação com o sistema original, a forma *agregada* do sistema apresenta um número menor de equações diferenciais. No entanto, de complexidade similar à do sistema original, já que um grande número das equações diferenciais foi convertido em equações algébricas, mas o número total de equações ficou inalterado. Para se obter uma redução real da complexidade do sistema e, conseqüentemente, do esforço computacional é necessário que o sistema de equações algébricas (48), que representam os estágios considerados como em estado estacionário, seja resolvido e sua solução seja integrada ao sistema dinâmico. As soluções dos sistemas algébricos podem, caso o sistema seja linear, ser expressas como funções das variáveis de estado dos elementos de agregação vizinhos.

Após esta substituição, o seguinte modelo reduzido é obtido:

$$\Omega_1 \cdot m_1 \cdot \frac{dx_1(t)}{dt} = f_1[t, p(t), x_1(t), \theta_1(t, x_1(t), x_2(t))] \quad (50)$$

$$\Omega_j \cdot m_j \cdot \frac{dx_j(t)}{dt} = f_j \left[t, \varphi_j \left(x_{j-1}(t), x_j(t) \right), x_j(t), \theta_j \left(x_j(t), x_{j+1}(t) \right) \right]$$

para $j = 2, \dots, n - 1$ (51)

$$\Omega_N \cdot m_N \cdot \frac{dx_N(t)}{dt} = f_N \left[t, \varphi_N \left(t, x_{N-1}(t), x_N(t) \right), x_N(t), q(t) \right]$$
(52)

No presente trabalho, os resultados são comparados com os resultados obtidos através da utilização de modelos agregados nos trabalhos de LINHART e SKOGESTAD (2011) e KAMATH (2011).

3.3- Método dos Momentos

O método dos momentos parte do mesmo pressuposto assumido quando da aplicação do método da colocação ortogonal, ou seja, de que a variável de estado pode ser aproximada por uma função polinomial. A única diferença relaciona-se à forma de abordar os resíduos dos balanços descritos na seção 3.1. No método dos momentos anulam-se os somatórios dos n primeiros momentos dos resíduos. Assim:

$$\sum_{i=1}^n i^m \cdot Res^{(n+1)}(i, t) = \sum_{k=0}^{n+1} W_k \cdot s_k^m \cdot Res^{(n+1)}(s_k, t) = 0$$
(53)

Sendo s_k para $k = 1, \dots, n$ as raízes do polinômio ortogonal no domínio discreto:

$$\sum_{i=1}^n i^k \cdot (n + 1 - i) \cdot \rho_n(i) = 0 \text{ para } k = 1, \dots, n$$
(54)

Como já comentado anteriormente, família de polinômios que apresenta a propriedade acima é o polinômio de Hahn. Em RIBEIRO (2011), durante a implementação do método verificaram-se graves problemas relacionados à obtenção de valores numéricos elevados que excediam a precisão do equipamento digital utilizado tanto na geração dos

polinômios de Hahn quanto na determinação de suas raízes, principalmente quando se usam valores altos de N (o número total de estágios). Para resolver tais problemas foi necessário adotar um reescalonamento da variável contínua designativa da posição dos estágios, da forma apresentada a seguir:

$$s_i = \frac{i-1}{N} \quad (55)$$

Considerando os pontos internos $0 < s^{(1)} < s^{(2)} < \dots < s^{(n)} < 1$ e os pontos extremos $s^{(0)} = -\frac{1}{N}$ e $s^{(n+1)} = \frac{N+1}{N} = 1 + \frac{1}{N}$ como pontos de interpolação, a aproximação polinomial aplicada à variável de estado $x_i(t)$ é então:

$$x_i(t) \cong x^{(n+1)}\left(\frac{i-1}{N}, t\right) = \sum_{j=0}^{n+1} l_j\left(\frac{i-1}{N}\right) \cdot x^{(n+1)}(s^{(j)}, t) \quad (56)$$

$$s^{(0)} = -\frac{1}{N}, s^{(n+1)} = \frac{N+1}{N} = 1 + \frac{1}{N} \quad (57)$$

$-\frac{1}{N} < s^{(1)} < s^{(2)} < \dots < s^{(n)} < 1 + \frac{1}{N}$ são os pontos de interpolação internos

$$e l_j(s) = \prod_{\substack{m=0 \\ m \neq j}}^{n+1} \left(\frac{s - s_m}{s_j - s_m} \right) \quad (58)$$

O resíduo do balanço de massa no estágio i é expresso por:

$$\begin{aligned} Res_i^{(n+1)}(t) = & m \cdot \frac{\partial x^{(n+1)}\left(\frac{i-1}{N}, t\right)}{\partial t} - L \cdot x^{(n+1)}\left(\frac{i-2}{N}, t\right) - V \cdot y^{(n+1)}\left(\frac{i}{N}, t\right) \\ & + L \cdot x^{(n+1)}\left(\frac{i-1}{N}, t\right) + V \cdot y^{(n+1)}\left(\frac{i-1}{N}, t\right) \text{ para } i = 1, 2, \dots, N \end{aligned} \quad (59)$$

Assim como apresentado no método da colocação ortogonal, consideram-se as seguintes matrizes de discretização:

$A_{k,j}^+ = l_j(s^{(k)} + 1)$ e $A_{k,j}^- = l_j(s^{(k)} - 1)$, além disso adotam-se as notações simplificadas:

$$x_j(t) = x^{(n+1)}(s^{(j)}, t) \text{ e } y_j(t) = y^{(n+1)}(s^{(j)}, t) = a \cdot x_j(t) + b \quad (60)$$

$$x^{(n+1)}(s^k - 1, t) = \sum_{j=0}^{n+1} A_{k,j}^- \cdot x_j(t) \quad (61)$$

e

$$y^{(n+1)}(s^k + 1, t) = \sum_{j=0}^{n+1} A_{k,j}^+ \cdot y_j(t) \quad (62)$$

Considerando a soma dos resíduos nos estágios reais ponderado pelas n primeiras potências da variável espacial s reescalada, tem-se o *Método dos Momentos* (em termos das variáveis reescaladas) expresso por:

$$\sum_{i=1}^n \left(\frac{i-1}{N}\right)^m \cdot Res_i^{(n+1)}(t) = 0 \text{ para } m = 0, 1, \dots, (n-1) \quad (63)$$

O grau do termo interno do somatório é um polinômio em i de no máximo grau $2n$ que poderia ser calculado exatamente por quadratura tipo Lobatto para domínio discreto reescalado segundo:

$$\sum_{i=1}^n \left(\frac{i-1}{N}\right)^m \cdot Res_i^{(n+1)}(t) = \sum_{k=0}^{n+1} W_k \cdot [s^{(k)}]^m \cdot Res^{(n+1)}(s_k, t) = 0 \quad (64)$$

Sendo $s^{(k)}$ para $k = 1, \dots, n$ as raízes do polinômio ortogonal no domínio discreto reescalado, que são as raízes do polinômio da grau n em s expresso por:

$$\sum_{i=1}^n \left(\frac{i-1}{N}\right)^k \cdot \left(1 + \frac{1}{N} - \frac{i-1}{N}\right) \cdot \rho_n \left(\frac{i-1}{N}\right) = 0 \text{ para } k = 1, \dots, n \quad (65)$$

A extensão do método clássico de colocação ao domínio discreto com a variável espacial reescalada consistiria simplesmente em anular os n resíduos nas raízes do polinômio de Hahn de mesmo grau.

Nos dois casos tem-se:

$$Res^{(n+1)}(s^{(k)}, t) = m \cdot \frac{dx_k(t)}{dt} - L \cdot \sum_{j=0}^{n+1} A_{k,j}^- \cdot x_j(t) - V \cdot \sum_{j=0}^{n+1} A_{k,j}^+ \cdot y_j(t) + L \cdot x_k(t) + V \cdot y_k(t) \quad (66)$$

Como as n equações em (64) são lineares, elas podem ser reescritas com a seguinte forma abaixo:

$$Res^{(n+1)}(s^{(k)}, t) + \Psi_{k,0} \cdot Res^{(n+1)}(s^{(0)}, t) + \Psi_{k,1} \cdot Res^{(n+1)}(s^{(n+1)}, t) = 0 \quad \text{para } k = 1, \dots, n \quad (67)$$

Ou, adotando uma notação simplificada:

$$Res^{(n+1)}(s^{(k)}, t) = Res_k(t) \Rightarrow Res_k(t) + \Psi_{k,0} \cdot Res_0(t) + \Psi_{k,1} \cdot Res_{n+1}(t) = 0 \quad \text{para } k = 1, \dots, n \quad (68)$$

Em que $\Psi_0 = M^{-1} \cdot b_0$ e $\Psi_1 = M^{-1} \cdot b_1$ com $b_{m,0} = M_{m,0}$, $b_{m,1} = M_{m,1}$ e M é a matriz quadrada pela remoção da primeira e última colunas de $\varphi_{m,k} = W_k \cdot [s^{(k)}]^m$. Substituindo a equação (66) na (68), a seguinte expressão pode ser encontrada:

$$m \cdot \frac{dX_k(t)}{dt} = L \cdot \sum_{j=0}^{n+1} B_{k,j}^- \cdot x_j(t) + V \cdot \sum_{j=0}^{n+1} B_{k,j}^+ \cdot y_j(t) - L \cdot X_k(t) - V \cdot Y_k(t), \quad (69)$$

Sendo:

$$X_k(t) = x_k(t) + \Psi_{k,0} \cdot x_0(t) + \Psi_{k,1} \cdot x_{n+1}(t) \quad (70)$$

$$Y_k(t) = y_k(t) + \Psi_{k,0} \cdot y_0(t) + \Psi_{k,1} \cdot y_{n+1}(t) \quad (71)$$

$$B_{k,j}^+ = A_{k,j}^+ + \Psi_{k,0} \cdot A_{0,j}^+ + \Psi_{k,1} \cdot A_{n+1,j}^+ \quad (72)$$

$$B_{k,j}^- = A_{k,j}^- + \Psi_{k,0} \cdot A_{0,j}^- + \Psi_{k,1} \cdot A_{n+1,j}^- \quad (73)$$

As condições no contorno $x_0(t) = x_n(t) = p(t)$ e $y_{n+1}(t) = y_{N+1}(t) = q(t)$ completam o sistema de $n + 2$ equações. Observe que a colocação ortogonal tradicional é reproduzida pela adoção de $\Psi_{k,0} = 0$ e $\Psi_{k,1} = 0$. Para ambos os casos, $s^{(1)}, s^{(2)}, \dots, s^{(n)}$ são as raízes do polinômio de Hahn de grau n , sendo que os pesos do polinômio são diferentes em cada um dos métodos.

Usando a proposta de reescalonamento da variável independente discreta, as raízes do polinômio de Hahn podem ser obtidas com alta exatidão para qualquer grau, visto que um grande acúmulo de erros de arredondamento é observado quando tal reescalonamento não for empregado, mesmo para o caso de polinômios de baixa ordem. (RIBEIRO, 2011)

É preciso enfatizar que, no modelo linear, o balanço de massa global é satisfeito através do estabelecimento do 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 dos momentos a localização dos pontos de colocação não é fixa, variando com os valores dos parâmetros dos problemas (no caso estacionário) e movendo-se com o tempo (no modelo dinâmico). Além disso, em modelos com mais de uma variável dependente, os resíduos dos balanços de cada variável são distintos entre si. Essa propriedade caracteriza uma natureza adaptativa desejável para o método dos momentos, 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 devido aos resíduos se anularem nos pontos fixos de colocação o que impede de ter uma maior adaptabilidade a novas condições operacionais. (RIBEIRO, 2011).

CAPÍTULO 4: ESTUDOS DE CASOS

Neste capítulo são apresentados os casos estudados para demonstrar a aplicabilidade e eficiência do uso de modelos de ordem reduzida de colunas de destilação, tendo em vista sua implementação em tempo real. Foram tratadas colunas de destilação binária, multicomponente, tanto quanto à simulação dinâmica quanto ao perfil de composição ao longo dos estágios da coluna no estado estacionário. Também foram estudados alguns casos de otimização, inclusive a otimização dinâmica da partida de uma coluna de destilação contínua. Todos os casos tiveram seus modelos matemáticos implementados no EMSO, com o auxílio do pacote termodinâmico VRTherm acoplado ao simulador, para o cálculo das variáveis termodinâmicas.

4.1- Objetivos Gerais

Com o intuito de testar o modelo reduzido em situações de aplicações práticas da engenharia química, procurou-se na literatura exemplos diversos de colunas de destilação, de forma que estes exemplos fossem bastante abrangentes em relação aos modelos de colunas (número de estágios, componentes, etc.), aos tipos de estudos feitos (simulação de operação, perturbações, otimizações, etc.). Ao mesmo tempo, deu-se preferência aos exemplos que também se utilizaram de modelos reduzidos nas análises, para que assim fosse possível uma comparação do modelo reduzido dos momentos com alguns dos demais métodos de redução presentes na literatura. Da mesma forma, buscaram-se artigos com exemplos que pudessem ser reproduzidos ou que contivessem uma quantidade satisfatória de dados para que as comparações pudessem ser feitas.

Cada caso estudado apresenta uma particularidade no que diz respeito às comparações feitas. No entanto, numa linha geral, a ideia foi comparar a capacidade preditiva e a exatidão do modelo reduzido quando comparado com o modelo completo, ou seja, o quão próxima é a resposta do modelo reduzido em relação à do completo, tanto no

que diz respeito ao perfil de composição quanto ao cálculo das variáveis de decisão e da função objetivo. Também foi avaliado o ganho computacional advindo do uso do modelo reduzido, em outras palavras, foi analisado se a redução do tempo de CPU, necessário para as simulações, conseguido com a diminuição do número de equações diferenciais a serem resolvidas, representa um ganho prático maior do que o erro gerado pela técnica de redução, e, obviamente, se este erro é suficientemente pequeno.

Além da comparação entre o modelo reduzido pelo método dos momentos e o modelo fenomenológico completo, também foram feitas comparações deste modelo reduzido com outros da literatura (descritos no Capítulo 3), a fim de demonstrar que o método dos momentos possui uma maior adaptabilidade aos diversos tipos de problemas abordados e que, ao mesmo tempo, o método é mais robusto, conseguindo uma resposta mais próxima à do modelo completo e com um tempo de CPU menor.

Todos os exemplos foram implementados em um computador com Intel® Core™ i7-2630QM e 6GB de memória.

4.2- Caso 1 – Modelos de Coluna de PINTO e BISCAIA (1987)

Neste primeiro exemplo foram estudadas as colunas apresentadas nos casos 1, 2 e 3 de PINTO e BISCAIA (1987). Tratam-se de colunas com 33, 43 e 19 estágios internos, um condensador total e um refeedor, totalizando 35, 45 e 21 estágios, respectivamente. Neste caso serão analisadas as separações de misturas binárias com volatilidades relativas $\alpha = 1,6$ e $\alpha = 1,9$ e uma mistura multicomponente de benzeno, tolueno e p-xileno.

As especificações das três colunas e os respectivos degraus aplicados à razão de refluxo e à vazão de destilado nos três exemplos são apresentados nas Tabelas 1, 2 e 3:

Tabela 1: Especificações da coluna de destilação apresentada no exemplo 1 de PINTO e BISCAIA (1987)

Número de pratos	33
Prato de alimentação	17
Composição da carga	[0,5; 0,5]
Volatilidade relativa (α)	1,6
Vazão de alimentação (kmol/s)	24
Perfil de Pressão	Linear
Razão de refluxo	3-4
Vazão de destilado (kmol/s)	12-9,6

Tabela 2: Especificações da coluna de destilação apresentada no exemplo 2 de PINTO e BISCAIA (1987)

Número de pratos	43
Prato de alimentação	22
Composição da carga	[0,5; 0,5]
Volatilidade relativa (α)	1,9
Vazão de alimentação (kmol/s)	24
Perfil de Pressão	Linear
Razão de refluxo	2,15 - 1,864
Vazão de destilado (kmol/s)	12 - 13,2

Tabela 3: Especificações da coluna de destilação apresentada no exemplo 3 de PINTO e BISCAIA (1987)

Número de pratos	19
Prato de alimentação	9
Composição da carga (benzeno, tolueno e p-xileno)	[0,4; 0,4; 0,2]
Vazão de alimentação (kmol/s)	272
Perfil de Pressão	Linear
Razão de refluxo	1,63 - 2
Vazão de destilado (kmol/s)	165,64 - 230

As três colunas foram simuladas nos estados estacionários inicial e final, referentes aos valores da razão de refluxo e da vazão de destilado. Também foram realizadas

simulações dinâmicas visando obter o comportamento dos sistemas após a aplicação dos degraus.

O modelo reduzido foi aplicado com seis pontos de colocação internos, três em cada seção, acarretando em uma redução da ordem do modelo de 83%, 87% e 72%, respectivamente.

Para que fosse feita a avaliação da capacidade preditiva do modelo reduzido e as respectivas reduções dos custos computacionais, foram comparados os perfis de composição, obtidos com a aplicação do modelo reduzido pelo método dos momentos e com a utilização do modelo completo, nos estados iniciais, finais e na transição entre os mesmos.

A Figura 3 ilustra o perfil de composição ao longo dos estágios para a simulação do caso 1. Tanto o estado inicial quanto o estado final (após o degrau negativo na vazão e positivo na razão de refluxo) apresentaram uma ótima concordância com o modelo completo. A Tabela 4 mostra os erros obtidos com o uso do modelo reduzido. O erro apresentado é a diferença em valores absolutos entre as composições calculadas, em cada estágio, com os dois modelos e essa foi a abordagem utilizada nos demais problemas estacionários estudados nesta dissertação. Os erros no topo, no fundo e no estágio da carga foram da ordem de 10^{-4} , sendo os erros nesses estágios maiores na simulação do estado inicial. Já o erro máximo foi de 0,0102 no estágio 25 do estado final, onde a composição foi da ordem de 0,55, ou seja, o erro máximo foi de aproximadamente 2% da grandeza calculada. A soma dos erros absolutos de todos os estágios foi de 0,1144 para o estado inicial e de 0,1357 para o estado final, o que representa um erro médio de 0,0032 e 0,0038 em cada estágio, respectivamente.

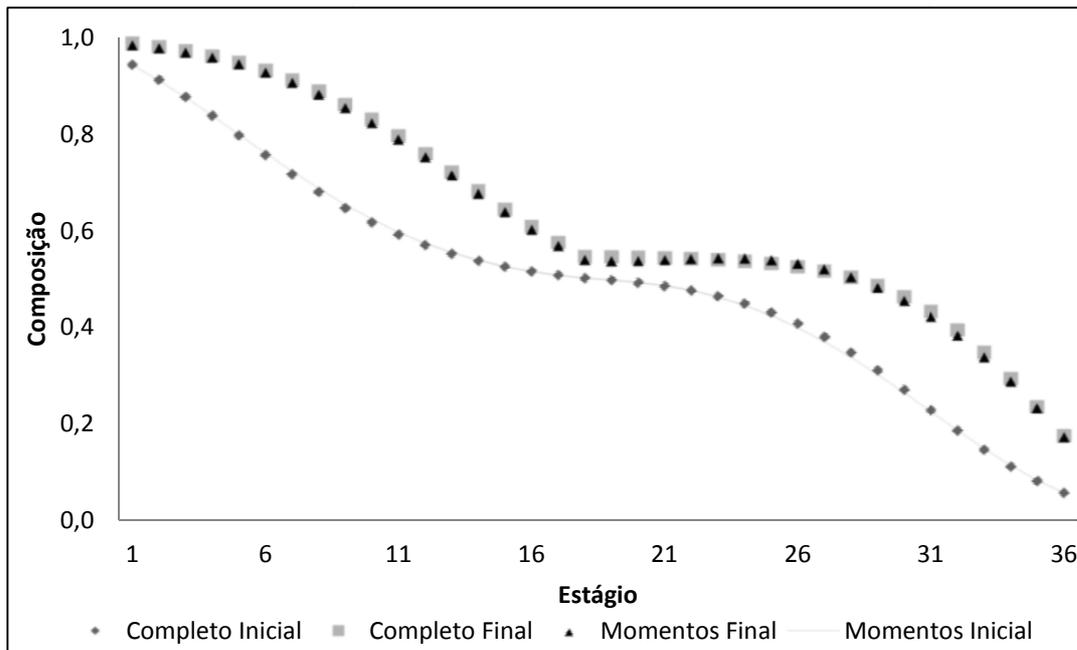


Figura 3 - Perfil de composição no estado estacionário para os estágios da coluna do exemplo 1 de PINTO e BISCAIA (1987) nos Estados Inicial e Final.

Tabela 4: Erros obtidos com a utilização do modelo reduzido na simulação estacionária dos estados inicial e final do exemplo 1 de PINTO e BISCAIA (1987)

Erro	Momentos (3x3) (Inicial)	Momentos (3x3) (Final)
Soma	0,1144	0,1357
Máximo	0,0101 (28° estágio)	0,0102 (25° estágio)
Topo	0,0006	0,0004
Fundo	0,0006	0,0003
Carga	0,0004	0,0004

A Figura 4 e a Tabela 5 apresentam os resultados obtidos para o perfil dinâmico da coluna. O erro foi calculado como sendo a diferença em valores absolutos da composição calculada em cada ponto de integração e esta foi a abordagem utilizada nos demais problemas dinâmicos estudados neste trabalho. O uso do modelo reduzido gerou uma redução de 83% no tempo de simulação, e um erro máximo de 0,2% que aconteceu durante a fase transiente. Tal erro, quando confrontado com o ganho de CPU, pode ser desprezado, uma vez que o modelo reduzido conseguiu prever o comportamento da composição de maneira adequada. Apesar de visualmente as curvas se distanciarem, um erro máximo de

0,0016, significa prever uma composição de 0,9716 ao invés de 0,9700 durante um tempo curto no qual o produto não atende às especificações, portanto um erro de 0,16% pode ser desconsiderado.

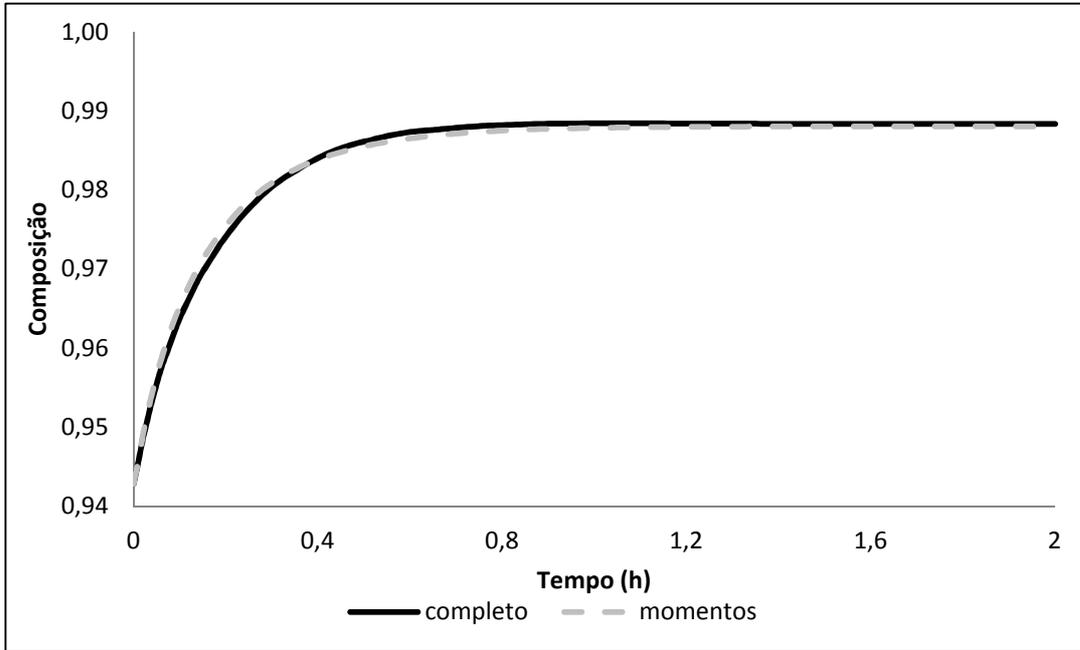


Figura 4 – Perfil da composição do produto de topo obtido com a simulação dinâmica do exemplo 1 de PINTO e BISCAIA (1987).

Tabela 5: Erro obtido com a utilização do modelo reduzido na simulação dinâmica da transição entre os estados do exemplo 1 de PINTO e BISCAIA (1987)

Erro Absoluto	Momentos (3x3)
Integral	0,1164
Máximo	0,0016
Razão do tempo de CPU (reduzido/completo)	0,17

A Figura 5 mostra o bom ajuste dos valores obtidos com o método dos momentos, já a Tabela 6 apresenta os erros obtidos. Para os estágios de topo, carga e fundo, a diferença foi semelhante nos dois estados e pode ser desprezada. A soma dos erros de 0,0630 para o estado inicial e de 0,0729 para o estado final, representam erros médios de 0,0014 e 0,0016 por estágio. O erro máximo, que foi obtido no estágio 31 do estado final, representa um

erro de 4% no valor absoluto da variável calculada. Novamente, pode-se considerar que o uso do modelo reduzido pouco afetou a qualidade da resposta.

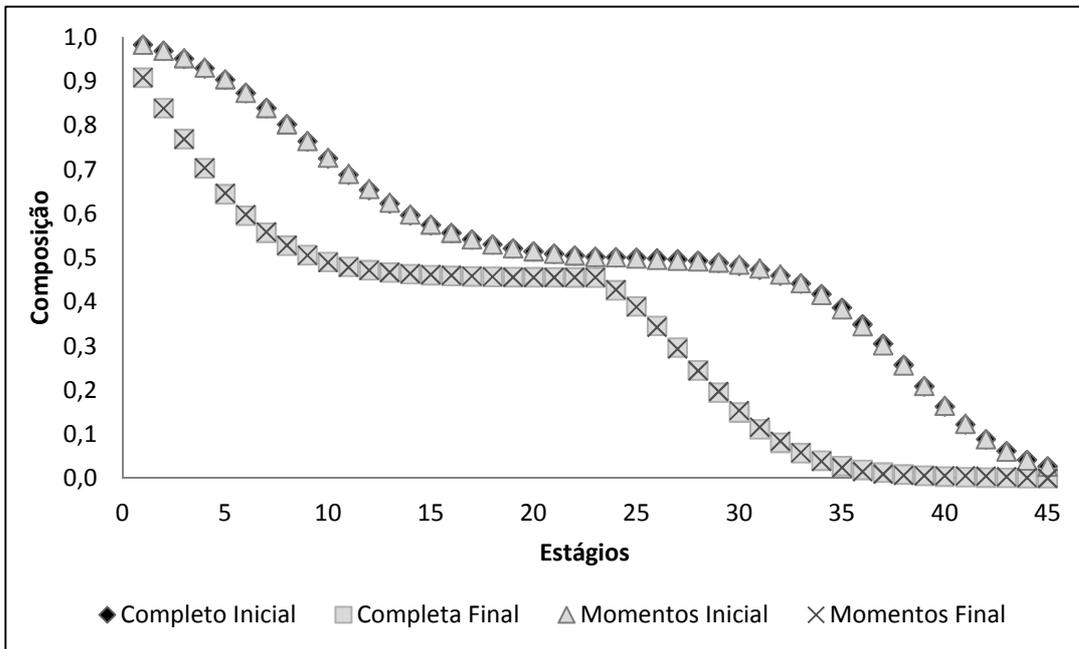


Figura 5 - Perfil de composição no estado estacionário para os estágios da coluna do exemplo 2 de PINTO e BISCAIA (1987) nos Estados Inicial e Final.

Tabela 6: Erros obtidos com a utilização do modelo reduzido na simulação estacionária dos estados inicial e final do exemplo 2 de PINTO e BISCAIA (1987)

Erro	Momentos (3x3) (Inicial)	Momentos (3x3) (Final)
Soma	0,0630	0,0729
Máximo	0,0034 (estágio 35)	0,0050 (estágio 31)
Topo	0,0002	0,0003
Fundo	0,0002	0,0002
Carga	0,0001	0,0001

Para o Perfil dinâmico do Exemplo 2, o modelo reduzido foi preciso ao encontrar a solução. As curvas do modelo completo e reduzido, reproduzidas na Figura 6, praticamente se sobrepõem. A Tabela 7 mostra o erro máximo, que é de 0,04% no início do período de regime transiente. Os ganhos computacionais são da ordem de 87%, e a perda de precisão pode ser considerada inexistente.

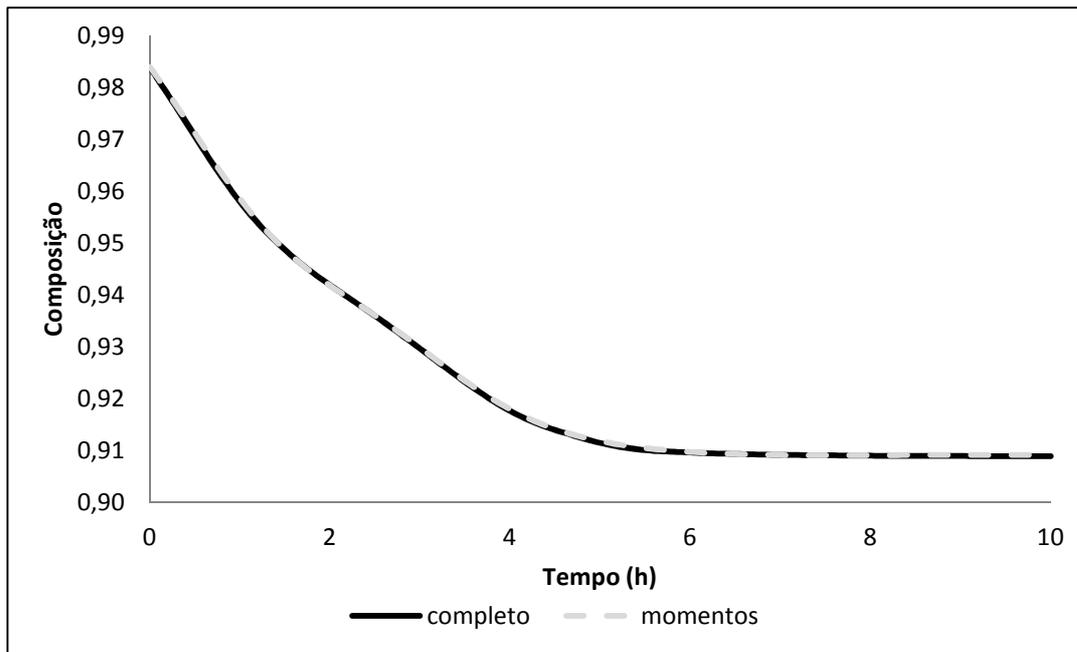


Figura 6 - Perfil da composição do produto de topo obtido com a simulação dinâmica do exemplo 2 de PINTO e BISCAIA (1987).

Tabela 7: Erro obtido com a utilização do modelo reduzido na simulação dinâmica da transição entre os estados do exemplo 2 de PINTO e BISCAIA (1987)

Erro Absoluto	Momentos (3x3)
Integral	0,0386
Máximo	0,0004
Razão do tempo de CPU (reduzido/completo)	0,13

A Figura 7 e a Tabela 8 mostram os resultados obtidos para o caso 3 – estado inicial, uma coluna ternária. Para o topo, o fundo e a carga os valores dos erros foram muito pequenos. O erro máximo (0,0065), encontrado no estágio 14 foi de aproximadamente 3% em relação à composição calculada ($\approx 0,2$). Já a soma dos erros (0,0407) representa um erro médio 0,0018 em cada estágio. Para a coluna ternária, os resultados foram até melhores que os da coluna binária. Há de se lembrar, porém, que, apesar de um componente a mais, a redução do número de estágio foi menor.

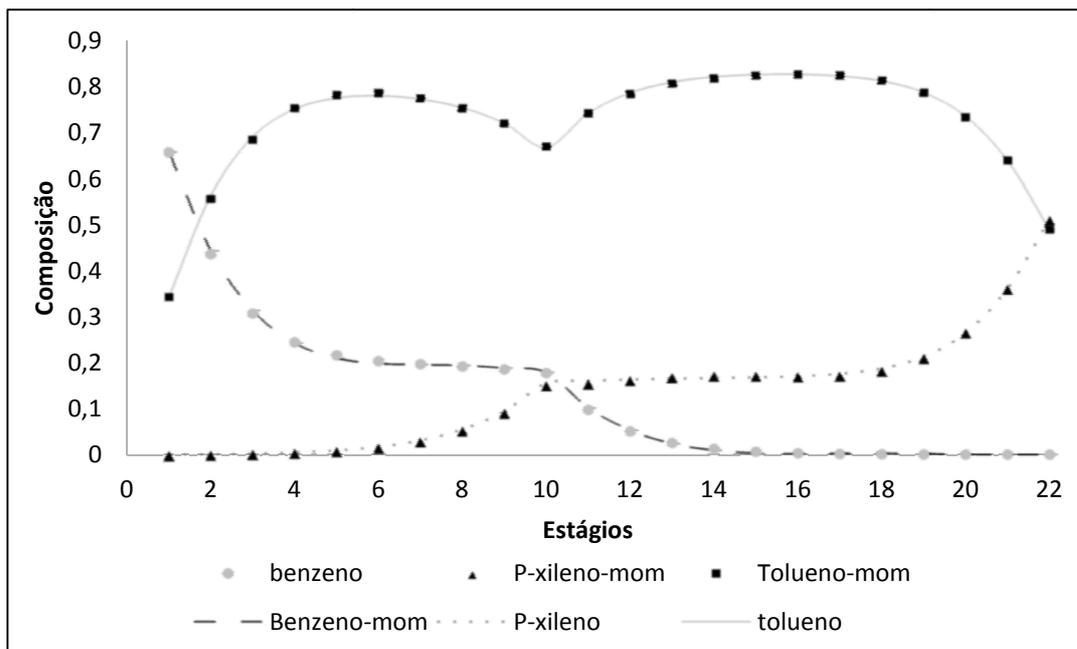


Figura 7 - Perfil de composição no estado estacionário para os estágios da coluna do exemplo 3 de PINTO e BISCAIA (1987) no Estado Inicial.

Tabela 8: Erros obtidos com a utilização do modelo reduzido na simulação estacionária do estado inicial do exemplo 3 de PINTO e BISCAIA (1987)

Erro	Momentos (3x3)
Soma	0,0407
Máximo	0,0065
Topo	0,0001
Fundo	0,0002
Carga	0,0003

Já para o estado final do exemplo 3, as previsões dos perfis de composição também foram satisfatórias, como é possível ver na Figura 8. Os erros para o topo e fundo, apresentados na Tabela 9, foram bem menores em relação ao estado inicial, da ordem de 10^{-5} , do que no caso anterior. Já para o prato de carga o erro foi similar. O erro máximo foi de 0,0105 no estágio 2 onde a composição é da ordem de 0,6, ou seja, 2% em relação ao valor calculado. A soma dos erros foi de 0,0684, o que representa um erro médio de 0,0031 em cada estágio. Os resultados obtidos para o estado final da coluna multicomponente foram bastante similares aos do caso binário.

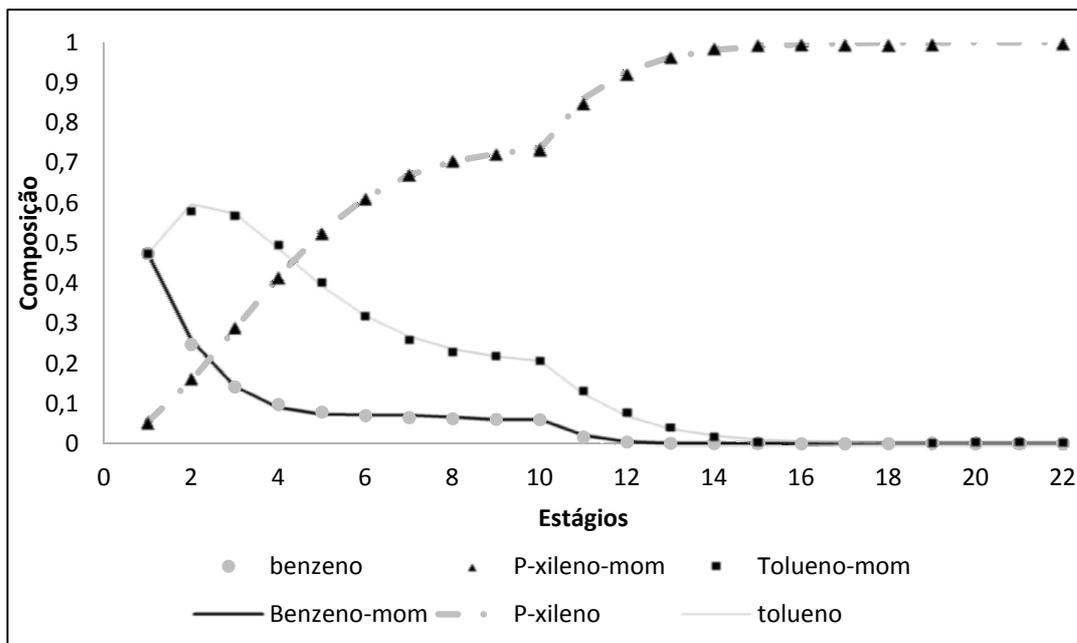


Figura 8 - Perfil de composição no estado estacionário para os estágios da coluna do exemplo 3 de PINTO e BISCAIA (1987) no Estado Final.

Tabela 9: Erros obtidos com a utilização do modelo reduzido na simulação estacionária do estado final do exemplo 3 de PINTO e BISCAIA (1987)

Erro	Momentos
Soma	0,0684
Máximo	0,0105
Topo	1×10^{-5}
Fundo	1×10^{-5}
Carga	0,0003

A Figura 9 mostra o perfil dinâmico da coluna do Caso 3 e a Tabela 10 os dados relativos ao erro e ao tempo de CPU. Assim como nos casos anteriores, o erro obtido ao usar o modelo reduzido foi muito pequeno. Neste caso, o ganho em termos de esforços computacionais foi um pouco menor, da ordem de 71%. No entanto, a resposta do modelo reduzido apresentou uma pequena oscilação no perfil entre os minutos 12 e 48. Tal diferença de comportamento entre os modelos, apesar de não desejada, pode ser desconsiderada neste caso específico, uma vez que a diferença entre os valores absolutos da variável calculada é muito pequena (no máximo 0,7%).

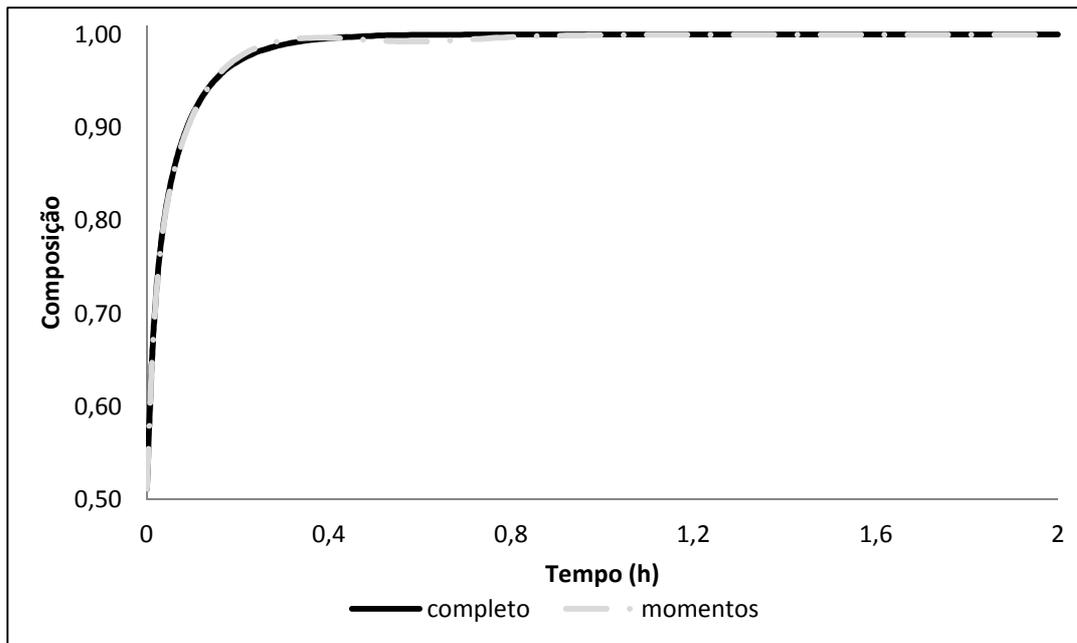


Figura 9 - Perfil da composição obtido com a simulação dinâmica do exemplo 3 de PINTO e BISCAIA (1987).

Tabela 10: Erro obtido com a utilização do modelo reduzido na simulação dinâmica da transição entre os estados do exemplo 3 de PINTO e BISCAIA (1987)

Erro Absoluto	Momentos (3x3)
Integral	0,3757
Máximo	0,0072
Razão do tempo de CPU (reduzido/completo)	0,29

Com os valores escolhidos para as condições iniciais dos estados estacionários, as soluções dos problemas, tanto com o modelo reduzido quanto com o modelo completo, foram encontradas com bastante rapidez, não sendo possível avaliar os ganhos computacionais advindos do uso do método de redução de ordem para as simulações estacionárias.

Os resultados obtidos neste exemplo foram muito similares aos alcançados por PINTO e BISCAIA (1987), quando da utilização do método da colocação ortogonal. Este estudo de caso foi usado como uma introdução do método dos momentos, nos exemplos a seguir, os resultados são mais profundamente discutidos.

4.3- Caso 2 – Modelo de Coluna de LINHART e SKOGESTAD (2011)

Neste segundo caso, foi estudada a coluna apresentada em LINHART e SKOGESTAD (2011). Trata-se de uma coluna de 92 estágios internos, um condensador total e um refeedor, totalizando 94 estágios, detalhada na Tabela 11. Neste caso é analisada a separação de uma mistura binária de iso-butanol e n-butanol.

Tabela 11: Especificações da coluna de destilação de LINHART e SKOGESTAD (2011)

Número de pratos	92
Prato de alimentação	46
Composição da carga (iso-butanol, n-butanol)	[0,34; 0,66]
Vazão de alimentação (mol/s)	155
Entalpia da carga (kJ/mol)	-22
Pressão de operação (bar)	4,8
Razão de refluxo	6,7
Vazão de destilado (mol/s)	55

Para as variáveis termodinâmicas, foram utilizadas as equações de estado de Soave-Redlich-Kwong através do VRtherm integrado ao simulador de processos EMSO.

O método baseado na anulação dos resíduos ponderados foi aplicado ao modelo de coluna de destilação em questão e os resultados foram comparados com o modelo fenomenológico completo para a simulação do perfil de composição ao longo dos estágios da coluna e para um exemplo de simulação dinâmica da mesma. Também foi realizada a comparação entre os resultados obtidos quando da aplicação de um degrau positivo de 10% na vazão de alimentação e, após alcançar o estado estacionário, a aplicação de um degrau negativo de igual magnitude, com os resultados apresentados em LINHART e SKOGESTAD (2011) com o uso de seu modelo agregado para a redução da ordem.

Tanto o método dos momentos, quanto o método da colocação ortogonal foram aplicados com seis pontos de colocação em cada seção, totalizando doze pontos em toda a coluna. Ou seja, uma redução de aproximadamente 87% da ordem do sistema em relação ao modelo completo. O bom ajuste alcançado com os métodos de redução é ilustrado na Figura 10, sendo possível verificar que as três curvas obtidas são muito próximas entre si. Já a superioridade do método dos momentos frente ao método da colocação ortogonal, com erros inferiores em praticamente todos os estágios, é evidenciada pela Tabela 12.

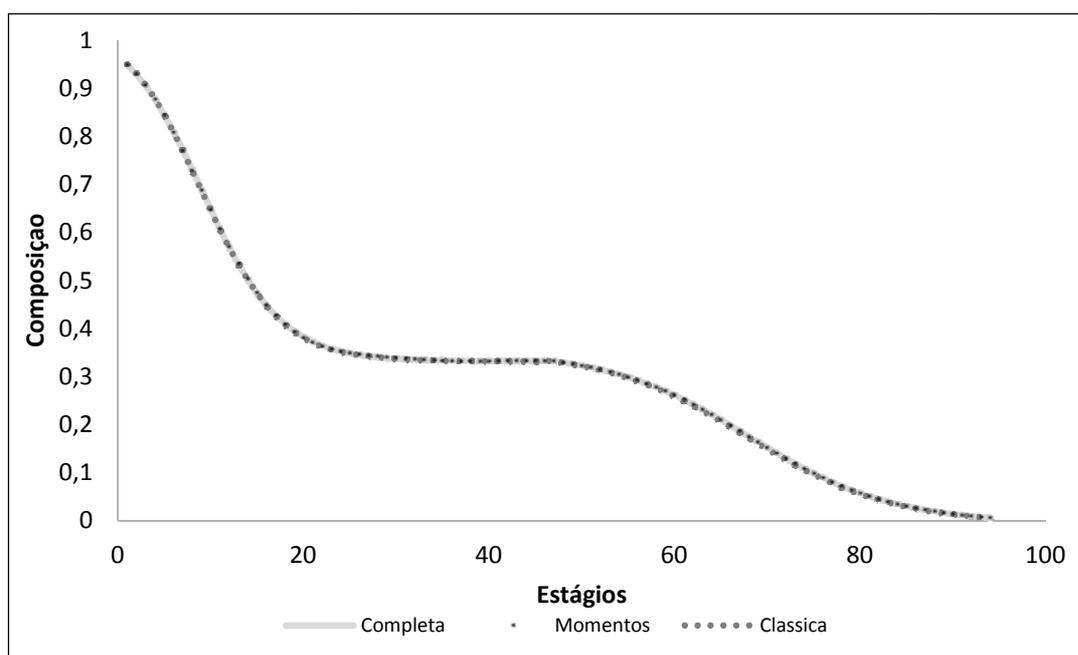


Figura 10 - Perfil da composição do produto de topo no estado estacionário para a coluna de LINHART e SKOGESTAD (2011).

A Tabela 12 nos mostra a comparação entre o erro obtido usando o método dos momentos e o método da colocação ortogonal. Ambos os métodos conseguiram representar de forma bastante satisfatória o perfil da fração molar do iso-butanol ao longo da torre de destilação. No entanto, o método dos momentos se mostrou mais preciso em todos os estágios, sendo o erro total (Soma) 2,54 vezes maior com o uso da técnica de redução baseada na colocação ortogonal clássica. A razão do tempo de simulação entre os modelos reduzidos e o modelo completo foi de 0,47 para a colocação ortogonal e 0,42 para o método dos momentos. Ou seja, além de uma maior exatidão na resposta obtida, o método dos momentos ainda levou a um esforço computacional menor.

Tabela 12: Erro obtido com a utilização dos modelos reduzidos na simulação do estado estacionário da coluna de LINHART e SKOGESTAD (2011)

Erro Absoluto	Momentos	Clássica
Soma	0,0376	0,0958
Máximo	0,0020	0,0029
Topo	3×10^{-6}	$6,5 \times 10^{-4}$
Fundo	$1,4 \times 10^{-5}$	$3,7 \times 10^{-4}$
Alimentação	0,0001	0,0014

Para um número de pontos de colocação maior do que doze, o ganho alcançado em exatidão é praticamente nenhum, quando se leva em conta o aumento dos custos computacionais. Por outro lado, com menos do que doze pontos de colocação, o aumento do erro é bastante considerável e a pouca diminuição do tempo de CPU não justifica tal estratégia. A Figura 11 e a Tabela 13 mostram com mais detalhes o efeito do número de pontos de colocação na predição da solução.

Analisando o conjunto de dados apresentados na Figura 11 e na Tabela 13 e, principalmente, o efeito do número de pontos de colocação no modelo reduzido pelo método dos momentos, nota-se que, apesar de uma redução de 7% nos custos computacionais, que embora pequena, pode ser bastante útil em termos práticos, a queda na capacidade preditiva do modelo reduzido é bastante importante (cerca de 68% de aumento para 10 pontos de colocação). O sistema se afastou da resposta real, principalmente, em tempos inferiores a 0,5 hora e, esse desvio possui uma importância muito maior para a predição do regime de operação da coluna do que a redução conseguida para o tempo de simulação.

Como é possível ver na Tabela 13, o método dos momentos se mostrou mais robusto e preciso na comparação com o método da colocação ortogonal. O erro integral foi aproximadamente 58% maior no método clássico. Além disso, a capacidade preditiva durante o período transiente também foi bem superior para o método dos momentos. O modelo reduzido pelo método da colocação ortogonal não foi capaz de prever, de maneira

satisfatória, o comportamento da coluna para tempos inferiores a 0,5 hora (o erro máximo para os dois métodos foi obtido neste região, sendo o do método clássico 1.629% maior).

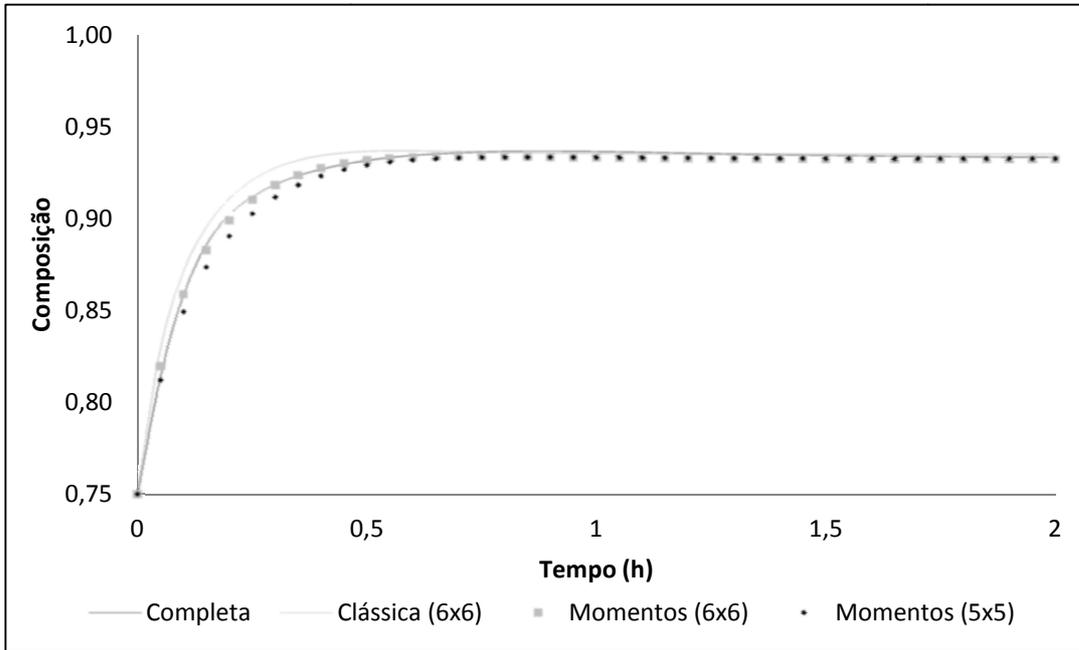


Figura 11 – Perfil obtido com a simulação dinâmica da coluna de LINHART e SKOGESTAD (2011).

Tabela 13: Erros obtidos com a utilização dos modelos reduzidos na simulação dinâmica da coluna de LINHART e SKOGESTAD (2011)

Erro Absoluto	Momentos (6x6)	Momentos (5x5)	Clássica (6x6)
Integral	0,0768	0,1290	0,1219
Máximo	0,0007	0,0088	0,0114
Razão do tempo de CPU (reduzido/completo)	0,41	0,38	0,55

Quando observamos a redução do tempo de simulação, a superioridade do método dos momentos novamente é clara, uma vez que o tempo gasto na solução com o método dos momentos foi de 41% do tempo quando utilizado o modelo completo e 55% para o método de colocação ortogonal.

A Figura 12 e a Tabela 14 mostram os resultados obtidos na comparação entre o método dos momentos e o modelo agregado para a aplicação de degraus na alimentação.

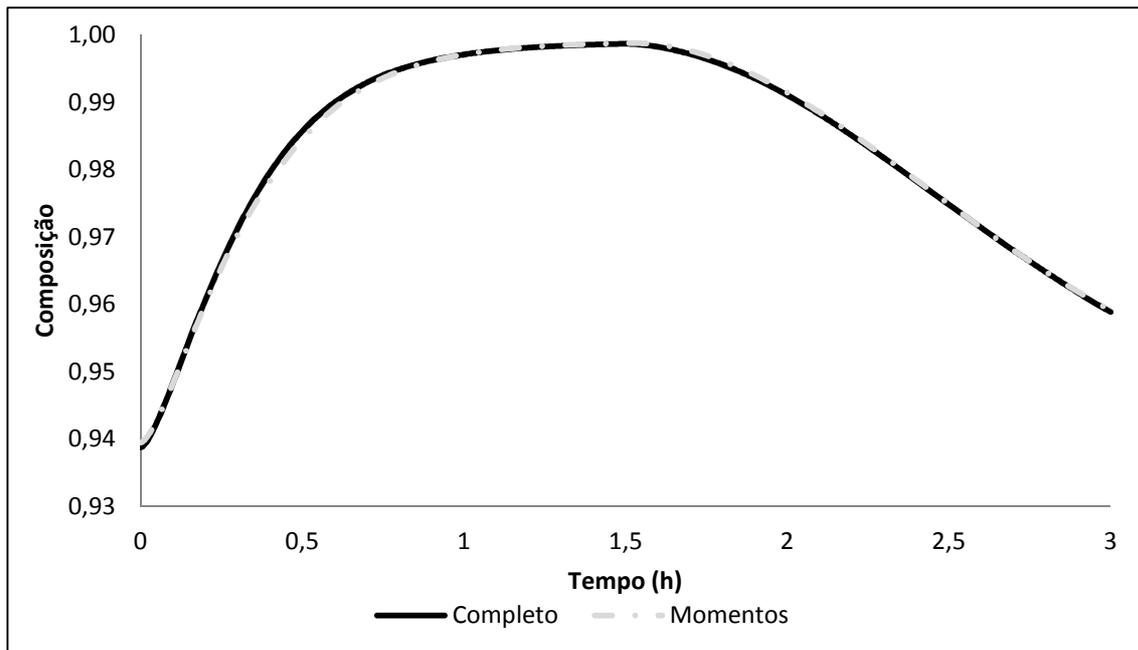


Figura 12 - Resposta do sistema a um degrau positivo de 10% na vazão de alimentação e, posteriormente, um degrau negativo de igual magnitude.

Tabela 14: Erros obtidos com a utilização dos modelos reduzidos na predição da resposta do sistema a uma perturbação na vazão de alimentação

Erro Absoluto	Momentos	LINHART e SKOGESTAD (2011)
Integral	0,2090	0,2683
Máximo	0,0013	0,0021
Razão do tempo de CPU (reduzido/completo)	0,26	0,15

Quando comparado com o modelo agregado de LINHART e SKOGESTAD (2011), o método dos momentos obteve uma resposta mais próxima ao modelo fenomenológico completo, o erro integral foi da ordem de 28% superior para o modelo agregado. O erro máximo, quando da utilização do modelo dos momentos também foi inferior, cerca de 60% menor. No entanto, um esforço computacional maior foi necessário, o que pode ser explicado pela maneira como as propriedades termodinâmicas foram calculadas.

LINHART e SKOGESTAD (2011) utilizaram uma tabela de propriedades termodinâmicas das substâncias envolvidas para, através de interpolação, conseguirem os

valores das propriedades termodinâmicas necessárias ao modelo. Esse procedimento reduz significativamente o número de equações algébricas do sistema, levando a uma redução dos custos computacionais.

No presente trabalho, utilizou-se o pacote termodinâmico *VRTherm*, acoplado ao simulador de processos *EMSO* para a realização dos cálculos das propriedades termodinâmicas requeridas através das equações de estado de Soave-Redlich-Kwong. Assim sendo, a metodologia adotada requereu um esforço computacional maior. No entanto, é mais precisa e adaptável do que o uso de tabelas termodinâmicas para substâncias específicas.

4.4- Caso 3 – Colunas Multicomponentes

No terceiro caso, foram estudadas as colunas apresentadas em KAMATH et al. (2010) e DORNEANU et al. (2008). Tratam-se de colunas com 17 e 24 estágios internos, um condensador total e um refeedor, totalizando 19 e 26 estágios, respectivamente. Neste caso são analisadas a separação de uma mistura multicomponente benzeno, tolueno e o-xileno e de uma mistura de buteno, iso-butano, propano e dodecano. As colunas são apresentadas nas Tabelas 15 e 16.

Para as variáveis termodinâmicas, foram utilizadas as equações de estado para fase líquida e vapor ideais através do *VRtherm* integrado ao simulador de processos *EMSO*.

O método dos momentos foi aplicado nos modelos de colunas de destilação apresentados nas Tabelas 15 e 16. Os resultados obtidos pela simulação foram comparados com os resultados alcançados com a utilização do modelo reduzido obtido pela técnica da colocação ortogonal (apenas a coluna de KAMATH et al. 2010) e com o modelo fenomenológico completo. Para a coluna de DORNEANU et al. (2008) fez-se a análise da sensibilidade do modelo reduzido pelos momentos em relação ao número de pontos de

colocação. Foram realizadas uma simulação do perfil de composição ao longo dos estágios das colunas no estado estacionário e uma simulação dinâmica das mesmas.

Tabela 15: Especificações da coluna de destilação apresentada no exemplo 3 de KAMATH et al. (2010)

Número de pratos	19
Prato de alimentação	9
Composição da carga (benzeno, tolueno e o-xileno)	[0,15; 0,25; 0,60]
Vazão de alimentação (kmol/s)	1
Temperatura da carga (K)	391,172
Pressão no condensador (bar)	1,05
Pressão no refeedor (bar)	1,25
Perfil da Pressão	Linear
Razão de refluxo	2.35
Vazão de destilado (kmol/s)	0,4

Tabela 16: Especificações da 3ª coluna de destilação apresentada em DORNEANU et al. (2008)

Número de pratos	24
Prato de alimentação	11
Composição da carga (isso-butano, buteno, propano e dodecano)	[0,3%; 0,6%; 95,4%; 3,7%]
Vazão de alimentação (kmol/h)	79
Temperatura da carga (K)	467
Pressão no condensador (bar)	1,2
Pressão no refeedor (bar)	1,5
Perfil da Pressão	Linear
Razão de refluxo	0,2
Vazão de destilado (kmol/h)	76

4.4.1 - KAMATH et al. (2010)

Primeiramente, o método dos momentos com diferentes números de pontos de colocação foi comparado com o modelo completo para ver qual o melhor ajuste. Após uma

análise dos resultados, optou-se por um total de sete pontos de colocação, uma vez que uma quantidade menor de pontos levou a uma perda da exatidão e a uma pequena redução dos custos computacionais e em contra partida, mais pontos de colocação não acarretaram em um ganho expressivo da exatidão quando levado em conta o maior tempo de CPU. A Figura 14 e a Tabela 18 exemplificam a situação.

Para efeito de comparação, ambos os modelos reduzidos, método dos momentos e método da colocação ortogonal foram aplicados com quatro pontos de colocação na seção de retificação e três pontos de colocação na seção de esgotamento, totalizando sete pontos em toda a coluna. Ou seja, uma redução de aproximadamente 63% da ordem do sistema em relação ao modelo completo. Os resultados são apresentados a seguir, na Figura 13 e na Tabela 17.

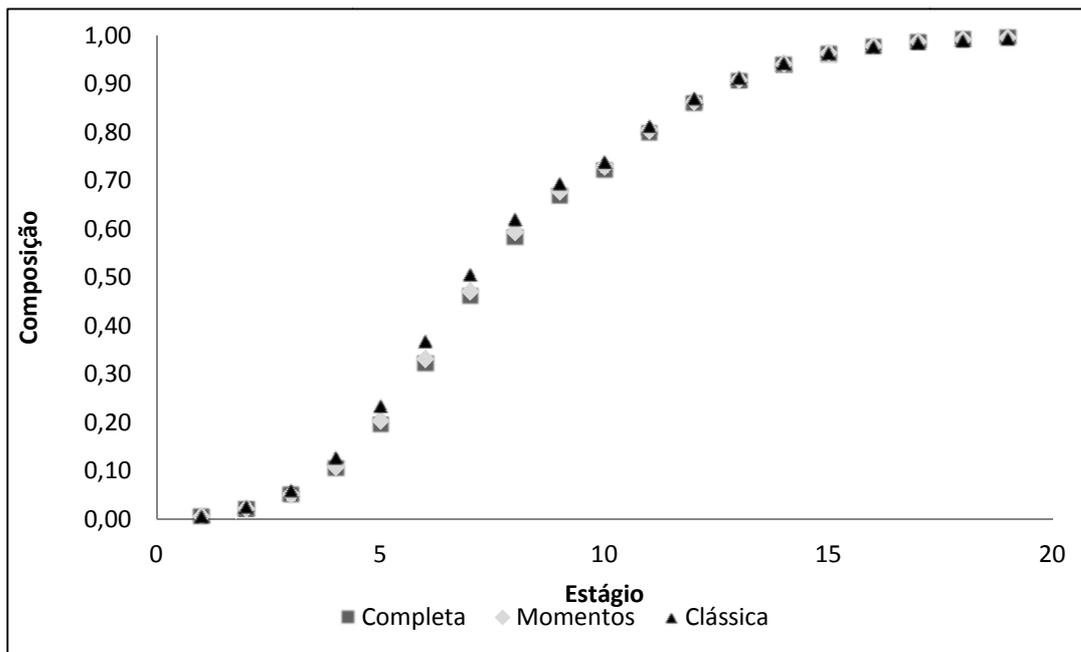


Figura 13 - Perfil da composição nos estágios da coluna do exemplo 3 de KAMATH *et. al.* (2010) no estado estacionário.

A Tabela 17 nos mostra a comparação entre o erro obtido usando o método dos momentos e o método da colocação ortogonal. O método dos momentos conseguiu representar de forma bastante satisfatória o perfil da fração molar do o-xileno ao longo da torre de destilação, enquanto o segundo apresentou um desvio considerável em comparação

ao modelo completo. O método baseado na anulação dos resíduos ponderados se mostrou bem mais preciso em todos os estágios, sendo o erro total (Soma) 3,69 vezes menor do que com o uso da técnica de redução baseada na colocação ortogonal clássica. A razão do tempo de simulação entre os modelos reduzidos e o modelo completo foi de 0,8 para a colocação ortogonal e 0,7 para o método dos momentos. A resposta obtida com a utilização do modelo reduzido pelo método dos momentos foi mais exata e a solução levou um tempo menor para ser calculada.

Tabela 17: Erros obtidos com o uso dos modelos reduzidos na simulação do estado estacionário da coluna do exemplo 3 de KAMATH et al. (2010)

Erro Absoluto	Momentos (4:3)	Clássica
Soma	0,0829	0,3055
Máximo	0,0119	0,0474
Topo	$1,4 \times 10^{-4}$	0,0016
Fundo	$1,1 \times 10^{-4}$	0,0010
Alimentação	0,0097	0,0270

A Figura 14 ilustra os resultados obtidos com a simulação dinâmica da coluna de destilação apresentada no 3º exemplo de KAMATH et. al. (2010). São mostrados os resultados obtidos com o uso do modelo completo, modelos reduzidos pela colocação ortogonal e pelo método dos momentos com sete pontos de colocação, e modelo reduzido pelo método dos momentos com seis pontos de colocação.

Analisando os resultados obtidos com diferentes números de pontos de colocação e apresentados na Tabela 18, a redução de sete para seis pontos acarretou em uma redução razão do tempo de CPU de 0,52 para 0,46 ($\approx 12\%$) e um aumento do erro Integral de 0,1033 para 0,1594 ($\approx 54\%$). Ou seja, é possível afirmar que diminuir o número de pontos de colocação para seis não se justifica, uma vez que a perda de precisão suprime o ganho computacional. É importante notar, no entanto, que mesmo com um número de pontos de colocação inferior, o método dos momentos conseguiu uma resposta mais próxima à do modelo completo do que o método da colocação ortogonal.

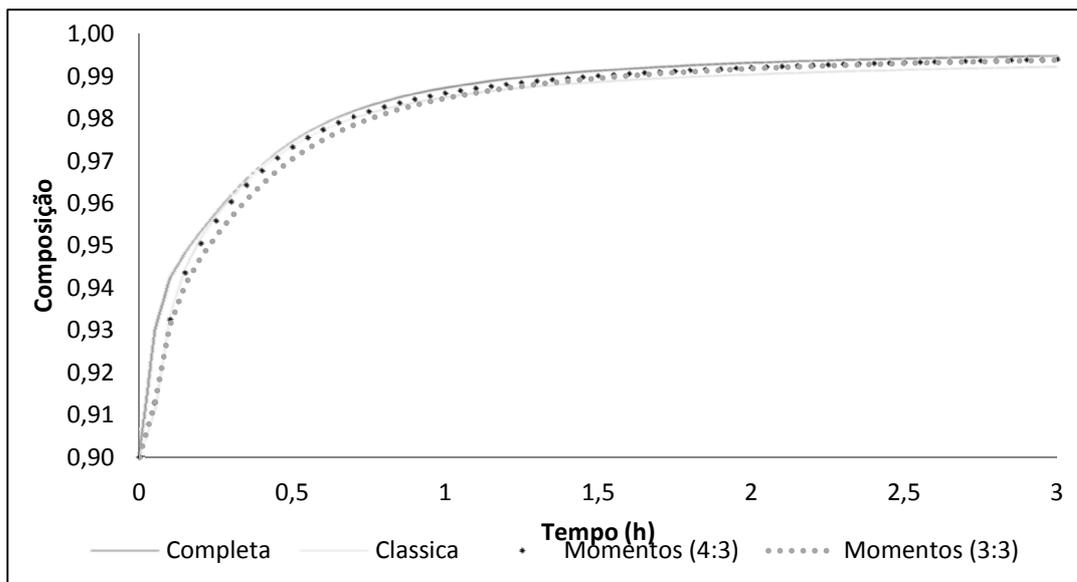


Figura 14 – Perfil de composição do produto de topo obtido com a simulação dinâmica da coluna do exemplo 3 de KAMATH et. al. (2010).

Tabela 18: Erros obtidos com o uso dos modelos reduzidos na simulação dinâmica da coluna do exemplo 3 de KAMATH et. al. (2010)

Erro Absoluto	Momentos (4:3)	Momentos (3:3)	Clássica (4:3)
Integral	0,1033	0,1594	0,1647
Máximo	0,0173	0,0175	0,0195
EE	0,0008	0,0009	0,0025
Razão do tempo de CPU (reduzido/completo)	0,52	0,46	0,66

Na comparação dos métodos usando o mesmo número de pontos de colocação, o erro total (Integral) obtido quando da aplicação do método da colocação ortogonal é 1,59 vezes maior do que quando o modelo reduzido pelo método dos momentos foi aplicado. Os erros máximos obtidos em cada um dos métodos também foram muito distintos, sendo o erro obtido pela técnica da colocação ortogonal 1,15 vezes maior do que o alcançado pela aplicação da técnica baseada na anulação dos resíduos ponderados (0,0195 contra 0,0173). Além disso, o valor do erro quando o sistema alcança o estado estacionário é bem diferente para os dois métodos, com o método baseado na anulação dos resíduos ponderados (erro de 0,0008) se mostrando bem mais preciso do que o outro método de redução (erro de 0,0025), cerca de três vezes maior.

Quando observamos a redução do tempo de simulação, a superioridade do método dos momentos é, outra vez, comprovada, uma vez que o tempo gasto na solução com o método dos momentos foi de 52% do tempo quando utilizado o modelo completo e 66% para o método de colocação ortogonal.

4.4.2 - DORNEANU et al. (2008)

Neste problema, o método dos momentos foi comparado apenas com o modelo completo. Foi escolhido o modelo com seis pontos de colocação em cada seção, 54 % de redução, uma vez que este apresentou a melhor relação entre redução de custos computacionais e manutenção da exatidão da solução.

Para efeitos de ilustração do que foi dito no parágrafo anterior, os resultados obtidos com um modelo reduzido com quatro pontos de colocação em cada seção, 70 % de redução, também foram representados nas Figuras 15 e 16 e Tabelas 19 e 20.

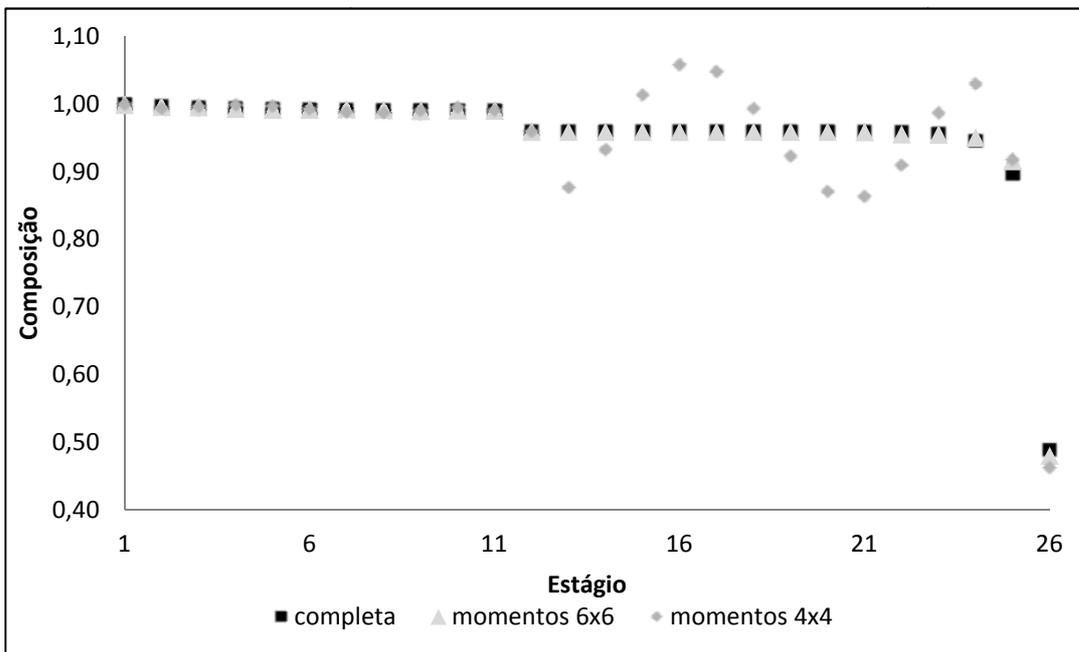


Figura 15 - Perfil da composição do produto de topo do estado estacionário da 3ª coluna de DORNEANU et al. (2008).

Tabela 19: Erros obtidos com a utilização dos modelos reduzidos na simulação do estado estacionário da 3ª coluna de DORNEANU et. al. (2008)

Erro Absoluto	Momentos (6:6)	Momentos (4:4)
Integral	0,0442	0,8438
Máximo	0,0201	0,0985
Topo	$1,9 \times 10^{-5}$	$4,5 \times 10^{-5}$
Fundo	0,0085	0,0260
Alimentação	1×10^{-4}	$4,9 \times 10^{-4}$

Nos estágios que precedem o prato de alimentação, ambos os modelos reduzidos conseguiram reproduzir o modelo completo com sucesso. No entanto, na seção de enriquecimento, o cenário foi bem distinto. Enquanto o modelo com 12 pontos de colocação foi capaz de prever com exatidão (erro máximo de 0,0201 no 25º estágio) o comportamento da coluna, o modelo com oito pontos fracassou. A oscilação da composição apresentada por este modelo acarretou um erro total 1900% maior do que o modelo de 12 pontos, inviabilizando o seu uso.

A Figura 16 e a Tabela 20 apresentam os resultados obtidos na simulação dinâmica. Ambos os modelos reduzidos foram capazes de prever o valor da composição no estado estacionário com excelente precisão. O modelo com oito pontos conseguiu uma redução de gastos computacionais aproximadamente 10% maior do que a redução alcançada com o modelo de doze pontos. Apesar de os erros absolutos obtidos pelo modelo com oito pontos não serem grandes, muito em função da escala, o modelo apresentou uma sobre-elevação não desejável, o que para efeitos de controle pode não ser adequado. Com doze pontos de colocação, foi possível conseguir uma redução de 57% no tempo de simulação e uma precisão assaz satisfatória para o comportamento do sistema em todo o tempo simulado, incluindo o período de regime transiente.

O modelo reduzido demonstrou-se adequado para o problema de alta pureza do produto, situação na qual um erro da ordem de 10^{-3} pode ser significativo.

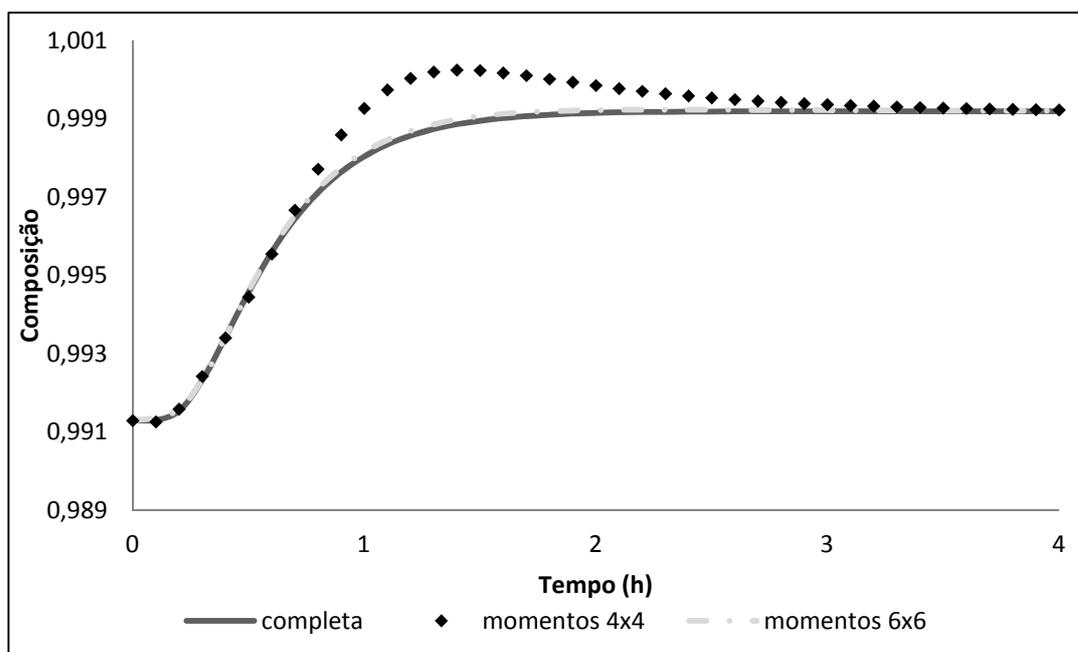


Figura 16 - Perfil obtido com a simulação dinâmica da 3ª coluna de DORNEANU et. al. (2008).

Tabela 20: Erros obtidos com a utilização dos modelos reduzidos na simulação dinâmica da 3ª coluna de DORNEANU et. al. (2008)

Erro Absoluto	Momentos (6:6)	Momentos (4:4)
Integral	0,0025	0,0196
Máximo	0,0001	0,0015
EE	$1,9 \times 10^{-5}$	$4,5 \times 10^{-5}$
Razão do tempo de CPU (reduzido/completo)	0,43	0,39

4.5- Caso 4 – Prato Ótimo de Carga

Neste caso, o objetivo é encontrar o prato de carga que maximiza a fração molar do benzeno no produto de topo da coluna do exemplo 1 de KAMATH *et al.* (2010) (Tabela 21) e do o-xileno no produto de fundo da coluna apresentada no exemplo 3 de KAMATH *et al.* (Tabela 15).

O procedimento adotado para otimizar o prato de carga foi a realização de diversas simulações dos estados estacionários da coluna de destilação alternando o prato de alimentação.

Tabela 21: Especificações da coluna de destilação apresentada no exemplo 1 de KAMATH et al. (2010)

Número de pratos	25
Prato de alimentação	-
Composição da carga (benzeno, tolueno)	[0,7; 0,3]
Vazão de alimentação (kmol/s)	100
Temperatura da carga (K)	359,6
Pressão (bar)	1,12
Razão de refluxo	0,985
Vazão de destilado (kmol/s)	69,6

Foram comparadas as soluções ótimas obtidas quando da aplicação do modelo reduzido apresentado na Seção 3.3 e com a utilização do modelo fenomenológico completo e com os três resultados obtidos por KAMATH *et al.* (2010) com o uso modelos reduzidos baseados na técnica de estágios agregados.

Para as variáveis termodinâmicas, foram utilizadas as equações de estado de Soave-Redlich-Kwong através do VRtherm integrado ao simulador de processos EMSO.

4.5.1- Exemplo 1 - KAMATH et al. (2010)

O método dos momentos foi aplicado com três pontos de colocação em cada seção, totalizando seis pontos em toda a coluna. Ou seja, uma redução de aproximadamente 76 % da ordem do sistema em relação ao modelo completo. Essa escolha foi adotada uma vez que, quando realizadas as otimizações com um número maior de pontos, até dez pontos, o acréscimo de precisão foi mínimo e, acima de dez pontos, o aumento do tempo de CPU não justificou o uso do modelo reduzido. Já para menos pontos de colocação (<6) a solução obtida não foi satisfatoriamente próxima e a redução dos custos computacionais foi mínima.

Os estágios escolhidos como candidatos a prato ótimo de carga foram os estágios 8, 9,..., 22 (KAMATH et al. 2010) e os resultados são apresentados na Figura 17 e na Tabela 22.

O estágio ótimo de carga obtido quando se utiliza o modelo fenomenológico completo é o estágio de número 15. Com a utilização do modelo reduzido com a técnica dos momentos, foi obtido o estágio 16 como solução do problema de otimização. Já com o uso dos modelos agregados em KAMATH et al. (2010), foi obtido o estágio 17 como estágio ótimo de carga. O método dos momentos propiciou uma solução mais próxima da obtida com o modelo completo e, quanto ao esforço computacional, este foi de 50 % menor para o método dos momentos quando comparado com o modelo completo, em KAMATH et al. (2010) a maior redução obtida também foi de 50%.

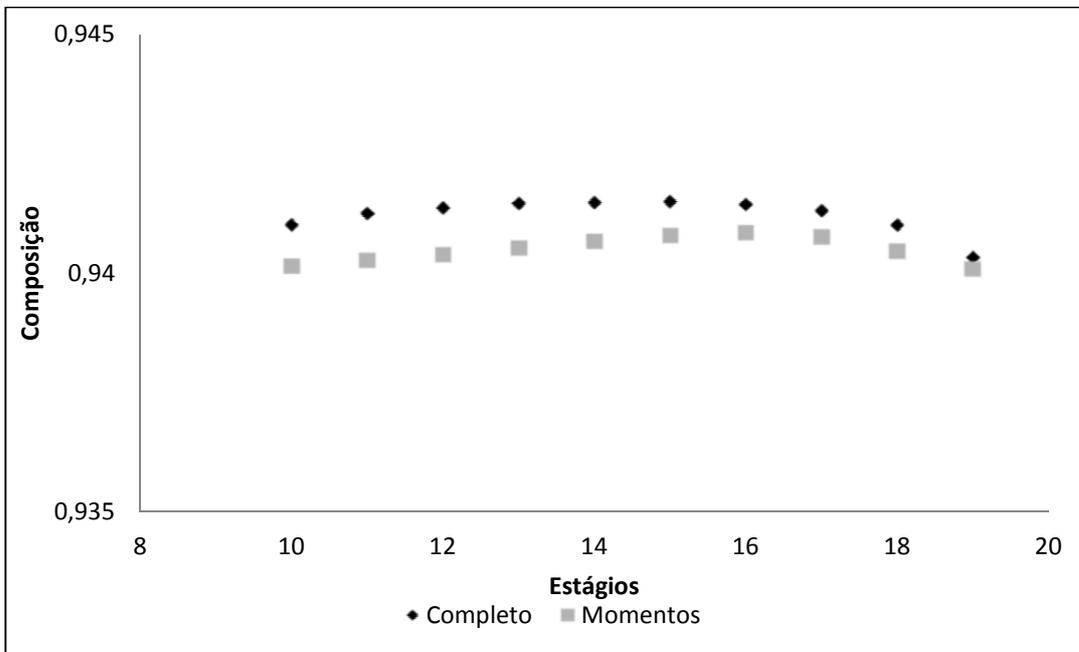


Figura 17 – Composição obtida para o produto de topo de acordo o estágio de alimentação escolhido.

Tabela 22: Resultados obtidos com o uso dos modelos reduzidos na otimização do prato de carga da coluna do exemplo 1 de KAMATH et al. (2010)

Erro Absoluto	Momentos	KAMATH et al. (2010)
Prato ótimo	16	(-, 17, 17)*
Razão do tempo de CPU (reduzido/completo)	0,5	(0,62, 0,5, 0,875)*

*Modelo Agregado – Suavizado, Solução Inteira por Arredondamento e Melhor Solução Inteira através de Busca.

A fim de avaliar a diferença que o resultado de cada modelo reduzido acarretaria na previsão do comportamento da coluna, podemos comparar os valores da composição do produto de topo obtida quando utilizamos como prato de carga, os pratos 15, 16 e 17. Com a estratégia do modelo composto, alimentação no 15º estágio, o valor da composição de benzeno no topo é de 0,94149, já com a estratégia do modelo reduzido pelo método dos momentos, a composição alcançada é de 0,94143, uma diferença de apenas 0,006%, 6×10^{-5} . Alimentando a coluna no 17º estágio, resultado dos modelos reduzidos utilizados em KAMATH et al (2010), a composição é de 0,9413, diferença de 0,02%. Embora a diferença também seja pequena em percentual, ela representa em valores absolutos uma diferença de $1,9 \times 10^{-4}$ na composição do produto, o que pode ser significativo quando se trabalha com um produto cuja especificação exige uma alta pureza.

4.5.2 – Exemplo 2 - KAMATH et al. (2010)

Neste exemplo, o método dos momentos foi aplicado com quatro pontos de colocação na seção de retificação e três pontos de colocação na seção de esgotamento, totalizando sete pontos em toda a coluna. Ou seja, uma redução de aproximadamente 63% da ordem do sistema em relação ao modelo completo. Mesmo número de pontos utilizados no Caso 3 deste trabalho, uma vez que a coluna simulada é a mesma.

Os estágios escolhidos como candidatos a prato ótimo de carga foram os estágios 5, 6, ..., 14 (KAMATH et al. 2010) e os resultados da otimização são apresentados na Figura 18 e Tabela 23.

O estágio ótimo de carga obtido quando se utiliza o modelo fenomenológico completo é o estágio de número 9. Com a utilização do modelo reduzido com a técnica dos momentos, foi obtido o estágio 9 como solução do problema de otimização. Já com o uso dos modelos agregados em KAMATH et al. (2010) foi obtido o estágio 10 como estágio ótimo de carga. O modelo reduzido pelo método dos momentos foi capaz de prever exatamente a solução do modelo completo e, com metade do tempo de simulação

necessário. Os resultados de KAMATH et al. (2010) desviaram em 10% do resultado correto.

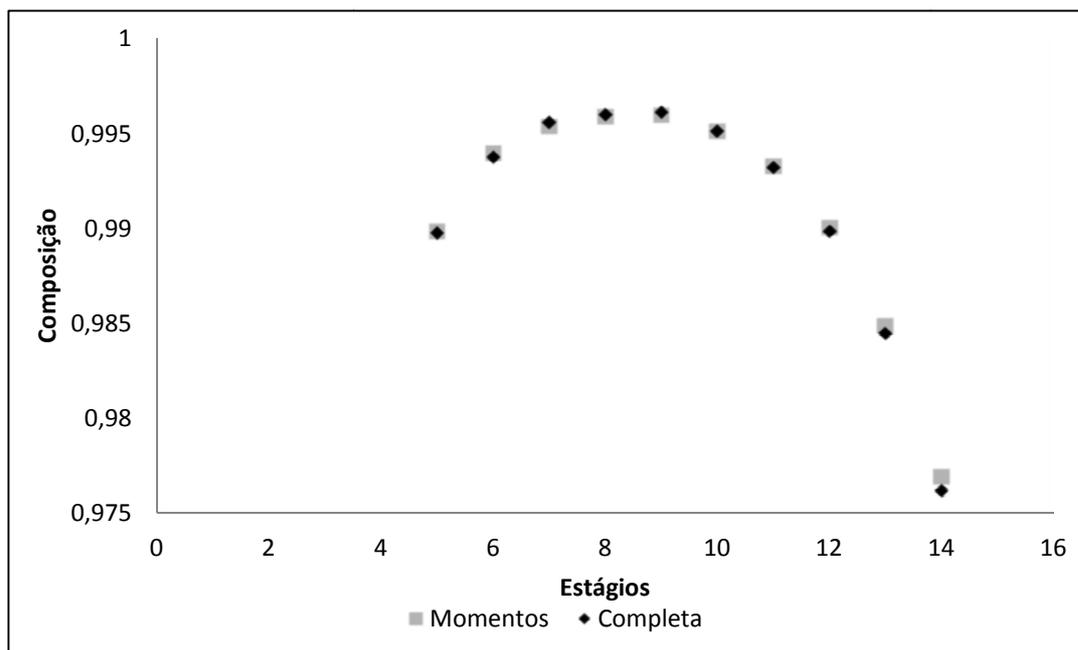


Figura 18 – Composição obtida para o produto de fundo de acordo com o estágio de alimentação escolhido

Tabela 23: Resultados obtidos com o uso dos modelos reduzidos na otimização do prato de carga da coluna do exemplo 2 de KAMATH et al. (2010)

Erro Absoluto	Momentos	KAMATH et al. (2010)
Prato ótimo	9	(-, 10, 10)*
Razão do tempo de CPU (reduzido/completo)	0,48	-

*Modelo Agregado – Suavizado, Solução Inteira por Arredondamento e Melhor solução Inteira através de Busca.

Quanto à redução dos custos de CPU, os autores utilizaram-se de um modelo com número de estágios variável, realizando também a otimização do número de estágios. Assim sendo, a redução obtida com o método dos momentos, 52%, para uma coluna com 19 estágios, não pode ser comparada com a redução obtida em KAMATH et al. (2010).

4.6- Caso 5 – Otimização das Condições de Operação

Neste problema, o objetivo é a otimização da fração molar do produto, através da mudança das variáveis operacionais, com o intuito de obter a maximização do lucro.

O problema em si, foi a obtenção da menor razão de refluxo que proporcionasse uma composição de no mínimo 0,99 para o produto. Foram otimizadas a coluna apresentada por KAMATH et al. (2010), primeiro caso de estudo (Tabela 21), e por PINTO e BISCAIA (1989), exemplos 1 e 2 (Tabelas 1 e 2).

Aqui, foram realizadas comparações entre os resultados alcançados com a aplicação dos modelos reduzidos pelo método dos momentos com os resultados obtidos quando da aplicação do modelo fenomenológico completo. No caso específico da coluna de KAMATH et al. (2010), os resultados foram comparados com os apresentados no artigo, referentes à aplicação de um modelo agregado.

Neste caso as variáveis livres escolhidas foram a razão de refluxo (RR) e a vazão de destilado (D). A função objetivo, apresentada em KAMATH *et al.* (2010), a ser maximizada é a seguinte:

$$F_{obj} = Lucro = D - 50 \times RR \quad (74)$$

$$Restrição = x_{produto} > 0,99 \quad (75)$$

Matematicamente, o problema consiste em maximizar a função objetivo obedecendo à restrição.

Para as variáveis termodinâmicas, foram utilizadas as equações de estado de Soave-Redlich-Kwong através do VRtherm integrado ao simulador de processos EMSO.

5.5.1 – Caso de Estudo 1 – KAMATH et al. (2010)

Neste caso, o método dos momentos foi aplicado com três pontos de colocação em cada seção, totalizando seis pontos em toda a coluna. Por se tratar da mesma coluna do caso 4, item 4.5.1, o mesmo número de pontos de colocação foi utilizado. Ao todo, foi alcançada uma redução de 76 % na ordem do sistema em relação ao modelo completo.

Foram comparados os resultados obtidos pelo uso do método de redução de ordem baseado na anulação dos resíduos ponderados, com o modelo completo e com o modelo reduzido apresentado em KAMATH et al. (2010). Os resultados são apresentados na Tabela 24.

Ao comparar os resultados obtidos quando da aplicação do método dos momentos com os resultados do modelo completo, nota-se que o erro no cálculo da razão de refluxo mínima necessária para satisfazer a função objetivo ficou em 0,20 %, já para a vazão de destilado máxima, este erro foi de aproximadamente 0,30 %. Ao avaliar a função objetivo, o desvio foi algo próximo a 0,54 %.

Tabela 24: Resultados obtidos com a otimização das variáveis de controle para a operação em regime estacionário da coluna de destilação do exemplo 1 de KAMATH et. al. (2010)

	Completa	Momentos	KAMATH et. al. (2010)
RR	0,985	0,987	(0,975; 0,978; 0,978)*
D	69,6	69,8	70,707
F _{obj}	20,34	20,45	(21,96; 21,82; 21,82)
Razão do tempo de CPU (reduzido/completo)	-	0,33	(0,62, 0,5, 0,875)*

*Modelo Agregado – Suavizado, Solução Inteira por Arredondamento e Melhor solução Inteira através de Busca.

É possível perceber que devido aos desvios relativamente pequenos, o modelo reduzido foi perfeitamente capaz de reproduzir a resposta do modelo completo com uma exatidão muito boa e com uma redução do tempo de CPU na ordem dos 67%, justificando assim a sua utilização em problemas de otimização estacionária.

Já para os modelos reduzidos de KAMATH et al. (2010), os erros atingidos foram de (1%; 0,7%; 0,7%) para a razão de refluxo com cada um dos modelos, 1,6% para a vazão de destilado e (8%; 7,3%; 7,3%) para a função objetivo com a utilização dos três modelos.

Ao se comparar os resultados de KAMATH et al. (2010) com os resultados obtidos no presente trabalho, é possível demonstrar a superioridade do método dos momentos frente ao modelo agregado ora proposto por KAMATH et al. (2010), uma vez que a resposta obtida foi mais próxima daquela alcançada quando do uso do modelo fenomenológico completo e ainda com um custo computacional bem menor.

5.5.2 – Exemplo 1 – PINTO E BISCAIA (1987)

O método dos momentos foi aplicado com três pontos de colocação em cada seção, totalizando seis pontos em toda a coluna, de acordo com o caso 1, exemplo 1, deste trabalho, o mesmo número de pontos de colocação foi utilizado. Acarretando em uma redução de 83 % na ordem do sistema em relação ao modelo completo.

Foram comparados os resultados obtidos pelo uso do método de redução de ordem baseado na anulação dos resíduos ponderados com o modelo completo. Os resultados são apresentados na Tabela 25 a seguir.

Tabela 25: Resultados obtidos com a otimização das variáveis de controle para a operação em regime estacionário da coluna de destilação do exemplo 1 de PINTO e BISCAIA (1987)

	Completa	Momentos
RR	4,272	4,256
D	11,883	11,900
F _{obj}	7,611	7,644
Razão do tempo de CPU (reduzido/completo)	-	0,75

Os resultados alcançados evidenciam a exatidão e o poder de previsão do modelo reduzido. A diferença entre a solução obtida com o uso dos dois modelos foi pequena. Para a razão de refluxo o erro foi de 0,4% e para a vazão de destilado o erro foi de 0,1%. Os valores encontrados para a função objetivo também divergiram muito pouco, diferença de 0,4 %.

O modelo reduzido foi capaz de prever a resposta do sistema e encontrar os valores ótimos de RR e D que garantem o maior lucro durante a operação, e ademais, conseguiu uma redução do tempo de CPU de aproximadamente 25%.

5.5.3 – Exemplo 2 – PINTO E BISCAIA (1987)

Neste exemplo, método dos momentos foi aplicado com cinco pontos de colocação em cada seção, totalizando 10 pontos em toda a coluna. Por se tratar da mesma coluna do exemplo 2 do caso 1 deste trabalho, o mesmo número de pontos de colocação foi utilizado. Assim sendo, uma redução de 78 % na ordem do sistema em relação ao modelo completo foi obtida.

Foram comparados os resultados obtidos pelo uso do método de redução de ordem baseado na anulação dos resíduos ponderados com o modelo completo. Os resultados são apresentados na Tabela 26 a seguir.

Tabela 26: Resultados obtidos com a otimização das variáveis de controle para a operação em regime estacionário da coluna de destilação do exemplo 2 de PINTO e BISCAIA (1987)

	Completa	Momentos
RR	2,211	2,209
D	11,908	11,863
F _{obj}	9,697	9,654
Razão do tempo de CPU (reduzido/completo)	-	0,77

Assim como nos dois exemplos anteriores, a predição feita pelo modelo reduzido foi bastante precisa. Os erros obtidos foram de 0,1%, 0,4% e 0,5% para a razão de refluxo, a vazão de destilado e para a função objetivo, respectivamente. Essas diferenças podem ser consideradas pequenas frente a redução de 23% do esforço computacional.

Os três exemplos aqui abordados não deixam dúvidas a respeito do grande potencial do modelo reduzido pelo método dos momentos ser empregado em problemas de otimização estacionária. Os erros encontrados na previsão das variáveis de estado e do

valor máximo da função objetivo foram muito pequenos e, por outro lado, os ganhos computacionais foram relevantes.

4.7- Caso 6 – Redução do Tempo de Regime Transiente

Neste exemplo é ilustrada partida de uma coluna de destilação através de uma estratégia bem simples e que visa diminuir o tempo de regime transiente. Nos casos 7 e 8, que são tratados nos itens posteriores, a otimização propriamente dita do *start-up* de colunas é abordada. Basicamente, o procedimento consiste em manter os valores das variáveis de controle (razão de refluxo e vazão de destilado) em valores que levem ao lucro zero, segundo a equação de lucro (eq. 74) até que a fração molar desejada para o produto (eq. 75), seja atingida e então aplicar os valores de estado estacionário desejados para as variáveis de controle.

Foi comparado o resultado obtido quando da aplicação do modelo reduzido pelo método dos momentos com o resultado advindo da simulação do modelo completo a fim de se avaliar a exatidão e adaptabilidade do modelo reduzido e a redução dos custos computacionais. Também foram comparadas as respostas obtidas para o perfil de composição pelos dois modelos com o perfil obtido pela aplicação direta dos valores de estado estacionário desejado para que fosse possível uma comparação entre os tempos de regime transiente.

Por se tratar da mesma coluna do caso 4, item 5.4.1, a mesma quantidade de pontos de colocação foi adotada, ou seja, três pontos de colocação em cada seção, totalizando seis pontos em toda a coluna. Acarretando em uma redução de 76 % na ordem do sistema em relação ao modelo completo.

A Figura 19 ilustra os perfis de composição obtidos. Com o uso da estratégia descrita anteriormente, o tempo de regime transiente durante a partida da coluna foi de 6 minutos, enquanto que com a aplicação direta dos valores da razão de refluxo e de vazão de

destilado correspondentes ao estado estacionário desejado, o tempo foi de aproximadamente 50 minutos. Ou seja, uma redução de 88% no tempo de partida.

As diferenças entre os valores obtidos para a razão de refluxo e vazão de destilado quando da aplicação do modelo reduzido e do modelo completo foram insignificantes. No entanto, a redução do tempo de CPU foi de aproximadamente 70%. Ou seja, além de proporcionar uma grande redução dos custos computacionais, o modelo reduzido foi capaz de manter a exatidão da solução.

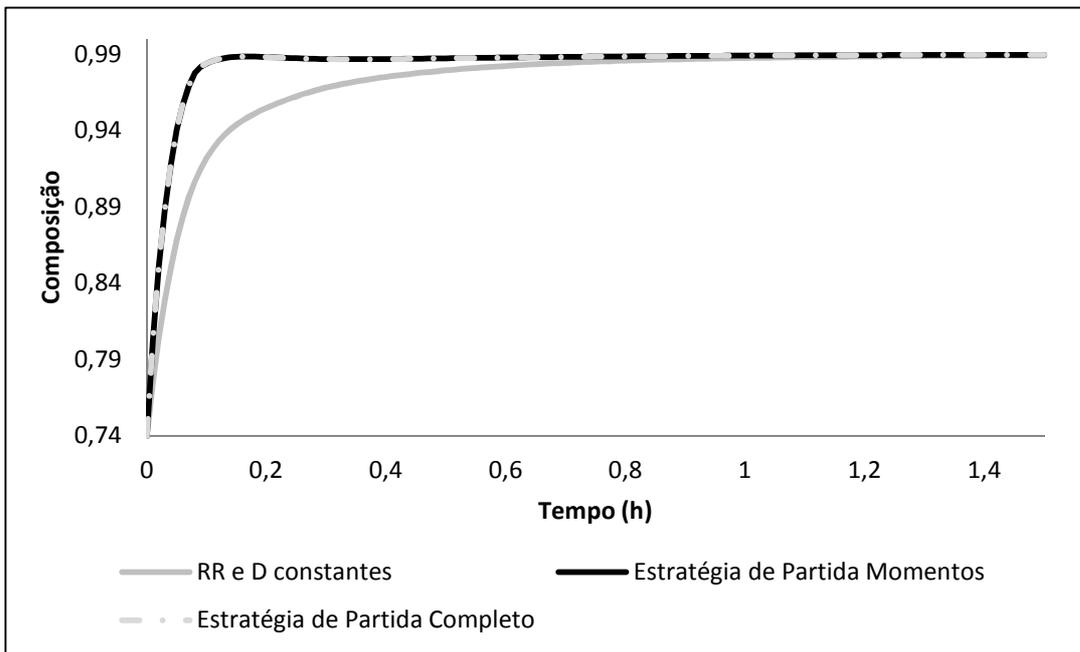


Figura 19 – Comparação dos perfis da composição do produto de topo com a utilização de valores constantes para D e RR e com a utilização dos valores de D e RR que levam ao lucro zero.

Isso feito, o uso do modelo reduzido se mostrou capaz de reproduzir o comportamento do sistema durante o regime transiente mesmo com a alteração das variáveis de controle. Assim sendo, a tentativa de usá-los em otimizações dinâmicas se mostra pertinente.

4.8- Caso 7 – Otimização da Partida (SCHRODER e MENDES, 1999)

O objetivo deste exemplo foi a redução do tempo do regime transiente durante a partida da coluna. Para tal, foi abordada a coluna apresentada por SCHRODER e MENDES (1999), detalhada na Tabela 27.

Decidiu-se fazer uma discretização no tempo, das equações diferenciais do modelo, a fim de que fosse possível a resolução do problema com a utilização dos pacotes otimizadores de problemas estacionários que já se encontram no simulador de processo EMSO.

Tabela 27: Especificações da coluna de destilação de SCHRODER e MENDES (1999)

	Estado Inicial	Estado Final
Número de pratos	40	-
Prato de alimentação	21	-
Composição da carga	0,5	-
x_D	0,9	0,99
D/F	0,555	0,5
L/F	2,737	2,706
Termodinâmica	$\alpha \cdot x_i$ $(1 + (\alpha - 1) \cdot x_i)$	-

Primeiramente, introduzimos o tempo normalizado τ , sendo:

$$\tau = \frac{t}{t^f} \quad (76)$$

Com t^f sendo o parâmetro desconhecido que representa o tempo do regime transiente.

Assim, o problema consiste em minimizar o parâmetro do tempo de regime transiente t^f necessário para conduzir a composição do destilado x_D do valor inicial em $\tau=0$

até o estado desejado em $\tau=1$. Aqui, as variáveis de controle escolhidas foram a vazão de destilado D e a taxa de vapor que entra no condensador V_1 .

Em termos matemáticos, o problema consiste em minimizar a função objetivo apresentada em SCHRODER e MENDES (1999), obedecendo às restrições impostas às variáveis de controle apresentadas na Tabela 28:

$$F_{obj} = \delta \cdot t^f + (1 - \delta) \cdot \gamma \cdot (x_{D(\tau=1)} - x_D^{est})^2 \quad (77)$$

sendo $\delta=10^{-6}$ e $\gamma=10^{-5}$ parâmetros apresentados no trabalho de SCHRODER e MENDES (1999).

Tabela 28: Restrições às Variáveis de Controle (kmol/min)

V_{min}	3,0
$V_{máx}$	3,5
D_{min}	0,0
$D_{máx}$	0,755

Foram comparadas as soluções ótimas obtidas quando da aplicação do modelo reduzido baseado na anulação dos resíduos ponderados e com a utilização do modelo fenomenológico completo.

Para que fosse possível resolver o problema de otimização dinâmica no ambiente EMSO, foi feita a discretização, pelo método de Euler explícito, das equações diferenciais de ambos os modelos, completo e reduzido. O número de passos foi ajustado para que o modelo discretizado representasse de forma satisfatória o modelo contínuo. As curvas comparativas são apresentadas nas Figuras 20 e 21.

Ao observar os gráficos é possível notar que a discretização com 20 passos foi suficiente para que o modelo discreto fosse capaz de reproduzir o modelo contínuo com um

grau de exatidão bastante confiável, tanto para o modelo completo quanto para o modelo reduzido.

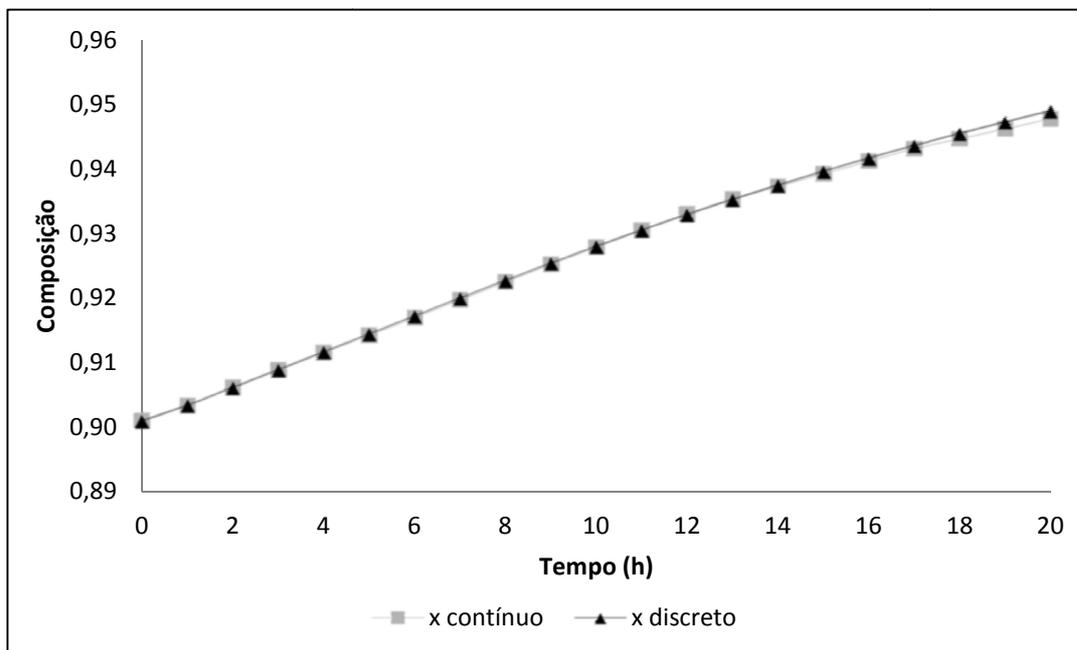


Figura 20 – Comparação do perfil de composição obtido com a simulação do modelo completo contínuo com o modelo completo discreto no tempo com 20 passos de discretização.

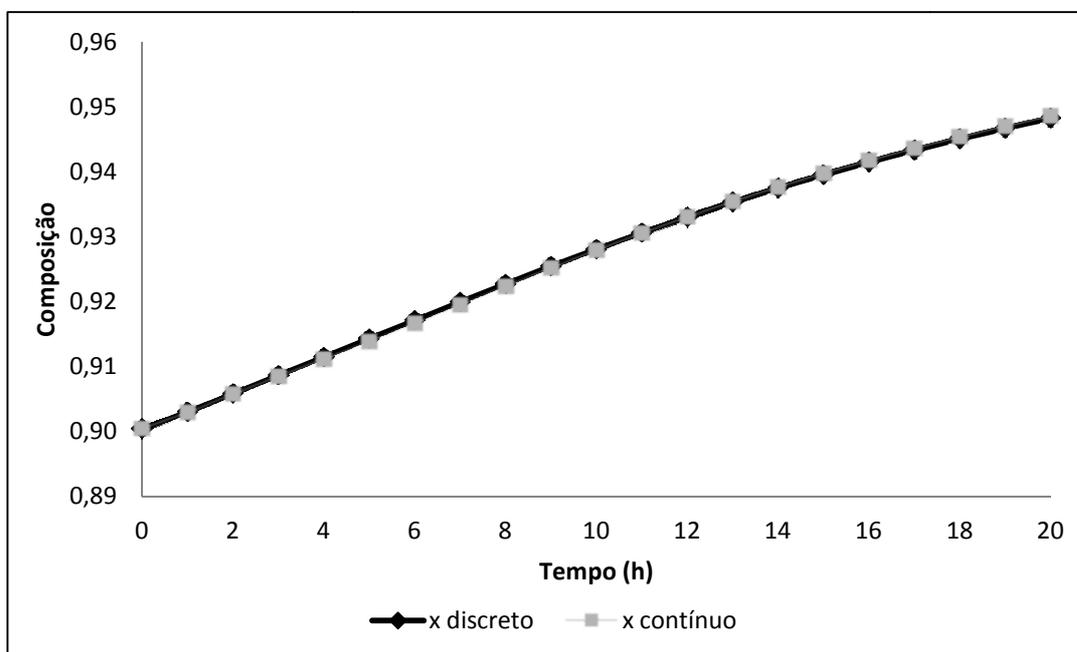


Figura 21 - Comparação do perfil de composição obtido com a simulação do modelo reduzido contínuo com o modelo reduzido discreto no tempo com 20 passos de discretização.

A estratégia ótima obtida para a razão de refluxo foi na verdade a adoção de um valor praticamente constante para a variável de controle. O resultado foi bastante similar para os dois modelos, sendo o erro máximo de aproximadamente 0,3%, comparando o modelo reduzido dos momentos com o modelo completo, como mostra a Figura 22.

Analisando os resultados da otimização, apresentados na Tabela 29, é possível afirmar que o valor encontrado para o parâmetro t^f foi o mesmo para ambos os modelos. A diferença de 0,02 encontrada significa em termos de tempo, 1,2 segundos em um período de 10 minutos e pode ser desprezada. Quanto aos valores da Função Objetivo, os valores obtidos quando a coluna foi simulada com as duas estratégias foi bem próximo, mostrando que a estratégia obtida pelo método dos momentos não só foi próxima em valores absolutos da razão de refluxo, mas também quanto à localização do ponto de mínimo buscado como solução.

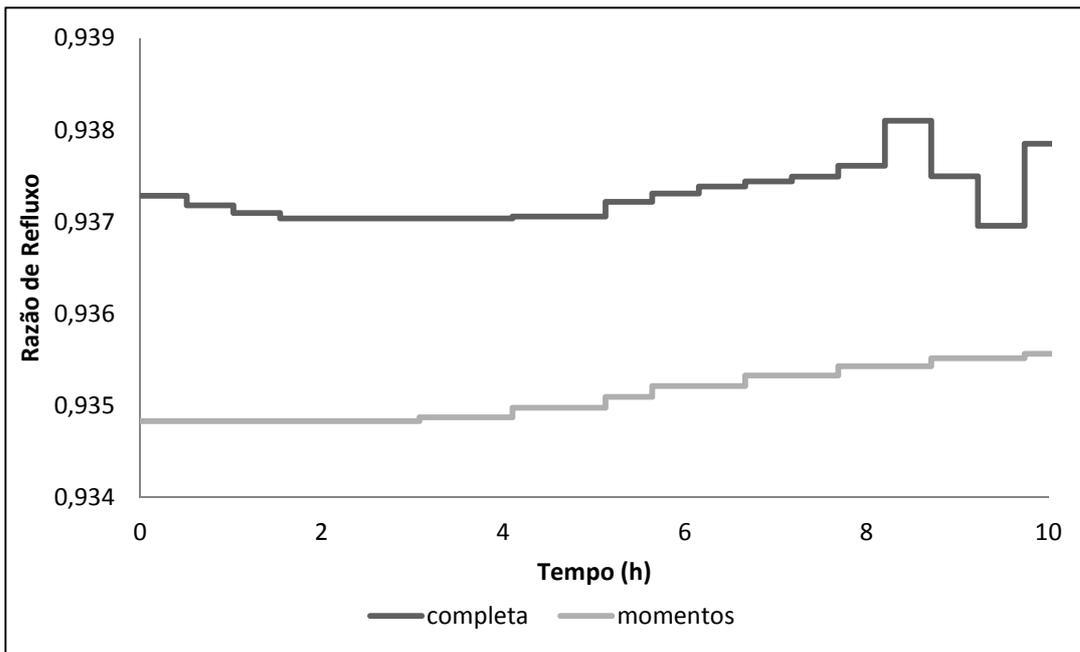


Figura 22 – Estratégia obtida para a razão de refluxo a fim de minimizar o tempo de partida da coluna de SCHRODER e MENDES (1999).

Quando observamos a redução do tempo de otimização, novamente as vantagens do modelo reduzido são evidenciadas. A solução com exatidão assaz satisfatória foi obtida com uma redução de 39% do tempo de CPU.

Tabela 29: Resultados da otimização da estratégia da razão de refluxo para minimizar o tempo de partida da coluna de SCHRODER e MENDES (1999)

	Completa	Momentos
t^f	10,04	10,02
F_{obj}	0,074	0,091
Razão do tempo de CPU (reduzido/completo)	-	0,61

Devido aos valores bastante próximos para a razão de refluxo, ao se usar o perfil obtido com a utilização do modelo reduzido para a simulação do modelo completo, e vice-versa, a trajetória obtida é praticamente a mesma. A seguir, a Figura 23 apresenta a trajetória ótima para a composição do produto de topo durante o regime transiente.

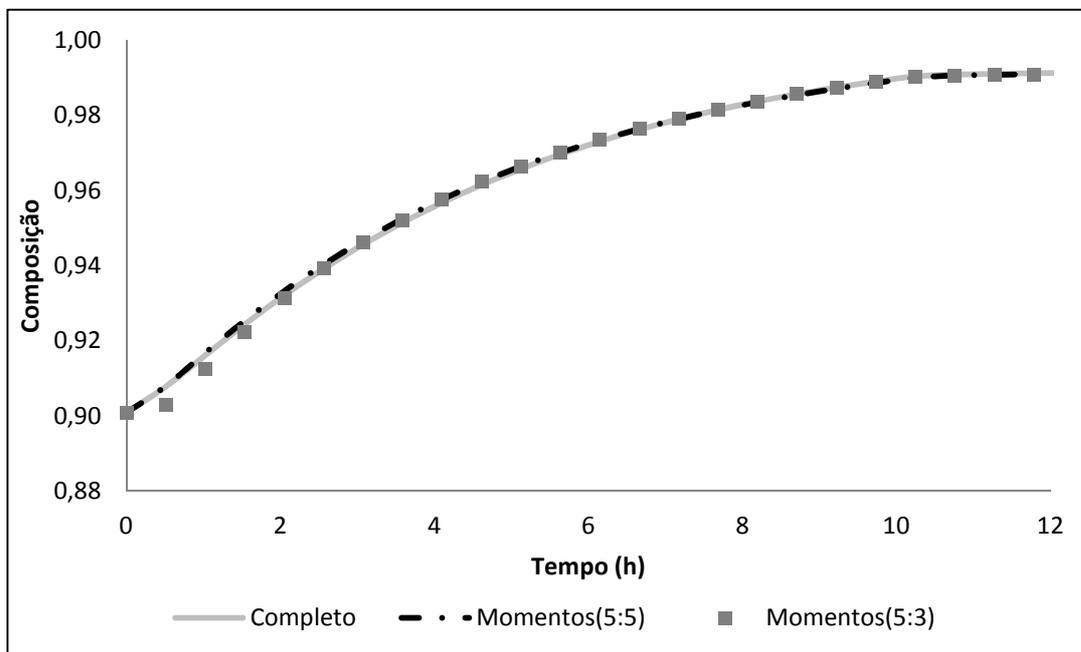


Figura 23 – Perfil de composição do produto de topo quando utilizada a estratégia ótima obtida para a razão de refluxo.

Pela análise da Tabela 30 e Figura 23, é possível afirmar que a reposta alcançada com o uso do modelo reduzido com dez pontos de colocação é bastante próxima à obtida com modelo completo.

Ao se reduzir o número de pontos de colocação para oito, a razão do tempo de CPU de 0,66 para 0,61 ($\approx 9\%$), porém essa redução foi conseguida ao custo de se aumentar o erro da aproximação. O erro integral cresceu de 0,0124 para 0,0197 ($\approx 59\%$) e, o mais crítico, o

erro máximo passou de 0,0011 para 0,0048, um aumento de 436% que se deu no início da curva, que corresponde à fase inicial de operação. Embora o valor absoluto (0,0048) não seja grande, o perfil obtido no início da curva foi um pouco diferente do perfil obtido com o modelo completo.

Tabela 30: Erro obtido com a utilização do modelo reduzido na predição da composição durante a partida da coluna de SCHRODER e MENDES (1999)

Erro Absoluto	Momentos (5:5)	Momentos (5:3)
Integral	0,0124	0,0197
Máximo	0,0011	0,0048
EE	0,0002	0,0004
Razão do tempo de CPU (reduzido/completo)	0,66	0,61

4.9- Caso 8 – Otimização da Partida usando o *Matlab* acoplado ao EMSO

Aqui, o objetivo do problema foi semelhante ao do caso 7. No entanto, a metodologia abordada para a resolução do problema foi distinta, bem como o modelo de coluna de destilação estudado.

As equações diferenciais do modelo não foram discretizadas. Ao invés disso, escolheu-se trabalhar com o modelo contínuo no EMSO e resolver o problema de otimização no ambiente *MATLAB*.

O modelo dinâmico da coluna foi programado e rodado no simulador de processos EMSO e o resultado da simulação exportado para o ambiente *MATLAB*, onde foi utilizada a rotina de otimização *fmincon* para realizar a otimização proposta. Dentro da rotina, foi utilizado o algoritmo de otimização SQP (algoritmo de Programação Quadrática Sucessiva). Neste caso, foi adotada uma aproximação polinomial de 3º grau com o tempo para a razão de refluxo (eq. 81). Ao adotar este procedimento, os dois programas foram rodados simultaneamente, uma vez que a cada passo dado pelo otimizador do *MATLAB*,

este necessita do resultado de uma simulação feita pelo EMSO. Os dois software se comunicam online através da interface existente.

A metodologia descrita foi aplicada a uma coluna de destilação com 94 estágios e demais especificações dadas na Tabela 31, a fim de minimizar a função objetivo descrita a seguir, obedecendo às devidas restrições. Neste problema, a vazão de destilado e a razão de refluxo foram escolhidas como as variáveis de controle.

Matematicamente, o problema consiste em maximizar a função objetivo:

$$F_{obj} = \int_0^{t_f} (x_D(t) - x_D^{est})^2 \cdot dt \quad (78)$$

obedecendo à restrição:

$$x_D > 0,99 \quad (79)$$

Tabela 31: Especificações da coluna de destilação utilizada na otimização da estratégia de partida

Número de pratos	92
Prato de alimentação	46
Composição da carga (iso-butanol, n-butanol)	[0,34, 0,66]
Vazão de alimentação (mol/s)	155
Entalpia da carga (kJ/mol)	-22
Pressão de operação (bar)	4,8
Razão de refluxo	10
Vazão de destilado (mol/s)	55

Para a razão de refluxo (RR), a seguinte aproximação foi utilizada:

$$RR = RR_{est} + b \cdot t + c \cdot t^2 + d \cdot t^3 \quad (80)$$

Sendo RR_{est} a razão de refluxo desejada para a operação da coluna durante o regime estabelecido. Os parâmetros b , c e d , são os parâmetros a serem determinados pelo otimizador, obtendo assim, o perfil ótimo para a Razão de Refluxo.

Como se deseja que ao fim do transiente a coluna opere com a $RR = RR_{est}$, a equação (80) foi modificada para a equação abaixo:

$$RR = RR_{est} + b \cdot (t - t_f) + c \cdot (t - t_f)^2 + d \cdot (t - t_f)^3 \quad (81)$$

Além disso, tem-se que:

$$\left. \frac{dRR}{dt} \right|_{t=t_f} = 0 \quad (82)$$

Com isto, o parâmetro b é facilmente determinado:

$$\left. \frac{dRR}{dt} \right|_{t=t_f} = b + 2 \cdot c \cdot (t - t_f) \Big|_{t=t_f} + 3 \cdot d \cdot (t - t_f)^2 \Big|_{t=t_f} = 0 \quad (83)$$

$$b = 0 \quad (84)$$

Agora, a otimização se resume a encontrar os valores dos parâmetros c e d que levam ao menor valor da função objetivo (eq. 78).

Foram comparadas as soluções ótimas obtidas quando da aplicação do modelo reduzido apresentado na Seção 3.3 e com a utilização do modelo fenomenológico completo.

Para as variáveis termodinâmicas, foram utilizadas as equações de estado de Soave-Redlich-Kwong através do VRtherm integrado ao simulador de processos EMSO.

Como a coluna modelada é a mesma do caso 2, utilizou-se a mesma quantidade de pontos de colocação daquele caso, como uma forma de assegurar a reprodutibilidade do modelo completo pelo modelo reduzido.

Após verificar a confiabilidade da solução obtida, foi realizada uma otimização nos mesmos moldes da realizada no caso 5. Ou seja, uma procura dos valores para o par de variáveis de controle, razão de refluxo e vazão de destilado, que levem o sistema ao regime de estado estacionário desejado para a operação da coluna, neste caso $x_D \approx 0,99$. No entanto, garantindo um lucro máximo segundo a equação (74).

O resultado obtido após a realização do procedimento acima descrito é apresentado na Tabela 32.

O motivo dessa otimização preliminar foi simplesmente obter o valor desejado para a Razão de Refluxo no Estado Estacionário, valor o qual o polinômio deve atingir no t^f . Além disto, procurou-se obter um perfil para a composição do produto de topo, o qual será usado para comparar com a solução ótima obtida.

Tabela 32: Valores desejados para as Variáveis de Controle no Estado Estacionário

Variáveis	Completa	Momentos
D (mol/s)	51	51
RR	12,15	12,15

Na Figura 24, são apresentadas as estratégias ótimas para a variável de controle, obtida com o uso de cada um dos modelos.

Pela Figura 24, é possível afirmar que os perfis ótimos para a razão de refluxo, a serem usados como estratégia de partida da coluna, foram muito próximos. O maior erro absoluto ocorreu no valor inicial da RR , diferença de 3,64 nos valores calculados pelos métodos. No entanto, levando-se em conta o valor da variável calculada, o maior erro foi 1,12, obtido no tempo de 53 minutos, equivalendo a 8,21 % da variável medida.

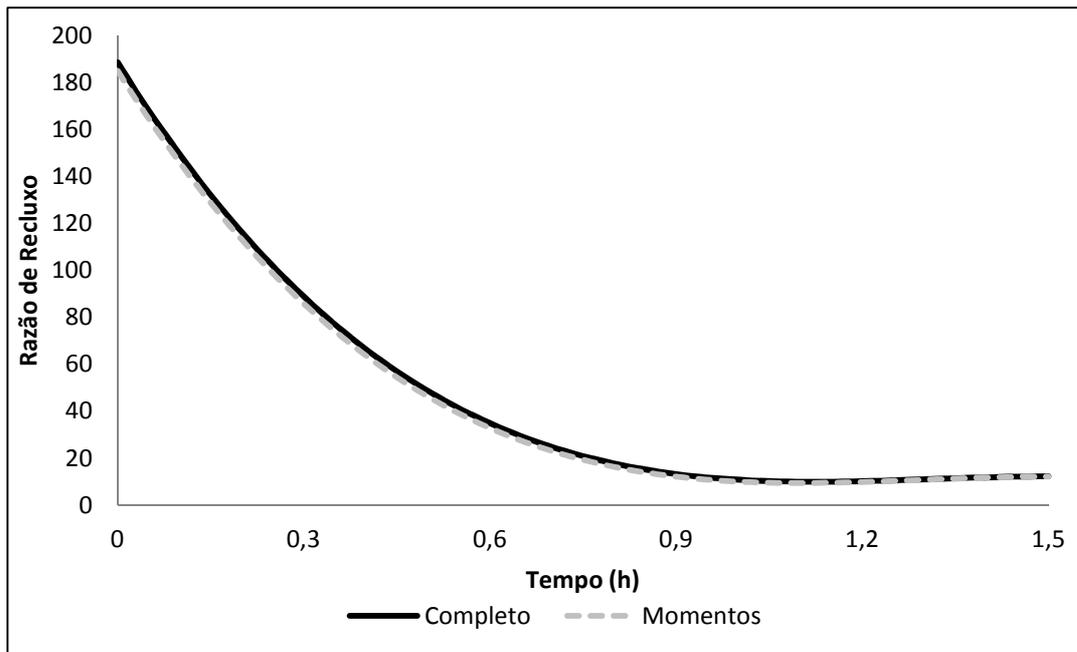


Figura 24 – Estratégia ótima da razão de refluxo para a partida da coluna.

A Tabela 33 apresenta alguns dos resultados obtidos pela otimização. O modelo reduzido necessitou de um número de iterações cerca de 40% menor do que o modelo completo. No entanto, os números de avaliações da função objetivo foram similares, 54 e 52, respectivamente. Como o tempo de simulação do modelo reduzido é menor, este conseguiu uma redução no tempo de processamento de 36%. Quanto aos parâmetros alvos da otimização, os erros foram de 8,2% e 1,8% para os valores de c e d respectivamente.

Tabela 33: Resultados obtidos pela otimização da estratégia da RR para a partida da coluna

	Completo	Momentos
Iterações	9	4
Avaliações da F_{obj}	54	52
c	-47,58	-51,50
d	-84,00	-85,54
Razão do tempo de CPU (reduzido/completo)	-	0,64

Os pequenos desvios obtidos no cálculo dos parâmetros, juntamente com a proximidade do valor da RR calculada, vide Figura 24, e a redução dos custos

computacionais justificam o uso do modelo reduzido. Porém, para que seja possível afirmar que o modelo reduzido obteve uma resposta confiável e robusta, é necessária uma análise específica dos valores da função objetivo. A Tabela 34 apresenta os valores da função objetivo obtidos quando das simulações dos modelos da coluna com as duas estratégias obtidas e com a utilização da razão de refluxo constante e igual a 12,15.

Tabela 34: Comparação entre os valores da F_{obj} quando simulados os dois modelos com ambas as estratégias obtidas pelas otimizações

	Estratégia do Completo	Estratégia do Reduzido	RR constante
Simulação de Completo	1,100	1,110	13,322
Simulação do Reduzido	0,971	0,964	15,795

Utilizando os valores de c e d encontrados com a utilização do modelo reduzido para a simulação do modelo completo, a diferença entre os valores da função objetivo foi de 0,01 ou 1%. Para o caso inverso, a diferença ficou em 0,007 ou 0,7%. A informação mais importante, dentro do escopo deste trabalho, que pode ser retirada da Tabela 34, é que ambos os modelos foram capazes de obter o valor mínimo da função objetivo, levando o sistema de valores da F_{obj} de 13 a valores unitários. O modelo reduzido não só foi capaz de obter o valor mínimo da função objetivo do sistema em um tempo de processamento inferior, como também a estratégia encontrada por este modelo, quando usada no modelo completo, leva a um valor de F_{obj} praticamente idêntico ao obtido quando da utilização do modelo completo para a otimização. Assim sendo, fica clara a pertinência e adaptabilidade do modelo reduzido pelo método dos momentos a problemas de otimização dinâmica.

Na Figura 25 encontram-se representados os perfis de composição quando da utilização das estratégias sugeridas pelos dois modelos e aquela que corresponderia a uma operação com uma RR constante e igual a 12,15. E, a Tabela 35 apresenta os erros obtidos nas simulações utilizando as três estratégias mencionadas.

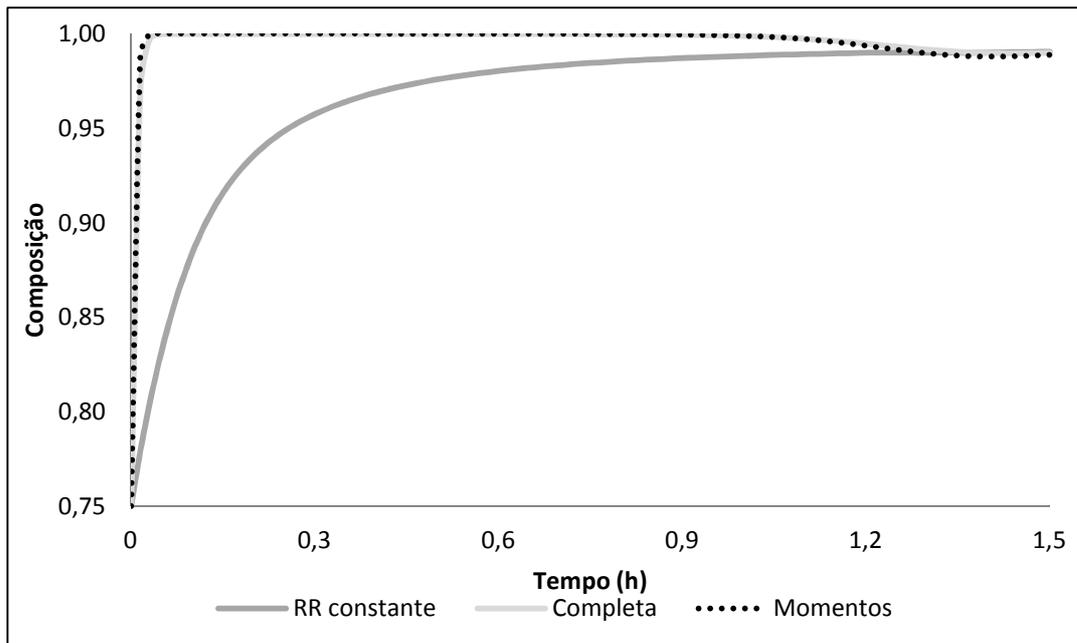


Figura 25 - Perfil de composição durante a partida da coluna com a adoção de uma RR constante (12,15) e com a adoção da estratégia ótima.

A Figura 25 mostra de forma mais clara a redução do tempo de regime transiente alcançada com as estratégias obtidas com a otimização. Foram simulados o modelo da coluna completa com uma RR constante, o modelo completo com a estratégia obtida com o uso deste na otimização e o modelo reduzido com a estratégia obtida com o uso do mesmo. O tempo de regime transiente foi reduzido de 90 minutos para 1,8 minutos, tempo no qual a coluna começa a disponibilizar produto acima da especificação desejada (0,99). Tal estratégia reduziu em 98% o tempo no qual a coluna opera de forma improdutiva e sujeita a grandes alterações das variáveis, o que pode acarretar problemas na operação, uma vez que a partida de uma unidade é o momento mais instável e complexo de sua operação.

Tabela 35: Erro obtido utilizando o modelo reduzido para a predição do perfil de composição durante o regime transiente

Erro Absoluto	Momentos
Integral	0,0730
Máximo	0,0027
Estado Estacionário	0,0011

Os baixos desvios obtidos com a utilização do modelo reduzido mostram mais uma vez a grande adaptabilidade e robustez do método em simulações dinâmicas onde há constantes alterações nas variáveis de controle, neste caso a razão de refluxo.

CAPÍTULO 5: CONCLUSÃO

Com o intuito de testar a aplicação do modelo reduzido em problemas típicos do dia-a-dia de um profissional da área da engenharia química, alguns problemas de separação em estágios foram abordados na presente dissertação.

Primeiramente, o modelo reduzido foi testado em simulações estacionárias, sendo capaz de prever com grande exatidão os perfis de composição ao longo dos estágios das colunas estudadas, mostrando sua capacidade para projetos de coluna, previsão de retiradas intermediárias de produtos, dentre outras aplicações.

Posteriormente, o modelo advindo da aplicação do método dos momentos foi aplicado a casos de simulação dinâmica simples e com perturbações do tipo degrau na alimentação. Os resultados revelaram-se extremamente satisfatórios, uma vez que o comportamento da coluna pode ser estimado com um grau alto de precisão, confirmando o grande potencial do método para a aplicação em problemas de controle, projeto de colunas e previsão de variáveis de operação.

O próximo passo foi implementar o modelo reduzido em problemas de otimização estacionária. O primeiro teste foi em problema de otimização do prato de carga e o método foi capaz de fazer uma predição bastante consistente. O segundo teste foi em problemas de otimização do produto, objetivando a maximização do lucro. Neste caso, o método obteve os melhores resultados, erros praticamente nulos e uma grande redução do tempo de CPU. Assim, foi possível demonstrar a grande capacidade de utilização do modelo reduzido na definição de estratégias de operação da coluna durante seu estado estacionário.

A última abordagem deste trabalho foi o problema de otimização dinâmica. Visando demonstrar a pertinência do uso dos modelos reduzidos em problemas de *start-up* de colunas, três estratégias para a definição da operação da coluna durante o período de regime transiente foram testadas.

Na primeira proposição, a estratégia do uso do refluxo total até que o sistema alcançasse a composição especificada e daí em diante a aplicação de uma *RR* constante foi utilizada. Tal abordagem foi útil para demonstrar que o modelo reduzido é capaz de reproduzir o comportamento do sistema durante o regime transiente, principalmente durante a alteração das variáveis de controle, podendo assim, ser utilizado para auxiliar na escolha de uma estratégia de partida adequada.

Em uma segunda proposição, foi feita a discretização de todo o sistema de equações diferenciais para encontrar uma estratégia para a Razão de Refluxo que levaria ao menor valor do parâmetro t^f . Os resultados encontrados foram satisfatórios e concordantes com o artigo de SCHOREDER e MENDES (1999).

Como uma última proposição, adotou-se uma aproximação polinomial de 3º grau no tempo para representar o comportamento da razão de refluxo e obter a estratégia ótima que levaria o sistema a permanecer o mínimo de tempo no estado transiente. Novamente, o modelo reduzido alcançou resultados bastante satisfatórios, conseguindo não só prever a estratégia de partida com alta precisão e com um tempo de processamento menor, mas também obtendo valores da função objetivo praticamente iguais aos obtidos pelo uso do modelo completo. Com isso, a utilização do modelo reduzido pelo método dos momentos em problemas de otimização dinâmica se mostrou adequada e muito promissora.

Cabe ressaltar que em todos os problemas tratados neste trabalho, os ganhos na redução do tempo de CPU foram muito mais relevantes do que os erros advindos da aproximação do modelo completo. Ou seja, o modelo reduzido foi capaz de prever o comportamento do sistema com muito mais rapidez que o modelo completo e com uma precisão similar, mostrando-se assim, uma estratégia muito boa para o tratamento de problemas dinâmicos com aplicação em tempo real.

O modelo reduzido obtido pela aplicação da técnica de redução de ordem de modelos de sistemas de separação por estágios baseado na anulação soma dos resíduos ponderados pelos momentos mostrou ser superior ao método tradicional da colocação ortogonal e aos métodos de

redução baseado nos modelos agregados apresentados por LINHART e SKOGESTAD (2011) e usados por KAMATH et. al. (2010).

A principal conclusão deste trabalho é a de que o modelo reduzido obtido pela aplicação da técnica de redução de ordem baseado na anulação soma dos resíduos ponderados pelos momentos se mostrou bastante eficiente para predizer o comportamento do modelo fenomenológico completo, com uma considerável redução dos custos computacionais e com um nível de erro adequado para os problemas tratados. O método dos momentos acabou se mostrando mais robusto e adaptável do que as demais técnicas apresentadas na literatura e utilizadas como comparação neste trabalho, para aplicação em problemas diversos que estão presentes na área de atuação do engenheiro químico.

Como sugestão para trabalhos futuros, seria bastante interessante a aplicação da técnica em outros problemas voltados à operação em tempo real, como por exemplo: aplicações de inferências e controle preditivo.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ALFRADIQUE, M.F., 2003, Implementação Automática de Procedimentos para Simulação de Colunas de Destilação Convencional e Reativa usando Computação Algébrica. *Tese*, UFRJ.
- BENALLOU, A., SEBORG, D.E., MELLICHAMP, D.A., 1986, Dynamic Compartmental Models for Separation Processes, *AICHE Journal*., v.32, pp. 1067-1078.
- CABALLERO, J.A., GROSSMANN, I.E., 1999, Aggregated models for integrated distillation systems, *AICHE Journal*, v.38, pp. 2330-2344.
- CARVALHO, C.R. de, 1996, Aplicação dos polinômios ortogonais discretos a modelagem e simulação de processos de separação por estágios, Dissertação de Mestrado, UNICAMP, São Paulo, SP, Brasil.
- CHO, Y.S., JOSEPH, B., 1983a, Reduced-Order Steady-State and Dynamic Models for Separation Processes – PART I, *AICHE Journal*, v.29 , pp.261-269.
- CHO, Y.S., JOSEPH, B., 1983b, Reduced-Order Steady-State and Dynamic Models for Separation Processes – PART II, *AICHE Journal*, v.29 , pp. 270-276.
- CHO, Y.S., JOSEPH, B., 1984, Reduced-Order Steady-State and Dynamic Models for Separation Processes – PART III, *Computers & Chemical Engineering*, v.8 , pp.81 - 90.
- CHOI, S. Y., KIM, H. S., LEE, K. S., YOO, K. P. e LEE, W. H., 1991, Reduced-Order Distillation Model Using Collocation Method With Cubic Splines, *Korean J. of Chem. Eng.*, 8(1), pp 44-52.

- DORNEANU, B., BILDEA, C. S., GRIEVINK, J., 2008, On the Application of Model Reduction to Plantwide Control, *Computer and Chemical Engineering*, 33, pp 699-711.
- 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.
- HENLEY, E.J., SEADER, J.D., 1981, *Equilibrium-Stage Separation Operations in Chemical Engineering*. 1 ed. New York, John Wiley & Sons.
- KAMATH, R. S., GROSSMANN, I. E., BIEGLER, L. T., 2010, Aggregate models based on improved group methods for simulation and optimization of distillations systems. *Computer and Chemical Engineering* 34 p. 1312-1319.
- KHOWINIJ, S., BIAN, M.A., HENSONA, E.C., BELANGERB, P., MEGANB, L., 2004, Reduced Order Modeling of High Purity Distillation Columns for Nonlinear Model Predictive Control, *Proceeding of the 2004 American Control Conference Boston, Massachusetts June 30 - July 2, 2004*, pp 4237-4242
- 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.
- KIM, H. S., LEE, K. S., YOO, K. P., LEE, W. H., PARK, H. S., 1989, Two-Part Modular Reduced-Order Model for Multicomponent Multistage Distillation Columns, *Journal of Chemical Engineering of Japan*, Vol. 22, n° 1, pp 41-47

- 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.
- 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.
- LINHART, A., SKOGESTAD, S., 2011, An aggregation model reduction method for one-dimensional distributed systems, *American Institute of Chemical Engineers Journal*, v. 58, n. 5, pp. 1524-1537.
- MENEGUELO, A. P., ROQUEIRO, N., MACHADO, N. A. F., 2004, Modelagem de Coluna de Destilação para Implementação de Observador de Estados, 3º Congresso Brasileiro de P&D em Petróleo e Gás.
- MUSCH, H.E., STEINER, M., 1993, Order Reduction of Rigorous Dynamic Models for Distillation Columns, *Computers & Chemical Engineering*, v.17, pp. 311-316.
- PINTO, J.C., BISCAIA, E.C., 1987, Order Reduction Strategies for Models of Staged Separation Systems, *Computers & Chemical Engineering*, v.12 , pp. 821-831.
- PORTAL VRTech. Disponível em: http://www.vrtech.com.br/en_us/vrtherm. Acesso em: 10 jun 2011.

PROJETO ALSOC. Disponível em: <http://www.enq.ufrgs.br/trac/alsoc>. Acesso em: 10 jun 2011.

RAMASWAMY, R. C., SARAF, D. N., 2002, Reduced Order Modeling of a Crude Distillation Unit for Online Applications, *Journal of Chem. Eng. Of Japan*, Vol. 35, Nº 8, pp 714-728.

RIBEIRO, L. D., 2011, Nova Técnica de Redução de Ordem de Modelo Baseada em Resíduos Ponderados no Domínio Discreto - PEQ/COPPE.

RICARDO, R. C. P., 2008, Apostila de Processos Petroquímicos – Especialização e Processamento de Petróleo.

SCHRODER, A., MENDES, M. J., 1999, Time Optimal Control of Distillation Columns: A Mixed IDP-SQP Approach. *Computer and Chemical Engineering Supplement*, p. 491-494.

SECCHI, A. R., 1988, *Controle Adaptativo de Colunas de Destilação Utilizando Modelos Reduzidos*. Dissertação de Mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

SIMÕES, A. R., 2000, *Modelos de Ordem Reduzida e Simulação em Colunas de Destilação*. Dissertação de Mestrado, UNICAMP, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

SOARES, R. P., SECCHI, A. R., 2003, EMSO: A new environment for modeling, simulation and optimization. 13o European Symposium on Computer Aided Process Engineering, Laaperanta.

STEWART, W.E., LEVIEN, K.L., MORARI, M., 1985, Simulation of Fractionation by Orthogonal Collocation, *Chemical Engineering Science*, v.40, pp. 409-421.

VILLADSEN, J.V., STEWART, W.E., 1967, Solution of Boundary-value Problems by Orthogonal Collocation. *Chemical Engineering Science*, v. 22, pp. 1483-1501.

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.

WELZ, M. L. S., MOLLER, K., CHAKRABORTY, A., 2008, Reduced Order Modeling of Rate-Based Distillation Columns, Spring Meeting & 4th Global Congress on Process Safety.

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 I - PUBLICAÇÕES

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

Reduced Rigorous Models for Efficient Dynamic Simulation and Optimization of Distillation Columns

Antonio Valleriote,^a Leonardo Dorigo,^a Argimiro R. Secchi,^a Evaristo C. Biscaia Jr.^a

^a*LMSCP/PEQ/COPPE/UFRJ, Av. Horácio Macedo, 2030 - Centro de Tecnologia - Bloco G - Sala G-115 CEP 21941-914 - Rio de Janeiro – RJ – E-mail address:*

evaristo@peq.coppe.ufrj.br, arge@peq.coppe.ufrj.br, ajvalleriote@hotmail.com, dorigo@petrobras.com.br.

Abstract

In this work, we compare the technique of model order reduction based on weighted residuals in discrete domain with the aggregated modelling method for efficient dynamic simulation and optimization of distillation columns. To compute the weighted residuals, a discrete form of Lobatto-Gauss quadrature was developed in a previous work Ribeiro et al. (2010), allowing a high degree of accuracy on the calculations of the weighted sums of heat and mass balances residuals on real stages. Balances related with upstream and downstream stages are considered as boundary conditions of corresponding difference-differential equations system. The aggregated modelling method is based on the two-step procedure of Linhart & Skogestad (2010). In the first step, aggregation stages are selected to compose the reduced dynamics with the corresponding holdup factors, and in the second step the resulting algebraic equations after applying the quasi-steady-state assumption to the remaining stages are replaced by pre-computed functions. Optimization of start-up policies, Wozny & Li (2004), optimal feed tray location, Kamath et al. (2010), and dynamic simulation of binary and multicomponent distillation columns were solved to compare the performance of both model reduction techniques.

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

1. Introduction

Processes described by large scale systems, such as stage separation processes, are presented in all areas of chemical engineering. Rigorous dynamic mathematical models of stage separation systems are normally described by high dimension systems of differential-algebraic equations, making them impractical for real-time applications. In this context, to obtain numerical solutions with lower computational cost, reduced order models are eligible, mainly on real-time optimization and control applications. The objective of this paper is to demonstrate that the weighted residuals technique can be used in any types of distillation problems, such binary, multicomponent, dynamic and optimization problems. Reduction of computational cost when reduced models, maintaining the predictive capacity of complete model, is unequivocally presented. To solve these problems, we use the software package for large-scale nonlinear optimization - IPOPT - Interior Point OPTimizer, (<https://projects.coin-or.org/Ipopt>), the process simulator EMSO (Environment for Modeling Simulation and Optimization, <http://www.enq.ufrgs.br/alsoc>), and for the thermodynamic properties, we used the VRTherm package (<http://www.vrtech.com.br>).

2. Order Reduction Techniques

The detailed description of the aggregated modelling method can be found in Linhart & Skogestad (2010). Here, we will show the main idea of the technique of model order reduction based on weighted residuals in discrete domain, and all the information about this technique can be obtained in the original paper Ribeiro et al. (2010). In order to introduce the model order reduction technique, a generic section of a stage separation system is described by the following difference-differential equations:

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

The corresponding reduced model is described by:

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

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 elements of the discretization matrices A^+ and A^- are obtained by applying difference operators to the Lagrange interpolation polynomials of dependent variables.

3. Simulation Case Studies

3.1. Case 1

This illustrative example is presented in Linhart & Skogestad (2010). A comparison between the steady-state composition obtained with complete and reduced model has been made, as well as the dynamic response of top product composition when a step is applied to feed flow rate. In the reduced model, 6 internal points were used in each section (total number of points=12), corresponding to 87% reduction in the full model dimension. These results are presented in Figures 1 and 2 and the corresponding absolute deviations from the complete model are shown in Tables 1 and 2. The profile for step disturbance in feed flow rate obtained using the reduced model based on weighted residuals showed satisfactory agreement with the one presented in Linhart & Skogestad (2010).

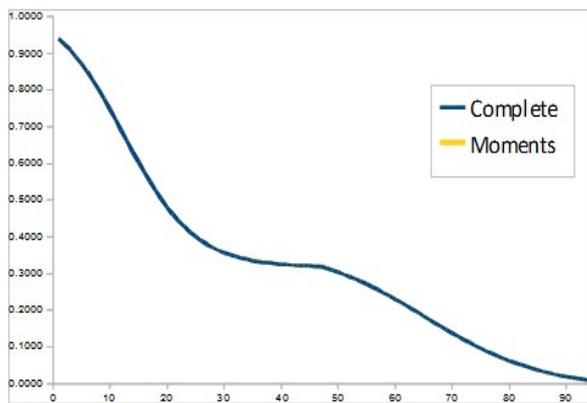


Figure 1. Steady-state liquid composition profile for complete and reduced models.

Table 1. Errors in steady-state profile

Absolute Error	Moments
Sum	0.0376
Max	0.0011
Top	0.0000
Bottom	0.0000
Feed	0.0001

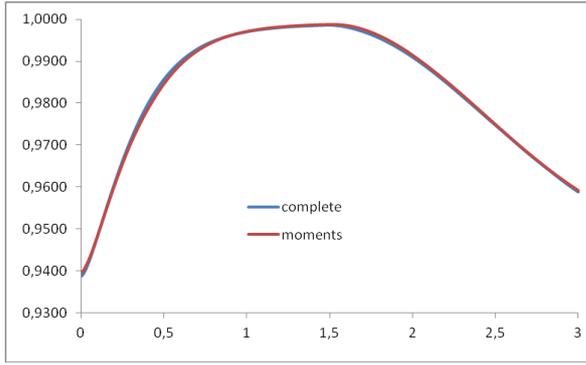


Figure 2. Top composition step response for complete and reduced models.

Table 2. Errors in step disturbance

Absolute Error	Moments	Linhart & Skogestad (2010)
Integral	0.2090	0.2683
Max	0.0013	0.0021
CPU ratio (reduce/compl ete)	0.26	0.15

3.2. Case 2

The second example is the column presented in Kamath et al. (2010). In the reduced model, 3 internal points were used in each section (total number of points=6), corresponding to 68% reduction in the full model dimension. These results are presented in Figures 3 and 4 and the corresponding absolute deviations from the complete model are shown in Tables 3 and 4.

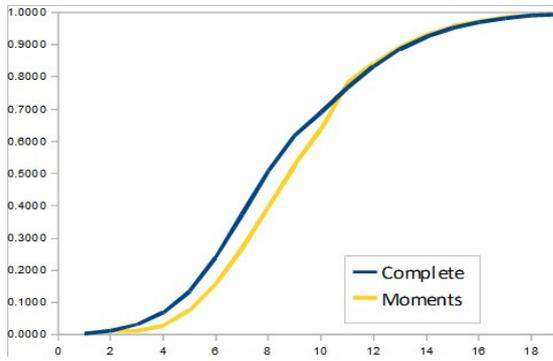


Figure 3. Steady-state liquid composition for complete and reduced models.

Table 3. Errors in steady state profiles

Absolute Error	Moments
Sum	0.6147
Max	0.1120
Top	0.0014
Bottom	0.0001
Feed	0.0908

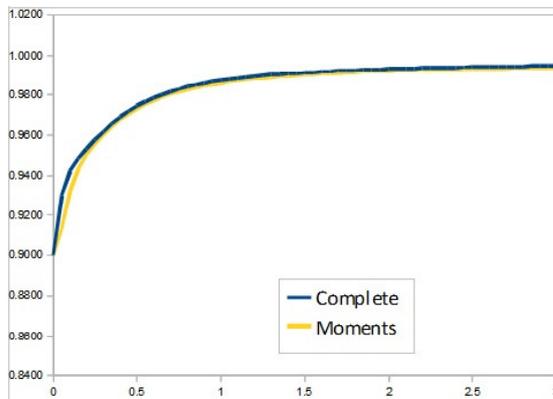


Table 4. Errors in dynamic response

Absolute Error	Moments
Integral	0.1001
Max	0.0173
Steady-State	0.0008
CPU ratio (reduce/complete)	0.52

Figure 4. Bottom composition step response for complete and reduced models.

3.3. Case 3

In this example, the objective was to maximize the mole fraction of top product (benzene) selecting the optimal feed tray, Kamath et al. (2010). A direct search procedure was applied, constructing the curve of top product composition versus feed tray location.

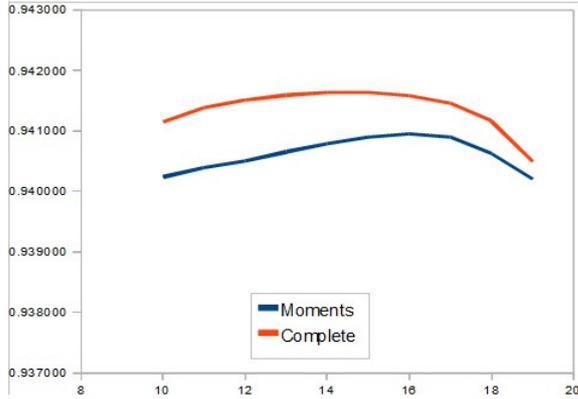


Figure 5. Steady-state compositions for complete model and proposed method.

The obtained optimal feed location was stage 15 for the complete model and stage 16 for the reduced model. The corresponding computational time reduction was around 50%, showing the efficiency of reduced model application to the optimization problem.

3.4. Case 4

This example maximizes the profit rate of a distillation column through manipulation of reflux ratio (RR) and distillate flow (D). This operation corresponds to find the lowest reflux with a mole fraction of the top product (benzene) greater than 0.99 (Kamath et al., 2010). Mathematically, this case is represented by:

$$\text{Profit} = D - 50 \cdot \text{RR}, \text{ restricted to } x_{\text{benzene}} \geq 0.99$$

Table 5. Top product optimization

	Moments	Complete
RR	0.987	0.985
D	69.8	69.6
F _{obj}	20.45	20.34
Time (s)	26	79

The differences between the values of operational variables and objective functions of the complete and reduced models are not significant, but the computational reduction time was around 67%.

3.5. Case 5

This example illustrates the start-up of a distillation column looking for a dynamic optimal strategy that reduces the initial transient period. Basically, this procedure consists to maintain the zero-profit values of reflux ratio and distillate flow until the mole fraction of the product (iso-butanol) reaches the specified top value of the desired product ($x_{\text{iso-butanol}} \geq 0.99$), and then applying the stationary values of reflux ratio and distillate flow. Using this technique, the initial transient time obtained was 0.5 hours, while using the final stationary values of reflux ratio and distillate flow this time was around 1.1 hours (55% of reduction).

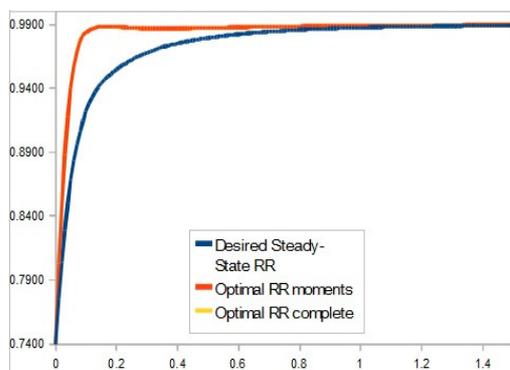


Figure 6. Start-up strategy.

The differences between the reflux ratio and distillate flow values in the complete and reduced models are insignificant, but the reduction of computational time was around 70%.

4. Conclusions

The obtained results show the advantages of the methodology, emphasizing the natural ability of the weighted residuals technique to deal with multicomponent systems and changes in the feed location. The last ability comes from the adaptive nature of this technique through the dynamic behaviour of quadrature points. Low computational costs were obtained with the technique for binary systems, for multicomponent systems, and in optimization problems revealing that this technique is appropriate for real-time applications, and optimal design and operation of complex distillation systems.

References

- L.D. Ribeiro, A.R. Secchi, E.C. Biscaia Jr., 2010, *A new technique of model order reduction based on weighted residuals in discrete domain*, ESCAPE 20, Ischia, Naples, 1639-1644.
- A. Linhart, S. Skogestad, 2010, *Reduced distillation models via stage aggregation*, Chemical Engineering Science, 65, 3439–3456.
- A. Linhart, S. Skogestad, 2009, *Computational performance of aggregated distillation models*, Computers & Chemical Engineering, 33, 296–308.
- G. Wozny, P. Li, 2004, *Optimisation and experimental verification of startup policies for distillation columns*, Computers & Chemical Engineering, 28, 253-265.
- R.S. Kamath, I.E. Grossmann, L.T. Biegler, 2010, *Aggregate models based on improved group methods for simulation and optimization of distillation systems*, Computers & Chemical Engineering, 34, 1312–1319.