

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**MODELOS SIMPLIFICADOS PARA COLUNAS DE DESTILAÇÃO
BINÁRIAS**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Bruno Éttori Bueno

Porto Alegre

2015

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

MODELOS SIMPLIFICADOS PARA COLUNAS DE DESTILAÇÃO BINÁRIAS

Bruno Éttori Bueno

Dissertação de Mestrado apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia

Área de concentração: Pesquisa e Desenvolvimento de Processos.

Linha de Pesquisa: Projeto, Simulação, Modelagem, Controle e Otimização de Processos Químicos.

Orientadores:

Prof. Dr. Jorge Otávio Trierweiler

Prof. Dr. Pedro Rafael Bolognese Fernandes

Porto Alegre

2015

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

A Comissão Examinadora, abaixo assinada, aprova a Dissertação *Modelos Simplificados para Colunas de Destilação Binárias*, elaborada por Bruno Éttori Bueno, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Engenharia.

Comissão Examinadora:

Prof. Dr. André Rodrigues Muniz

Prof. Dr. Jorge Rodolfo Silva Zabadal

Prof. Dr. Marcelo Farenzena

Resumo

Modelos simplificados fisicamente interpretáveis são importantes em diversas aplicações industriais. Colunas de destilação, dada sua importância para a lucratividade da planta e por consumirem muita energia, requerem modelos estáticos e dinâmicos dessa natureza, que auxiliem para a sua operação ótima. Como aplicações de tais modelos, destacam-se controle, otimização e treinamento de operadores. Esse campo de pesquisa é promissor, uma vez que, apesar da complexidade destes sistemas, estes apresentam uma dinâmica dominante de baixa ordem para as composições. Nesta dissertação é proposto um método rápido e preciso para determinação desta dinâmica dominante. Para tanto, considera-se uma coluna como sendo a combinação de quatro subsistemas: condensador (I), refeedor (II), zona de retificação (III) e zona de esgotamento (IV). Para (III) e (IV) são propostas expressões simples e com significado físico (*shortcuts* dinâmicos) para as constantes de tempo dominantes de cada seção. Expressões completas para o modelo estático de cada seção são também propostas em conjunto com um método para a geração da respectiva álgebra de blocos, que evidencia os ciclos entre os estágios de cada seção. Os ciclos entre os subsistemas (I) a (IV) são os responsáveis pelo deslocamento dos polos dominantes de cada seção, o que conduz à dinâmica dominante da coluna. Este fenômeno é explicado pela álgebra de blocos entre estes subsistemas proposta neste trabalho. Ainda que as expressões para as constantes de tempo dominantes de cada seção sejam oriundas de um modelo linearizado da mesma, a álgebra de blocos entre as seções introduz a não linearidade que explicita a dinâmica dominante da coluna, decorrente das correntes de refluxo. Por serem sistemas multivariáveis, *shortcuts* para a predição da direcionalidade, com base no deslocamento dos perfis de composições estacionárias de cada seção após estas sofrerem perturbações, são também propostos. *Shortcuts* para a álgebra de blocos, que explicitam qual seção da coluna é a dominante frente à outra, também são apresentados. Todas as métricas citadas são rápidas e precisas. Os erros relativos correspondentes aos modos dinâmicos são em sua maioria inferiores a 10% quando comparados com o respectivo modelo linear completo. A álgebra de blocos é exata e fornece métricas para explicar a dinâmica dominante de colunas. Contudo, é necessário ter posse de um modelo linear. Na ausência deste, almeja-se que as bases dinâmicas do método proposto auxiliem para o desenvolvimento de modelos caixa cinza para colunas reais, com o auxílio de dados de planta.

Abstract

Simplified models that provide insight about the system physics are important to many industrial applications. Distillation columns, due to their contributions to process profitability and their high energy consumption, require static and dynamic models of this class, which are helpful to their optimal operation. Key applications of such models are control, optimization and operator training. This research field is promising, since despite distillation columns having complex dynamic behavior, their composition responses present low order dynamics. In this work, a fast and accurate method, for prediction of the mentioned dominant response, is presented. For this goal, the column is considered as the combination of four subsystems: condenser (I), reboiler (II), rectifying zone (III) and stripping zone (IV). For (III) and (IV), simple expressions for the dominant time constant of each column section, featuring insight of the physics (dynamic shortcuts), are proposed. Full expressions for the static gains of each section are also proposed with a method to generate the respective block diagram algebra. The recycle streams between all the (I) to (IV) subsystems move the poles of each subsystem, leading to the column dominant dynamics. This is explained by the full block algebra between all the subsystems that's proposed in this work. Even if the dominant time constants of each section are generated from its linear model, the block algebra between the sections inserts the non-linearity that explains the column's dominant behavior due to the recycle streams. Since distillation columns are multivariate systems, shortcuts that predict the process directionality, with basis on the stationary composition profiles changes, are also proposed. Shortcuts for the block diagram algebra, which make explicit the section with dominant dynamics, are also presented. All of the methods presented are fast, simple and accurate. The relative errors for the sections time constants are mostly inferior to 10% when compared to the respective full order linear model. The block algebra is exact and provides insight on the dominant dynamic behavior of the columns. However, linear models of the systems are required. In absence of linear models, one important future goal of this work is to verify its applicability to build grey box models, with support of industrial data, for real columns.

“A verdadeira viagem de descobrimento não consiste em procurar novas paisagens, mas em ter novos olhos”. (Marcel Proust)

Agradecimentos

Aos meus pais Edson e Mirian, por todo o amor e suporte durante minha vida, e por terem me dado condições de alcançar as oportunidades que tive. São meus mentores desde cedo, meus melhores amigos e aqueles quem amo e sempre vou proteger.

Aos meus amigos do DEQUI, Nel & Ruddy, Raymundo, Cris, Viviane, Juliano, Baladão, Luis Felipe, Ivanor. Obrigado pela companhia diária, vamos fazer muitos churras ainda. Aos amigos de fora do DEQUI, Débora, Eric, Everton, Felipe, Lúcia, Renan, Gilbs, e muitos outros... Todos são pessoas especiais para mim.

Aos meus orientadores prof. Jorge e prof. Pedro por todos os ensinamentos, confiança e motivação. Obrigado por terem contribuído para minha formação pessoal e profissional.

À UFRGS e ao DEQUI pelo ensino de excelência.

À CAPES e à Petrobras pelo fomento financeiro.

Ao meu cachorro, Lobinho também, afinal não podemos esquecer de nossos irmãos caçulas.

SUMÁRIO

Capítulo 1 – Introdução	1
1.1 Colunas de Destilação: Aspectos Físicos e Matemáticos	1
1.2 Motivação.....	3
1.3 Objetivos	4
1.4 Estrutura da Dissertação	5
Capítulo 2 – Revisão Bibliográfica.....	6
2.1 Abordagens para Modelagem de Colunas de Destilação	6
2.2 Modelos de Ordem Reduzida Não Lineares.....	8
2.2.1 Modelos Compartimentados.....	8
2.2.2 Modelos de Propagação de Ondas.....	9
2.2.3 Modelos de Colocação Ortogonal	10
2.3 Dinâmica Dominante da Composição e <i>Shortcuts</i> para sua Predição	11
2.3.1 Dinâmica Dominante de Baixa Ordem das Composições.....	11
2.3.2 Modelo de Wahl e Harriott.....	11
2.3.3 Primeiras Formulações para a Constante de Tempo Dominante.....	12
2.3.4 Modelo Shortcut com Base nas Retroalimentações entre os Estágios	13
2.4 Direcionalidade em Colunas de Destilação	13
2.4.1 Modelo das Duas Constantes de Tempo (Skogestad e Morari, 1988)	13
2.4.2 Modelo de Sáfors e Waller	15
Capítulo 3 – Características e Representações dos Sistemas Estudados.....	16
3.1 Sistemas Estudados e Hipóteses Simplificativas	16
3.1.1 Holdup da Fase Vapor Desprezível Frente ao da Fase Líquida	16
3.1.2 Holdup Constante da Fase Líquida	16
3.1.3 Vazões Molares Constantes em Cada Seção da Coluna	17
3.1.4 Volatilidade Relativa Constante ao Longo da Coluna.....	17
3.2 Modelo Dinâmico Não Linear de uma Seção da Coluna	17
3.2.1 Representação da Coluna por Seções	17
3.2.2 Dinâmica da Composição Molar	19
3.2.3 Equilíbrio Líquido-Vapor em cada Estágio de Separação	20
3.2.4 Variáveis de Interesse em cada Seção.....	20
3.3 Modelo Linearizado da Coluna.....	20
3.3.1 Matrizes Jacobianas de Espaço de Estados	21
3.4 Funções de Transferência do Modelo Linearizado	22
3.5 Metodologia Proposta para Construção de Diagramas de Blocos	22
3.5.1 Método Proposto.....	23
3.5.2 Exemplo 1 de Aplicação do Método – Três Tanques em Série: Sistema com Interação e sem Interação	24
3.5.3 Exemplo 2 de Aplicação do Método – Solução Analítica para os Ganhos Estáticos	28
3.6 Representações de uma Seção da Coluna por Diagrama de Blocos.....	29
3.6.1 Exemplo 3 de Aplicação do Método – Seção R com Três Estágios.....	30
Capítulo 4 – <i>Shortcuts</i> para a Dinâmica Dominante de Colunas de Destilação	32
4.1 Visão Geral do Método Proposto.....	32
4.1.1 Representação de uma Coluna por Seções Conectadas.....	32
4.1.2 Fluxograma Representativo do Método.....	36
4.1.3 Estruturas das Matrizes de Transferência	37
4.1.4 Álgebra de Blocos entre as Seções	39
4.2 <i>Shortcuts</i> para as Constantes de Tempo Dominantes em cada Seção da Coluna ..	40
4.2.1 Dedução das Aproximações para os Polos Dominantes de uma Seção Genérica da Coluna.....	40

4.2.2	Constante de Tempo Dominante da Seção de Retificação	48
4.2.3	Constante de Tempo Dominante da Seção de Esgotamento	48
4.2.4	Estrutura Genérica para os Modos Dinâmicos Dominantes de cada Seção	48
4.3	Ganhos Estáticos do Modelo Linear	49
4.4	<i>Shortcuts</i> para Predição da Direcionalidade	51
4.4.1	Direcionalidade de colunas a partir das alterações do perfil de concentrações	51
4.4.2	CrITÉrios Shortcut para Captura da Direcionalidade em uma Seção da Coluna	54
Capítulo 5 –	Estudos de Caso e Resultados	58
5.1	Metodologia	58
5.2	Implementações dos Modelos	58
5.2.1	Implementação do Modelo Não Linear	58
5.2.2	Implementação do Modelo Linear Completo	59
5.2.3	Implementação do Método de Skogestad e Morari	59
5.2.4	Implementação do Método de Skogestad e Morari	60
5.3	Perturbações Realizadas	60
5.4	Sistemas Abordados	61
5.5	Resultados, Análises e Conclusões Parciais para a Coluna A	62
5.5.1	Predição das constantes de tempo de cada seção e da coluna	62
5.5.2	Direcionalidade e respostas no tempo	64
5.6	Resultados, Análises e Conclusões Parciais para a Coluna B	66
5.6.1	Predição das constantes de tempo de cada seção e da coluna	66
5.6.2	Direcionalidade e respostas no tempo	68
5.7	Resultados, Análises e Conclusões Parciais para a Coluna C	71
5.7.1	Predição das constantes de tempo de cada seção	71
5.7.2	Direcionalidade e respostas no tempo	72
5.8	Resultados, Análises e Conclusões Parciais para a Coluna D	75
5.8.1	Predição das constantes de tempo de cada seção	75
5.8.2	Direcionalidade e respostas no tempo	76
5.8.3	Dinâmica dominante pela álgebra de blocos e simplificação do diagrama	77
5.9	Resultados, Análises e Conclusões Parciais para a Coluna E	79
5.9.1	Predição das constantes de tempo de cada seção	79
5.9.2	Direcionalidade e respostas no tempo	81
5.10	Resultados, Análises e Conclusões Parciais para a Coluna F	82
5.11	Resultados, Análises e Conclusões Parciais para a Coluna G	83
5.11.1	Predição das constantes de tempo de cada seção	83
5.11.2	Direcionalidade e respostas no tempo	84
Capítulo 6 –	Considerações Finais	87
	Referências Bibliográficas	89

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1: Coluna de Destilação Fracionada (Adaptado de Lutvica <i>et al.</i> , 2013).	2
Figura 1.2: Contribuições de um Modelo <i>Shortcut</i> para Colunas de Destilação.	5
Figura 3.1: Representação Esquemática da Coluna de Destilação.	18
Figura 3.2: Balanço Material nas Seções da Coluna.....	18
Figura 3.3: Estágios Internos de uma Seção S.....	19
Figura 3.4: Sistema (a): Tanques em Série sem Interação entre os Níveis.	24
Figura 3.5: Diagramas de Blocos para o Sistema (a).	25
Figura 3.6: Sistema (b): Tanques em Série com Interação entre os Níveis.....	26
Figura 3.7: Diagrama de Blocos para o Sistema (b).	28
Figura 3.8: Diagrama de Blocos para a Seção de uma Coluna.	30
Figura 4.1: Fluxograma Síntese do Método Proposto.	37
Figura 4.2: Entradas e Saídas de Cada Seção.	37
Figura 4.3: Álgebra de Blocos entre as Seções da Coluna.....	39
Figura 4.4: Síntese da Sistemática Proposta para Geração das Expressões.	40
Figura 4.5: Predição da dinâmica do modelo não linear através do modelo linear completo, para diferentes padrões de perturbações (Coluna A).	41
Figura 4.6: Predição da dinâmica do modelo não linear através do modelo linear completo, para diferentes padrões de perturbações (Colunas C e G).....	41
Figura 4.7: Visão Geral das Etapas para Dedução das Expressões.	43
Figura 4.8: Coluna de Destilação e seções representadas como colunas individuais.	52
Figura 4.9: Requisitos para cálculo das métricas propostas para direcionalidade.....	53
Figura 5.1: Diagrama de blocos para o modelo não linear.	59
Figura 5.2: Diagrama de blocos para o modelo de Skogestad e Morari.....	59
Figura 5.3: Coluna A – Respostas no tempo (A.1).....	65
Figura 5.4: Coluna A – Respostas no tempo (A.2).....	66
Figura 5.5: Coluna B – Perfis de concentrações estacionárias.....	67
Figura 5.6: Coluna B – Respostas no tempo (B.1).	69
Figura 5.7: Coluna B – Respostas no tempo (B.2).	70
Figura 5.8: Coluna C – Respostas no tempo (C.1).	74
Figura 5.9: Coluna C – Respostas no tempo (C.2).	74
Figura 5.10: Coluna D – Respostas no tempo (D.1).	76
Figura 5.11: Coluna D – Respostas no tempo (D.2).	77
Figura 5.12: Coluna D – Álgebra de blocos simplificada.	78
Figura 5.13: Coluna D – Respostas no tempo (D.3).	78
Figura 5.14: Coluna E – Respostas no tempo (E.1).....	81
Figura 5.15: Coluna E – Respostas no tempo (E.2).....	82
Figura 5.16: Coluna G – Respostas no tempo (G.1a).	85
Figura 5.17: Coluna G – Respostas no tempo (G.1b).	85
Figura 5.18: Coluna G – Álgebra de blocos simplificada.	86
Figura 5.19: Coluna G – Respostas no tempo (G.1c).....	86

NOTAÇÃO E SIMBOLOGIA

L	Vazão molar da fase líquida
V	Vazão molar da fase vapor
α	Volatilidade relativa
F	Vazão molar da corrente de alimentação
q	Fração de fase líquida na alimentação
M	<i>Holdup</i> molar dos estágios
M_1	<i>Holdup</i> molar do condensador
M_n	<i>Holdup</i> molar do refeedor
f	Posição do estágio de alimentação
n	Número de estágios da coluna
x	Composição molar da fase líquida
y	Composição molar da fase vapor
X	Vetor de estados
u_{MV}	Vetor de entradas manipuladas
ud	Vetor de distúrbios
Y	Vetor de saídas
D	Vazão molar do destilado
B	Vazão molar do produto de fundo
st	Primeiro estágio de uma seção
ns	Último estágio de uma seção
<i>Feed</i>	Subíndice para a corrente de alimentação
S	Subíndice para uma seção genérica
R	Subíndice para a seção de retificação
E	Subíndice para a seção de esgotamento
R_{LV}	Razão entre os refluxos internos na seção de retificação
E_{LV}	Razão entre os refluxos internos na seção de esgotamento
G	Função de transferência para um bloco de primeira ordem
Γ	Função de transferência para um <i>shortcut</i> de uma seção
K_M	Matriz de ganhos estáticos
G_M	Matriz de transferência para uma seção
k	Ganho estático para um bloco de primeira ordem
H	Função de transferência em G_M
A	Matriz Jacobiana de estados

B	Matriz Jacobiana de entradas
C	Matriz Jacobiana de saídas
fb	Função de transferência de laços feedback
\mathcal{E}	Matriz similar proposta em um dos métodos (4.9)
U	Matriz proposta em um dos métodos (4.13)
$diag(m)$	Matriz diagonal com elementos iguais a m
λ	Autovalor (polo)
γ	Coefficiente em um dos métodos (4.15)
η	Função em um dos métodos (4.17 e 4.18)
τ	Constante de tempo
r	Número de estágios da seção de retificação
e	Número de estágios da seção de esgotamento
T	Subíndice para o estágio de topo de uma seção
B	Subíndice para o estágio de fundo de uma seção
K	Ganho estático do modelo linear completo de uma seção
$INPUT$	Subíndice para um ganho estático definido por 4.34
f_i	Ganho estático <i>feedback</i> ($fb(0)$)
IN	Subíndice para uma variável de entrada qualquer
r_s	Métrica proposta em (4.48)
ρ_s	Métrica proposta em (4.49)
OS	Subíndice para a seção oposta a uma seção S
T	Constante de tempo proposta considerando-se a direcionalidade
R_s	Métrica proposta na Seção 4.4
E_s	Métrica proposta na Seção 4.4
r_s	Métrica proposta na Seção 4.4
e_s	Métrica proposta na Seção 4.4
$cond$	Condensador
ref	Refervedor

Capítulo 1 – Introdução

O entendimento dos comportamentos estacionário e dinâmico de colunas de destilação pode ser aprimorado através de modelos simplificados com uma base fenomenológica, de forma a serem de rápida execução e interpretáveis fisicamente. Esta é uma linha de pesquisa com potencial aplicação industrial, contudo foram desenvolvidos relativamente poucos trabalhos a respeito. Neste capítulo, apresenta-se a motivação para o desenvolvimento de tais modelos, além dos objetivos e da estrutura desta dissertação.

1.1 Colunas de Destilação: Aspectos Físicos e Matemáticos

Nas plantas químicas e petroquímicas, processos de separação por destilação são amplamente empregados. Kirk-Othmer (2004) destaca a destilação contínua por fracionamento como um dos processos essenciais da Engenharia Química. Este equipamento é projetado visando-se obter um produto com maior fração do componente mais volátil da mistura alimentada, enquanto que no fundo se retira uma mistura concentrada no menos volátil. A Figura 1.1, adaptada de Lutvica *et al.*, 2013, ilustra os componentes essenciais de uma coluna fracionadora:

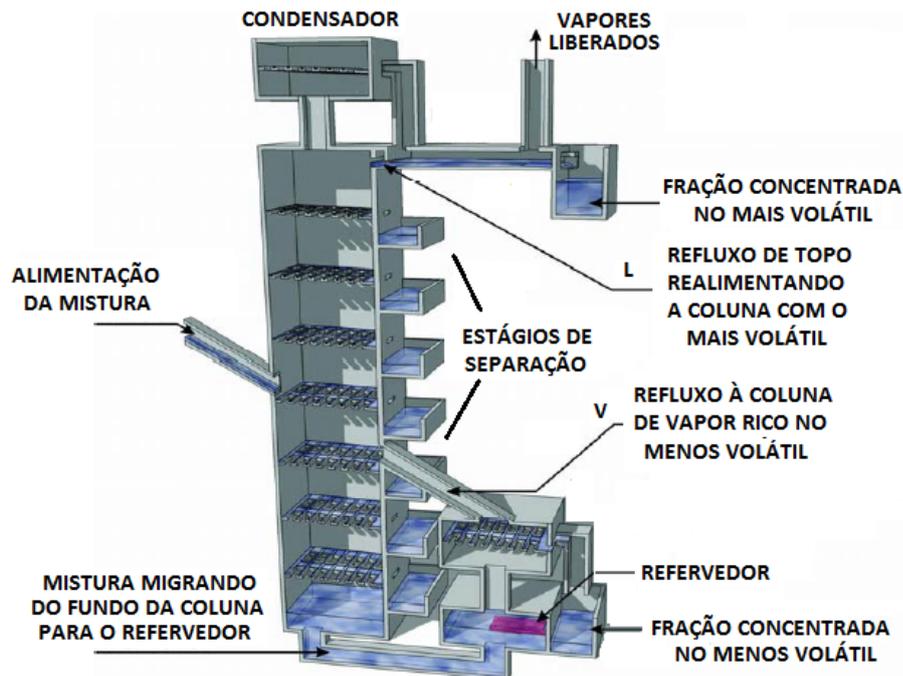


Figura 1.1: Coluna de Destilação Fracionada (Adaptado de Lutvica *et al.*, 2013).

O princípio que rege o funcionamento das colunas de destilação é a transferência de energia e de componentes entre duas fases que escoam em contracorrente, uma líquida e outra vaporizada, quando estas assumem contato em regiões denominadas estágios de separação. A partir de cada estágio se deseja obter uma mistura em equilíbrio que, na fase vapor, está enriquecida no componente mais volátil. Em cada extremo da coluna existe uma corrente de refluxo (no topo, o refluxo L ; no fundo, o refluxo V) para os estágios internos, de forma a viabilizar a circulação das fases e, deste modo, agirem como forças motrizes para a separação. Contudo, este processo na prática demanda um elevado consumo energético. Estima-se que, numa planta industrial típica, as colunas representam 40 % do consumo total de energia (Felder e Rousseau, 2005).

Para que a operação contínua seja rentável, com separação eficiente consumindo o mínimo possível de energia, deve haver um compromisso entre o número de estágios da coluna e as condições de refluxo, para a obtenção de produtos sob uma pureza desejada, a partir das condições da mistura alimentada. Na fase de projeto é avaliado o conjunto ótimo destes parâmetros a partir de métodos *shortcut* estáticos consolidados. Uma compilação destes pode ser encontrada no tutorial de Skogestad (1997). Para projeto de controladores, com o objetivo de garantir a segurança da operação e as especificações dos produtos, é requerido avaliar a comportamento dinâmico da coluna sob uma determinada condição operacional.

É conveniente realizar tais estudos mediante simulações de modelos estáticos e dinâmicos do processo, evitando-se, desta forma, intervenções na planta. Contudo, sabe-se que a modelagem destes equipamentos, mesmo na sua configuração mais simples, contendo apenas uma corrente de alimentação e supondo-se mistura aproximadamente ideal, ao ser implementada de forma rigorosa, é de elevada ordem e pode apresentar problemas numéricos devido ao mau condicionamento, efeito este pronunciado para

colunas de alta pureza, o que dificulta a sua execução em simuladores de modelos dinâmicos. Além da não linearidade característica do perfil de composições destes sistemas, em parte decorrente do equacionamento do equilíbrio líquido-vapor em cada estágio, há também o acoplamento entre os estados correspondentes às composições molares, devido à interação entre um determinado estágio e os adjacentes que implica efeitos de reciclo (*feedback*) no sistema deslocando os seus polos. Conforme a pureza da coluna aumenta, o polo dominante é direcionado para valores mais próximos da origem do lugar das raízes, correspondentes a maiores constantes de tempo. Este efeito é identificado mediante as respostas dinâmicas mais lentas de colunas de elevada pureza em comparação com as de operações em baixa pureza. Com isto, para o modelo linearizado, a razão entre os valores absolutos do maior autovalor e do menor autovalor aumenta, podendo reduzir o desempenho de métodos numéricos sensíveis à rigidez do sistema.

1.2 Motivação

As características citadas na Seção 1.1 dificultam a utilização de simulações dinâmicas rigorosas em tempo real, exigindo uma elevada demanda computacional e elevados tempos de processamento. Contudo, para aplicações de controle, otimização e treinamento de operadores, sabe-se que é suficiente um modelo simplificado (ou seja, de ordem reduzida) que capture as características dinâmicas essenciais do sistema em amplas faixas operacionais, como a direcionalidade e outros efeitos multivariáveis, e os modos dinâmicos dominantes. Se, além de atender essas características, o modelo reduzido fornecer expressões fisicamente interpretáveis, este pode ser considerado um *shortcut* que pode trazer entendimentos importantes para operação e projeto de colunas destilação.

Como a dinâmica da destilação pode ser representada por modelos de baixa ordem (Levy, 1969), a literatura apresenta diversas abordagens para a obtenção aproximada dos modos dinâmicos representativos destes sistemas. Dentre estas, destacam-se os trabalhos de Bernalou (1986), de Hwang (1995), e modelos oriundos de técnicas de identificação de sistemas. Ainda que estes modelos forneçam aproximações para os modos dinâmicos dominantes, nenhum é capaz de fornecer respostas satisfatórias e diretas às seguintes questões:

- a) Por que colunas com ambos os produtos de alta pureza apresentam respostas significativamente lentas frente a outros cenários de operação? Esta questão está relacionada à localização dos polos no plano complexo.
- b) Por que as colunas podem responder de acordo com uma dinâmica mais rápida, quando sujeita a um padrão de perturbações específico na direção de menor ganho? Além disso, por que uma seção da coluna pode responder dinamicamente de forma lenta enquanto a outra pode de forma rápida? Questões estas relacionadas com a direcionalidade.
- c) Qual a relação dos ganhos estáticos com o deslocamento dos pólos da coluna devido à presença das correntes de refluxo? Tal questão está relacionada com a interação entre os sub-sistemas que compõe a coluna: condensador, refeedor, prato de alimentação e as zonas de retificação e de esgotamento.

Para que questões como as acima sejam elucidadas, os modelos *shortcut* são requeridos. Desta categoria, destacam-se dois modelos: Skogestad e Morari (1988) apresentam algumas respostas para as questões (a) e (b), enquanto que Kapoor e McAvoy (1986) estudam as questões (a) e (c).

A viabilidade para desenvolver tais modelos decorre dos seguintes fatores:

- As respostas dinâmicas de colunas de destilação são essencialmente dominadas por uma ou duas constantes de tempo, como já mencionado;
- É possível tomar como ponto de partida um modelo linear para os desenvolvimentos, e neste utilizar os valores das variáveis de operação avaliados em um determinado estado estacionário, pois estes são prontamente obtidos a partir de simuladores estacionários presentes na indústria.

O último fator apresentado leva em conta a maior facilidade e disponibilidade de se utilizar um simulador estático de colunas de destilação, o qual pode ser usado ponto de partida para o cálculo do modelo dinâmico simplificado.

1.3 Objetivos

Um modelo matemático que represente a dinâmica dominante de forma fisicamente interpretável requer expressões matemáticas simples para as constantes de tempo dominantes e uma formulação para captura da direcionalidade. Partindo-se destes requerimentos, os objetivos deste trabalho são:

- I. Desenvolver um método simplificado (*shortcut*) para a simulação de colunas de destilação operando com misturas binárias aproximadamente ideais. Este deve ser capaz de prever o comportamento estacionário e o dinâmico, com compromisso entre acurácia para fins de controle ou aplicações em tempo real, e simplicidade das expressões para que estas sejam fisicamente interpretáveis. Como os sistemas abordados são multivariáveis, a direcionalidade destes também deve ser prevista;
- II. Verificar a viabilidade deste método para predição da dinâmica em colunas de destilação com diversas condições operacionais, comparando-a com os respectivos modelos lineares de ordem completa e com o não linear;
- III. Fornecer contribuições para o entendimento do comportamento estático e dinâmico, além da direcionalidade, para fins de projeto e operação de colunas de destilação, conforme o diagrama da Figura 1.2:

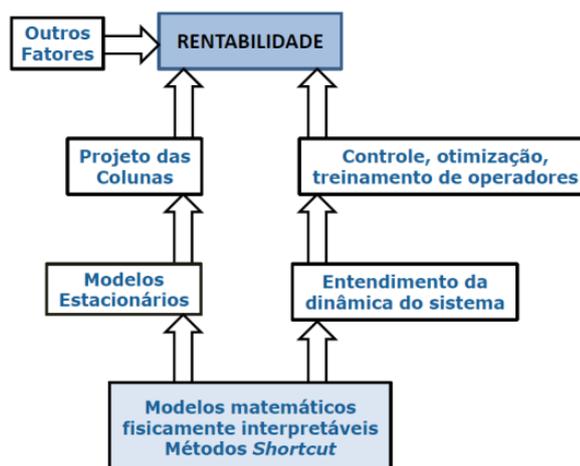


Figura 1.2: Contribuições de um Modelo *Shortcut* para Colunas de Destilação.

Para tanto, foram desenvolvidos:

- Uma abordagem de divisão da coluna em seções (sub-sistemas), unidas mediante álgebra de blocos;
- Expressões exatas para os ganhos estáticos das seções, e simplificadas para seus modos dinâmicos dominantes;
- Critérios para predição da direcionalidade com base na modificação do perfil de concentrações de cada seção quando a coluna é sujeita a perturbações nos refluxos.

O principal requisito para a aplicação das técnicas propostas é um modelo linear da coluna. Este pode ser prontamente formulado a partir da linearização de um modelo fenomenológico da coluna.

1.4 Estrutura da Dissertação

Nesta dissertação, o Capítulo 2 apresenta a revisão bibliográfica relativa aos modelos apresentados na literatura, além de conceitos relevantes aos estudos realizados neste trabalho. No Capítulo 3 são apresentados o modelo não linear e o linearizado, assim como a representação em álgebra de blocos. Neste capítulo se propõem um método para geração da álgebra de blocos dos sistemas abordados e expressões para o modelo estático. No Capítulo 4 é mostrado como se podem obter os modelos estáticos e dinâmicos de ordem reduzida capazes de capturar a direcionalidade dos sistemas abordados. O método desenvolvido no Capítulo 4 foi testado e validado para diversas colunas de destilação operando sob distintas condições de refluxo, número de estágios e características de mistura. O método foi avaliado frente ao modelo linear completo e ao não linear, e comparado também com o método de Skogestad e Morari (1988). Os resultados desta análise são apresentados e discutidos no Capítulo 5, cabendo ao Capítulo 6 o fechamento da dissertação através da apresentação das conclusões e sugestões para trabalhos futuros.

Capítulo 2 – Revisão Bibliográfica

Neste capítulo é apresentado um breve histórico dos modelos reduzidos para colunas de destilação presentes na literatura, além de alguns conceitos importantes para o entendimento do comportamento dinâmico desses sistemas.

2.1 Abordagens para Modelagem de Colunas de Destilação

Os modelos para colunas de destilação podem ser concebidos mediante três distintas abordagens (Truong *et al.*, 2010):

- I) **Modelagem fenomenológica:** Os modelos são gerados a partir das relações de conservação de massa, energia e momento, além da termodinâmica e das equações constitutivas. Hipóteses simplificativas podem ser assumidas sobre estas relações, implicando distintos graus de complexidade para os modelos, desde os tipicamente classificados como “rigorosos” até os mais simples. Apresentam validade global para os sistemas abordados, sendo que o fator restritivo é a qualidade das aproximações. Contudo, mesmo em configurações mais simples, podem apresentar complexidade inviável para aplicações em controle. Usualmente o desenvolvimento de tais modelos é dispendioso (Seborg *et al.* 2004).
- II) **Modelos empíricos (caixa-preta):** Utilizam dados de entrada e de saída da planta, requerendo, portanto, intervenções nesta. Os modelos gerados são relações empíricas entre as entradas e saídas, não explicitando a dinâmica natural dos sistemas. Com isto, o custo computacional é significativamente reduzido comparado com (I), porém a validade de aplicação se restringe ao sistema estudado ou até mesmo a uma faixa restrita de pontos de operação para um mesmo sistema. Esta abordagem é a frequentemente utilizada na indústria.
- III) **Modelos híbridos (caixa-cinza):** Combina as características das abordagens (I) e (II), de forma a ser possível gerar modelos mais flexíveis e precisos, sem sacrificar a simplicidade destes para aplicações em controle. A contribuição fenomenológica pode ser oriunda de um modelo *shortcut*.

A abordagem I conduz a modelos de ordem elevada, não condizentes com os objetivos deste trabalho. As abordagens II e III visam gerar modelos de ordem reduzida, e

suas formulações matemáticas são geradas mediante técnicas de identificação de sistemas (Ljung, 1999).

Uma quarta categoria corresponde à abordagem *shortcut* apresentada no Capítulo 1:

IV) **Modelos dinâmicos *shortcut***: Podem ser obtidos a partir da redução de ordem aliado a um entendimento aprofundado acerca do comportamento dinâmico do sistema, que possibilite estruturar expressões matemáticas simples para as constantes de tempo dominantes deste. Ao serem utilizados isoladamente, podem requerer um modelo linear. Na ausência de um modelo linearizado, podem ser úteis para potencializar a predição de modelos caixa-cinza como os definidos em (III).

As abordagens II e III podem ser úteis para aplicações em tempo real devido à sua rápida execução, oferecendo baixo custo computacional. Entretanto, dificilmente fornecerão expressões que forneçam uma rápida explicação física acerca das relações entre as variáveis de operação da coluna. A presença de parâmetros ajustados, oriundos da técnica de identificação empregada, já pode ser suficiente para dificultar o entendimento físico destas relações. Tanto estes parâmetros como os estados estão sujeitos a não apresentarem significado físico (Benallou *et al.*, 1986). Neste sentido, a abordagem IV, correspondente ao escopo deste trabalho, é interessante. Porém, quando utilizada para modelar integralmente a dinâmica do sistema, requer o seu respectivo modelo linearizado.

Uma quinta abordagem corresponde a modelos não lineares clássicos da literatura:

V) **Modelos reduzidos não lineares**: Na década de 80, foram propostas distintas abordagens para geração de modelos não lineares de ordem reduzida para destilação. Três grupos desta categoria são aqui abordados: modelos de compartimentos, como o de Benallou *et al.* (1986); modelos de colocação ortogonal, como o de Stewart *et al.* (1983); modelos de propagação de onda, como o de Hwang (1995). Como estes modelos são não lineares e relativamente complexos, não estão de acordo com os objetivos do presente trabalho. Contudo, serão abordados por apresentarem contribuições para o entendimento da dinâmica de colunas.

A Tabela 2.1 apresenta um comparativo entre as características das abordagens I a IV, no contexto de aplicação destas às colunas de destilação.

Tabela 2.1: Características intrínsecas e desejadas para cada abordagem (tipo de modelo).

Tipo de Modelo	Objetivo principal	Complexidade para simulações	Como gerar?	<i>Insight</i> acerca da física dos sistemas	Exatidão
I	Simulações rigorosas	Maior possível enquanto viável de rodado. Está sujeito a problemas numéricos, de inicialização e convergência	Modelo não linear bem detalhado	Dificulta uma rápida interpretação física	Elevada
II,III	Aplicações industriais em tempo real	Baixa. Simulações dinâmicas de baixo custo. Fácil de ser mantido	Pode requerer ajustes de parâmetros e técnicas de redução de ordem	Razoável, mas a presença de parâmetros de ajuste pode ser um empecilho	Boa para controle
IV	Fornecer <i>insight</i> sobre a dinâmica dominante e efeitos MIMO	Menor possível	Requer manipulações algébricas com base no entendimento físico	Melhor possível	Boa para controle, contudo inferior à de (II)

Nas próximas seções serão discutidas as diferentes abordagens apresentadas na Tabela 2.1.

2.2 Modelos de Ordem Reduzida Não Lineares

2.2.1 Modelos Compartmentados

Segundo Benallou *et al.* (1986), é possível considerar diversos estágios de uma coluna de destilação como agrupados em uma unidade chamada de “compartimento”, a qual é modelada dinamicamente como se fosse apenas um estágio. O *holdup* de massa neste compartimento é equivalente ao somatório dos *holdups* de massa individuais de cada estágio englobado pelo compartimento. Adicionalmente, considera-se que os estágios

apresentam a mesma resposta dinâmica, e que a composição no interior do compartimento é equivalente à de um prato denominado como “prato sensível”. Estas considerações reduzem consideravelmente a ordem do modelo, por gerarem um menor sistema de equações algébrico-diferenciais. O método mantém o significado físico das variáveis de estado e não requer a linearização do sistema. Contudo, é reportado por Horton *et al.* (1991) que este método pode prever respostas inversas inexistentes no modelo de ordem completa. Caso este problema gere uma ação de controle no sentido oposto, as respostas dinâmicas podem apresentar problemas de estabilidade (Horton *et al.*, 1991).

Horton *et al.* (1991) propõem um modelo compartimentado com melhorias, com uma estrutura algébrica adequada que também fornece melhor precisão e menor custo computacional. Os autores também recomendam alguns procedimentos para que o método seja aplicado corretamente. Um deles consiste em fazer a adequada escolha da posição de divisão dos compartimentos, prevenindo a ocorrência de respostas inversas inexistentes no modelo de ordem completa.

2.2.2 Modelos de Propagação de Ondas

Esta classe de modelos considera a transferência de massa através do sistema como um perfil de variação de propriedades físicas, como as composições no caso de colunas de destilação, que migra através do sistema e altera seu formato no decorrer do tempo, após o sistema ser sujeito a um conjunto de perturbações ou distúrbios. Este perfil é denominado “onda”, e este conceito foi pioneiramente desenvolvido por Gilles e Retzbach (1980). Aplicam-se estes modelos em equipamentos que trabalham com escoamentos em contracorrente, como colunas de destilação, e para os que apresentam leito fixo. A diferença principal entre cada aplicação reside nas condições de contorno da equação diferencial parcial característica do sistema.

Hwang (1995) apresenta o embasamento teórico dos modelos baseados em propagação de onda, para processos de transferência de massa, de forma detalhada. Matematicamente, a migração da onda através da extensão do equipamento pode ser descrita por uma equação diferencial parcial originada de um balanço de massa. O autor considera uma coluna ideal em equilíbrio e sem dispersão axial, além da hipótese de fluxos molares constantes e *holdups* com variação nula em cada fase. De-sta forma, o balanço de massa para uma camada infinitesimal da coluna leva à Equação 2.1:

$$\frac{\partial x}{\partial t} + w \frac{\partial x}{\partial z} + r \left(\frac{\partial y}{\partial t} - u \frac{\partial y}{\partial z} \right) = 0 \quad (2.1)$$

Onde u é a velocidade de fluxo para um processo contracorrente, w é a velocidade linear de escoamento da fase líquida e r é a razão entre os *holdups* das fases líquida e vapor. Com algumas manipulações algébricas, pode-se obter uma relação de equilíbrio entre a fase líquida e a vapor devido à hipótese de equilíbrio em cada estágio, conduzindo à Equação 2.2:

$$\frac{\partial x}{\partial t} + v \frac{\partial x}{\partial z} = 0 \quad (2.2)$$

Em que v é a velocidade de propagação de onda definida pela Equação 2.3:

$$v = \frac{w - u r \frac{\partial y}{\partial x}}{1 + r \frac{\partial y}{\partial x}} \quad (2.3)$$

Observa-se na Equação 2.3 que a inclinação da curva de equilíbrio é representada pelo termo $\frac{\partial y}{\partial x}$ e que a velocidade de onda local decresce de forma monotônica conforme aumenta a inclinação desta curva, de forma a moldar o perfil de composições de forma similar ao observado tipicamente em colunas de destilação, ainda mais evidente para colunas de alta pureza.

A migração da onda é influenciada por duas contribuições: Mecanismo de convecção em equilíbrio (a) e mecanismos de dissipação (b).

O mecanismo (a) é o principal responsável pelo comportamento não linear, representado pelas variações de formato e velocidade da onda. Os mecanismos (b) são aproximadamente lineares por estarem relacionados com as condições de operação e com a estrutura do equipamento, e abrangem os efeitos de não equilíbrio e de dispersão axial.

Contudo, ainda que esta abordagem contribua para o entendimento das alterações no perfil de composições da coluna, a complexidade de seu tratamento matemático a torna inviável para ser tomada como ponto de partida para geração de modelos *shortcut*.

2.2.3 Modelos de Colocação Ortogonal

Nesta abordagem, o objetivo é reduzir a ordem do sistema de equações algébrico-diferenciais a partir da aproximação dos estados por polinômios ajustados ao modelo do processo. O ajuste é feito utilizando-se pontos que forneçam aproximação adequada das características dinâmicas do equipamento como um todo (Stewart *et al.*, 1983).

Apesar dos resultados tipicamente satisfatórios, o método é menos eficiente quando aplicado a operações que demandam produtos de alta pureza. É o caso das colunas que operam com baixas razões de refluxo, mas demandam elevada pureza nas especificações, apresentando regiões contendo estágios onde há baixo enriquecimento. Segundo Stewart *et al.* (1983), funções que levem a um ajuste polinomial mais flexível, de forma a considerar este caso, por exemplo, são necessárias.

Pinto e Biscaia (1988) analisam quatro diferentes estratégias de colocação ortogonal para serem aplicados em processos de separação por estágios: (a) Colocação ortogonal seccional sem extrapolação; (b) colocação ortogonal seccional com extrapolação; (c) colocação ortogonal utilizando splines e (d) colocação ortogonal global.

Os resultados obtidos por Pinto e Biscaia são melhores que os obtidos por Stewart *et al.* (1983), porém a caracterização da resposta dinâmica também apresenta limitações, como mostrado nos estudos de caso em que o método (d) foi utilizado. Segundo Pinto e Biscaia, os métodos (b) e (c) não são recomendados para os casos estudados, porém não descartam a possibilidade de que sejam eficientes para outros tipos de sistemas de separação por estágios.

Outra característica limitante deste tipo de técnica é que os parâmetros gerados através do método são difíceis de serem ajustados e não apresentam significado físico (Skogestad, 1992), sendo inviável para ser ponto de partida para o desenvolvimento de modelos simplificados com significado físico.

2.3 Dinâmica Dominante da Composição e *Shortcuts* para sua Predição

2.3.1 Dinâmica Dominante de Baixa Ordem das Composições

Para o caso da destilação, o desenvolvimento de modelos de ordem reduzida é viável, devido às respostas dinâmicas próximas às de um modelo de primeira ordem observadas para as composições, as quais também são dominantes frente aos efeitos hidráulicos e térmicos. Esse comportamento foi estudado e verificado por Levy *et al.* (1969), via análises modais. A partir de técnicas de desacoplamento dos efeitos dinâmicos do sistema, são obtidas as combinações lineares das variáveis de processo comportando-se como se elas não interagissem entre si. Estas combinações são denominadas de modos, que são ativados mediante perturbações nas variáveis de entrada (refluxos e condições de alimentação). Tal análise, além de caracterizar dinâmicas particulares do processo, é útil para desenvolver estratégias de controle que reduzam a interação entre variáveis fortemente acopladas.

Segundo Levy *et al.* (1969), se o modo é desativado rapidamente, então a dinâmica é considerada rápida no sistema, com a ressalva de que a ativação de um determinado modo não pode ser considerada de forma independente das ativações dos outros modos associados a uma mesma perturbação. O autor demonstrou que os modos relacionados às composições de produtos apresentaram ativações mais duradouras, ou seja, dinâmicas mais lentas, que os correspondentes às temperaturas e aos *holdups* de líquido nos respectivos pratos. Com isto, o trabalho de Levy *et al.* (1969) explicitou a presença da dinâmica dominante das respostas da composição às perturbações.

2.3.2 Modelo de Wahl e Harriott

O trabalho de Wahl e Harriott (1970) teve como objetivo explicar fisicamente a dinâmica dominante. Os autores estabeleceram um parâmetro denominado taxa de circulação reduzida, L_r , como métrica da capacidade do sistema se manter em equilíbrio:

$$L_r = \frac{L/H_t}{1/T_s} \quad (2.4)$$

O numerador da Equação 2.4 é a definição de taxa de circulação, definida como o efeito da taxa de mistura entre as correntes de líquido e de vapor, ou seja, o quanto é armazenado de fluido no interior da coluna, expresso pela capacitância H_t , para uma dada vazão L . O denominador expressa o grau de afastamento do sistema do estado estacionário, onde T_s é uma constante de tempo do sistema linearizado, de magnitude próxima a uma constante de tempo considerada dominante do processo. Com esta análise, valores de taxa de circulação elevados indicam mais intensidade na transferência de massa, com menos acúmulo de líquido por estágio.

Segundo Wahl e Harriott (1970), a partir dos parâmetros acima descritos, perturbações na composição da alimentação de colunas com baixa taxa de circulação se propagam através do equipamento como se este fosse uma série de tanques

perfeitamente agitados. Como cada tanque é expresso por uma função de transferência de primeira ordem, para n tanques tem-se um conjunto de n sistemas de primeira ordem em série. Por exemplo, um conjunto de três pratos consecutivos apresenta uma resposta de terceira ordem. No que tange às respostas de composição, uma mudança na corrente de vapor enviada do refeedor para a coluna leva a uma resposta de primeira ordem em cada prato por parte da variação da vazão de vapor. Com relação à carga da alimentação, caso esta seja predominantemente líquida, a mudança de composição em cada prato é consideravelmente mais lenta que as variações no nível de líquido do respectivo estágio. Portanto, com baixas taxas de circulação a seção inferior da coluna apresenta uma resposta de primeira ordem equivalente à de um prato apenas, enquanto que os pratos no topo da coluna respondem como uma sequência de tanques em série.

A partir destes estudos, a conclusão é que estas interações entre os pratos, por levarem estes a apresentarem respostas de composição aproximadamente iguais, levam o sistema a apresentar um comportamento de baixa ordem, mesmo sendo naturalmente de ordem mais elevada quanto maior for a quantidade de estágios. Isto também pode ser verificado a partir da matriz de autovalores das derivadas das equações diferenciais do modelo em relação aos estados, analisando a similaridade de magnitude entre os diversos autovalores.

2.3.3 Primeiras Formulações para a Constante de Tempo Dominante

Uma aproximação para a constante de tempo dominante do coluna, τ_{col} , que não requer um modelo linearizado a partir da modelagem fenomenológica de todos os pratos, foi proposta a partir da abordagem utilizada por Moczek *et al.* (1963). Esta considera que todos os estágios da coluna apresentam respostas equivalentes, de forma a se obter a seguinte expressão:

$$\tau_{col} = \frac{\Delta(\sum M_i x_i)}{\Delta(Fz) - y_{D0}\Delta D - x_{B0}\Delta B} \quad (2.5)$$

Onde $\Delta(\sum M_i x_i)$ é a variação em holdup molar para um determinado componente chave em toda a coluna (somatório das variações individuais em cada estágio representado pelo subíndice i), para um determinado componente. ΔD e ΔB são as variações nas vazões dos produtos de saída quando a coluna é sujeita a perturbações em ΔL e ΔV e distúrbios em ΔF . y_{D0} e x_{B0} são as composições iniciais dos produtos.

Este tipo de resultado indica que a resposta da composição em malha aberta apresenta uma constante de tempo significativamente mais elevada que as outras, tornando-se essencialmente de primeira ordem. A constante de tempo dominante pode ser estimada a partir da consideração de que todos os estágios possuem a mesma resposta dominante, o que corresponde à aproximação da coluna de destilação por um tanque de mistura (Davidson, 1956). Uma solução analítica para esta constante de tempo foi obtida por Skogestad e Morari (1987):

$$\tau = \frac{\frac{M_I}{lnS} + M_D y_D (1 - y_D) + M_B x_B (1 - x_B)}{D y_D (1 - y_D) + B x_B (1 - x_B)} \quad (2.6)$$

Onde M_I é o inventário total de líquido no interior da coluna, e S é o fator de separação, cujo logaritmo natural é usualmente 10 (Shinsky, 1984) e é definido pela Equação 2.7.

$$S = \frac{y_D(1-x_B)}{x_B(1-y_D)} \quad (2.7)$$

Pela Equação 2.6, quanto maior a pureza da coluna, mais elevada é a constante de tempo, condizendo com o observado na prática, por exemplo, para colunas de destilação de alta pureza.

2.3.4 Modelo Shortcut com Base nas Retroalimentações entre os Estágios

Kapoor e McAvoy (1986) propõem um modelo que estima a constante de tempo dominante da coluna a partir da redução de ordem, realizada através do Método dos Momentos, de uma função de transferência oriunda de conexões de funções de transferências entre modelos reduzidos para as seções de retificação e esgotamento, refervedor e condensador. Com esta abordagem, os autores são capazes de explicar o aumento da constante de tempo dominante conforme a coluna opera com especificações de maior pureza. Como estas colunas operam a elevados refluxos, os polos da função de transferência da resposta da composição em cada estágio são deslocados em direção à origem devido às várias retroalimentações entre os pratos.

2.4 Direcionalidade em Colunas de Destilação

As colunas de destilação são sistemas MIMO com forte interação (Skogestad, 1987). Portanto, considerando-se a estrutura LV, a dinâmica das composições estacionárias da coluna pode apresentar dois comportamentos distintos para uma determinada combinação de perturbações nas correntes de refluxo e de vapor. Este comportamento em colunas é observado há décadas (Skogestad, 1988). Contudo o modelo de Skogestad e Morari (1988) é o primeiro a considerar este efeito.

2.4.1 Modelo das Duas Constantes de Tempo (Skogestad e Morari, 1988)

Skogestad e Morari (1988) apresentam a primeira formulação para captura da direcionalidade em colunas. Os autores definem que as direções das perturbações afetam o comportamento dinâmico de duas formas distintas:

A) Dinâmica Lenta: corresponde às direções de perturbações não alinhadas com a de menor ganho. As composições estacionárias da coluna são significativamente mais sensíveis a estas perturbações, e este efeito é mais significativo conforme mais puros são os produtos. Caso a perturbação esteja alinhada com a direção de maior ganho, onde $\Delta L = -\Delta V$ para o caso ideal, as composições da coluna sofrerão a máxima alteração possível.

B) Dinâmica Rápida: corresponde à direção $\Delta L = \Delta V$, para a qual as composições estacionárias da coluna são menos sensíveis.

Conforme Skogestad e Morari (1988), estes efeitos se devem às diferentes formas em que o perfil de concentrações da coluna é afetado pelas perturbações. Para (A), as variações nos refluxos de topo (ΔL) e fundo (ΔV) alteram as vazões dos produtos de forma que a pureza de um deles é aumentada em detrimento da pureza do outro. Isto equivale a um translado do perfil, com comparativamente pouca alteração em sua

inclinação. Para (B), as perturbações não alteram as vazões dos produtos, de forma a não alterar significativamente as suas composições. Neste caso, o perfil de concentrações sofre alterações predominantemente em sua inclinação, com deslocamento desprezável.

Skogestad e Morari (1988) propuseram um modelo linear cuja maior contribuição é prever a direcionalidade. As entradas avaliadas são as vazões correspondentes a escoamentos externos e internos, definidos como:

Escoamentos externos: Vazões de saída de produto de fundo e de topo.

Escoamentos internos: São as vazões de refluxo no topo e de vapor realimentando a coluna pelo fundo.

Os autores demonstram que baixas variações nos escoamentos externos implicam efeitos significativos nas composições dos produtos, sob uma dinâmica lenta. Para este caso, as saídas são afetadas em direções opostas, ou seja, o produto de topo se torna mais puro e o produto de fundo tem sua composição reduzida. Alterações simultâneas nos escoamentos internos, de forma a manter D (vazão de destilado) e B (vazão do produto de fundo) constantes no estado estacionário, resultam em maior pureza nos produtos de topo e de fundo, e a dinâmica das composições para este caso é significativamente mais rápida. O modelo final apresentado, considerando-se a direcionalidade, está representado conforme as Equações 2.8 e 2.9:

$$dx_1 = \frac{K_{x_1,L}}{1+\tau_1 S} dL + \left(\frac{K_{x_1,L} + K_{x_1,V}}{1+\tau_2 S} - \frac{K_{x_1,L}}{1+\tau_1 S} \right) dV \quad (2.8)$$

$$dx_n = \frac{K_{x_n,L}}{1+\tau_1 S} dL + \left(\frac{K_{x_n,L} + K_{x_n,V}}{1+\tau_2 S} - \frac{K_{x_n,L}}{1+\tau_1 S} \right) dV \quad (2.9)$$

Onde as constantes de tempo τ dominantes de maior módulo (subíndice 1) e de segundo maior módulo (subíndice 2) podem ser obtidas conforme Skogestad e Morari (1988):

$$\tau_1 = \frac{M(n-2)}{I_S \ln(S)} + \frac{M_1 y_1 (1-y_1)}{I_S} + \frac{M_n x_n (1-x_n)}{I_S} \quad (2.10)$$

$$\tau_2 \sim \tau_1 \left[\frac{L}{F} \left(\frac{K_{x_1,V}}{K_{x_1,L}} - \frac{K_{x_n,V}}{K_{x_n,L}} \right) + \frac{K_{x_1,V}}{K_{x_1,L}} \right] \quad (2.11)$$

E os ganhos estáticos $K_{Y,U}$, de uma variação na entrada para uma variação na saída, podem ser obtidos a partir do modelo linear da coluna.

Os autores reduzem os efeitos da não linearidade aplicando a hipótese de Ryskamp (1981), que afirma que a não linearidade relativa aos perfis de concentração na coluna pode ser reduzida mediante a utilização do logaritmo natural das concentrações:

$$d(\ln(1 - y_D)) = -\frac{1}{1-y_D} dy_D \quad (2.12)$$

$$d(\ln x_B) = \frac{1}{x_B} dx_B \quad (2.13)$$

No que tange a alteração do ponto de operação, foi observado pelos autores que a aplicação da hipótese de Ryskamp leva os elementos das matrizes de ganhos dinâmicos a apresentarem as mesmas ordens de grandeza entre si, reduzindo consideravelmente os efeitos da não linearidade, o que possibilitaria a implementação de controladores lineares. Melhorias, ainda que não tão significativas como as observadas no período transiente, também são verificadas ao serem comparadas as matrizes de ganhos estáticos. Conforme Skogestad e Morari (1987), aplicar a hipótese de Ryskamp equivale a tornar comparáveis os valores dos estados do processo, a partir da seguinte mudança de escala na matriz de ganhos:

$$H(s) = \begin{pmatrix} F_0/(1 - y_{D0}) & 0 \\ 0 & F_0/x_{B0} \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

Onde $H(s)$ é uma matriz escalonada após a mudança de escala, e o sub-índice 0 indica valores nominais (estado estacionário) das respectivas variáveis. Observa-se que esta mudança de escala apresenta maiores benefícios conforme mais puros forem os produtos de saída, tornando o perfil de concentrações menos discrepante nos pratos intermediários da coluna em relação às seções inferior e superior do equipamento. Pelo fato de o modelo desenvolvido por Skogestad e Morari ser linear, ele se torna adequado para análises típicas de controle de processos, como a determinação de polos, zeros, RGA e outras métricas importantes.

As colunas de alta pureza com elevados refluxos apresentam constantes de tempo dominantes mais elevadas que as colunas de baixa pureza. Isto é devido ao atraso na resposta devido às mais intensas circulações internas através dos estágios. Portanto, para colunas de baixa pureza, as duas constantes de tempo propostas por Skogestad e Morari se tornam mais próximas, podendo ser representadas por um modelo contendo apenas uma constante de tempo. Skogestad e Morari ignoram o efeito das recirculações em sua abordagem, e o consideram uma complicação desnecessária (Skogestad e Morari, 1987). Entretanto, esta característica presente em sistemas envolvendo retroalimentações internas de estados é importante para o entendimento da dinâmica dominante, sendo explorada por Kapoor e McAvoy (1986).

2.4.2 Modelo de Sáfors e Waller

Sáfors e Waller (1995) estendem a abordagem de Skogestad e Morari (1987) para direcionalidade, considerando o entendimento físico acerca das saídas das colunas após um padrão de perturbações, e também aplicando suas métricas para colunas reais. Os autores demonstram que a dinâmica rápida não corresponde necessariamente a perturbações que levem a $\Delta D \sim \Delta B \sim 0$, ainda que esta seja uma consideração razoável para fins práticos, mas sim quando o somatório das variações internas do componente entre os estágios é aproximadamente nulo, $\sum M_i \Delta x_i \sim 0$. Fisicamente isto significa uma redistribuição do componente entre os estágios da coluna, de forma a não alterar significativamente a pureza dos produtos.

Capítulo 3 – Características e Representações dos Sistemas Estudados

Neste capítulo, são apresentadas as características gerais das colunas estudadas, assim como um modelo dinâmico não linear típico que as representa. Sua versão linearizada e as correspondentes funções de transferência também são descritas. Adicionalmente, é apresentado um método sistemático para gerar a representação na forma de diagrama de blocos para sistemas cuja matriz Jacobiana de estados seja tridiagonal. Este método também permite a obtenção de expressões analíticas para os ganhos estáticos do sistema.

3.1 Sistemas Estudados e Hipóteses Simplificativas

Neste trabalho, são abordadas colunas de destilação de distintos graus de pureza, considerando-se diversos cenários de operação. Assume-se que as colunas são destinadas a separar misturas binárias com comportamento relativamente próximo ao ideal.

O modelo não linear para estas colunas, utilizado neste trabalho, decorre da aplicação das hipóteses simplificativas descritas nas Seções 3.1.1 a 3.1.4. Está sendo considerada base molar para os equacionamentos, portanto, onde está escrito “*holdup*”, subentende-se “*holdup* molar”. Esta consideração é análoga para as vazões e composições.

3.1.1 *Holdup da Fase Vapor Desprezível Frente ao da Fase Líquida*

Segundo Choe e Luyben (1987), esta hipótese é satisfeita se a pressão da coluna é inferior a 10 bar, ou no caso em que o *holdup* da fase vapor seja 20 % daquele da fase líquida. Esta consideração é, portanto, aplicável em diversas situações práticas, exceto para colunas operando a elevadas pressões ou com misturas de componentes altamente voláteis. Com esta hipótese, os balanços materiais são escritos em termos da fase líquida apenas.

3.1.2 *Holdup Constante da Fase Líquida*

Conforme os estudos de Levy (1969), a dinâmica da composição é significativamente mais lenta que a das vazões. Portanto, pode-se assumir como constante o *holdup* da fase líquida em cada estágio e vaso de acúmulo, caso o objetivo de controle seja manter composições nas especificações desejadas. Além disso, pratos com vertedouro operam bem próximos da condição de *holdup* constante. Com esta hipótese, reduz-se o número

de estados, pois a dinâmica de inventário de líquido em cada prato está sendo desprezada.

3.1.3 Vazões Molares Constantes em Cada Seção da Coluna

Esta hipótese é válida considerando-se que:

- a) As entalpias molares de vaporização dos componentes são próximas entre si e independentes da concentração molar;
- b) a entalpia de mistura pode ser negligenciada;
- c) os efeitos térmicos das transferências de calor sensível entre cada corrente e as vizinhanças é desprezível frente às variações de calor latente;
- d) a pressão é relativamente constante ao longo da coluna;
- e) os estágios de equilíbrio operam adiabaticamente.

Assumindo-se que estas considerações são aplicáveis aos sistemas estudados, a consequência é que o balanço de energia não é requerido para determinar as vazões molares em cada seção. Portanto, não existindo correntes de entrada ou de saída adicionais nos estágios internos, as vazões molares de cada fase permanecem constantes tanto no interior da seção de retificação (R) como no da de esgotamento (E):

$$V_R = V + (1 - q)F \quad (3.1)$$

$$L_R = L \quad (3.2)$$

$$V_E = V \quad (3.3)$$

$$L_E = L + qF \quad (3.4)$$

Onde V é a vazão molar de vapor gerado no refeedor, L é a vazão molar do refluxo da coluna e F é a vazão molar da corrente de alimentação. A fração da vazão da corrente de alimentação que se encontra em fase líquida é expressa por q .

3.1.4 Volatilidade Relativa Constante ao Longo da Coluna

O equilíbrio líquido-vapor (ELV) em cada estágio pode ser expresso em termos da volatilidade relativa α entre os componentes de uma mistura aproximadamente ideal.

3.2 Modelo Dinâmico Não Linear de uma Seção da Coluna

O modelo não linear utilizado considera que a coluna é representada como a conexão entre suas seções de retificação (R) e de esgotamento (E), definidas a partir do prato de alimentação o qual corresponde ao estágio f .

3.2.1 Representação da Coluna por Seções

O esquema para as colunas abordadas é ilustrado pela Figura 3.1:

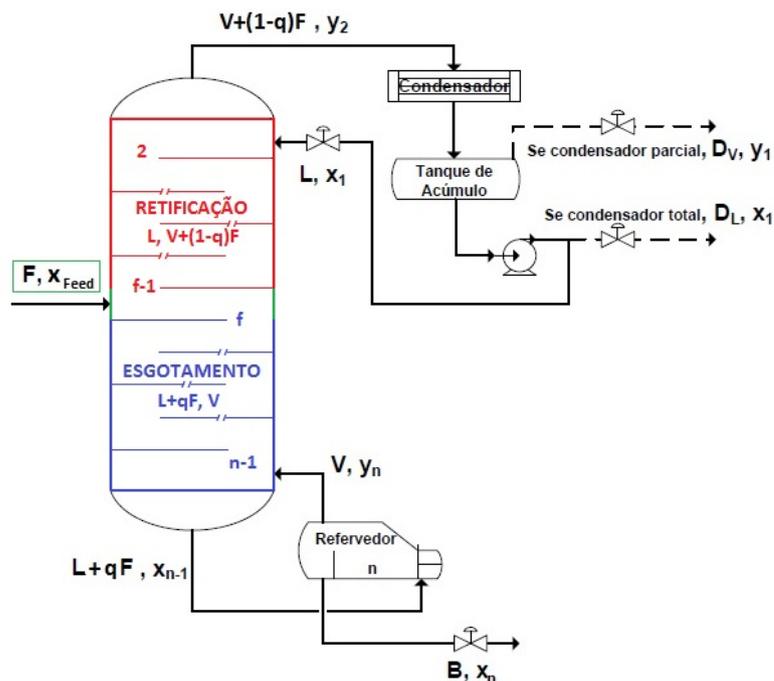


Figura 3.1: Representação Esquemática da Coluna de Destilação.

A coluna da Figura 3.1 pode ser dividida em seções, representadas por: (I) Condensador (índice 1); (II) Estágios internos da seção de retificação, incluindo o acima da alimentação (índices 2 a $f - 1$); (III) Estágios internos da seção de esgotamento, incluindo o de alimentação (índices f a n); (IV) Refevedor (índice n). O balanço material pode ser representado como a união dos modelos de cada seção, conforme ilustrado pela Figura 3.2:

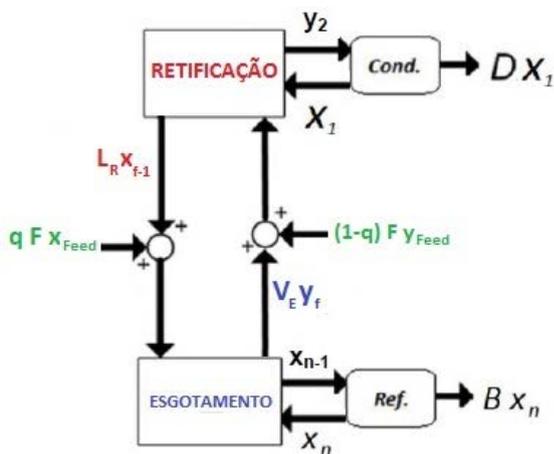


Figura 3.2: Balanço Material nas Seções da Coluna.

Onde x_j e y_j são as composições molares do componente de referência no estágio j , na fase líquida e na fase vapor, respectivamente. Os subíndices 1, f e n correspondem, respectivamente, às correntes de saída de destilado com vazão molar D , de saída do estágio de alimentação, e de saída do produto de fundo com vazão molar B .

Para uma corrente de alimentação de composição z_{Feed} , o balanço material da Equação (3.5) corresponde ao prato de alimentação:

$$F z_{Feed} = qF x_{Feed} + (1 - q)F y_{Feed} \quad (3.5)$$

Uma seção S qualquer da coluna é ilustrada pela Figura 3.3:

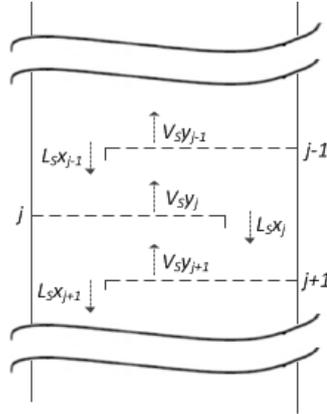


Figura 3.3: Estágios Internos de uma Seção S.

Cada seção S ($S = R$ para a de retificação, $S = E$ para a de esgotamento) contém um estágio de topo t_S , e um total de n_S estágios, onde:

- Caso a seção seja a zona de retificação:

$$t_R = 2; n_r = f - 1.$$

- Caso a seção seja a zona de esgotamento:

$$t_E = f; n_e = n - f - 1.$$

3.2.2 Dinâmica da Composição Molar

O comportamento dinâmico da fração molar do componente de referência no estágio j , $x_{i,j}$, é descrito pelas Equações 3.6 a 3.12, decorrentes do balanço molar por componente:

- Estágios internos de uma seção ($2 \leq j < f - 1$ para retificação; $f < j \leq n - 1$ para esgotamento):

$$M \frac{dx_j}{dt} = L_S x_{j-1} + V_S y_{j+1} - L_S x_j - V_S y_j \quad (3.6)$$

Onde M é o *holdup* molar da fase líquida da mistura em cada estágio j .

- Para o prato acima do de alimentação ($j = f - 1$):

$$M \frac{dx_j}{dt} = L_R x_{j-1} + V_E y_{j+1} + (1 - q)F y_{Feed} - L_R x_j - V_R y_j \quad (3.7)$$

- Para o prato de alimentação ($j = f$):

$$M \frac{dx_j}{dt} = L_R x_{j-1} + V_E y_{j+1} + q F x_{Feed} - L_E x_j - V_E y_j \quad (3.8)$$

- Para o condensador ($j = 1$):

$$M_1 \frac{dx_1}{dt} = V_R y_2 - L_R x_1 - D_L x_1, \text{ total} \quad (3.9)$$

$$M_1 \frac{dx_1}{dt} = V_R y_2 - L_R x_1 - D_V y_1, \text{ parcial} \quad (3.10)$$

$$D_L = D_V = V_R - L_R \quad (3.11)$$

- Para o refeedor ($j = n$):

$$M_n \frac{dx_n}{dt} = L_E x_{n-1} - V_E y_n - B x_n \quad (3.12)$$

$$B = L_E - V_E \quad (3.13)$$

E as vazões molares são dadas conforme as Equações 3.1 a 3.4.

3.2.3 Equilíbrio Líquido-Vapor em cada Estágio de Separação

A partir da hipótese de volatilidade relativa constante, pode-se escrever:

$$y_j = \frac{\alpha x_j}{1 + (\alpha - 1)x_j} \quad (3.14)$$

3.2.4 Variáveis de Interesse em cada Seção

- Estados: $\vec{X} = [x_{t_S}, \dots, x_{n_S}]$. Para as seções de retificação e de esgotamento, $\vec{X} = [x_2, \dots, x_{f-1}]$ e $\vec{X} = [x_f, \dots, x_{n-1}]$, respectivamente. Para o condensador e para o refeedor os estados são x_1 e x_n , respectivamente.
- Entradas: $\vec{u}_{MV} = [L, V, x_{t_S-1}, x_{n_S+1}]$.
- Saídas (variáveis “medidas” em cada seção): $\vec{Y} = [x_{t_S}, x_{n_S}]$.

3.3 Modelo Linearizado da Coluna

Linearizando-se o modelo não linear descrito na Seção 3.2, em torno de um ponto de operação estacionário simbolizado com o subíndice ‘ss’, obtém-se a sua representação em espaço de estados. Esta é constituída pelas matrizes A , B e C , que são as matrizes Jacobianas de estados, entradas e saídas, respectivamente, para a seção.

Nesta Seção, por conveniência, os subíndices 1 e n correspondem ao primeiro e ao último estágios da seção da coluna, respectivamente.

- Seção de retificação, distúrbios:

$$B = [B_F \ B_{x_{Feed}}] = \frac{1}{M} \begin{bmatrix} (1-q)(y_{2,ss} - y_{1,ss}) & 0 \\ \vdots & \vdots \\ (1-q)(y_{n-1,ss} - y_{n-2,ss}) & 0 \\ (1-q)(y_{Feed} - y_{n-1,ss}) & (1-q)F \frac{\partial y_{Feed}}{\partial x_{Feed}} \end{bmatrix} \quad (3.23)$$

- Seção de esgotamento, distúrbios:

$$B = [B_F \ B_{x_{Feed}}] = \frac{1}{M} \begin{bmatrix} q(x_{Feed} - x_{f,ss}) & qF \\ q(x_{f,ss} - x_{f+1,ss}) & 0 \\ \vdots & \vdots \\ q(x_{n-1,ss} - x_{n,ss}) & 0 \end{bmatrix} \quad (3.24)$$

3.4 Funções de Transferência do Modelo Linearizado

A partir das representações em espaço de estados (Equações 3.15 a 3.24), as funções de transferência (FT) correspondentes são definidas de acordo com as Equações 3.25 e 3.26:

$$G_{j,k}(s) \equiv \frac{a_{j,k}}{s-a_{j,j}} \quad (3.25)$$

$$G_{j,IN}(s) \equiv \frac{b_{j,IN}}{s-a_{j,j}} \quad (3.26)$$

Onde $G_{j,k}(s)$ corresponde a uma variação da composição de saída x_j decorrente de uma variação na composição de entrada x_k , para o respectivo bloco, associado ao estágio j , presente no diagrama de blocos representativo do modelo em funções de transferência do sistema. De forma análoga são descritas as FT $G_{j,MV}(s)$.

$$G_{j,k}(s) \equiv \frac{\Delta x_j(s)}{\Delta x_k(s)} \quad (3.27)$$

$$G_{j,IN=L}(s) \equiv \frac{\Delta x_j(s)}{\Delta L(s)} \quad (3.28)$$

$$G_{j,IN=V}(s) \equiv \frac{\Delta x_j(s)}{\Delta V(s)} \quad (3.29)$$

$$G_{j,IN=F}(s) \equiv \frac{\Delta x_j(s)}{\Delta F(s)} \quad (3.30)$$

$$G_{j,IN=x_{Feed}}(s) \equiv \frac{\Delta x_j(s)}{\Delta x_{Feed}(s)} \quad (3.31)$$

3.5 Metodologia Proposta para Construção de Diagramas de Blocos

Esta seção propõe um método sistemático para construir o diagrama de blocos das FT de sistemas com matriz Jacobiana de estados tridiagonal.

Além disto, esta representação explicita as conexões das entradas e saídas das respectivas FT genéricas representadas pelas Equações 3.25 e 3.26. Isto permite aprofundar o entendimento sobre as influências individuais destas FTs sobre o comportamento dinâmico global do sistema, tais como, por exemplo:

- Presença de dinâmicas em paralelo, implicando surgimento de zeros;
- Presença de laços *feedback* associados a estruturas de reciclo de correntes, em que o comportamento dinâmico de um estado j é influenciado por aqueles dos estados subsequentes.

3.5.1 Método Proposto

- a) A partir do modelo linear em espaço de estados, devem ser obtidas as matrizes Jacobianas A , B e C desta representação, representando-se os seus elementos genericamente por $a_{j,k}$ e $b_{j,MV}$:

$$\left. \frac{\partial \left(\frac{dx_j}{dt} \right)}{\partial x_k} \right|_{ss} \equiv a_{j,k}; \quad \left. \frac{\partial \left(\frac{dx_j}{dt} \right)}{\partial u_{MV}} \right|_{ss} \equiv b_{j,MV} \quad (3.32)$$

Para matrizes tridiagonais, os termos $a_{j,k}$ são nulos se $|j - k| > 1$.

Para construir o diagrama de blocos através do método aqui proposto, interessa apenas a estrutura das matrizes Jacobianas, que é representada por $a_{j,k}$ e $b_{j,MV}$ sem a necessidade de que estes sejam calculados.

A matriz C é a matriz identidade de ordem n por serem considerados todos os estados como variáveis de saída. Isto permite obter os formatos das soluções correspondentes a todos os estados.

- b) Formula-se o seguinte sistema de equações lineares:

$$AK_M = B \quad (3.33)$$

Onde K_M é a matriz de ganhos estáticos, pois, a partir da matriz de transferência:

$$G_M(s) = C(sI - A)^{-1}B + D \quad (3.34)$$

Para o estado estacionário, e com $D = 0$, tem-se:

$$K_M = G_M(0) \quad (3.35)$$

$$K_M = -A^{-1}B \quad (3.36)$$

E, a partir da Equação 3.36, obtém-se 3.33.

- c) Aplica-se o algoritmo de Thomas ao Sistema de Equações 3.33 resultante.

Este algoritmo é um caso particular da eliminação de Gauss, sendo aplicável a sistemas tridiagonais de equações. Devido à esparsidade da matriz tridiagonal, este requer uma ordem inferior de número de operações do que a eliminação Gaussiana generalizada.

A notação K_{M_j} corresponde ao elemento j da matriz K_M . Cada um destes elementos correspondem a uma determinada combinação dos ganhos $k_{Y,U}$, onde Y e U são as respectivas variáveis de saída e entrada, definidos por:

$$k_{Y,U} = G_{Y,U}(0) \quad (3.37)$$

- d) Observando-se as soluções obtidas pelo algoritmo de Thomas, constrói-se o diagrama de blocos equivalente para K_{M_j} , onde cada bloco equivale a um dos ganhos $k_{Y,U}$. A mesma estrutura é válida para o diagrama da correspondente FT, $H_{j,MV}(s)$. Estão denominadas por $H(s)$ as FT que correspondem a diversas combinações entre as $G_{j,k}(s)$. Os ganhos K_{M_j} são correspondentes à $H_{j,MV}(0)$.

Neste trabalho foi verificado que a aplicação do algoritmo de Thomas permite a detecção de estruturas de dinâmicas de *feedback*, em paralelo, e em série em cada um dos elementos de K_M , pelas relações matemáticas envolvendo os elementos $a_{j,k}$ e $b_{j,k}$. Com isto, diagramas de blocos para sistemas complexos podem ser construídos de forma exata com facilidade, sem requerer a inspeção do respectivo sistema de EDO's, o qual não explicita as estruturas de dinâmica mencionadas.

Outra característica deste algoritmo, aproveitada no método proposto, é o formato no qual a solução é gerada. Como os elementos da matriz K_M são obtidos de forma recursiva, cada um pode ser representado como função do elemento anterior.

3.5.2 Exemplo 1 de Aplicação do Método – Três Tanques em Série: Sistema com Interação e sem Interação

- a) Considerando o seguinte sistema de três tanques de armazenamento em série, não havendo refluxos entre eles:

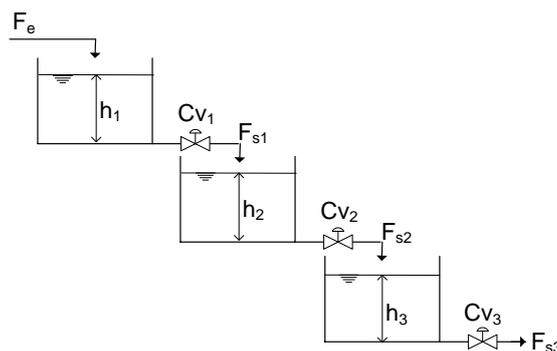


Figura 3.4: Sistema (a): Tanques em Série sem Interação entre os Níveis.

- Modelo não linear:

$$\frac{dh_1}{dt} = \frac{1}{a_1} (F_e - C_{V1} \sqrt{h_1}) \quad (3.38)$$

$$\frac{dh_j}{dt} = \frac{1}{a_j} (C_{Vj-1}\sqrt{h_{j-1}} - C_{Vj}\sqrt{h_j}), j = 2, 3 \quad (3.39)$$

- Matrizes Jacobianas do modelo:

$$A_{(a)} = \begin{bmatrix} -\frac{C_{V1}}{2a_1\sqrt{h_1}} & 0 & 0 \\ \frac{C_{V1}}{2a_2\sqrt{h_1}} & -\frac{C_{V2}}{2a_2\sqrt{h_2}} & 0 \\ 0 & \frac{C_{V2}}{2a_3\sqrt{h_2}} & -\frac{C_{V3}}{2a_3\sqrt{h_3}} \end{bmatrix}; B_{(a)} = \begin{bmatrix} 1 \\ a_1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Portanto, as estruturas das Jacobianas de (a) são as seguintes:

$$A = \begin{bmatrix} a_{1,1} & 0 & 0 \\ a_{2,1} & a_{2,2} & 0 \\ 0 & a_{3,2} & a_{3,3} \end{bmatrix}; B = \begin{bmatrix} b_{1,1} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}; C = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.40)$$

Aplicando-se o algoritmo de Thomas, obtém-se a seguinte matriz de ganhos estáticos:

$$K_M = \begin{bmatrix} K_{M1} \\ K_{M2} \\ K_{M3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{b_{1,1}}{a_{1,1}} \\ \frac{b_{1,1}}{a_{1,1}} & \frac{a_{2,1}}{a_{2,2}} \\ \frac{b_{1,1}}{a_{1,1}} & \frac{a_{2,1}}{a_{2,2}} & \frac{a_{3,2}}{a_{3,3}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k_{h_1,Fe} \\ k_{h_1,Fe} & k_{h_2,h_1} \\ k_{h_1,Fe} & k_{h_2,h_1} & k_{h_3,h_2} \end{bmatrix} \quad (3.41)$$

E o seguinte diagrama de blocos pode ser construído analisando-se a estrutura de FTs em série indicada por K_{M3} :

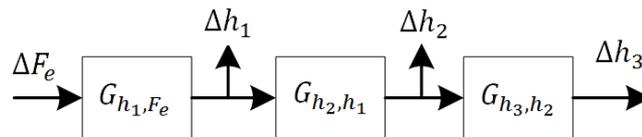


Figura 3.5: Diagramas de Blocos para o Sistema (a).

Observa-se que, uma vez que a matriz A é triangular, o inferior seus autovalores estão explícitos na diagonal principal. Os pólos da FT global do sistema, a qual é $H_{h_3,Fe}(s) = \frac{\Delta h_3(s)}{\Delta F_e(s)} = G_{h_1,Fe}(s)G_{h_2,h_1}(s)G_{h_3,h_2}(s)$, são estes autovalores.

A partir do resultado anterior, pode-se observar que não há a influência das alterações do nível do tanque $j + 1$ sobre o nível do tanque j , uma vez que estes vasos não estão conectados neste sentido. Portanto, a FT global do sistema é representada pela série de FTs dos tanques individuais. A Jacobiana A é mais esparsa que uma matriz tridiagonal completa. Caso existisse tal influência, a Jacobiana se torna tridiagonal completa devido à presença de termos $a_{j,j+1} = \left. \frac{\partial(\frac{dx_j}{dt})}{\partial x_{j+1}} \right|_{ss}$, que

correspondem a estruturas *feedback* do estado $j + 1$ para o j . Isso é verificado para o sistema (b) a seguir.

b) Três tanques de armazenamento em série, conectados entre si mediante tubulações:

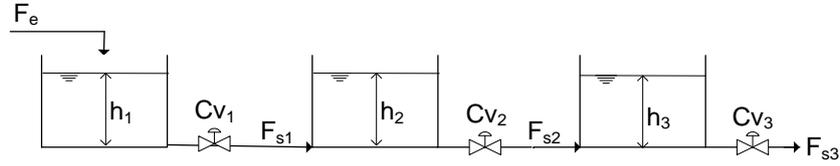


Figura 3.6: Sistema (b): Tanques em Série com Interação entre os Níveis.

- Modelo não linear:

$$\frac{dh_1}{dt} = \frac{1}{a_1} (F_e - C_{V1}\sqrt{h_1 - h_2}) \quad (3.42)$$

$$\frac{dh_2}{dt} = \frac{1}{a_2} (C_{V1}\sqrt{h_1 - h_2} - C_{V2}\sqrt{h_2 - h_3}) \quad (3.43)$$

$$\frac{dh_3}{dt} = \frac{1}{a_3} (C_{V2}\sqrt{h_2 - h_3} - C_{V3}\sqrt{h_3}) \quad (3.44)$$

- Matrizes Jacobianas do modelo:

$$A = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2a_1} \frac{C_{V1}}{\sqrt{h_1 - h_2}} & \frac{1}{2a_1} \frac{C_{V1}}{\sqrt{h_1 - h_2}} & 0 \\ \frac{1}{2a_2} \frac{C_{V1}}{\sqrt{h_1 - h_2}} & -\frac{1}{2a_2} \left(\frac{C_{V1}}{\sqrt{h_1 - h_2}} + \frac{C_{V2}}{\sqrt{h_2 - h_3}} \right) & \frac{1}{2a_2} \frac{C_{V2}}{\sqrt{h_2 - h_3}} \\ 0 & \frac{1}{2a_3} \frac{C_{V2}}{\sqrt{h_2 - h_3}} & -\frac{1}{2a_3} \left(\frac{C_{V2}}{\sqrt{h_2 - h_3}} + \frac{C_{V3}}{\sqrt{h_3}} \right) \end{bmatrix};$$

$$B = \begin{bmatrix} 1 \\ a_1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Portanto, as estruturas das Jacobianas de (b) são as seguintes:

$$A = \begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & 0 \\ a_{2,1} & a_{2,2} & a_{2,3} \\ 0 & a_{3,2} & a_{3,3} \end{bmatrix}; B = \begin{bmatrix} b_{1,1} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}; C = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.45)$$

Aplicando-se o algoritmo de Thomas, obtém-se a seguinte matriz de ganhos estáticos:

$$K_M = \left[\begin{array}{l} -\frac{b_{1,1}}{a_{1,1}} - \frac{a_{1,2}}{a_{1,1}} \left(\frac{b_{1,1}a_{2,1}}{a_{1,1} \left(a_{2,2} - \frac{a_{2,1}a_{1,2}}{a_{1,1}} \right)} + \frac{a_{2,3}a_{3,2}b_{1,1}a_{2,1}}{a_{1,1} \left(a_{2,2} - \frac{a_{2,1}a_{1,2}}{a_{1,1}} \right)^2 \left(a_{3,3} - \frac{a_{3,2}a_{2,3}}{a_{2,2} - \frac{a_{2,1}a_{1,2}}{a_{1,1}}} \right)} \right) \\ \frac{b_{1,1}a_{2,1}}{a_{1,1} \left(a_{2,2} - \frac{a_{2,1}a_{1,2}}{a_{1,1}} \right)} + \frac{a_{2,3}a_{3,2}b_{1,1}a_{2,1}}{a_{1,1} \left(a_{2,2} - \frac{a_{2,1}a_{1,2}}{a_{1,1}} \right)^2 \left(a_{3,3} - \frac{a_{3,2}a_{2,3}}{a_{2,2} - \frac{a_{2,1}a_{1,2}}{a_{1,1}}} \right)} \\ - \frac{a_{3,2}b_{1,1}a_{2,1}}{a_{1,1} \left(a_{2,2} - \frac{a_{2,1}a_{1,2}}{a_{1,1}} \right) \left(a_{3,3} - \frac{a_{3,2}a_{2,3}}{a_{2,2} - \frac{a_{2,1}a_{1,2}}{a_{1,1}}} \right)} \end{array} \right] \quad (3.46)$$

Observa-se, nas expressões de ganhos estáticos, que a influência do *feedback* do valor do nível $j + 1$ sobre o nível j , está representada por termos na forma $1 - G_{j,j+1}G_{j+1,j}$, onde $G_{i,k} = \frac{a_{i,k}}{s - a_{i,i}}$. Isto é melhor visualizado com os seguintes rearranjos das expressões:

$$K_{M_3} = - \frac{\frac{b_{1,1}a_{2,1}a_{3,2}}{a_{1,1}a_{2,2}a_{3,3}}}{\left(1 - \frac{a_{2,1}a_{1,2}}{a_{2,2}a_{1,1}} \right) \left(1 - \frac{a_{3,2}a_{2,3}}{a_{3,3}a_{2,2}} \right)} \quad (3.47)$$

$$K_{M_2} = \frac{\frac{b_{1,1}a_{2,1}}{a_{1,1}a_{2,2}} - \frac{a_{2,3}K_{M_3}}{a_{2,2}}}{1 - \frac{a_{2,1}a_{1,2}}{a_{2,2}a_{1,1}}} \quad (3.48)$$

$$K_{M_1} = - \frac{b_{1,1}}{a_{1,1}} - \frac{a_{1,2}}{a_{1,1}} K_{M_2} \quad (3.49)$$

O que é equivalente a:

$$H_{h_1, F_e}(s) = G_{h_1, F_e}(s) + G_{h_1, h_2}(s) H_{h_2, F_e}(s) \quad (3.50)$$

$$H_{h_2, F_e}(s) = \frac{G_{h_1, F_e}(s) G_{h_2, h_1}(s) + G_{h_2, h_3}(s) H_{h_3, F_e}(s)}{1 - G_{h_2, h_1}(s) G_{h_1, h_2}(s)} \quad (3.51)$$

$$H_{h_3, F_e}(s) = \frac{G_{h_1, F_e}(s) G_{h_2, h_1}(s) G_{h_3, h_2}(s)}{\left(1 - G_{h_2, h_1}(s) G_{h_1, h_2}(s) \right) \left(1 - \frac{G_{h_3, h_2}(s) G_{h_2, h_3}(s)}{1 - G_{h_2, h_1}(s) G_{h_1, h_2}(s)} \right)} \quad (3.52)$$

Devido à conexão física entre os tanques, que permite o escoamento de fluido entre eles, há a influência das alterações do nível do tanque 3 sobre o nível do tanque 2, matematicamente descrita pelo termo $\sqrt{h_2 - h_3}$, a qual é transmitida do tanque 2 para o tanque 1, esta descrita pelo termo $\sqrt{h_1 - h_2}$. A combinação destes efeitos é representada em $H_{h_3, F_e}(s)$ pelo fator $\left(1 - \frac{G_{h_3, h_2}(s) G_{h_2, h_3}(s)}{1 - G_{h_2, h_1}(s) G_{h_1, h_2}(s)} \right)$.

O fator $\left(1 - G_{h_2, h_1}(s) G_{h_1, h_2}(s) \right)$ representa a contribuição individual de alterações de h_2 sobre h_1 . O numerador de $H_{h_3, F_e}(s)$ para o Sistema (b), que é a rota direta desta FT, expressa a contribuição dinâmica do sistema caso não houvesse a interação dos tanques $j + 1$ sobre os tanques j , conseqüentemente este termo é idêntico à FT $H_{h_3, F_e}(s)$ do Sistema (a).

A partir do formato de $H_{h_3, F_e}(s)$ para o Sistema (b), o seguinte diagrama de blocos pode ser construído:

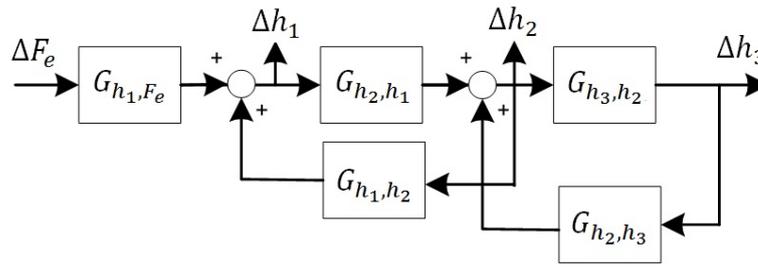


Figura 3.7: Diagrama de Blocos para o Sistema (b).

O fator $\left(1 - \frac{G_{h_3, h_2}(s) G_{h_2, h_3}(s)}{1 - G_{h_2, h_1}(s) G_{h_1, h_2}(s)}\right)$ implica que a conexão de soma que recebe o sinal de $(\Delta h_3(s) G_{h_2, h_3}(s))$ deve ser posicionada entre o caminho direto da estrutura de reciclo $\frac{G_{h_2, h_1}(s)}{1 - G_{h_2, h_1}(s) G_{h_1, h_2}(s)}$, que é $G_{h_2, h_1}(s)$, e o seu laço *feedback*, o qual é $G_{h_1, h_2}(s)$. Esta configuração decorre da sequência de interações entre os níveis, descrita no parágrafo anterior. Portanto, representações semelhantes às da Figura 3.7 são típicas de sistemas que apresentam a matriz A em forma tridiagonal.

Ainda que o diagrama de blocos da Figura 3.7 possa ser construído de forma relativamente simples e intuitiva a partir da inspeção das EDO's do modelo não linear, a dificuldade de um procedimento via inspeção é tanto maior quanto maior a ordem do sistema. Portanto, o método proposto apresenta vantagens, por este explicitar as relações entre as FTs individuais, pois de outra forma, estas relações somente seriam conhecidas mediante a álgebra de blocos aplicada ao respectivo diagrama, logo este já deveria estar construído por prévia inspeção das EDO's. No método proposto, a geração do diagrama é baseada na solução final da FT, na qual estruturas em série, paralelo e de reciclo estão explícitas, ao invés de requerer uma inspeção do conjunto de equações diferenciais do modelo, o qual pode não evidenciar de imediato a estrutura do sistema. Adicionalmente, a forma de geração dos diagramas correspondentes a $H_{h_2, F_e}(s)$ e $H_{h_1, F_e}(s)$, por inspeção das EDO's, não é tão direta, podendo requerer manipulações relativamente exaustivas, via álgebra de blocos, a partir do diagrama de $H_{h_3, F_e}(s)$.

3.5.3 Exemplo 2 de Aplicação do Método – Solução Analítica para os Ganhos Estáticos

A solução analítica para cada ganho estático pode ser facilmente obtida a partir do método proposto. Em função da forma iterativa da solução, é possível relacionar diretamente a expressão do ganho correspondente a uma determinada entrada sobre um estado como função de expressões de ganho de subsistemas internos.

Para o Sistema (b) da Seção 3.5.2, a partir de manipulações algébricas da matriz de ganhos estáticos, têm-se:

$$K_{M_1} = k_{h_1, F_e} + k_{h_1, h_2} K_{M_2} \quad (3.53)$$

$$K_{M_2} = \frac{1}{1-k_{h_2,h_1}k_{h_1,h_2}} (k_{h_1,F_e}k_{h_2,h_1} + k_{h_2,h_3}K_{M_3}) \quad (3.54)$$

$$K_{M_3} = \frac{k_{h_1,F_e}k_{h_2,h_1}k_{h_3,h_2}}{(1-k_{h_2,h_1}k_{h_1,h_2})\left(1-\frac{k_{h_3,h_2}k_{h_2,h_3}}{1-k_{h_2,h_1}k_{h_1,h_2}}\right)} \quad (3.55)$$

A análise do sistema (b) contribui para o entendimento do comportamento dinâmico de uma sequência de estágios internos de uma coluna de destilação. A dinâmica do nível do tanque 2 do sistema (b) é influenciada pelas dinâmicas dos níveis dos tanques anterior e posterior a este. Analogamente, o comportamento dinâmico da composição de um estágio em uma coluna de destilação é influenciado pelos estágios adjacentes a este. Este fato está relacionado à estrutura tridiagonal da matriz Jacobiana de estados de ambos os sistemas. Desenvolvimentos similares aos realizados para o sistema (b) estão estendidos na Seção 3.6 para os sistemas de interesse neste trabalho.

3.6 Representações de uma Seção da Coluna por Diagrama de Blocos

O método proposto na Seção 3.5 pode ser aplicado em cada seção da coluna estudada para a obtenção dos respectivos diagramas de blocos. As estruturas de cada uma das matrizes Jacobianas A (tridiagonal com elementos constantes na diagonal inferior) e B são as mesmas para todas as seções:

$$A_S = \begin{bmatrix} a_{n_T,n_T} & a_{n_T,n_{T+1}} & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ a & a_{n_{T+1},n_{T+1}} & a_{n_{T+1},n_{T+2}} & 0 & \cdots & \vdots \\ 0 & a & a_{n_{T+2},n_{T+2}} & a_{n_{T+2},n_{T+3}} & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & a & a_{n_S,n_S} \end{bmatrix} \quad (3.56)$$

Por ser um sistema MIMO, por conveniência, serão construídos isoladamente os diagramas de blocos para cada uma das MV's. Para um número A de variáveis de entrada, representadas pelo subíndice MV, decorrem mvs matrizes $B_{S_{MV}}$ da forma:

$$B_{S_{MV}} = \begin{bmatrix} b_{n_T,MV} \\ b_{n_{T+1},MV} \\ \vdots \\ b_{n_{T-},MV} \end{bmatrix} \quad (3.57)$$

As expressões dos elementos de K_M , para cada MV, serão apresentadas no Capítulo 4, juntamente com formas adicionais propostas para representações em diagramas de blocos.

A Figura 3.8 ilustra o diagrama de blocos para $H_{x_{ns},MV}(s)$. Esta FT está relacionada com o elemento $K_{M_{ns}}$ de K_M , $H_{x_{ns},MV}(0) = K_{M_{ns}}$, e corresponde à influência de uma determinada MV sobre a composição molar do componente de referência no estágio ns da seção:

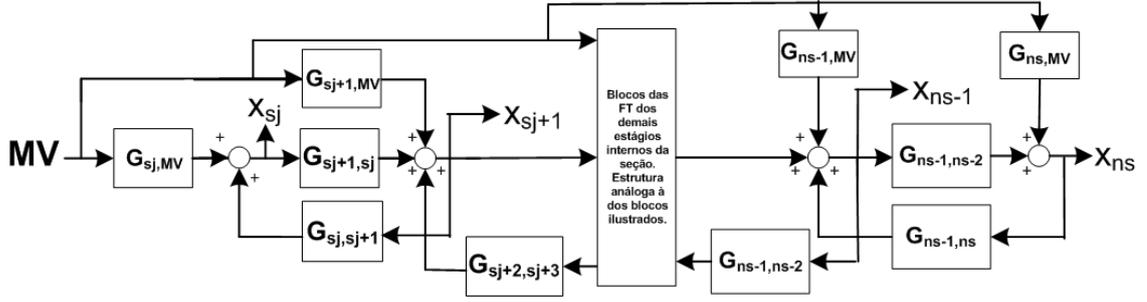


Figura 3.8: Diagrama de Blocos para a Seção de uma Coluna.

3.6.1 Exemplo 3 de Aplicação do Método – Seção R com Três Estágios

Neste exemplo, é considerada uma seção R com três estágios, equivalentes a dois pratos de equilíbrio e um condensador parcial no topo da coluna. Para $MV = L_R$ ou $MV = V_R$, as estruturas das matrizes Jacobianas são as seguintes:

$$A = \begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & 0 \\ a & a_{2,2} & a_{2,3} \\ 0 & a & a_{3,3} \end{bmatrix}; B = \begin{bmatrix} b_{1,1} \\ b_{2,1} \\ b_{3,1} \end{bmatrix}; C = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.58)$$

A matriz de ganhos estáticos, considerando-se condensador parcial, tem a seguinte estrutura:

$$K_M = \begin{bmatrix} \frac{b_{1,1}}{a_{1,1}} - \frac{a_{1,2}}{a_{1,1}} \left(\frac{-b_{2,1} + \frac{b_{1,1}a_{2,1}}{a_{1,1}}}{a_{2,2} - \frac{a_{2,1}a_{1,2}}{a_{1,1}}} - \frac{a_{2,3} \left(-b_{3,1} - \frac{a_{3,2} \left(-b_{2,1} + \frac{b_{1,1}a_{2,1}}{a_{1,1}} \right)}{a_{2,2} - \frac{a_{2,1}a_{1,2}}{a_{1,1}}} \right)}{\left(a_{2,2} - \frac{a_{2,1}a_{1,2}}{a_{1,1}} \right) \left(a_{3,3} - \frac{a_{3,2}a_{2,3}}{a_{2,2} - \frac{a_{2,1}a_{1,2}}{a_{1,1}}} \right)} \right) \\ \frac{-b_{2,1} + \frac{b_{1,1}a_{2,1}}{a_{1,1}}}{a_{2,2} - \frac{a_{2,1}a_{1,2}}{a_{1,1}}} - \frac{a_{2,3} \left(-b_{3,1} - \frac{a_{3,2} \left(-b_{2,1} + \frac{b_{1,1}a_{2,1}}{a_{1,1}} \right)}{a_{2,2} - \frac{a_{2,1}a_{1,2}}{a_{1,1}}} \right)}{\left(a_{2,2} - \frac{a_{2,1}a_{1,2}}{a_{1,1}} \right) \left(a_{3,3} - \frac{a_{3,2}a_{2,3}}{a_{2,2} - \frac{a_{2,1}a_{1,2}}{a_{1,1}}} \right)} \\ -b_{3,1} - \frac{a_{3,2} \left(-b_{2,1} + \frac{b_{1,1}a_{2,1}}{a_{1,1}} \right)}{a_{2,2} - \frac{a_{2,1}a_{1,2}}{a_{1,1}}} \\ \frac{a_{3,3} - \frac{a_{3,2}a_{2,3}}{a_{2,2} - \frac{a_{2,1}a_{1,2}}{a_{1,1}}}}{a_{2,2} - \frac{a_{2,1}a_{1,2}}{a_{1,1}}} \end{bmatrix} \quad (3.59)$$

Esta, em termos dos ganhos estáticos da seção R, pode ser reescrita como:

$$K_M = \begin{bmatrix} \frac{k_{x_1,MV} + K_{M2} k_{x_1,x_2}}{k_{x_2,MV} + k_{x_1,MV} k_{x_2,x_1} + K_{M3} k_{x_2,x_3}} \\ \frac{1 - k_{x_2,x_1} k_{x_1,x_2}}{(k_{x_2,MV} + k_{x_1,MV} k_{x_2,x_1})} \\ \frac{k_{x_3,MV} + k_{x_3,x_2}}{1 - k_{x_2,x_1} k_{x_1,x_2}} \\ \frac{1 - k_{x_3,x_2} k_{x_2,x_3}}{1 - k_{x_2,x_1} k_{x_1,x_2}} \end{bmatrix} \quad (3.60)$$

Portanto, podem-se identificar na Matriz 3.59 as seguintes FT:

$$H_{x_3,MV}(s) = \frac{G_{x_3,MV}(s) + \frac{G_{x_3,x_2}(s)[G_{x_2,MV}(s) + G_{x_1,MV}(s)G_{x_2,x_1}(s)]}{1 - [G_{x_2,x_1}(s)G_{x_1,x_2}(s)]}}{1 - \frac{[G_{x_3,x_2}(s)G_{x_2,x_3}(s)]}{1 - [G_{x_2,x_1}(s)G_{x_1,x_2}(s)]}} \quad (3.61)$$

$$H_{x_2,MV}(s) = \frac{G_{x_2,MV}(s) + [G_{x_1,MV}(s)G_{x_2,x_1}(s)] + [H_{x_3,MV}(s)G_{x_2,x_3}(s)]}{1 - [G_{x_2,x_1}(s)G_{x_1,x_2}(s)]} \quad (3.62)$$

$$H_{x_1,MV}(s) = G_{x_1,MV}(s) + [H_{x_2,MV}(s)G_{x_1,x_2}(s)] \quad (3.63)$$

Capítulo 4 – *Shortcuts* para a Dinâmica Dominante de Colunas de Destilação

Este Capítulo apresenta um método que prediz com compromisso entre acurácia e simplicidade para fins de controle os comportamentos estático e dinâmico dos sistemas abordados. A Seção 4.1 apresenta uma visão geral deste método. Expressões analíticas simples para o primeiro e segundo modos dinâmicos de cada seção da coluna são apresentadas na Seção 4.2. A forma de obtenção dos ganhos estáticos é apresentada na Seção 4.3. Métricas para capturar de forma rápida e precisa a direcionalidade dos sistemas são propostas na Seção 4.4. A implementação do método e as ferramentas computacionais requeridas para esta são apresentadas na Seção 4.5.

4.1 Visão Geral do Método Proposto

4.1.1 Representação de uma Coluna por Seções Conectadas

Uma coluna de destilação pode ser vista como a conexão entre quatro sistemas: condensador, zona de retificação, zona de esgotamento e refeedor. A zona de retificação e a zona de esgotamento são usualmente denominadas de seções, bem como quaisquer conjuntos de estágios no interior destas. Contudo, neste trabalho o conceito de seção é definido em termos do comportamento dinâmico, cf. a Definição 4.1:

Definição 4.1: *Seção de uma coluna.* Seção é um determinado conjunto de estágios apresentando características dinâmicas (constantes de tempo naturais) próximas entre si, de forma que seja possível representar o conjunto de constantes de tempo por um valor médio entre elas. Exemplos de seções são apresentados a seguir, pelos itens (a) a (c):

- a) A zona de retificação, com ou sem o prato acima da alimentação, além de quaisquer conjuntos de estágios no interior desta;
- b) A zona de esgotamento, com ou sem o prato de alimentação, além de quaisquer conjuntos de estágios no interior desta;
- c) Tanto o condensador como o refeedor, estes isolados da coluna.

Observe que, conforme a definição de seção aqui proposta, não são exemplos desta os itens (d) a (f):

- d) O condensador conectado com quaisquer conjuntos de estágios da seção de retificação;
- e) O refeedor conectado com quaisquer conjuntos de estágios da seção de esgotamento;
- f) Quaisquer conjuntos de estágios da seção de retificação conectados com quaisquer conjuntos de estágios da seção de esgotamento;
- g) Demais configurações além das apresentadas nos itens (a) a (c).

Definindo-se como descontinuidades quaisquer conjuntos de dois estágios adjacentes que impedem a constituição de uma seção, têm-se, como exemplos destas:

- a) O condensador junto com o estágio de topo da seção de retificação;
- b) O refeedor junto com o estágio de fundo da seção de esgotamento;
- c) O estágio acima da alimentação junto com o de alimentação.

A partir da matriz Jacobiana de estados da coluna (cf. Eq. 3.15, onde $a_{k,k}$ corresponde ao elemento k , $1 \leq k \leq n$ da diagonal principal), têm-se as seguintes expressões para as constantes de tempo naturais, ou seja, sem considerar os efeitos das retroalimentações de estágios adjacentes, do modelo linearizado:

$$\tau_k \equiv \frac{-1}{a_{k,k}}, 1 \leq k \leq n \quad (4.1)$$

$$\tau_1 = \frac{M_1}{L} \left[1 + \left(\frac{1}{R_{LV}} + \frac{1-q}{R_{LF}} - 1 \right) \left(\frac{\partial y_{1,ss}}{\partial x_{1,ss}} \right) \right]^{-1}, \text{ condensador total} \quad (4.2)$$

$$\tau_1 = \frac{M_1}{L} \left[1 + \left(\frac{1}{R_{LV}} + \frac{1-q}{R_{LF}} - 1 \right) \left(\frac{\partial y_{1,ss}}{\partial x_{1,ss}} \right) \right]^{-1}, \text{ condensador parcial} \quad (4.3)$$

$$\tau_k = \frac{M}{L} \left[1 + \left(\frac{1}{R_{LV}} + \frac{1-q}{R_{LF}} \right) \left(\frac{\partial y_{k,ss}}{\partial x_{k,ss}} \right) \right]^{-1}, 2 \leq k \leq f - 1 \quad (4.4)$$

$$\tau_k = \frac{M}{L+qF} \left[1 + \frac{1}{E_{LV}} \left(\frac{\partial y_{k,ss}}{\partial x_{k,ss}} \right) \right]^{-1}, f \leq k \leq n - 1 \quad (4.5)$$

$$\tau_n = \frac{M_n}{L+qF} \left[1 + \frac{1}{E_{LV}} \left(\frac{\partial y_{k,ss}}{\partial x_{k,ss}} - 1 \right) \right]^{-1}, \text{ refeedor} \quad (4.6)$$

Estas serão utilizadas para o estudo apresentado no Exemplo 4.1.

Exemplo 4.1: Constantes de tempo naturais dos modelos linearizados para as seções. Considere as colunas A, C, D e G, adaptadas de Skogestad e Morari (1988), cujos parâmetros estão apresentados na Tabela 4.1 (para todos os casos, $F = 1 \text{ kmol/s}$, $M = 0,5 \text{ kmol}$, $M_1 = 32,1 \text{ kmol}$, $M_n = 11,1 \text{ kmol}$):

Tabela 4.1: Colunas A, C, D e G (adaptadas de Skogestad e Morari, 1988).

Coluna	n f	L/V α	D/F x_{Feed}	x_1 $1 - x_n$
A	41	0,844	0,5	98,96
	20	1,5	0,5	98,97
C	41	0,092	0,962	98,76
	20	0,1	1,5	98,99
D	111	0,614	0,951	99,50
	72	0,65	1,12	89,89
G	81	0,5	0,841	99,9999
	41	0,5	1,5	99,9999

Simulando-se o modelo não linear (Eqs. 3.6 a 3.14), são obtidas as soluções estacionárias para as composições molares de cada coluna. Com estas, foram calculadas as constantes de tempo a partir das Eqs. 4.1 a 4.6:

Tabela 4.2: Comparação entre os modos dinâmicos naturais dos estágios.

Seção da Coluna	Constante de tempo (modo natural) do estágio k [min]				
	τ_k	Coluna A	Coluna C	Coluna D	Coluna G
Condensador	τ_1	601	585	154	614
Zona de Retificação	τ_2	6,17	5,81	13,033	63,477
	τ_{f-1}	5,30	4,75	12,582	54,192
Zona de Esgotamento	τ_f	4,46	4,09	12,064	45,468
	τ_{n-1}	3,55	3,46	11,332	35,978
Refrervedor	τ_n	127	124	48	128

Verificações e conclusões do Exemplo 4.1: A partir da Tabela 4.2, foram calculadas as diferenças entre constantes de tempo naturais, as quais constam na Tabela 4.3:

Tabela 4.3: Diferenças entre as constantes de tempo.

Diferenças absolutas entre constantes de tempo [min]					Número de estágios delimitados por cada diferença
$\Delta\tau$	Coluna A $n = 41$ $f = 20$	Coluna C $n = 41$ $f = 20$	Coluna D $n = 111$ $f = 72$	Coluna G $n = 81$ $f = 41$	
$\tau_2 - \tau_1$	594	579	141	551	2
$\tau_{f-1} - \tau_2$	0,87	1,06	0,451	9,29	$f - 2$
$\tau_f - \tau_{f-1}$	0,84	0,66	0,518	8,72	2
$\tau_{n-1} - \tau_f$	0,91	0,63	0,732	9,49	$N - f$
$\tau_n - \tau_{N-1}$	124	121	37	92	2

Verificação I: As diferenças $\tau_{f-1} - \tau_2$ e $\tau_f - \tau_{f-1}$ são próximas entre si, em que $\tau_{f-1} - \tau_2$ delimita e inclui $f - 2$ estágios (zona de retificação). O mesmo é verificado para $\tau_{n-1} - \tau_f \sim \tau_f - \tau_{f-1}$, em que $\tau_{n-1} - \tau_f$ delimita e inclui $N - f$ estágios (zona de esgotamento).

Conclusão I: Foi verificado que a diferença entre as constantes de tempo naturais do primeiro e do último estágios é próxima à diferença entre os dois estágios, f e $f - 1$, localizados na região de alimentação (fundo da zona de retificação conectado com o topo da zona de esgotamento). Portanto, existe uma descontinuidade (variação significativa entre as constantes de tempo) entre o último estágio da seção de retificação e o primeiro da zona de esgotamento.

Além disso, a maioria dos pares de estágios adjacentes no interior de cada seção apresentam constantes de tempo naturais comparativamente próximas entre si. Pode-se adicionalmente verificar que, usualmente, $\tau_k - \tau_{k-1} \ll \tau_f - \tau_{f-1}$ e que $\tau_k - \tau_{k-1} \sim \tau_{k-1} - \tau_{k-2}$ onde k e $k - 1$ são quaisquer dois estágios adjacentes dentro da zona de retificação ou da de esgotamento.

Verificação II: $\tau_{f-1} - \tau_2 \ll \tau_2 - \tau_1$ e $\tau_{n-1} - \tau_f \ll \tau_N - \tau_{N-1}$.

Conclusão II: A diferença entre a constante de tempo natural de cada equipamento com a do estágio adjacente da respectiva seção da coluna a qual este se conecta é usualmente elevada frente a qualquer outra diferença entre dois estágios adjacentes. Para um mesmo ponto de operação, esta diferença reduz-se conforme o *holdup* de cada equipamento se aproxima ao do estágio adjacente da coluna.

Com base nas definições e verificações do Exemplo 4.1, as colunas aqui consideradas são constituídas por quatro seções (aqui também denominadas como subsistemas).

Seção I: Condensador (subíndice 1);

Seção II: Estágios internos da zona de retificação, incluindo o acima da alimentação (subíndices 2 a $f - 1$);

Seção III: Estágios internos da zona de esgotamento, incluindo o de alimentação (subíndices f a n);

Seção IV: Refervedor (subíndice n).

Observe que não é necessário definir uma quinta seção englobando apenas o estágio de alimentação (f) e o acima deste ($f - 1$), uma vez que os seus modos dinâmicos naturais apresentam a mesma estrutura que a dos demais estágios presentes nas respectivas seções (cf. Eqs. 4.4 e 4.5). A diferença entre estes dois estágios dos demais que são adjacentes a eles restringe-se à matriz B de entradas na representação em espaço de estados (cf. Eq. 3.21 e Matrizes 3.22 a 3.24).

O condensador e o refervedor são representados pelos seus respectivos modelos lineares.

4.1.2 Fluxograma Representativo do Método

Para os subsistemas III e IV são propostos modelos dinâmicos simplificados, correspondendo a matrizes de transferência com FT de primeira ordem. Para este fim, propõem-se, para as zonas de retificação e esgotamento:

- I. Estrutura da álgebra de blocos que representa a interação entre as zonas de retificação e de esgotamento entre si e com os respectivos equipamentos (condensador e refervedor) (Subseção 4.1.4);
- II. Expressões aproximadas e simplificadas (*shortcuts*) para as constantes de tempo dominantes (Seção 4.2);
- III. Expressões analíticas para as matrizes de ganhos estáticos (Seção 4.3);
- IV. Critério rápido (*shortcut*) para predizer a direcionalidade (Seção 4.4).

Pode-se resumir o método no fluxograma abaixo:

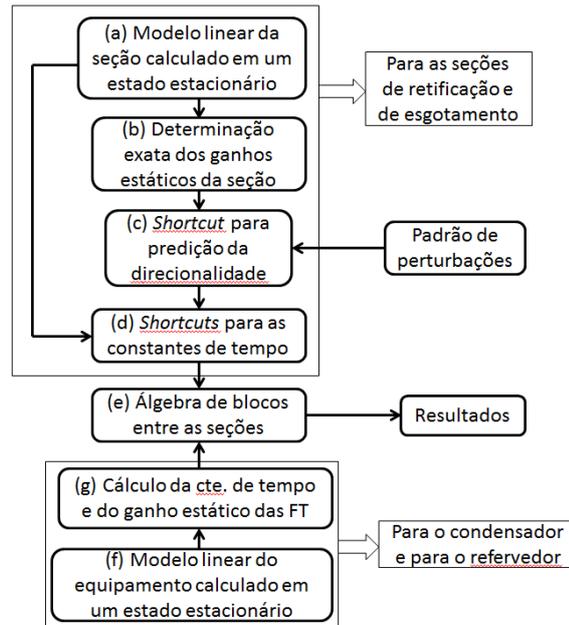


Figura 4.1: Fluxograma Síntese do Método Proposto.

Observe que um modelo linear para cada seção da coluna é o principal requisito para aplicação do método. Este modelo é o ponto de partida tanto para a determinação das constantes de tempo aproximadas das seções de retificação e de esgotamento como para o critério da direcionalidade.

4.1.3 Estruturas das Matrizes de Transferência

Cada seção apresenta quatro entradas (dois refluxos internos e duas composições de entrada) e duas saídas (composições de topo e fundo da seção), como ilustrado na Figura 4.2.

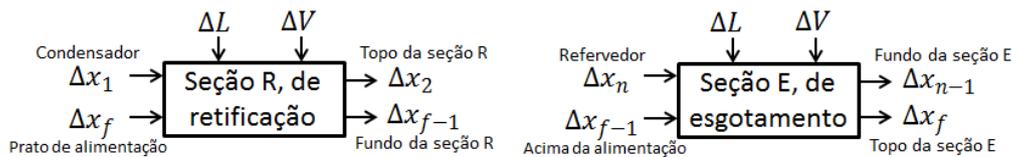


Figura 4.2: Entradas e Saídas de Cada Seção.

Sabe-se que o modelo dinâmico linear completo para cada seção é representado pelas seguintes matrizes de transferência:

- Seção de retificação:

$$\begin{bmatrix} \Delta x_2(s) \\ \Delta x_{f-1}(s) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} G_{x_2,L}(s) & G_{x_2,V}(s) & G_{x_2,x_1}(s) & G_{x_2,x_f}(s) \\ G_{x_{f-1},L}(s) & G_{x_{f-1},V}(s) & G_{x_{f-1},x_1}(s) & G_{x_{f-1},x_f}(s) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta L(s) \\ \Delta V(s) \\ \Delta x_1(s) \\ \Delta x_f(s) \end{bmatrix} \quad (4.7)$$

- Seção de esgotamento:

$$\begin{bmatrix} \Delta x_{n-1}(s) \\ \Delta x_f(s) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} G_{x_{n-1},L}(s) & G_{x_{n-1},V}(s) & G_{x_{n-1},x_{f-1}}(s) & G_{x_{n-1},x_n}(s) \\ G_{x_f,L}(s) & G_{x_f,V}(s) & G_{x_f,x_{f-1}}(s) & G_{x_f,x_n}(s) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta L(s) \\ \Delta V(s) \\ \Delta x_{f-1}(s) \\ \Delta x_n(s) \end{bmatrix} \quad (4.8)$$

Onde os elementos $G_{Y,U}(s)$, são FT de elevada ordem para cada canal, onde Y é a variável de saída e U é a variável de entrada. Estas são representadas por:

$$G_{Y,U}(s) = \frac{K_{Y,U}(s-z_{n-1})(s-z_{z-2})\dots(s-z_2)(s-z_1)}{(s-p_n)(s-p_{n-1})\dots(s-p_2)(s-p_1)} \quad (4.9)$$

Onde p , z e $K_{Y,U}$ são os pólos, zeros e o ganho estático do modelo linear completo.

Para os modelos simplificados propostos para cada seção, propõem-se, como aproximações para as FT " $G_{Y,U}(s)$ " de ordem n , as FT de primeira ordem " $\Gamma_{Y,U}(s)$ " cf. a Definição 4.2.

Definição 4.2: Os modelos simplificados $\Gamma_{Y,U}(s) \sim G_{Y,U}(s)$ de cada canal nos Sistemas 4.7 e 4.8 apresentam a seguinte estrutura:

- a) São funções de transferência de primeira ordem:

$$\Gamma_{Y,U}(s) = \frac{K_{Y,U}}{T_{Y,m}s+1} \quad (4.10)$$

- b) **Parte dinâmica da Eq. 4.10:** $T_{Y,m}$ é a aproximação da constante de tempo dominante da seção. Expressões para cada seção são propostas na Seção 4.2. O subíndice m pode ser 1 (dinâmica lenta, constante de tempo de maior módulo) ou 2 (dinâmica rápida, constante de tempo de segundo maior módulo), devido à direcionalidade do sistema. O critério para a predição da direcionalidade é apresentado na Seção 4.4.
- c) **Parte estática Eq. 4.10:** $K_{Y,U}$ é o ganho estático de ΔU para ΔY . Expressões exatas (equivalentes ao ganho do modelo linear completo) para os ganhos de cada canal são propostas na Seção 4.3.

Como a notação $\Gamma_{Y,U}(s)$ é para o modelo *shortcut*, e $G_{Y,U}(s)$ é para a versão completa, as estruturas das matrizes de transferência para os modelos simplificados são equivalentes, contudo com FT de primeira ordem " $\Gamma_{Y,U}(s)$ " compondo as matrizes:

- Seção de retificação:

$$\begin{bmatrix} \Delta x_2(s) \\ \Delta x_{f-1}(s) \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} \Gamma_{x_2,L}(s) & \Gamma_{x_{n-1},V}(s) & \Gamma_{x_2,x_1}(s) & \Gamma_{x_2,x_f}(s) \\ \Gamma_{x_{f-1},L}(s) & \Gamma_{x_{f-1},V}(s) & \Gamma_{x_{f-1},x_1}(s) & \Gamma_{x_{f-1},x_f}(s) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta L(s) \\ \Delta V(s) \\ \Delta x_1(s) \\ \Delta x_f(s) \end{bmatrix} \quad (4.11)$$

- Seção de esgotamento:

$$\begin{bmatrix} \Delta x_{n-1}(s) \\ \Delta x_f(s) \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} \Gamma_{x_{n-1},L}(s) & \Gamma_{x_{n-1},V}(s) & \Gamma_{x_{n-1},x_{f-1}}(s) & \Gamma_{x_{n-1},x_n}(s) \\ \Gamma_{x_f,L}(s) & \Gamma_{x_f,V}(s) & \Gamma_{x_f,x_{f-1}}(s) & \Gamma_{x_f,x_n}(s) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta L(s) \\ \Delta V(s) \\ \Delta x_{f-1}(s) \\ \Delta x_n(s) \end{bmatrix} \quad (4.12)$$

Para fins de implementação desta estrutura no ambiente Simulink, por exemplo, é conveniente elaborar a álgebra de blocos equivalente como mostrado a seguir.

4.1.4 Álgebra de Blocos entre as Seções

A Figura 4.3 apresenta a álgebra de blocos detalhada da coluna conectada mediante suas seções.

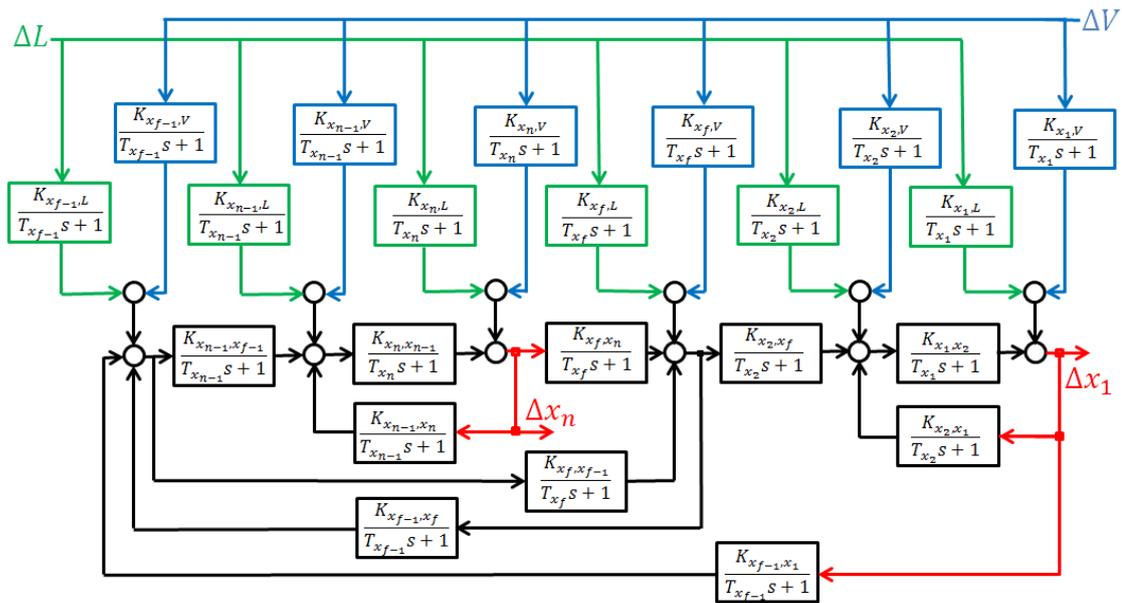


Figura 4.3: Álgebra de Blocos entre as Seções da Coluna.

Tanto a seção de retificação como a de esgotamento apresentam oito blocos, correspondentes aos canais das respectivas matrizes de transferência.

Observe que as FT de cada bloco são todas de primeira ordem, onde as constantes de tempo para cada seção são as definidas na Seção 4.2. Por enquanto, é importante ressaltar que, conforme consta na Definição 4.2.b, cada constante de tempo pode representar por uma dinâmica rápida (menor módulo) ou uma dinâmica lenta (maior módulo), cuja determinação depende de um critério de direcionalidade conforme apresentado na Seção 4.4, que definirá qual das duas dinâmicas será executada em cada bloco.

Observe também que a álgebra de blocos da Figura corresponde a um modelo simplificado não linear para a coluna. Esta não linearidade é inserida com as retroalimentações presentes no diagrama. Cada bloco, entretanto, representa um modelo simplificado linear (FT de primeira ordem) para a respectiva seção da coluna.

4.2 Shortcuts para as Constantes de Tempo Dominantes em cada Seção da Coluna

Apresenta-se, a seguir, o método desenvolvido neste trabalho para obtenção de expressões aproximadas para as constantes de tempo dominantes de uma seção (conforme a definição presente na Subseção 4.1.1) da coluna. A dedução das expressões é demonstrada na Seção 4.2.1. As expressões finais, como funções das variáveis e parâmetros do processo, são apresentadas na Seção 4.2.2. Por conveniência, a notação n_s será utilizada para representar o número de estágios de uma seção genérica da coluna. Esta notação é adaptada para n_r e n_e para as seções de retificação e de esgotamento, respectivamente.

4.2.1 Dedução das Aproximações para os Polos Dominantes de uma Seção Genérica da Coluna

Motivação e Base do Método: A partir da matriz Jacobiana de estados de uma seção, originada a partir de um modelo linearizado em torno de um estado estacionário, almeja-se obter aproximações para os seus autovalores (inversos das respectivas constantes de tempo).

Sabe-se que para sistemas de ordem três ou superior (correspondentes, por exemplo, a seções de coluna envolvendo três ou mais estágios), as soluções analíticas exatas para os autovalores são complexas demais ou até inviáveis de serem obtidas. A literatura apresenta diversas técnicas numéricas de aproximação para estes autovalores (vide Capítulo 2). Porém, as técnicas numéricas, por mais simples que sejam, podem gerar expressões de complexidade incompatível para gerar modelos *shortcut*.

Portanto, neste trabalho é proposta uma abordagem distinta: simplificar a matriz Jacobiana de estados até que se obtenha uma matriz aproximada e de mesma ordem que a original. Esta matriz deve apresentar uma estrutura suficientemente simples para que seus autovalores possam ser obtidos de forma exata mediante expressões analíticas fisicamente interpretáveis.

A seguir será demonstrada a dedução dos autovalores aproximados para uma seção genérica da coluna. As premissas requeridas e etapas correspondentes para o método estão ilustradas pela Figura 4.4:

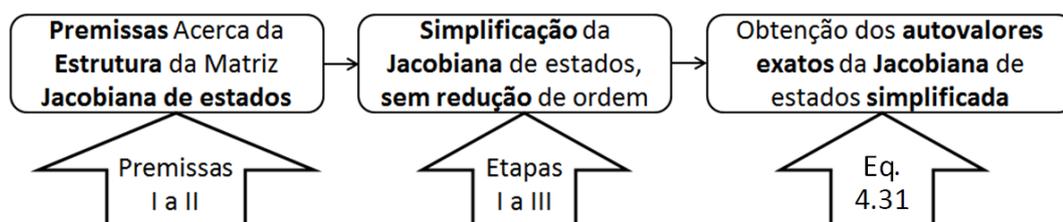


Figura 4.4: Síntese da Sistemática Proposta para Geração das Expressões.

As Premissas I a II e as Etapas I a III são descritas a seguir.

Premissas do Método: Para cada premissa, apresenta-se a respectiva implicação auxiliar para a dedução do método, acompanhada de um exemplo.

Premissa 1: Pode-se aproximar a dinâmica do modelo não linear com a do modelo linearizado em torno de um determinado ponto de operação (proximidade entre as constantes de tempo do modelo não linear e do linear).

Implicação 1: Propõe-se aproximar os dois autovalores de menor valor absoluto da matriz Jacobiana de estados (correspondentes aos inversos das constantes de tempo dominantes do modelo linear) para representar a dinâmica dominante do sistema.

Exemplo 4.2: *Comparação entre as constantes de tempo dos modelos não linear e o linear completo.* Considere as colunas A e C, para as quais foram simulados o modelo não linear e o linear completo. Foram utilizadas perturbações com distintas magnitudes e direções.

Coluna A:

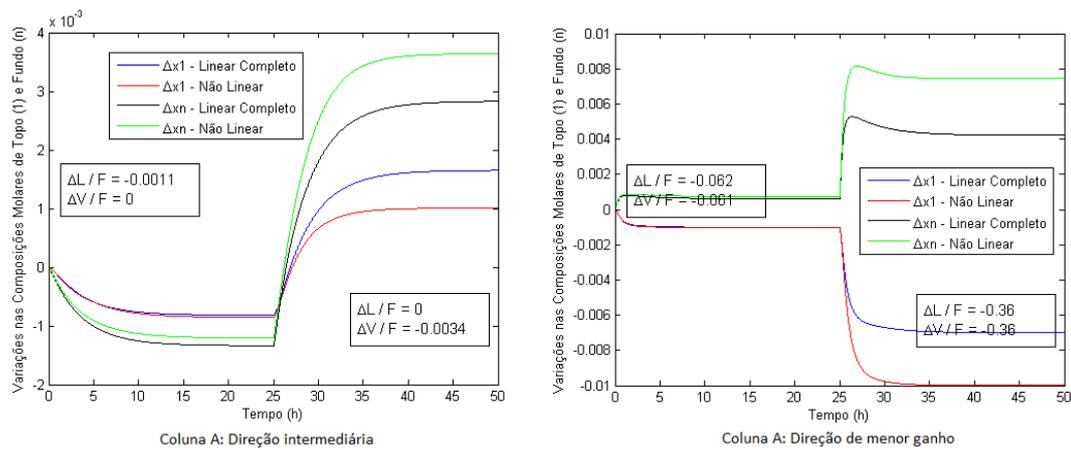


Figura 4.5: Predição da dinâmica do modelo não linear através do modelo linear completo, para diferentes padrões de perturbações (Coluna A).

Colunas C e G:

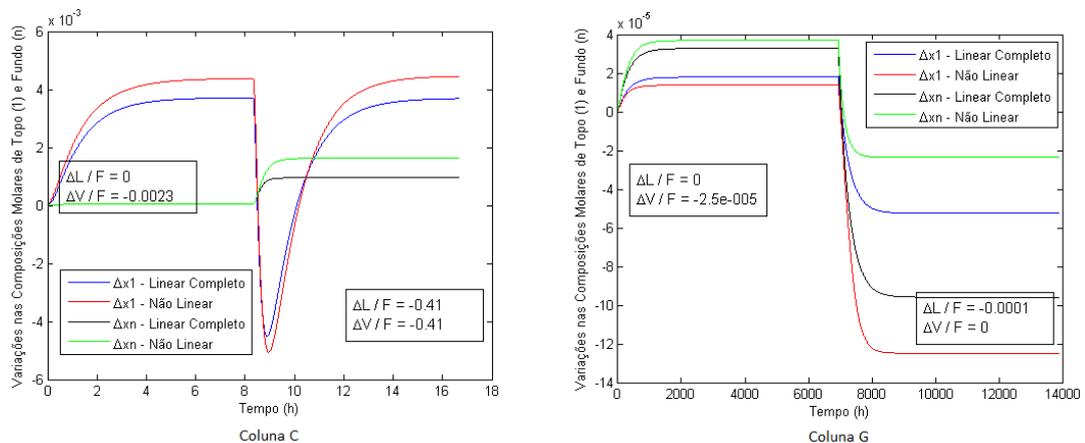


Figura 4.6: Predição da dinâmica do modelo não linear através do modelo linear completo, para diferentes padrões de perturbações (Colunas C e G).

Observe que, para todos os sistemas, que apresentam distintos graus de não linearidade (a coluna G é de altíssima pureza, e é a mais não linear de todas, vide as especificações desta, apresentadas na Tabela 4.1; a coluna C é igual à coluna A, contudo se encontra num ponto de operação completamente distinto do de A), a dinâmica do modelo não linear é muito bem capturada pelo modelo linear completo.

Premissa II: Em uma determinada diagonal da matriz Jacobiana de estados de uma Seção, os elementos adjacentes da matriz Jacobiana de estados apresentam pouca variação entre si.

Implicação II: Propõe-se utilizar alguma média entre os elementos sobre uma determinada diagonal da matriz para poder simplificá-la.

Exemplo 4.3: *Comparação entre os autovalores entre as matrizes Jacobiana de estados do modelo linear completo de uma seção, e de uma matriz Jacobiana aproximada.* Considere a seção de retificação das colunas C, D e G (dados na Tabela 4.1). A partir das respectivas matrizes Jacobianas de estados, propõe-se uma matriz Jacobiana de estados aproximada \tilde{A} , cujas entradas a_d (diagonal principal), a_s (diagonal superior) e a_i (diagonal inferior) são definidas como:

$$a_d = \frac{1}{n_S} \sum_{k=1}^{n_S} a_{k,k} \quad (4.13)$$

$$a_s = \frac{1}{n_S-1} \sum_{k=2}^{n_S} a_{k-1,k} \quad (4.14)$$

$$a_i = \frac{1}{n_S-1} \sum_{k=2}^{n_S} a_{k,k-1} \quad (4.15)$$

Onde são as entradas da matriz Jacobiana de estados original da seção.

Para uma seção de cinco estágios no interior da seção de retificação (estágios 2 a 6 da Coluna C), tem-se:

$$A = \begin{pmatrix} -0,172 & 0,0835 & & & \\ 0,0913 & -0,1748 & 0,0867 & & \\ & 0,0913 & -0,1779 & 0,0901 & \\ & & 0,0913 & -0,1813 & 0,0937 \\ & & & 0,0913 & -0,185 \end{pmatrix} \quad (4.16)$$

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} -0,1782 & 0,0885 & & & \\ 0,0913 & -0,1782 & 0,0885 & & \\ & 0,0913 & -0,1782 & 0,0885 & \\ & & 0,0913 & -0,1782 & 0,0885 \\ & & & 0,0913 & -0,1782 \end{pmatrix} \quad (4.17)$$

Os autovalores de menor valor absoluto de A e \tilde{A} são $\lambda_{min,A} = 2,248 \cdot 10^{-2}$ e $\lambda_{min,\tilde{A}} = 2,226 \cdot 10^{-2}$ respectivamente. O erro relativo $\left(\frac{\lambda_{min,\tilde{A}} - \lambda_{min,A}}{\lambda_{min,A}}\right) * 100$ corresponde a 0,3 %.

Considerando-se a seção de retificação inteira (19 estágios), da mesma coluna (C), tem-se que os autovalores de menor absoluto de A e \tilde{A} são $\lambda_{min,A} = 2,119 \cdot 10^{-3}$ e $\lambda_{min,\tilde{A}} = 1,840 \cdot 10^{-3}$ respectivamente. O erro relativo $\left(\frac{\lambda_{min,\tilde{A}} - \lambda_{min,A}}{\lambda_{min,A}}\right) * 100$ corresponde a 13,2 %. Observe que o erro relativo para uma matriz da ordem completa da seção, apesar de maior, permanece aceitável.

Para a matriz Jacobiana de estados da seção de retificação da coluna D (72 estágios), $\lambda_{min,A} = 7,523 \cdot 10^{-4}$ e $\lambda_{min,\tilde{A}} = 7,807 \cdot 10^{-4}$ respectivamente. O erro relativo $\left(\frac{\lambda_{min,\tilde{A}} - \lambda_{min,A}}{\lambda_{min,A}}\right) * 100$ corresponde a 3,2 %. Observe que, mesmo para ordens elevadas, o erro relativo pode ser relativamente baixo.

Observe que as verificações do Exemplo 4.1 também servem como apoio para a Premissa II.

Considerando-se as Premissas I e II, sustentadas pelos Exemplos 4.2 e 4.3, respectivamente, é descrita a seguir a linha de raciocínio seguida para geração das expressões.

Etapas para Dedução das Expressões: Uma visão geral das etapas envolvidas para a aproximação das constantes de tempo dominantes de uma seção é ilustrada pela Figura 4.7:

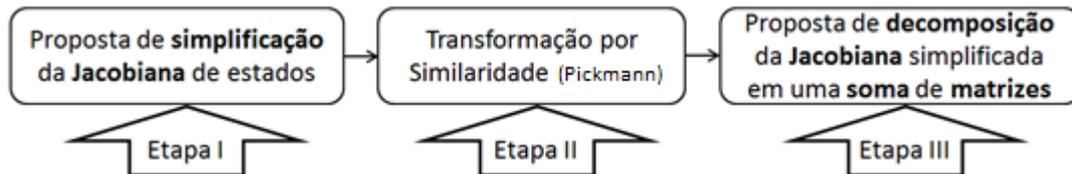


Figura 4.7: Visão Geral das Etapas para Dedução das Expressões.

As três etapas são detalhadas a seguir. O procedimento é o mesmo para qualquer seção de uma coluna que apresente características dinâmicas que entrem de acordo com as Premissas I e II acima estipuladas. Portanto, este é válido tanto para a zona de retificação como para a zona de esgotamento, ou para qualquer conjunto de estágios internos que possa ser definido como seção.

Por conveniência, serão considerados, nesta Seção, os subíndices 1 e n_s para representar, respectivamente, o primeiro e o último estágios da seção (não confundir com a notação 1 utilizada no restante do texto para indicar o condensador).

Etapa I: Aproximação da matriz Jacobiana de estados de uma seção.

Partindo-se da matriz Jacobiana de estados de uma seção qualquer com n_s estágios:

$$A = \begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & & & & \\ a_{2,1} & a_{2,2} & a_{2,3} & & & \\ & a_{3,2} & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & & \\ & & & & a_{n_S-1,n_S} & \\ & & & & & a_{n_S,n_S} \end{pmatrix} \quad (4.18)$$

Foram aproximados todos os elementos de uma determinada diagonal de A pela média aritmética entre os elementos da respectiva diagonal conforme as Equações 4.19 a 4.21, obtendo-se a matriz \bar{A} :

$$a_d = \frac{1}{n_S} \sum_{k=1}^{n_S} a_{k,k} \quad (4.19)$$

$$a_s = \frac{1}{n_S-1} \sum_{k=2}^{n_S} a_{k-1,k} \quad (4.20)$$

$$a_i = \frac{1}{n_S-1} \sum_{k=2}^{n_S} a_{k,k-1} \quad (4.21)$$

$$\bar{A} \equiv \begin{pmatrix} a_d & a_s & & & & \\ a_i & a_d & a_s & & & \\ & a_i & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & & \\ & & & & a_s & \\ & & & & & a_d \end{pmatrix} \quad (4.22)$$

A aproximação da matriz A por \bar{A} correspondente à única etapa do procedimento apresentado que altera os autovalores da matriz original. Tal aproximação é requisito para a Etapa II, que requer que cada uma das diagonais seja populada por um elemento representativo. No caso, o valor médio dos elementos (cf. Etapa I).

A Etapa I é independente das demais. O valor representativo poderia ser obtido por outra média, como a geométrica por exemplo. Contudo, foi escolhida a média aritmética, devido ao compromisso entre simplicidade e precisão que esta fornece para os casos estudados.

Etapa II: Transformação por similaridade, conforme a transformação apresentada em Pickmann (2007):

Nesta Etapa, transformou-se \bar{A} em uma matriz similar simétrica E , mediante a transformação por similaridade definida pelas Eqs. 4.23 a 4.25, conforme apresentado em (Pickmann, 2007):

$$d_1 = 1, d_k = d_{k-1} \sqrt{\frac{a_i}{a_s}}, 2 \leq k \leq n_S \quad (4.23)$$

$$D_1 = \text{diag}(d_k) \quad (4.24)$$

$$D_2 = \text{diag}\left(\frac{1}{d_k}\right) \quad (4.25)$$

Gerando-se \mathcal{E} :

$$\mathcal{E} = D_1 \bar{A} D_2 = \begin{pmatrix} a_d & a_s \sqrt{\frac{a_i}{a_s}} & & & \\ a_s \sqrt{\frac{a_i}{a_s}} & a_d & a_s \sqrt{\frac{a_i}{a_s}} & & \\ & a_s \sqrt{\frac{a_i}{a_s}} & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & a_s \sqrt{\frac{a_i}{a_s}} \\ & & & a_s \sqrt{\frac{a_i}{a_s}} & a_d \end{pmatrix} \quad (4.26)$$

De posse da matriz similar \mathcal{E} , é possível fatorar seu termo $a_s \sqrt{\frac{a_i}{a_s}}$, racionalizando-se também este, obtendo-se a matriz \hat{A} :

$$\hat{A} = \sqrt{a_s a_i} \begin{pmatrix} \frac{a_d}{\sqrt{a_s a_i}} & 1 & & & \\ 1 & \frac{a_d}{\sqrt{a_s a_i}} & 1 & & \\ & 1 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & 1 \\ & & & 1 & \frac{a_d}{\sqrt{a_s a_i}} \end{pmatrix} \quad (4.27)$$

O objetivo desta transformação é viabilizar a conversão de \hat{A} em uma soma de duas matrizes comutativas entre si. Para um par de matrizes comutativas, cada autovalor k dos n_s autovalores da matriz resultante da soma de ambas é igual à soma entre cada autovalor k dos n_s autovalores de cada uma. Esta é uma propriedade conhecida da literatura de álgebra linear. Um exemplo de par de matrizes comutativas é uma matriz múltipla da matriz identidade e qualquer outra matriz genérica.

Etapa III: Conversão de \hat{A} em uma soma de matrizes comutativas entre si.

Propõe-se um formato alternativo para \hat{A} , como sendo a soma das matrizes \hat{A}_I e \hat{A}_{II} , $\hat{A} = \hat{A}_I + \hat{A}_{II}$, comutativas entre si. Estas matrizes são definidas, respectivamente, por:

Matriz \hat{A}_I :

$$\hat{A}_I \equiv (\sqrt{a_s a_i}) \hat{U}_{n_s} \quad (4.28)$$

$$\hat{U}_{n_s} \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 & & & \\ 1 & 0 & 1 & & \\ & 1 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & 1 \\ & & & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.29)$$

Matriz \hat{A}_2 :

$$\hat{A}_{II} \equiv \text{diag}(a_d) = \begin{pmatrix} a_d & 0 & & & \\ 0 & a_d & 0 & & \\ & 0 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & & & 0 & a_d \end{pmatrix} \quad (4.30)$$

Onde \hat{A}_{II} é uma matriz múltipla da matriz identidade, garantindo sua comutatividade com \hat{A}_I .

Os formatos das matrizes \hat{U}_{n_S} e \hat{A}_{II} , obtidas mediante a dedução proposta neste trabalho, facilitam a obtenção de autovalores exatos da matriz aproximada, que podem ser tomados como aproximações para os autovalores da matriz \hat{A} original. Esta facilidade no tratamento matemático é devido às Considerações I a IV discutidas a seguir:

Consideração I: Relativa ao tipo de aproximação realizada.

Não é requerida nenhuma técnica numérica para aproximação de autovalores (como Método das Potências, Fatoração QR, etc.), uma vez que a aproximação é realizada apenas para a matriz, obtendo-se os autovalores exatos desta matriz aproximada, e não para os autovalores da matriz original.

Consideração II: Relativa aos autovalores de \hat{A}_I .

O espectro (conjunto de autovalores) de uma matriz na forma de \hat{U}_{n_S} , cf. a Matriz 4.29, pode ser verificado computacionalmente, e é dependente apenas de sua ordem. Uma vez calculado, seus valores podem ser tabelados (vide Apêndice I). O espectro de \hat{A}_I é o de \hat{U} multiplicado pelo fator $\sqrt{a_s a_i}$.

Consideração III: Relativa aos autovalores de \hat{A}_2 .

Os n_S autovalores da matriz \hat{A}_{II} de ordem n_S são iguais a a_d , porque esta é uma matriz diagonal constituída apenas por elementos iguais a a_d .

Consideração IV: Relativa à soma $\hat{A}_I + \hat{A}_{II}$.

Os autovalores λ_n e λ_{n-1} , de menor módulo, de $\hat{A} = \hat{A}_I + \hat{A}_{II} = (\sqrt{a_s a_i})\hat{U}_{n_S} + \text{diag}(a_d)$, são os de interesse, porque correspondem às duas constantes de tempo dominantes, τ_1 e τ_2 , respectivamente, da seção. Estes autovalores podem ser calculados através da soma dos autovalores de \hat{A}_I e \hat{A}_{II} :

$$\lambda_k = a_d + \eta_k \sqrt{a_s a_i}, \text{ onde } k = n \text{ ou } k = n - 1 \quad (4.31)$$

A propriedade aditiva em 4.31 é válida porque $\hat{A}_{II} = \text{diag}(a_d)$ é uma matriz diagonal múltipla da matriz identidade. Assim, esta matriz é comutativa com qualquer outra matriz à qual ela é somada. Esta é uma propriedade conhecida de Álgebra Linear, e para esta é válida a igualdade $\lambda_{\hat{A}_I + \hat{A}_{II}} = \lambda_{\hat{A}_I} + \lambda_{\hat{A}_{II}}$.

Em 4.31, O fator $\eta_j \sqrt{a_s a_i}$ corresponde ao espectro de \hat{A}_I , enquanto que o fator a_d corresponde ao espectro de \hat{A}_{II} ,

Exemplo 4.4: *Geração dos autovalores η_j ; relativo à Consideração II.* A partir da função *eig()* do MATLAB (ou alguma função equivalente de outro *software*), pode-se computar diretamente os autovalores para quaisquer matriz \hat{U}_{n_s} . Para o caso de $n_s = 3$, tem-se:

$$\hat{U}_3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.32)$$

Os autovalores η_j correspondentes são: $-1,414$, 0 , $1,414$. Para a primeira constante de tempo, aplica-se o menor autovalor do conjunto, $\gamma_3 = -1,414$. Para a segunda constante de tempo, aplica-se o segundo menor autovalor do conjunto, $\gamma_2 = 0$.

Exemplo 4.5: *Verificando-se o espectro de uma matriz tridiagonal decomposta conforme a Etapa III.* Considere a Submatriz 4.33, originada a partir da Matriz 4.17, esta já aproximada, do Exemplo 4.3. Pode-se decompô-la na seguinte soma, cf. Etapa III:

$$\hat{A}_{4.33} = \begin{pmatrix} -0,1782 & 0,0885 & 0 \\ 0,0913 & -0,1782 & 0,0885 \\ 0 & 0,0913 & -0,1782 \end{pmatrix} \quad (4.33)$$

Aplicando-se as Eqs. 4.28 a 4.30:

$$\hat{A}_{4.33} = \sqrt{0,0913 \cdot 0,0885} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0,1782 & 0 & 0 \\ 0 & 0,1782 & 0 \\ 0 & 0 & 0,1782 \end{pmatrix} \quad (4.34)$$

$$\hat{A}_{4.33} = 0,0899 \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} - 0,1782 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.35)$$

Como $-0,1782 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ é uma matriz diagonal, esta é comutativa com $0,0899 \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$. Logo, o autovalor da soma é a soma dos autovalores das duas matrizes, como demonstrado a seguir:

Para $0,1782 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, os três autovalores são iguais a $-0,1782$. Para $0,0899 \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$, os autovalores são $-0,1271$, 0 e $0,1271$. A soma dos autovalores, portanto, resulta no conjunto $-0,0511$, $-0,1782$ e $-0,3053$, que é equivalente aos autovalores da soma $0,0899 \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} - 0,1782 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$.

Conforme o método, os dois autovalores $\lambda_{1,A}$ e $\lambda_{2,A}$ de menor módulo podem ser calculados da seguinte forma:

$$\lambda_{1,A} = 0,0899\lambda_{1,\hat{U}_3} + 0,1782\lambda_{1,I_3} \quad (4.36)$$

$$\lambda_{2,A} = 0,0899\lambda_{2,\hat{U}_3} + 0,1782\lambda_{2,I_3} \quad (4.37)$$

E qualquer autovalor k do espectro desta matriz pode ser determinado pela seguinte expressão:

$$\lambda_{k,A} = 0,0899\lambda_{k,\hat{U}_3} + 0,1782\lambda_{k,I_3}, \quad 1 \leq k \leq 3 \quad (4.38)$$

Analogamente, para uma matriz de ordem n_s , a expressão fica:

$$\lambda_{k,A} = \sqrt{a_s a_i} \lambda_{k,\hat{U}_{n_s}} + a_d \lambda_{k,I_{n_s}}, \quad 1 \leq k \leq n_s \quad (4.39)$$

Onde a_s , a_i e a_d são as médias aritméticas correspondentes a matrizes de ordens distintas.

4.2.2 Constante de Tempo Dominante da Seção de Retificação

Considerando-se uma seção de retificação com n_r estágios, a partir da Equação 4.31 se obtém a seguinte aproximação das constantes de tempo dominantes $\tau_{R,m}$, desta seção onde $m = 1$ para a de maior módulo e $m = 2$, para a de menor módulo:

$$\tau_{R,m} = \frac{M}{L} \left(1 + \frac{1}{R_{LV}} \frac{1}{n_r} \sum_{k=2}^{n_f-1} \left. \frac{\partial y_k}{\partial x_k} \right|_{SS} - \eta_m \sqrt{\frac{1}{R_{LV}} \frac{1}{n_r-1} \sum_{k=3}^{n_f-1} \left. \frac{\partial y_k}{\partial x_k} \right|_{SS}} \right)^{-1} \quad (4.40)$$

Onde:

$$R_{LV} = \frac{L}{V+(1-q)F} \quad (4.41)$$

$$\left. \frac{\partial y_k}{\partial x_k} \right|_{SS} = \frac{\alpha}{(1+\alpha x_k - x_k)^2}, \quad 1 \leq k \leq n \quad (4.42)$$

4.2.3 Constante de Tempo Dominante da Seção de Esgotamento

Considerando-se uma seção de esgotamento com n_e estágios, a partir da Equação 4.31 se obtém a seguinte aproximação das constantes de tempo dominantes $\tau_{E,m}$, desta seção onde $m = 1$ para a de maior módulo e $m = 2$, para a de menor módulo:

$$\tau_{E,m} = \frac{M}{L+qF} \left(1 + \frac{1}{E_{LV}} \frac{1}{n_e} \sum_{k=n_f}^n \left. \frac{\partial y_k}{\partial x_k} \right|_{SS} - \eta_m \sqrt{\frac{1}{E_{LV}} \frac{1}{n_e-1} \sum_{k=n_f}^n \left. \frac{\partial y_k}{\partial x_k} \right|_{SS}} \right)^{-1} \quad (4.43)$$

Onde:

$$E_{LV} = \frac{L+qF}{V} \quad (4.44)$$

4.2.4 Estrutura Genérica para os Modos Dinâmicos Dominantes de cada Seção

Observe que as Equações 4.40 e 4.43 apresentam o seguinte formato genérico:

$$\tau_S = \frac{\rho_1}{\rho_2} \left(\frac{1}{\rho_3 - \rho_4 \sqrt{\rho_5 \rho_6}} \right) \quad (4.45)$$

Onde:

- I) Os termos $\rho_2 = L$ ou $\rho_2 = L + qF$, para as seções de retificação e esgotamento, respectivamente, são necessários para que a influência da variável motriz L não seja desconsiderada caso as razões $\left(\frac{L}{V}\right)_S$ sejam unitárias;
- II) O termo $\rho_3 = 1 + \frac{1}{\left(\frac{L}{V}\right)_S} \frac{1}{n_s} \sum n_s \frac{\partial y_k}{\partial x_k} \Big|_{SS}$, corresponde à influência média dos estágios individuais sem considerar a ação das retroalimentações entre os estágios adjacentes;
- III) O termo $\rho_4 = \eta(n_s)$, corresponde à influência do número de estágios sobre a constante de tempo dominante. Observe que uma parte significativa da informação sobre esta constante de tempo se deve unicamente à ordem da seção, e está presente neste termo. Isto foi possível de ser obtido com a dedução da matriz \hat{U} . Este termo também é responsável pela dinâmica lenta ($\tau_{Seção,1}$) e rápida ($\tau_{Seção,2}$) da seção.
- IV) O termo $\sqrt{\rho_5 \rho_6} = \sqrt{\frac{1}{\left(\frac{L}{V}\right)_S} \frac{1}{n_s} \sum n_s \frac{\partial y_k}{\partial x_k} \Big|_{SS}}$, corresponde à influência das alimentações e retroalimentações dos estágios adjacentes que amplificam a constante de tempo dominante;
- V) O termo de capacitância $\rho_1 = M$, corresponde ao *holdup* molar médio da seção. Pode-se também considerar a constante de tempo dominante como uma expressão genérica $\tau_{Seção} = M \tau_{SeçãoM=1}$, onde $\tau_{SeçãoM=1} = \frac{1}{\rho_2} \left(\frac{1}{\rho_3 - \rho_4 \sqrt{\rho_5 \rho_6}} \right)$. Característica esta natural para qualquer termo de capacitância, como a área da seção transversal de um tanque por exemplo.

Observe a partir de IV e V, onde $\tau_{Seção} = \frac{\rho_1}{\rho_2} \left(\frac{1}{\rho_3 - \rho_4 \sqrt{\rho_5 \rho_6}} \right)$, que o fator $\rho_3 - \rho_4 \sqrt{\rho_5 \rho_6}$ ilustra como as retroalimentações alteram os modos dinâmicos da seção, de forma que um efeito mais pronunciado das retroalimentações, expresso por $\sqrt{\rho_5 \rho_6}$, faz este fator ser mais descontado de ρ_3 , reduzindo-se o denominador em $\frac{1}{\rho_3 - \rho_4 \sqrt{\rho_5 \rho_6}}$, e amplificando a constante de tempo dominante.

4.3 Ganhos Estáticos do Modelo Linear

Soluções exatas para as concentrações estacionárias da coluna podem ser obtidas mediante simulações de modelos rigorosos. A partir deste perfil estacionário exato, qualquer novo perfil de concentrações, oriundo de perturbações nos refluxos internos (ΔL e ΔV) e de distúrbios na alimentação (Δx_F e ΔF), pode ser gerado mediante alguma das seguintes formas:

- a) Conhecendo-se a solução exata para a matriz de ganhos estacionários. Esta pode ser obtida a partir de um modelo linear, conforme o método proposto na Seção 3.5;
- b) Conhecendo-se equações ajustadas de curvas de ganhos estacionários, obtidas a partir de métodos de redução de ordem (como o de Litz ou o de Hankel), ou de métodos de identificação *grey box*;
- c) Com os próprios simuladores estacionários, que fornecem os ganhos correspondentes ao do modelo não linear.

Para (a) e (b) há discrepância com relação aos ganhos do modelo não linear. Contudo, para os objetivos deste trabalho, utiliza-se a abordagem em (a), através do método proposto na Seção 3.5 para a determinação exata das matrizes de ganhos estáticos de cada seção da coluna. Estas estão representadas abaixo por $R(0)$ (seção de retificação) e $E(0)$ (seção de esgotamento):

- Seção de retificação:

$$\begin{bmatrix} \Delta x_2(0) \\ \Delta x_{f-1}(0) \end{bmatrix} = R(0) \begin{bmatrix} \Delta L(0) \\ \Delta V(0) \\ \Delta x_1(0) \\ \Delta x_f(0) \end{bmatrix} \quad (4.46)$$

$$R(0) \equiv \begin{bmatrix} K_{x_2,L} & K_{x_2,V} & K_{x_2,x_1} & K_{x_2,x_f} \\ K_{x_{f-1},L} & K_{x_{f-1},V} & K_{x_{f-1},x_1} & K_{x_{f-1},x_f} \end{bmatrix} \quad (4.47)$$

- Seção de esgotamento:

$$\begin{bmatrix} \Delta x_{n-1}(0) \\ \Delta x_f(0) \end{bmatrix} = E(0) \begin{bmatrix} \Delta L(0) \\ \Delta V(0) \\ \Delta x_{f-1}(0) \\ \Delta x_n(0) \end{bmatrix} \quad (4.48)$$

$$E(0) \equiv \begin{bmatrix} K_{x_{n-1},L} & K_{x_{n-1},V} & K_{x_{n-1},x_{f-1}} & K_{x_{n-1},x_n} \\ K_{x_f,L} & K_{x_f,V} & K_{x_f,x_{f-1}} & K_{x_f,x_n} \end{bmatrix} \quad (4.49)$$

Em $R(0)$ e $E(0)$, são definidos como:

$$R(0) \equiv -C_R A^{-1}_R B_R \quad (4.50)$$

$$E(0) \equiv -C_E A^{-1}_E B_E \quad (4.51)$$

Onde A_R , B_R , C_R são as submatrizes correspondentes à representação em espaço de estados da seção de retificação, definidas como:

$$A_R \equiv A[2, f - 1; 2, f - 1] \quad (4.52)$$

$$B_R \equiv B[2, f - 1; 1, 2] \quad (4.53)$$

$$C_R \equiv I_{n_r} \quad (4.54)$$

E A_E , B_E , C_E são as submatrizes correspondentes à representação em espaço de estados da seção de retificação, definidas como:

$$A_E \equiv A[f, n - 1; f, n - 1] \quad (4.55)$$

$$B_E \equiv B[f, n - 1; 1, 2] \quad (4.56)$$

$$C_E \equiv I_{n_e} \quad (4.57)$$

As soluções exatas para $R(0)$ e $E(0)$ são obtidas aplicando-se o algoritmo de Thomas aos sistemas abaixo:

$$A_R R(0) = C_R \quad (4.58)$$

$$A_E E(0) = C_E \quad (4.59)$$

4.4 Shortcuts para Predição da Direcionalidade

Uma abordagem alternativa para a captura da direcionalidade é proposta a seguir.

4.4.1 Direcionalidade de colunas a partir das alterações do perfil de concentrações

Motivação e Base do Método: A literatura apresenta poucos modelos que capturam os efeitos da direcionalidade em colunas. Dois destes, que merecem destaque, são o de Skogestad e Morari (1988) e o de Sáfors e Waller (1995), que estão mais bem detalhados na Seção 2.4. Ambos contribuem com interpretações físicas para as dinâmicas “lenta” e “rápida” observadas em colunas devido a diferentes padrões de perturbações nos refluxos (ΔL e ΔV).

Para uma abordagem com modelos *shortcut*, requer-se uma estrutura de modelo simples também para a captura da direcionalidade. Desta forma, neste trabalho propõe-se um conjunto de métricas para avaliar a direcionalidade que não se restringem às ideias de Sáfors e Waller (1995) e Skogestad e Morari (1987), contudo as utiliza como base para sua formulação e as estende.

Premissas do Método: Para cada premissa, apresenta-se a respectiva implicação auxiliar para a dedução do método, acompanhada de um exemplo.

Premissa III: Extensão da interpretação física da direcionalidade proposta por Sáfors e Waller.

A direcionalidade da coluna é relacionada com as variações no perfil de concentrações. Considere um perfil estacionário inicial. Manipulando-se os refluxos ΔL e ΔV , o sistema é levado a um novo estado estacionário apresentando um segundo perfil de concentrações. De acordo com Sáfors e Waller, os efeitos correspondentes à mudança de perfil podem ser:

Efeito (a): Deslocamento do perfil, devido ao aumento da pureza em um extremo da seção em detrimento desta no outro extremo;

Efeito (b): Variações na inclinação do perfil devido à redistribuição do componente entre os estágios da seção (deformação do perfil);

Implicação III: Pode-se buscar quantificar estes efeitos calculando-se apenas a diferença entre as concentrações nos dois estados estacionários. Com isto, pode-se verificar a relação existente entre a mudança do perfil de concentrações e a direcionalidade de colunas.

Premissa IV: Cada seção de uma coluna é essencialmente uma coluna individual, porém com uma entrada no estágio de topo e outra no estágio fundo, e nenhuma descontinuidade devido a correntes intermediárias de alimentação. A Figura 4.8 ilustra esta representação:

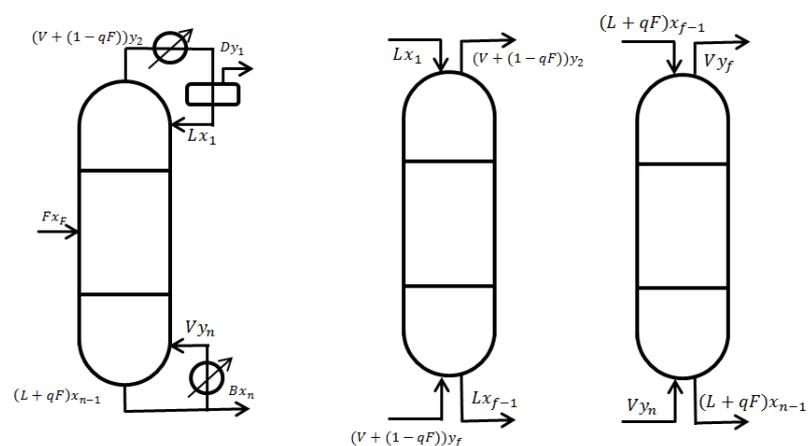


Figura 4.8: Coluna de Destilação e seções representadas como colunas individuais.

Implicação IV: A dinâmica de cada seção é tratada de forma similar à de uma coluna alimentada por duas correntes: uma no topo e outra no fundo. Desta forma, têm-se como variáveis motrizes, além de ΔL e ΔV :

- a) As variações nas composições das correntes de refluxo da coluna, que alimentam uma seção:

Δx_1 , saindo do condensador para a seção de retificação;

Δx_n , saindo do refeedor para a seção de esgotamento.

- b) As variações nas composições de saída da seção oposta que alimentam uma determinada seção:

Δx_f , saindo do estágio de topo da seção de esgotamento para o de fundo da seção de retificação;

Δx_{f-1} , saindo do estágio de fundo da seção de retificação para o de topo da seção de esgotamento.

Conforme a Premissa IV, é possível estender a Premissa III para cada seção da coluna. Assim, a direcionalidade em cada seção é influenciada pela forma como o perfil de concentrações é alterado conforme um determinado conjunto de perturbações.

Características do Método: Aqui são apresentados os principais requisitos para aplicação do método. Por conveniência, o vetor contendo as composições para um estado estacionário inicial será denotado como X_{SS0} . A notação X_{SSF} será a correspondente para o estado estacionário final.

$$X_{SS0} \equiv [x_{1,0}, x_{2,0}, \dots, x_{n-1,0}, x_{n,0}]^T \tag{4.60}$$

$$X_{SSF} \equiv [x_{1,F}, x_{2,F}, \dots, x_{n-1,F}, x_{n,F}]^T \tag{4.61}$$

Característica 1: Requer um simulador estacionário para a geração de X_{SS0} . Para a obtenção de X_{SSF} , requer-se a matriz de ganhos estáticos completa da coluna (método proposto correspondente às Eqs. 3.33 a 3.36). Com isto, o estado estacionário de cada composição é obtido por:

$$x_{i,F} = x_{i,0} + K_{x_{i,L}} \Delta L + K_{x_{i,V}} \Delta V \tag{4.62}$$

Com a Eq. 4.62, é possível calcular a variação de *holdup* em cada estágio da seção. Observe que apenas uma simulação estática é necessária, para cada variação no perfil de concentrações.

De posse destas informações, aplicam-se uma série de métricas propostas para captura da direcionalidade que têm por base esta mudança no perfil de concentrações. Antes de apresentá-las, entretanto, convém resumir os requisitos para sua aplicação através do seguinte fluxograma:

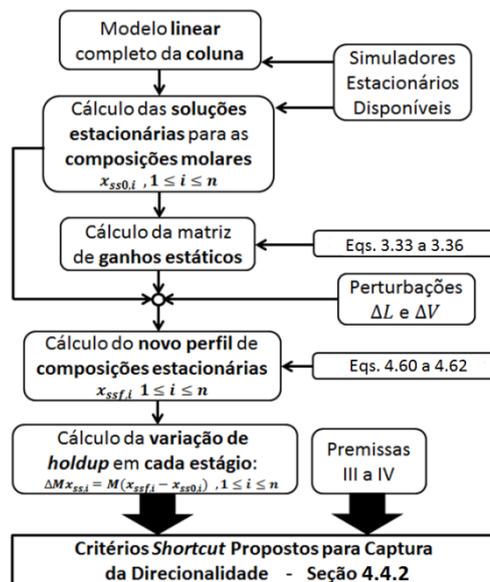


Figura 4.9: Requisitos para cálculo das métricas propostas para direcionalidade.

4.4.2 Critérios Shortcut para Captura da Direcionalidade em uma Seção da Coluna

Os critérios propostos nesta subseção visam fornecer métricas rápidas e precisas para a captura da direcionalidade em cada seção da coluna, auxiliando também no entendimento do comportamento dinâmico de cada seção individual.

Definição 4.3: *Dinâmicas dominante, “mista” e lenta em uma seção.* São definidas aqui as dinâmicas dominante de uma seção como a representada pela constante de tempo de maior módulo ($\tau_{S,1}$); a lenta como a representada pela constante de tempo de segundo maior módulo ($\tau_{S,2}$); e a mista com um dos extremos da seção respondendo conforme $\tau_{S,1}$, enquanto que o extremo oposto responde conforme $\tau_{S,2}$.

Dedução da dinâmica mista em uma seção: Considere partir da razão entre a constante de tempo dominante da seção ($\tau_{S,1}$) e a rápida ($\tau_{S,2}$) de uma S seção da coluna ($S \equiv R$ para a seção de retificação, $S \equiv E$ para a seção de esgotamento):

$$r_{S,1} \equiv \frac{\tau_{S,1}}{\tau_{S,2}} \quad (4.63)$$

Onde $\tau_{R,1}$, $\tau_{R,2}$, $\tau_{E,1}$ e $\tau_{E,2}$ são determinados pelos *shortcuts* das Equações , respectivamente, e, também a partir da razão equivalente, $r_{S,2} \equiv r_{S,1}^{-1}$, a seguinte métrica que correlaciona as dinâmicas das seções entre si é proposta:

$$\rho_{S,i} \equiv \frac{r_{S,i}}{r_{S,i} + r_{OS,i}} \quad (4.64)$$

Onde o índice OS corresponde à seção oposta à S , ou seja, para $S \equiv R$, $OS \equiv E$ e para $S \equiv E$, $OS \equiv R$.

Para cada seção, as constantes de tempo representativas são definidas por:

Dinâmica mista (lenta em um extremo da seção, rápida no extremo oposto) da zona de retificação:

$$T_{R,1} \equiv \rho_{R,1}\tau_{R,1} + \rho_{R,2}\tau_{R,2} \quad (4.65)$$

Dinâmica rápida da zona de retificação:

$$T_{R,2} \equiv \tau_{R,2} \quad (4.66)$$

Dinâmica dominante da zona de retificação:

$$T_{R,dom} \equiv \tau_{R,1} \quad (4.67)$$

Dinâmica mista (lenta em um extremo da seção, rápida no extremo oposto) da zona de esgotamento:

$$T_{E,1} \equiv \rho_{E,1}\tau_{E,1} + \rho_{E,2}\tau_{E,2} \quad (4.68)$$

Dinâmica rápida da zona de esgotamento:

$$T_{E,2} \equiv \tau_{E,2} \quad (4.69)$$

Dinâmica dominante da zona de esgotamento:

$$T_{E,dom} \equiv \tau_{E,1} \quad (4.70)$$

Demonstração breve da dedução da dinâmica mista: Considere uma coluna representada pela seguinte matriz 2x2:

$$A_{col,I} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\tau_{R,1}} - \frac{1}{\tau_{R,2}} & \frac{c_3}{\tau_{E,1}} + \frac{c_4}{\tau_{E,2}} \\ \frac{c_1}{\tau_{R,1}} + \frac{c_2}{\tau_{R,2}} & -\frac{1}{\tau_{E,1}} - \frac{1}{\tau_{E,2}} \end{bmatrix} \quad (4.71)$$

Onde os fatores c são constantes. Pode-se verificar que os autovalores De $A_{col,I}$ podem ser aproximados pelos de $A_{col,II}$:

$$A_{col,II} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\frac{\tau_{R,1}\tau_{E,2} + \tau_{R,2}\tau_{E,1}}{\tau_{E,2} + \tau_{E,1}}} - \frac{1}{\tau_{R,2}} & \frac{c_7}{\frac{\tau_{R,1}\tau_{E,2} + \tau_{R,2}\tau_{E,1}}{\tau_{E,2} + \tau_{E,1}}} + \frac{c_8}{\tau_{E,2}} \\ \frac{c_5}{\frac{\tau_{R,1}\tau_{E,2} + \tau_{R,2}\tau_{E,1}}{\tau_{E,2} + \tau_{E,1}}} + \frac{c_6}{\tau_{R,2}} & -\frac{1}{\frac{\tau_{R,1}\tau_{E,2} + \tau_{R,2}\tau_{E,1}}{\tau_{R,2} + \tau_{R,1}}} - \frac{1}{\tau_{E,2}} \end{bmatrix} \quad (4.72)$$

Crítérios para direcionalidade e interpretação física: Os critérios propostos a seguir estabelecem quando seção responde conforme sua dinâmica lenta, rápida ou a mista.

Considere as razões entre variação de *holdup* nos extremos de cada seção da coluna, expressas por:

$$R_T \equiv \frac{M\Delta x_2}{\sum_{k=2}^{f-1} M\Delta x_k} = \frac{1}{1 + \frac{\sum_{k=3}^{f-1} \Delta x_k}{\Delta x_2}} \quad (4.73)$$

$$R_B \equiv \frac{M\Delta x_{f-1}}{\sum_{k=2}^{f-1} M\Delta x_k} = \frac{1}{1 + \frac{\sum_{k=2}^{f-2} \Delta x_k}{\Delta x_{f-1}}} \quad (4.74)$$

$$E_T \equiv \frac{M\Delta x_f}{\sum_{k=f}^{n-1} M\Delta x_k} = \frac{1}{1 + \frac{\sum_{k=f+1}^{n-1} \Delta x_k}{\Delta x_f}} \quad (4.75)$$

$$E_B \equiv \frac{M\Delta x_{n-1}}{\sum_{k=f}^{n-1} M\Delta x_k} = \frac{1}{1 + \frac{\sum_{k=f}^{n-2} \Delta x_k}{\Delta x_{n-1}}} \quad (4.76)$$

Observe que cada razão apresenta a seguinte forma genérica:

$$razão_{extremo} \equiv \frac{\text{variação no extremo}}{\text{soma de todas as variações na seção}} = \frac{1}{1 + \frac{\text{soma das demais variações}}{\text{variação no extremo}}} \quad (4.77)$$

Considere inicialmente que a razão $\frac{\text{soma das demais variações}}{\text{variação no extremo}}$ seja próxima de 1, onde este valor 1 é resultante da razão $\frac{\text{variação no extremo}}{\text{variação no extremo}} = 1$. Vide o denominador $1 + \frac{\text{soma das demais variações}}{\text{variação no extremo}}$. Para este caso, a composição no extremo da seção variou aproximadamente tanto quanto a soma das variações do restante da seção. Isso indica uma predominância do efeito de deslocamento de perfil (dinâmica lenta no respectivo extremo). Quanto mais discrepante esta razão for de um, mais achatado se torna o perfil

no respectivo extremo, e mais deformado se torna o perfil no restante da seção. Isto indica uma deformação do perfil (dinâmica rápida no respectivo extremo).

Estas constatações formam a base para todos os demais critérios apresentados a seguir. Os Estudos de Caso do Capítulo 5 também explicam detalhadamente estes comportamentos observados nas colunas abordadas. Considere as seguintes métricas (equivalentes a $\frac{\text{soma das demais variações}}{\text{variação no extremo}}$):

$$r_T \equiv \frac{\sum_{k=3}^{f-1} \Delta x_k}{\Delta x_2} \quad (4.78)$$

$$r_B \equiv \frac{\sum_{k=2}^{f-2} \Delta x_k}{\Delta x_{f-1}} \quad (4.79)$$

$$e_T \equiv \frac{\sum_{k=f+1}^{n-1} \Delta x_k}{\Delta x_f} \quad (4.80)$$

$$e_B \equiv \frac{\sum_{k=f}^{n-2} \Delta x_k}{\Delta x_{n-1}} \quad (4.81)$$

Estas razões correspondem à variação na composição de uma saída de cada seção pela variação total em seus demais estágios, onde os subíndices T e B correspondem aos de topo e de fundo, respectivamente. As notações R ou r e E ou e correspondem às seções de retificação e esgotamento, respectivamente. As razões r_T , r_B , e_T e e_B expressam o quanto as variações nas composições da seção, exceto a do extremo avaliado na seção, contribuem à variação total do perfil frente à variação individual deste extremo, e são métricas equivalentes a R_T , R_B , E_T e E_B , porém de melhor análise quantitativa devido à sua faixa de valores estar, em módulo, entre 1 e 1000.

A seguir, as métricas que levam a um deslocamento do perfil de concentrações da seção.

Tabela 4.4: Métricas para Verificar se a Dinâmica da Seção é a Lenta.

Métrica	Seção de retificação	Seção de esgotamento
I. Topo da seção <i>versus</i> fundo da seção	$\vartheta \left(\frac{\sum_{k=3}^{f-1} \Delta x_k}{\Delta x_2} \right) \sim \vartheta \left(\frac{\sum_{k=2}^{f-2} \Delta x_k}{\Delta x_{f-1}} \right)$	$\vartheta \left(\frac{\sum_{k=f+1}^{n-1} \Delta x_k}{\Delta x_f} \right) \sim \vartheta \left(\frac{\sum_{k=f}^{n-2} \Delta x_k}{\Delta x_{n-1}} \right)$
II. Topo da seção <i>versus</i> seção inteira	$\sum_{k=3}^{f-1} \Delta x_k \gg \Delta x_2$	$\sum_{k=f+1}^{n-1} \Delta x_k \gg \Delta x_f$
III. Fundo da seção <i>versus</i> seção inteira	$\sum_{k=2}^{f-2} \Delta x_k \gg \Delta x_{f-1}$	$\sum_{k=f}^{n-2} \Delta x_k \gg \Delta x_{n-1}$

Para uma seção, caso as respectivas métricas I, II e III, da Tabela, sejam todas satisfeitas, pode se considerar que a dinâmica da seção é a lenta, ou seja:

Para a seção de retificação:

$$T_{x_2} = T_{R,1} \tag{4.82}$$

$$T_{x_{f-1}} = T_{R,1} \tag{4.83}$$

Para a seção de esgotamento:

$$T_{x_f} = T_{E,1} \tag{4.84}$$

$$T_{x_{n-1}} = T_{E,1} \tag{4.85}$$

E por fim, as métricas que levam a uma deformação do perfil de concentrações da seção (perfil no extremo da seção achatado, perfil no restante da seção expandido).

Tabela 4.5: Métricas para Verificar se a Dinâmica da Seção é a Rápida.

Métrica	Seção de retificação	Seção de esgotamento
IV. Troca de sinal no perfil ΔX_{ss}	$\frac{\sum_{k=3}^{f-1} \Delta x_k}{\Delta x_2} = -c \frac{\sum_{k=2}^{f-2} \Delta x_k}{\Delta x_{f-1}}$	$\frac{\sum_{k=f+1}^{n-1} \Delta x_k}{\Delta x_f} = -c \frac{\sum_{k=f}^{n-2} \Delta x_k}{\Delta x_{n-1}}$
V. Topo da seção <i>versus</i> seção inteira	$\vartheta \left[\frac{\left(\frac{\sum_{k=3}^{f-1} \Delta x_k}{\Delta x_2} \right)}{\left(\frac{\sum_{k=2}^{f-2} \Delta x_k}{\Delta x_{f-1}} \right)} \right] > 10$	$\vartheta \left[\frac{\left(\frac{\sum_{k=f+1}^{n-1} \Delta x_k}{\Delta x_f} \right)}{\left(\frac{\sum_{k=f}^{n-2} \Delta x_k}{\Delta x_{n-1}} \right)} \right] > 10$
VI. Fundo da seção <i>versus</i> seção inteira	$\vartheta \left[\frac{\left(\frac{\sum_{k=3}^{f-1} \Delta x_k}{\Delta x_2} \right)}{\left(\frac{\sum_{k=2}^{f-2} \Delta x_k}{\Delta x_{f-1}} \right)} \right] < 0,1$	$\vartheta \left[\frac{\left(\frac{\sum_{k=f+1}^{n-1} \Delta x_k}{\Delta x_f} \right)}{\left(\frac{\sum_{k=f}^{n-2} \Delta x_k}{\Delta x_{n-1}} \right)} \right] < 0,1$

Capítulo 5 – Estudos de Caso e Resultados

Neste Capítulo são apresentados estudos de caso envolvendo colunas com variadas características e pontos de operação, para validar os métodos propostos nesta dissertação. As predições destes são comparadas com a predição do modelo linear e com o método das duas constantes de tempo de Skogestad e Morari.

5.1 Metodologia

Simulações dinâmicas de colunas com distintas condições de projeto e de operação foram realizadas para verificar a capacidade apresentada pelos *shortcuts* propostos em prever:

I) A dinâmica dominante, com o objetivo de validar as constantes de tempo expressas pelos *shortcuts* propostos no Cap. 4 (Eqs. 4.40 e 4.43).

II) A direcionalidade, com o objetivo de validar as métricas propostas no Cap.4 (Tabelas 4.4 e 4.5).

III) A influência dos reciclos (ΔL e ΔV) sobre a dinâmica dominante da coluna, através da álgebra de blocos que conecta os modelos reduzidos para as seções e os equipamentos adjacentes (Figura 4.3).

5.2 Implementações dos Modelos

O método proposto foi comparado com o método das duas constantes de tempo de Skogestad e Morari (1988), cujo equacionamento apresenta-se na Seção 2.4, e com o modelo linear completo (Seção 3.3). Os dados estacionários para os modelos linearizados foram obtidos através de simulações do modelo não linear.

5.2.1 Implementação do Modelo Não Linear

O modelo não linear apresentado na Seção 3.3 foi implementado em uma *s-function* do MATLAB. O *script* correspondente a esta *s-function* está em uma *Mask* do Simulink. O diagrama da Figura 5.1 ilustra esta implementação:

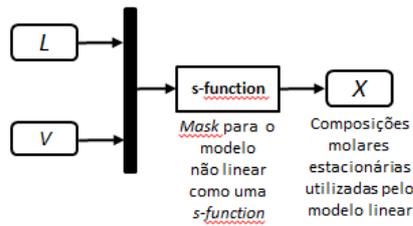


Figura 5.1: Diagrama de blocos para o modelo não linear.

Simulando-se o modelo não linear, são obtidos os valores estacionários da composições molares (vetor X) para um determinado ponto de operação (este estabelecido pelas entradas L e V e pelos parâmetros da coluna).

5.2.2 Implementação do Modelo Linear Completo

O diagrama em blocos da Figura 5.1 (aqui denominado de *nonlinmodel.mdl*) foi linearizado utilizando-se a função *linmod* do MATLAB. Esta função retorna a representação em espaço de estados do sistema:

$$[A_{col}, B_{col}, C_{col}, D_{col}] = \text{linmod}('nonlinmodel', Xs, in) \quad (5.1)$$

Onde os argumentos *in* e Xs correspondem às entradas e às soluções estacionárias para as composições molares da simulação não linear:

$$in = [L; V] \quad (5.2)$$

$$Xs = \text{Simulink.BlockDiagram.getInitialState}('nonlinmodel') \quad (5.3)$$

5.2.3 Implementação do Método de Skogestad e Morari

O modelo de Skogestad e Morari (1988) foi implementado através do seguinte diagrama de blocos:

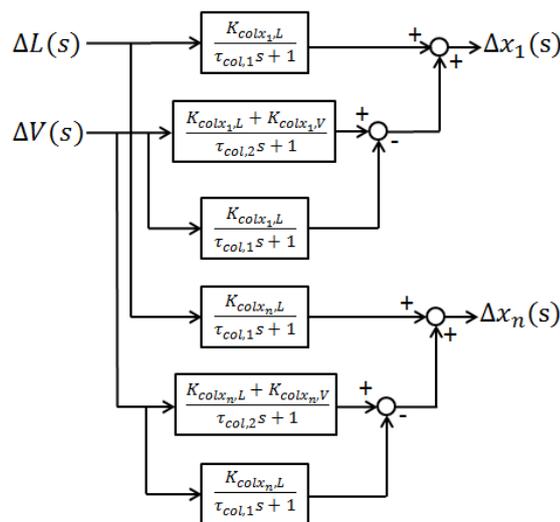


Figura 5.2: Diagrama de blocos para o modelo de Skogestad e Morari.

Onde $K_{colY,U}$ corresponde ao ganho estático de uma variação na entrada U (L ou V) para uma variação na saída Y (x_1 ou x_n). Estes ganhos podem ser obtidos da seguinte forma:

$$K_{col} = \begin{bmatrix} K_{colx_1,L} & K_{colx_1,V} \\ K_{colx_n,L} & K_{colx_n,V} \end{bmatrix} = -C_{col}A_{col}^{-1}B_{col} \quad (5.4)$$

As constantes de tempo $\tau_{col,1}$ e $\tau_{col,2}$ são obtidas conforme as Eqs. 2.10 e 2.11, respectivamente.

5.2.4 Implementação do Método de Skogestad e Morari

As Equações do Capítulo 4, correspondentes aos *shortcuts* propostos, foram implementadas em MATLAB. O Simulink é requerido para simular o diagrama de blocos da Figura 4.3. Caso o Simulink não esteja disponível ao usuário do modelo, recomenda-se converter esta álgebra de blocos na função de transferência correspondente. Desta forma, todas as equações podem ser implementadas em outros ambientes (como o Maple, por exemplo).

5.3 Perturbações Realizadas

Os sistemas foram perturbados nas direções de maior e de menor ganhos, além de em direções intermediárias. As perturbações correspondentes a cada direção foram definidas a partir da decomposição em valores singulares (SVD) das matrizes de ganhos estáticos do modelo completo da coluna. Este procedimento está detalhado a seguir:

Para a matriz de ganhos estáticos da coluna completa (Eq. 5.4), foi aplicada a função $SVD()$ do MATLAB:

$$[U_{svd}, S_{svd}, V_{svd}] = SVD(K_{col}) \quad (5.5)$$

A função $SVD()$ retorna três matrizes, U_{SVD} , S_{SVD} e V_{SVD} , cujas definições encontram-se na documentação do MATLAB. Inseriu-se o subíndice *svd* para distinguir da notação de outras variáveis já definidas neste trabalho. A matriz de interesse é a V_{svd} , que corresponde às direções das entradas. A estrutura geral desta matriz, conforme retornada pelo Comando 5.5, é a seguinte:

$$V_{svd} = \begin{bmatrix} v_{HG,1} & v_{LG,1} \\ v_{HG,2} & v_{LG,2} \end{bmatrix} \quad (5.6)$$

Considerando-se uma constante k qualquer, tem-se:

Direção de maior ganho:

$$\Delta L = k v_{HG,1}, \quad \Delta V = k v_{HG,2}, \quad (5.7)$$

$$\Delta L = -\Delta V \quad (5.8)$$

Direção de menor ganho:

$$\Delta L = k v_{LG,2}, \quad \Delta V = k v_{LG,2} \quad (5.9)$$

$$\Delta L = \Delta V \quad (5.10)$$

Direções intermediárias:

$$\Delta L = k, \Delta V = 0 \quad (5.11)$$

$$\Delta L = 0, \Delta V = k \quad (5.12)$$

5.4 Sistemas Abordados

São estudadas, no total, sete colunas de destilação binárias ideais com volatilidade relativa constante, as quais se diferenciam pelo número de pratos (N), pelo prato de alimentação (f), pela composição de topo (x_1), composição de fundo ($1-x_n$), pelo refluxo interno (L/V), pela volatilidade relativa (α), pela relação D/F , pela carga da unidade F e pela sua composição x_{Feed} (para todos os casos, $F = 1 \text{ kmol/s}$, $M = 0,5 \text{ kmol}$, $M_1 = 32,1 \text{ kmol}$, $M_n = 11,1 \text{ kmol}$):

A Tabela 5.1 apresenta a definição completa das colunas estudadas, as quais se basearam nos estudos de caso apresentados por Skogestad & Morari (1988), seguindo a notação correspondente (Colunas A a G) do referido trabalho.

Tabela 5.1: Características e condições operacionais das colunas.

Coluna	n f	x_1 $1 - x_n$	L/V α	D/F x_{Feed}
A	41	98,96	0,844	0,5
	20	98,97	1,5	0,5
B	41	98,76	0,962	0,092
	20	98,99	1,5	0,1
C	41	89,90	0,831	0,555
	20	99,85	1,5	0,5
D	111	99,50	0,951	0,614
	72	89,89	1,12	0,65
E	16	99,96	0,589	0,158
	11	95,02	5	0,2
F	11	99,99	0,312	0,5
	6	99,99	15	0,5
G	81	99,9999	0,841	0,5
	41	99,9999	1,5	0,5

Os sistemas A, B e C representam a mesma coluna (iguais n , f), com a mesma mistura (iguais α), em três pontos de operação distintos. Para as condições operacionais de A, são obtidos produtos de média pureza. Como em B a carga é menos pura no componente de interesse, a coluna é operada com maior refluxo para que os produtos apresentem

especificações próximas das obtidas por A. Em C, o produto de fundo está com elevada pureza, em detrimento da pureza do componente obtido no topo.

O sistema D representa uma coluna de características próximas às das que separam misturas propano-propeno. Este é um caso típico de separação relativamente difícil na indústria, que requer colunas maiores e operando com elevados refluxos.

Os sistemas E e F representam colunas laboratoriais, que apresentam um número reduzido de estágios. Como este é inferior ao valor ótimo requerido para uma determinada separação (principalmente para F, que é de alta pureza nos dois extremos) parâmetros como razão de refluxo e volatilidade relativa devem ser definidos em condições não ótimas, como as apresentadas na Tabela 5.1.

A coluna G representa uma coluna de pureza elevada, com grande número de estágios e refluxo moderado.

5.5 Resultados, Análises e Conclusões Parciais para a Coluna A

5.5.1 Predição das constantes de tempo de cada seção e da coluna

Constantes de tempo das seções da Coluna A: A Tabela 5.2 apresenta a predição das constantes de tempo de cada seção da coluna.

Tabela 5.2: Coluna A – Constantes de tempo de cada seção.

Constante de Tempo	Modelo Linear Completo	Método Proposto (Seção 4.2)	
		Constante de Tempo Estimada	Erro Relativo (%)
$\tau_{R,1}$	529,1	495,3	6,4
$\tau_{R,2}$	111,5	110,6	0,8
$\tau_{R,1}/\tau_{R,2}$	4,75	4,48	5,6
$\tau_{E,1}$	746,4	798,3	7
$\tau_{E,2}$	101,4	110,6	9,1
$\tau_{E,1}/\tau_{E,2}$	7,36	7,22	2

Observe que os erros relativos para as constantes de tempo são inferiores a 10 % (uma faixa aceitável), porque as matrizes Jacobianas de estados A_S de cada uma das seções satisfazem a Premissa II (Seção 4.2.1).

Para verificar a validade dessa Premissa de forma quantitativa, é necessário utilizar alguma métrica que leva em conta, para cada diagonal de cada A_S , a dispersão entre cada um de seus elementos e o respectivo valor médio entre eles.

Para esse fim, aplica-se em cada seção o coeficiente de variação CV das composições molares em termos da variância (métrica esta conhecida da Estatística):

$$CV \equiv \frac{100s_x^2}{\bar{x}} \quad (5.13)$$

Onde s_x^2 é a variância das composições molares da seção e \bar{x} é a média aritmética destas. A rigor, esta métrica deveria ser aplicada sobre os elementos das diagonais superior e principal de cada A_S (os elementos da diagonal inferior são todos iguais dentro de uma seção), e não apenas sobre as composições molares. Porém, por simplicidade, avaliam-se apenas as composições, uma vez que estas são as grandezas que mais influenciam os elementos de cada diagonal.

Além disso, utiliza-se a variância ao invés do desvio-padrão uma vez que esta leva em consideração os elementos com maior discrepância do valor médio, como é o caso das regiões de maior não linearidade do perfil de concentrações estacionárias.

A Tabela 5.3 apresenta a aplicação desta métrica à Coluna A.

Tabela 5.3: Coluna A – Coeficientes de variação das composições de cada seção.

Seção	CV (%) Eq. 5.13	Erro Relativo (%)	
		$\tau_{S,1}$	$\tau_{S,2}$
Retificação	2,6	6,4	0,8
Esgotamento	14	7	9,1

Os coeficientes de variação indicam que a Premissa II é aplicável a ambas as seções da coluna.

Constantes de tempo da Coluna A: Como o método proposto não prediz diretamente $\tau_{Col,1}$ e $\tau_{Col,2}$ foi linearizado o diagrama de blocos da Fig. 4.3 através da ferramenta *Linear Analysis* do *Control and Estimation Tools Manager* do Simulink. As constantes de tempo obtidas são o inverso dos respectivos autovalores da matriz Jacobiana de estados resultante da linearização.

Os resultados estão apresentados na Tabela 5.4 (as constantes de tempo com o subíndice “500” correspondem às do sistema com o condensador e o refeedor com *holdups* iguais a 500).

Tabela 5.4: Coluna A – Constantes de tempo da coluna.

Constante de Tempo	Modelo Linear Completo	Linearização do Modelo Proposto (Seção 4.2)		Skogstad e Morari (1988) Eqs. 2.10 e 2.11	
		Constante de Tempo Estimada	Erro Relativo (%)	Constante de Tempo Estimada	Erro Relativo (%)
$\tau_{Col,1}$	12812,1	13056,6	1,9	15140	18,2
$\tau_{Col,2}$	1988,2	2106,3	5,9	1537,8	22,7
$\tau_{Col,1,500}$	11318,8	11615,6	2,6	12595,8	11,3
$\tau_{Col,2,500}$	724,3	931	28,5	1283,7	77,2

5.5.2 Direcionalidade e respostas no tempo

A Tabela 5.5 apresenta as métricas para direcionalidade com base nas variações de composições molares para um determinado padrão de perturbações:

Tabela 5.5: Coluna A – Métricas para direcionalidade de cada seção.

Perturbações realizadas	$\frac{\Delta L}{F} = 0,004$ $\Delta V = 0$	$\frac{\Delta L}{F} = -0,29$ $\Delta V = \Delta L$	$\Delta L = 0$ $\frac{\Delta V}{F} = -5,7 \cdot 10^{-3}$	$\frac{\Delta L}{F} = -4,1 \cdot 10^{-4}$ $\Delta V = -\Delta L$
$r_{x_2}, r_{x_{f-1}}$	124,82 , 11,64	62,92 , 39,86	127,47 , 11,38	116,63 , 12,53
$r_{x_2} / r_{x_{f-1}}$	10,73	1,58	11,20	9,28
$e_{x_f}, e_{x_{n-1}}$	31,20 , 111,46	-99,64 , 66,77	33,63 , 102,54	25,23 , 141,11
$e_{x_f} / e_{x_{n-1}}$	0,28	-1,49	0,32	0,18
Modelo escolhido	$R_{fast}E_{slow}$	$R_{slow}E_{fast}$	$R_{fast}E_{slow}$	$R_{fast}E_{slow}$
Vide figura(s)	5.3	5.3	5.4	5.4

Antes de analisar as respostas dinâmicas, é importante entender as informações fornecidas pela Tabela 5.5.

Análise de direcionalidade A.1: Considere o par de perturbações $\Delta L = 0,004F$, $\Delta V = 0$. Observe que este acréscimo no refluxo de topo leva a uma baixa variação Δx_2 (topo da seção de retificação), frente à variação de *holdup* total do restante da seção de retificação $\sum_{k=3}^{f-1} \Delta x_k$ (cf. indicado pelo elevado valor de $r_{x_2} = \sum_{k=3}^{f-1} \Delta x_k / \Delta x_2$). Adicionalmente, leva-se a uma elevada de variação Δx_{f-1} (fundo da seção de retificação), frente à variação de *holdup* total do restante da seção de retificação $\sum_{k=2}^{f-2} \Delta x_k$ (cf. indicado pelo baixo valor de $r_{x_{f-1}} = \sum_{k=2}^{f-2} \Delta x_k / \Delta x_{f-1}$). Desta forma, espera-se que o topo da seção de retificação responda com uma dinâmica rápida devido à predominância do efeito de deformação do perfil de concentrações, já que um dos extremos variou pouco frente ao resto da seção, e o outro extremo variou muito (atente que a seção está sendo analisada como uma coluna individual, conforme a Premissa III). Portanto, a constante de tempo representativa da seção de retificação é expressa pelo modelo R_{fast} . A seção de esgotamento apresenta um comportamento distinto para esse par de perturbações, para a qual ambos os extremos apresentam variações nas composições de magnitudes mais próximas entre si do no caso da seção de retificação, indicando uma predominância do efeito de deslocamento do perfil de perturbações sobre o efeito de deformação. Logo, a seção de esgotamento responde conforme sua dinâmica mista entre seu topo e fundo, E_{slow} . Considerações análogas podem ser feitas para os pares de perturbações $\Delta L = 0$, $\Delta V = -0,0057F$ e $\Delta L = 0,00041F$, $\Delta V = -\Delta L$. Para o primeiro par, isto é esperado porque uma redução em ΔV modifica o perfil de concentrações de forma análoga a um incremento em ΔL . O segundo apresenta um incremento em ΔL e um decréscimo em ΔV conjuntos.

Análise de direcionalidade A.2: Para $\Delta L = -0,29F$, $\Delta V = \Delta L$, esta alinhada à direção de menor ganho, há inversão no sinal do perfil de variações de composições da seção de esgotamento. Portanto, o perfil de concentrações para esta seção isolada é predominantemente deformado, e a seção responde conforme sua constante de tempo lenta (E_{fast}). A seguir, as respostas dinâmicas para distintos conjuntos de perturbações.

Sequência de respostas dinâmicas A.1:

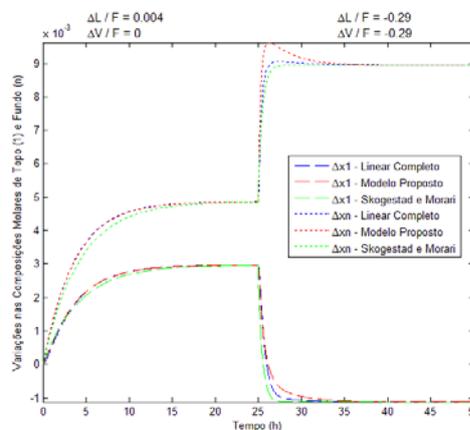


Figura 5.3: Coluna A – Respostas no tempo (A.1).

Pela Figura 5.3, verifica-se que o método proposto reproduz o modelo linear completo com mais acurácia do que o método de Skogestad e Morari (MS&M). Observe

que para o primeiro padrão de perturbações a predição do método proposto é praticamente exata. Para o segundo padrão de perturbações, apesar de a predição não ser tão exata, é ainda superior à do MS&M.

Sequência de respostas dinâmicas A.2:

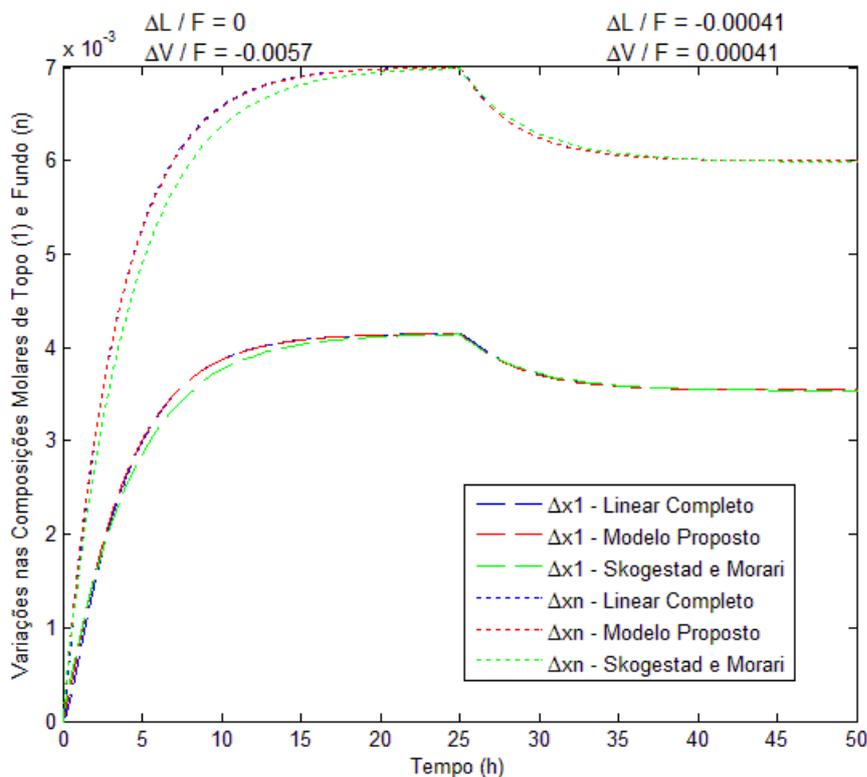


Figura 5.4: Coluna A – Respostas no tempo (A.2).

Pela Figura 5.4, verifica-se que o método proposto representa o modelo linear completo de forma praticamente exata para $\Delta L = 0$, $\Delta V = -0,0057F$ (com precisão semelhante à do padrão de perturbações $\Delta L = 0,004F$, $\Delta V = 0$, vide Figura 5.3). Esta similaridade na predição se deve à já mencionada similar influência destes sobre o perfil de variação de concentrações (isto pode ser verificado pelas métricas apresentadas na Tabela 5.5, as quais apresentam valores próximos para ambos os padrões de perturbações).

Na Figura 5.4, para o segundo padrão de perturbações $\Delta L = 0,00041F$, $\Delta V = -\Delta L$, que apresenta magnitude reduzida frente aos demais avaliados, verifica-se que todos os métodos apresentam excelente acurácia.

5.6 Resultados, Análises e Conclusões Parciais para a Coluna B

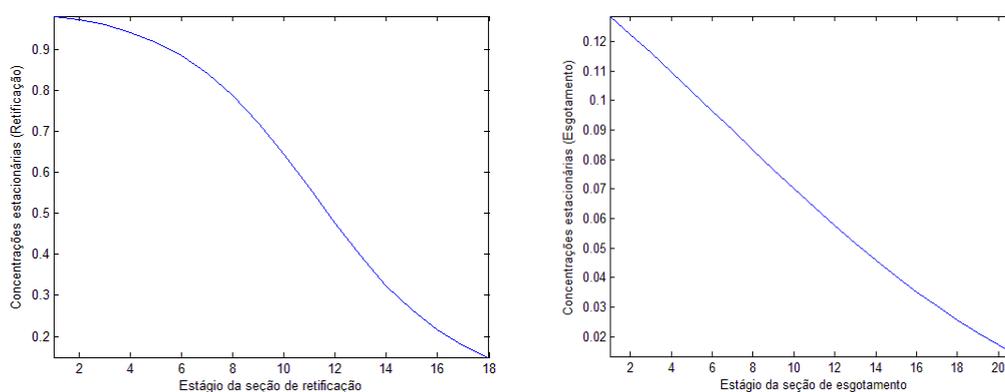
5.6.1 Predição das constantes de tempo de cada seção e da coluna

Constantes de tempo das seções da Coluna B: A Tabela 5.6 apresenta a predição das constantes de tempo de cada seção.

Tabela 5.6: Coluna B – Constantes de tempo de cada seção.

Constante de Tempo	Modelo Linear Completo	Método Proposto (Seção 4.2)	
		Constante de Tempo Estimada	Erro Relativo (%)
$\tau_{R,1}$	1103	966,24	12,4
$\tau_{R,2}$	126,80	138,17	9,0
$\tau_{R,1}/\tau_{R,2}$	8,85	7,11	19,7
$\tau_{E,1}$	50,37	50,73	0,7
$\tau_{E,2}$	11,33	11,38	0,5
$\tau_{E,1}/\tau_{E,2}$	4,44	4,45	0,3

Os erros relativos para as constantes de tempo da seção de retificação são próximos a 10 % (uma faixa aceitável). Observa-se que a predição é quase exata para seção de esgotamento. Verificando-se as composições estacionárias, observa-se que para esta seção, a diferença entre cada composição molar é mais suave, tornando-se mais exata a aplicação da média aritmética sobre os elementos de sua matriz Jacobiana de estados, o que atende satisfatoriamente a Premissa II. A Figura 5.5 ilustra esta diferença entre os perfis de concentrações das duas seções:

**Figura 5.5:** Coluna B – Perfis de concentrações estacionárias.

De fato, observa-se pela Tabela 5.7 que o *CV* é significativamente inferior para a seção de esgotamento:

Tabela 5.7: Coluna B – Coeficientes de variação das composições de cada seção.

Seção	CV (%) Eq. 5.13	Erro Relativo (%)	
		$\tau_{S,1}$	$\tau_{S,2}$
Retificação	15	12,4	9
Esgotamento	2	0,7	0,5

Constantes de tempo da Coluna B: A Tabela 5.8 apresenta a predição das constantes de tempo da coluna.

Tabela 5.8: Coluna B – Constantes de tempo da coluna.

Constante de Tempo	Modelo Linear Completo	Linearização do Método Proposto (Seção 4.2)		Skogstad e Morari (1988) Eqs. 2.10 e 2.11	
		Constante de Tempo Estimada	Erro Relativo (%)	Constante de Tempo Estimada	Erro Relativo (%)
$\tau_{Col,1}$	17904,6	16762	6,4	16151,5	9,8
$\tau_{Col,2}$	1967,6	2633,4	33,8	1155,2	41,3
$\tau_{Col,1}/\tau_{Col,2}$	9,1	6,37	30,1	14	53,6
$\tau_{Col,1,500}$	13165,5	12209,5	7,3	12887,9	2,1
$\tau_{Col,2,500}$	745,7	1014,6	36,1	929,6	24,7
$\tau_{Col,1,500}/\tau_{Col,2,500}$	17,7	12	31,8	13,9	21,5

Os erros relativos para a coluna completa estão satisfatórios e inferiores aos do MS&M para *holdups* distintos nos equipamentos.

5.6.2 Direcionalidade e respostas no tempo

A Tabela 5.9 apresenta as métricas para direcionalidade com base nas variações de composições molares para um determinado padrão de perturbações:

Tabela 5.9: Coluna B – Métricas para direcionalidade de cada seção.

Perturbações realizadas	$\frac{\Delta L}{F} = 0,22$ $\Delta V = \Delta L$	$\Delta L = 0$ $\frac{\Delta V}{F} = 0,0035$	$\frac{\Delta L}{F} = 0,0027$ $\Delta V = 0$	$\frac{\Delta L}{F} = -0,0026$ $\Delta V = -\Delta L$
$r_{x_2}, r_{x_{f-1}}$	148,11 ,29,79	90,82 , 45,57	141,32 , 30,11	75,73 , 52,53
$r_{x_2} / r_{x_{f-1}}$	4,97	1,99	4,69	1,44
$e_{x_f}, e_{x_{n-1}}$	5,74 , -284,69	12,75 , 82	13,95 , 74,65	12,49 , 83,76
$e_{x_f} / e_{x_{n-1}}$	-0,02	0,16	0,19	0,15
Modelo escolhido	$R_{slow}E_{fast}$	$R_{fast}E_{fast}$	$R_{fast}E_{fast}$	$R_{fast}E_{fast}$
Vide figura(s)	5.6	5.6	5.7	5.7

Análise de direcionalidade B.1: Para $\Delta L = 0,22F$, $\Delta V = \Delta L$, esta alinhada à direção de menor ganho, há inversão no sinal do perfil de variações de composições da seção de esgotamento, assim como observado na Análise de direcionalidade A.2. Portanto, esta seção isolada responde conforme sua dinâmica lenta, R_{slow} .

Análise de direcionalidade B.2: Para as demais perturbações, valem considerações análogas às da Análise de direcionalidade A.1.

Seqüência de respostas dinâmicas B.1:

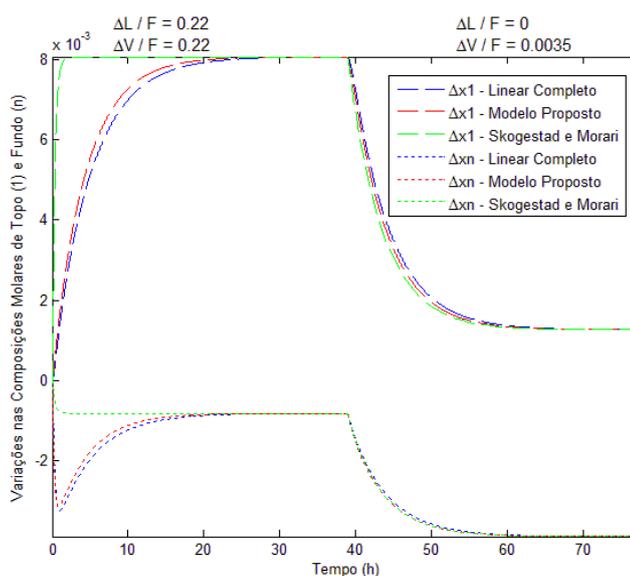


Figura 5.6: Coluna B – Respostas no tempo (B.1).

Pela Figura 5.6 observa-se que para o primeiro padrão de perturbações, $\Delta L = 0,22F$, $\Delta V = \Delta L$, a seção de retificação responde de forma lenta enquanto que a de esgotamento apresenta uma dinâmica rápida (vide a curva do modelo linear completo). Como o MS&M (curvas verdes) prevê dinâmica lenta para ambas as seções quando ambas sofrem perturbações alinhadas à direção de menor ganho, este leva erroneamente a uma dinâmica lenta para a seção de retificação. Contudo, com o método proposto, este comportamento particular é capturado, porque esse está embasado na variação do perfil de concentrações, e não apenas nas relações entre ΔL e ΔV . Observe a discrepância entre os valores das métricas de direcionalidade para cada seção. O perfil de concentrações para a seção de retificação é alterado de forma a predominarem os efeitos de deslocamento (modelo R_{slow}). No caso da seção de esgotamento, há inversão do sinal do perfil de variações de concentrações. Logo, há um acréscimo e decréscimo de *holdup* combinados, conduzindo a uma predominância dos efeitos de deformação sobre o perfil de concentrações, e a uma dinâmica lenta para esta seção.

Para o segundo padrão de perturbações, $\Delta L = 0$, $\Delta V = 0,0035F$, o método proposto prevê o modelo linear de forma ligeiramente superior que o MS&M. Esta predição é ainda melhor no início da resposta transiente.

Sequência de respostas dinâmicas B.2:

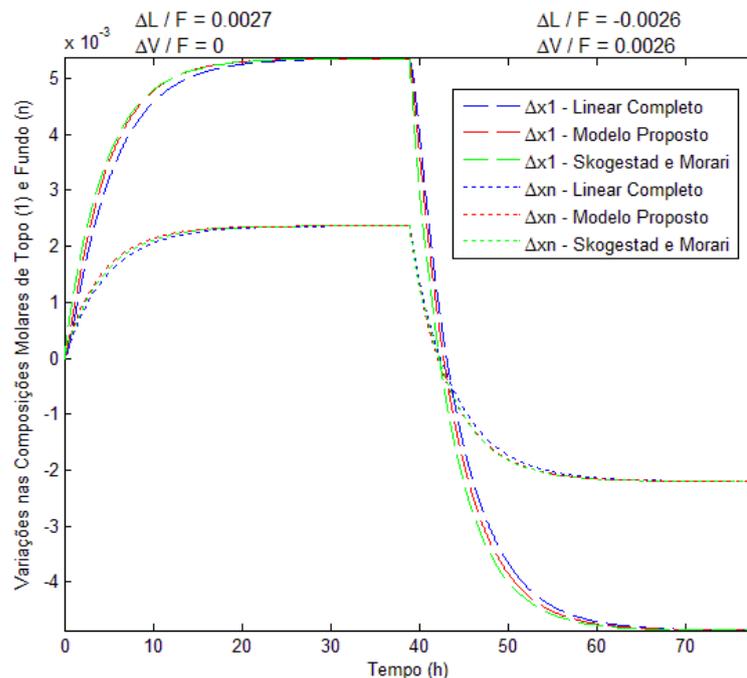


Figura 5.7: Coluna B – Respostas no tempo (B.2).

Pela Figura 5.7 observa-se que, para os dois padrões de perturbações, o método proposto prevê o modelo linear de forma ligeiramente superior que a do MS&M. Esta predição é ainda melhor no início da resposta transiente.

5.7 Resultados, Análises e Conclusões Parciais para a Coluna C

5.7.1 Predição das constantes de tempo de cada seção

Constantes de tempo das seções da Coluna C: A Tabela 5.10 apresenta a predição das constantes de tempo de cada seção da coluna.

Tabela 5.10: Coluna C – Constantes de tempo de cada seção.

Constante de Tempo	Modelo Linear Completo	Método Proposto (Seção 4.2)	
		Constante de Tempo Estimada	Erro Relativo (%)
$\tau_{R,1}$	471,93	537,07	13,8
$\tau_{R,2}$	96,39	100,89	4,7
$\tau_{R,1}/\tau_{R,2}$	4,9	5,32	8,7
$\tau_{E,1}$	298,18	371,10	24,5
$\tau_{E,2}$	85,53	90,31	5,6
$\tau_{E,1}/\tau_{E,2}$	3,49	4,11	17,9

Os erros relativos da Tabela 5.10 encontram-se numa faixa satisfatória. O erro para a seção de esgotamento é superior porque as composições dos estágios próximos ao fundo da coluna constituem um perfil mais não linear, uma vez que esta é de altíssima pureza no produto de fundo (e de média pureza no topo). De fato, observa-se pela Tabela 5.11 que o *CV* é superior para a seção de esgotamento:

Tabela 5.11: Coluna C – Coeficientes de variação das composições de cada seção.

Seção	<i>CV</i> (%) Eq. 5.13	Erro Relativo (%)	
		$\tau_{S,1}$	$\tau_{S,2}$
Retificação	5,5	13,8	4,7
Esgotamento	12,4	24,5	5,6

Constantes de tempo da Coluna C: A Tabela 5.12 apresenta a predição das constantes de tempo da coluna.

Tabela 5.12: Coluna C – Constantes de tempo da coluna.

Constante de Tempo	Modelo Linear Completo	Linearização do Método Proposto (Seção 4.2)		Skogstad e Morari (1988) Eqs. 2.10 e 2.11	
		Constante de Tempo Estimada	Erro Relativo (%)	Constante de Tempo Estimada	Erro Relativo (%)
$\tau_{Col,1}$	4341,3	4654,7	7,2	6098,8	40,5
$\tau_{Col,2}$	775,9	1402,5	80,8	2443,2	214,9
$\tau_{Col,1}/\tau_{Col,2}$	5,6	3,3	40,7	2,5	55,4
$\tau_{Col,1,500}$	1471,5	1861,1	24,5	2711,4	84,2
$\tau_{Col,2,500}$	478,8	905,2	89,1	1086	126,8
$\tau_{Col,1,500}/\tau_{Col,2,500}$	3,1	2,1	33,1	2,5	18,8

Observe que os erros relativos para a coluna são inferiores aos das seções individuais. A álgebra de blocos, ao concatenar as seções com os refluxos provenientes dos equipamentos, explicita as retroalimentações correspondentes (vide Fig. 4.3), tornando mais precisa a predição da dinâmica do sistema completo.

Adicionalmente, a influência dos erros relativos devido às constantes de tempo das seções sobre a resposta da coluna é tanto menor quanto maior for a diferença entre estas e as constantes de tempo dominantes da coluna, $\tau_{Col,1}$ e $\tau_{Col,2}$.

Para a coluna C, as constantes de tempo das seções são de uma ordem de grandeza inferiores às da coluna.

5.7.2 Direcionalidade e respostas no tempo

A Tabela 5.13 apresenta as métricas para direcionalidade com base nas variações de composições molares para um determinado padrão de perturbações:

Tabela 5.13: Coluna C – Métricas para direcionalidade de cada seção.

Perturbações realizadas	$\Delta L = 0$ $\frac{\Delta V}{F} = -0,05$	$\frac{\Delta L}{F} = -0,03$ $\Delta V = 0$	$\frac{\Delta L}{F} = 0,03$ $\Delta V = -\Delta L$	$\frac{\Delta L}{F} = -3$ $\Delta V = \Delta L$
$r_{x_2}, r_{x_{f-1}}$	35,51 , 31,08	15,50 , 55,09	42,43 , 24,07	-0,37 , -2,45
$r_{x_2} / r_{x_{f-1}}$	1,14	0,28	1,76	0,15
$e_{x_f}, e_{x_{n-1}}$	11,95 , 303,83	10,95 , 364,78	15,59 , 211,7	55,65 , 17,02
$e_{x_f} / e_{x_{n-1}}$	0,04	0,03	0,07	3,27
Modelo escolhido	$R_{slow}E_{fast}$	$R_{slow}E_{fast}$	$R_{slow}E_{fast}$	$R_{fast}E_{slow}$
Vide figura(s)	5.8	5.8	5.9	5.9

Análise de direcionalidade C.1: Para as perturbações na direção de menor ganho, $\Delta L = 0, \Delta V = -0,05F$, observa-se que os estágios de topo e fundo da seção de retificação contribuem de forma significativa, e de formas equivalentes entre si, para a mudança do perfil de concentrações desta seção ($r_{x_2} = \sum_{k=3}^{f-1} \Delta x_k / \Delta x_2$ e $r_{x_{f-1}} = \sum_{k=2}^{f-2} \Delta x_k / \Delta x_{f-1}$ próximos a 1). Isto indica uma predominância dos efeitos de deslocamento para este perfil de concentrações. Portanto, a seção de retificação é representada por sua constante de tempo lenta. Em contrapartida, para a seção de esgotamento $e_{x_f} = \sum_{k=f+1}^{n-1} \Delta x_k / \Delta x_f$ é consideravelmente inferior a $e_{x_{n-1}} = \sum_{k=f}^{n-2} \Delta x_k / \Delta x_{n-1}$, indicando que a composição de topo desta seção, Δx_f , varia significativamente mais do que a de fundo, Δx_{n-1} , o que corresponde a uma predominância dos efeitos de deformação do perfil de concentrações. Logo, a seção de esgotamento responde conforme a sua dinâmica rápida (E_{fast}). Observações análogas são válidas para os padrões de perturbações $\Delta L = -0,03F, \Delta V = 0$ e $\Delta L = 0,03, \Delta V = -\Delta L$.

Análise de direcionalidade C.2: Para o padrão de perturbações $\Delta L = -3F, \Delta V = \Delta L$, observa-se predominância dos efeitos de deformação do perfil para a seção de retificação, e de deslocamento do perfil para a seção de esgotamento.

Sequência de respostas dinâmicas C.1:

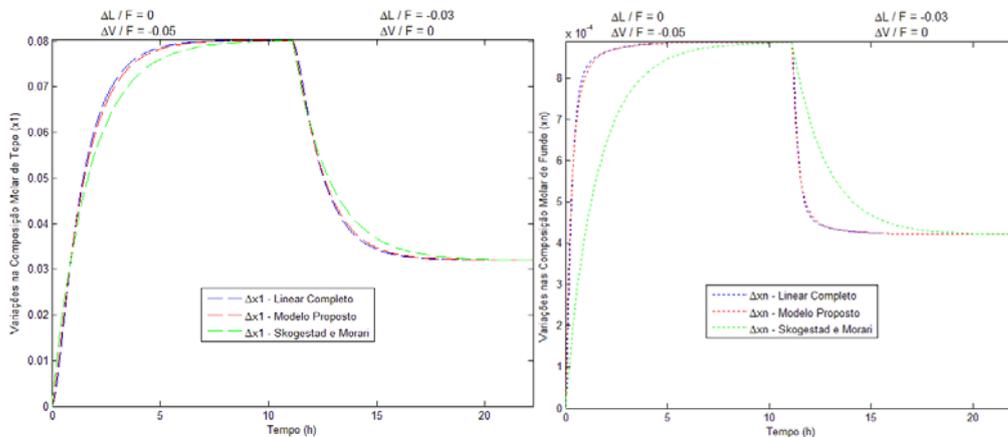


Figura 5.8: Coluna C – Respostas no tempo (C.1).

Observe que, apesar dos erros relativos para as constantes de tempo de cada seção estarem na faixa de 15-25 %, o método proposto apresenta melhor predição que o MS&M. Isto se deve à ordem de magnitude da constante de tempo dominante da coluna ser significativamente superior à de cada seção ($\tau_{Col,1} = 4652 \gg \tau_{R,1} = 537$, $\tau_{Col,1} = 4652 \gg \tau_{E,1} = 371$), de modo que erros na predição das constantes de tempo das seções influenciem menos a predição da resposta da coluna. Em colunas como a C, que apresentam razão de refluxo elevada, $\frac{L}{V} = 0,962$ no caso, os refluxos internos contribuem significativamente para a dinâmica da coluna, deslocando o polo dominante da coluna para dinâmicas mais lentas. Este comportamento é adequadamente reproduzido pelo método proposto devido à álgebra de blocos. Para as respostas no fundo da coluna, considerações análogas são válidas. Contudo, atente que o erro elevado do MS&M é devido à predição das constantes de tempo pelo referido método, e não à direcionalidade, a qual está sendo corretamente predita (a curva verde corresponde à dinâmica rápida, porém apresenta erro elevado para a segunda constante de tempo dominante, vide Tabela 5.10).

Sequência de respostas dinâmicas C.2:

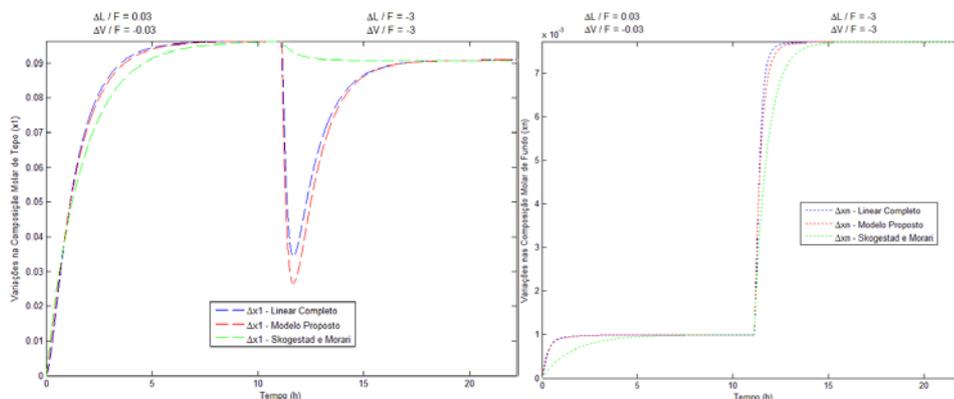


Figura 5.9: Coluna C – Respostas no tempo (C.2).

Considerações análogas à Sequência de respostas dinâmicas C.1 são válidas para as respostas da Figura 5.9. Observe também que o *overshoot* do modelo linear completo é capturado pelo método proposto.

5.8 Resultados, Análises e Conclusões Parciais para a Coluna D

5.8.1 Predição das constantes de tempo de cada seção

Constantes de tempo das seções da Coluna D: A Tabela 5.14 apresenta a predição das constantes de tempo de cada seção.

Tabela 5.14: Coluna D – Constantes de tempo de cada seção.

Constante de Tempo	Modelo Linear Completo	Método Proposto (Seção 4.2)	
		Constante de Tempo Estimada	Erro Relativo (%)
$\tau_{R,1}$	1329,2	1280,2	3,7
$\tau_{R,2}$	330,3	326,9	1
$\tau_{R,1}/\tau_{R,2}$	4	3,9	2,7
$\tau_{E,1}$	517,2	502,8	2,8
$\tau_{E,2}$	100,2	101,3	1,1
$\tau_{E,1}/\tau_{E,2}$	5,2	5	3,8

Para a coluna D, as predições das constantes de tempo de cada seção são praticamente exatas. Os coeficientes de variação também são baixos (Tabela 5.15):

Tabela 5.15: Coluna D – Coeficientes de variação das composições de cada seção.

Seção	CV (%) Eq. 5.13	Erro Relativo (%)	
		$\tau_{S,1}$	$\tau_{S,2}$
Retificação	1,1	3,7	1
Esgotamento	7,9	2,8	1,1

É importante ressaltar que os coeficientes de variação estão sendo avaliados apenas para as composições molares. As seções de retificação e de esgotamento também se diferem na corrente de líquido (L e $L + qF$, respectivamente) e na própria escala das composições molares. Portanto, esta métrica pode apresentar leves discrepâncias caso os

erros relativos entre as seções sejam muito próximos entre si, como observado na Tabela 5.15.

5.8.2 Direcionalidade e respostas no tempo

A Tabela 5.16 apresenta as métricas para direcionalidade para a Coluna D, com base nas variações de composições molares para um determinado padrão de perturbações:

Tabela 5.16: Coluna D – Métricas para direcionalidade de cada seção.

Perturbações realizadas	$\frac{\Delta L}{F} = -0,04$ $\Delta V = 0$	$\frac{\Delta L}{F} = 5$ $\Delta V = \Delta L$	$\Delta L = 0$ $\frac{\Delta V}{F} = 0,045$	$\frac{\Delta L}{F} = 0,02$ $\Delta V = -2 \Delta L$
$r_{x_2}, r_{x_{f-1}}$	460,42 , 61,05	760,64 , 51,13	419,12 , 64,79	826,16 , 37,96
$r_{x_2} / r_{x_{f-1}}$	7,54	14,88	6,47	21,77
$e_{x_f}, e_{x_{n-1}}$	41,68 , 92	11,46 , -111,81	40,70 , 93,99	63 , 61,85
$e_{x_f} / e_{x_{n-1}}$	0,45	-0,1	0,43	1,02
Modelo escolhido	$R_{fast}E_{slow}$	$R_{fast}E_{fast}$	$R_{fast}E_{slow}$	$R_{fast}E_{slow}$
Vide figura(s)	5.10, 5.13	5.10, 5.13	5.11	5.11

Sequência de respostas dinâmicas D.1:

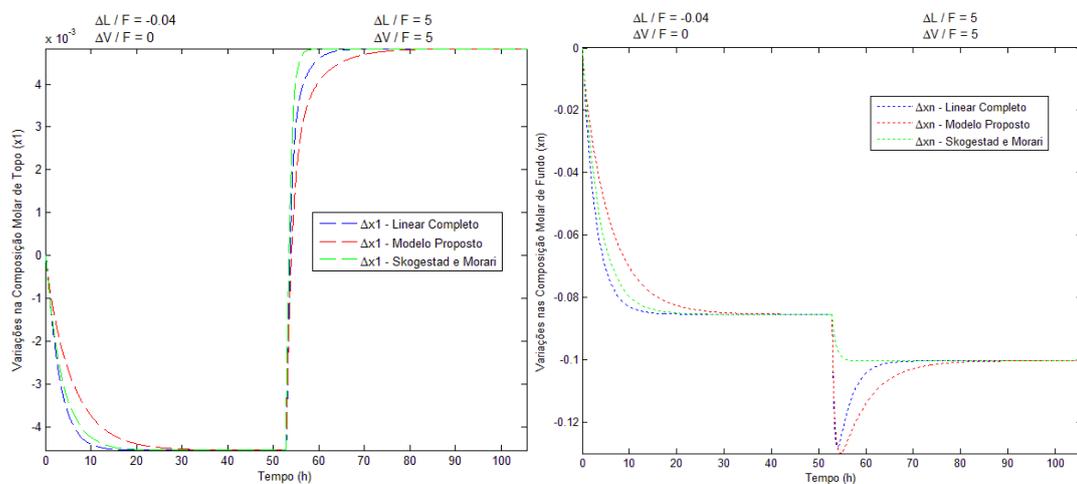


Figura 5.10: Coluna D – Respostas no tempo (D.1).

Sequência de respostas dinâmicas D.2:

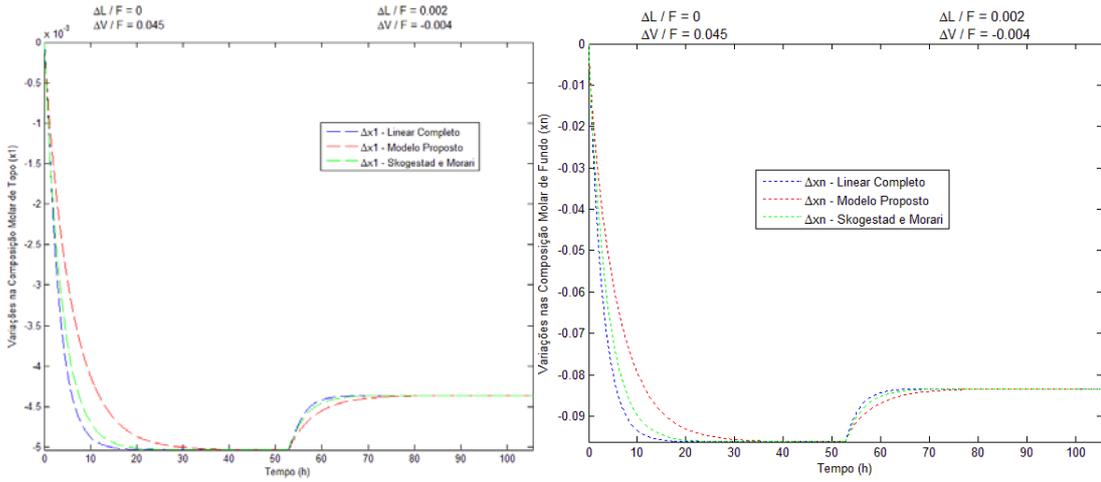


Figura 5.11: Coluna D – Respostas no tempo (D.2).

Para as Sequências de respostas dinâmicas D.1 e D.2, observe que as respostas estão mais lentas do que o esperado. Isto é explicado da seguinte forma: o método proposto para direcionalidade considera que todos os blocos do diagrama da Figura contribuem para a dinâmica da coluna. Desta forma, se houver excesso de polos (devido a blocos com funções de transferência que não contribuem significativamente à dinâmica do sistema completo), o sistema pode ser conduzido a dinâmicas mais lentas. Neste aspecto, a álgebra de blocos tem papel fundamental para representar corretamente a dinâmica da coluna. A seguir, esta análise é feita.

5.8.3 Dinâmica dominante pela álgebra de blocos e simplificação do diagrama

Considere as equações estáticas 5.14 a 5.17, que expressam as relações entre as entradas e as saídas de cada bloco da Figura 4.3, e os respectivos ganhos estáticos:

$$\Delta x_2(0) = K_{x_2,L} \Delta L(0) + K_{x_2,V} \Delta V(0) + K_{x_2,x_1} \Delta x_1(0) + K_{x_2,x_f} \Delta x_f(0) \quad (5.14)$$

$$\Delta x_{f-1}(0) = K_{x_{f-1},L} \Delta L(0) + K_{x_{f-1},V} \Delta V(0) + K_{x_{f-1},x_1} \Delta x_1(0) + K_{x_{f-1},x_f} \Delta x_f(0) \quad (5.15)$$

$$\Delta x_f(0) = K_{x_f,L} \Delta L(0) + K_{x_f,V} \Delta V(0) + K_{x_f,x_{f-1}} \Delta x_{f-1}(0) + K_{x_f,x_n} \Delta x_n(0) \quad (5.16)$$

$$\Delta x_{n-1}(0) = K_{x_{n-1},L} \Delta L(0) + K_{x_{n-1},V} \Delta V(0) + K_{x_{n-1},x_{f-1}} \Delta x_{f-1}(0) + K_{x_{n-1},x_n} \Delta x_n(0) \quad (5.17)$$

Nas Eqs. 5.14 a 5.17, cada produto de ganho pela respectiva variação na entrada contribui com uma parcela da variação de saída. Pode-se verificar que para o padrão de perturbações $\Delta L = -0,04F$, $\Delta V = 0$, o produto $K_{x_f,x_{f-1}} \Delta x_{f-1}$ é igual a -0,16, (variação nas composições devido ao refluxo entre as duas seções). Os produtos $K_{x_2,x_1} \Delta x_1$ e $K_{x_{n-1},x_n} \Delta x_n$ são iguais a -0,02 e -0,068, respectivamente (variações nas composições devido aos refluxos entre cada seção e o seu respectivo equipamento). Todos estes valores são superiores em módulo aos dos demais produtos, os quais são inferiores a 0,01. Considerações análogas são verificadas para o padrão de perturbações $\Delta L = 0, \Delta V = 0,045F$ ($K_{x_f,x_{f-1}} \Delta x_{f-1} = -0,169$, $K_{x_{n-1},x_n} \Delta x_n = -0,07$, $K_{x_{n-1},x_n} \Delta x_n = -0,025$).

Considerando-se apenas a contribuição de $K_{x_{f-1},x_f} \Delta x_f$ e $K_{x_f,x_{f-1}} \Delta x_{f-1}$ para o diagrama de blocos, tem-se que os demais blocos contribuem apenas para a parte estática. Desta forma, o diagrama de blocos da Fig. 4.3 apresenta apenas cinco funções de transferência contribuintes para a resposta dinâmica.

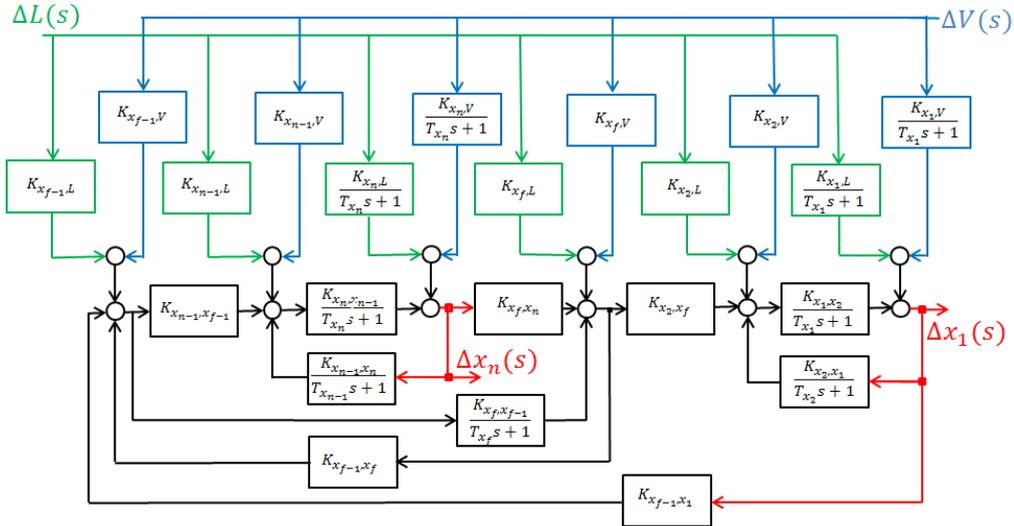


Figura 5.12: Coluna D – Álgebra de blocos simplificada.

Simulando-se com o diagrama de blocos simplificado, são obtidas as seguintes respostas:

Seqüência de respostas dinâmicas D.3 (vide D.1 para comparação):

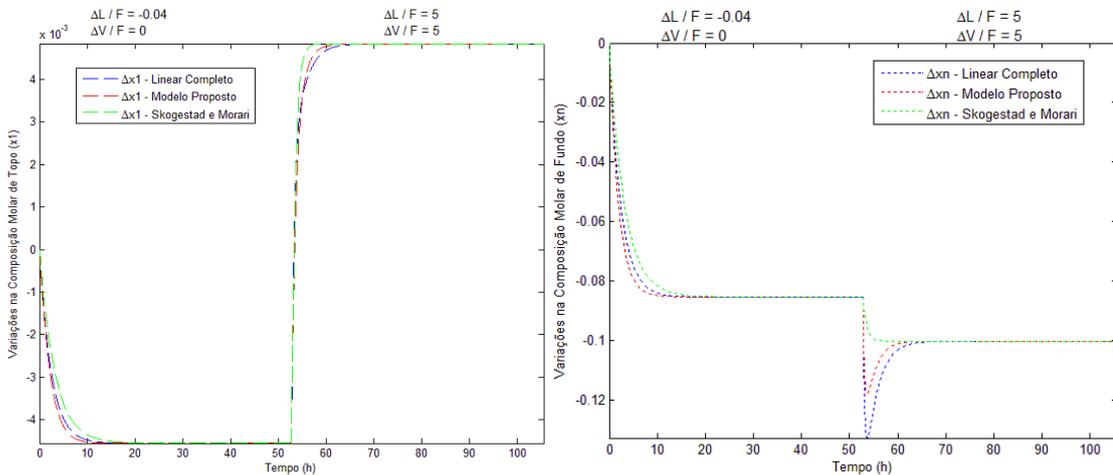


Figura 5.13: Coluna D – Respostas no tempo (D.3).

Observa-se que a dinâmica da coluna está sendo corretamente capturada, com uma álgebra de blocos mais simples, a qual é a representativa do sistema. A Tabela 5.17 apresenta os erros relativos considerando-se o diagrama completo e o diagrama simples:

Tabela 5.17: Coluna D – Constantes de tempo da coluna.

Cte de Tempo	Modelo Linear Completo	Linearização do Método Proposto (Seção 4.2)				Skogestad e Morari (1988)	
		Cte. de tempo (Diagrama completo)	Erro Rel. (%)	Cte. de tempo (Diagrama simples)	Erro Rel. (%)	Cte. de tempo	Erro Rel. (%)
$\tau_{Col,1}$	10091,5	21505,4	113,1	8480,1	15,9	13292,3	31,7
$\tau_{Col,2}$	2160,2	4532,1	109,8	4358,4	101,8	3041,6	40,8
$\tau_{Col,1,500}$	8812,5	20363,8	131,1	6893,5	21,8	11530,5	30,8
$\tau_{Col,2,500}$	1431,7	3188,6	122,7	3092,6	116	2638,4	84,3

Verifica-se na Tabela 5.17 uma significativa redução nos erros para as constantes de tempo da coluna, e a predição é melhor que a do MS&M.

5.9 Resultados, Análises e Conclusões Parciais para a Coluna E

5.9.1 Predição das constantes de tempo de cada seção

Constantes de tempo das seções da Coluna E: A Tabela 5.18 apresenta a predição das constantes de tempo de cada seção da coluna.

Tabela 5.18: Coluna E – Constantes de tempo de cada seção.

Constante de Tempo	Modelo Linear Completo	Método Proposto (Seção 4.2)	
		Constante de Tempo Estimada	Erro Relativo (%)
$\tau_{R,1}$	2203,16	2444,02	10,9
$\tau_{R,2}$	386,51	438,45	13,4
$\tau_{R,1}/\tau_{R,2}$	5,7	5,57	2,2
$\tau_{E,1}$	110,02	107,58	2,2
$\tau_{E,2}$	30,75	30,5	0,8
$\tau_{E,1}/\tau_{E,2}$	3,58	3,53	1,4

Observe a semelhança entre os relativos de cada seção da coluna E com os erros das respectivas seções da Coluna B. Pode-se também verificar que os formatos dos perfis de concentrações são semelhantes para as duas colunas, apesar de ambas serem significativamente distintas em seus parâmetros e seu ponto de operação. A Tabela 5.19 apresenta os coeficientes de variação, que estão coerentes com os erros observados e com a comparação feita com a coluna B:

Tabela 5.19: Coluna E – Coeficientes de variação das composições de cada seção.

Seção	CV (%) Eq. 5.13	Erro Relativo (%)	
		$\tau_{S,1}$	$\tau_{S,2}$
Retificação	10,8	10,9	13,4
Esgotamento	1,2	2,2	0,8

Constantes de tempo da Coluna E: A Tabela 5.20 apresenta a predição das constantes de tempo da coluna.

Tabela 5.20: Coluna E – Constantes de tempo da coluna.

Constante de Tempo	Modelo Linear Completo	Linearização do Método Proposto (Seção 4.2)		Skogestad e Morari (1988) Eqs. 2.10 e 2.11	
		Constante de Tempo Estimada	Erro Relativo (%)	Constante de Tempo Estimada	Erro Relativo (%)
$\tau_{Col,1}$	6446,7	7326,5	13,7	1929,1	70,1
$\tau_{Col,2}$	3558,3	5167,6	45,2	1078,5	69,7
$\tau_{Col,1}/\tau_{Col,2}$	1,81	1,42	21,8	1,79	1,3
$\tau_{Col,1,500}$	3373,6	4847,1	43,7	952,9	71,8
$\tau_{Col,2,500}$	441,1	2892	555,6	451,3	2,3
$\tau_{Col,1,500}/\tau_{Col,2,500}$	7,65	1,68	78,1	2,11	72,4

Os erros relativos para a coluna são inferiores para a constante de tempo dominante da coluna através do método proposto. Os erros elevados para a segunda constante de

tempo dominante devem ser verificados através da análise da álgebra de blocos da coluna, de forma similar ao realizado para a coluna D. Contudo, como a segunda constante de tempo dominante não exerce influência significativa para as resposta dinâmicas avaliadas (vide próxima seção), esta análise não foi realizada.

5.9.2 Direcionalidade e respostas no tempo

Tabela 5.21: Coluna E – Métricas para direcionalidade de cada seção.

Perturbações realizadas	$\frac{\Delta L}{F} = 0,013$ $\Delta V = 0$	$\Delta L = 0$ $\frac{\Delta V}{F} = 0,016$	$\frac{\Delta L}{F} = -0,3$ $\Delta V = \Delta L$	$\frac{\Delta L}{F} = 0,1$ $\Delta V = -\Delta L$
$r_{x_2}, r_{x_{f-1}}$	395,34 , 7,12	74,96 , 36,47	4,76 , 84,35	900,17 , 2,71
$r_{x_2} / r_{x_{f-1}}$	55,56	2,06	0,06	332,56
$e_{x_f}, e_{x_{n-1}}$	5,39 , 3,7	6,91 , 3,54	-30,26 , 0,79	5,37 , 2,88
$e_{x_f} / e_{x_{n-1}}$	1,46	1,95	-38,43	1,86
Modelo escolhido	$R_{dom}E_{dom}$	$R_{dom}E_{dom}$	$R_{dom}E_{dom}$	$R_{dom}E_{dom}$
Vide figura(s)	5.14	5.14	5.15	5.15

As métricas de direcionalidade indicam que a coluna responde com uma dinâmica lenta. Contudo, observe a diferença entre as constantes de tempo dominantes da seção de retificação e de esgotamento. Com base nesta diferença, considera-se que ambas as seções respondem com suas constantes de tempo de maior módulo (conforme o último critério de direcionalidade definido na Seção 4.4).

Sequência de respostas dinâmicas E.1:

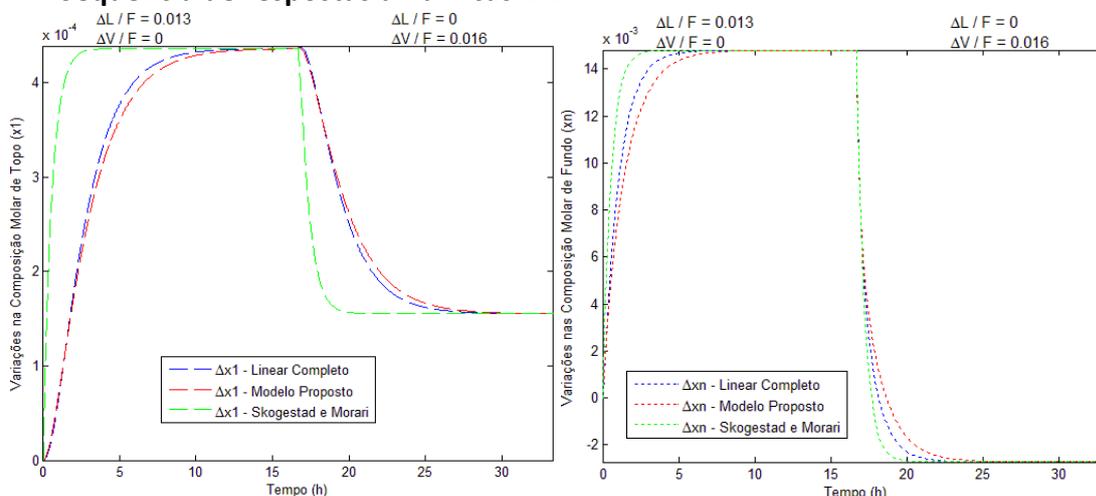


Figura 5.14: Coluna E – Respostas no tempo (E.1).

Sequência de respostas dinâmicas E.2:

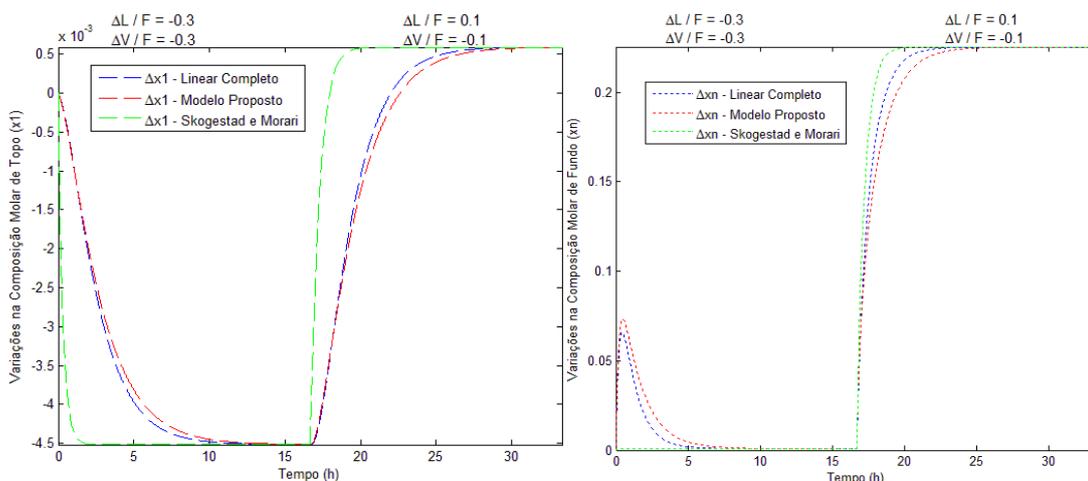


Figura 5.15: Coluna E – Respostas no tempo (E.2).

Observe que, para as direções não correspondentes às de menor ganho, a dinâmica se torna um pouco mais lenta conforme a curva se aproxima do estado estacionário. Contudo, a predição da resposta inicial é satisfatória e significativamente superior ao MS&M. Para a direção de menor ganho, ambos os métodos podem ser considerados equivalentes em precisão.

5.10 Resultados, Análises e Conclusões Parciais para a Coluna F

A Tabela 5.22 apresenta a predição das constantes de tempo de cada seção da coluna.

Tabela 5.22: Coluna F – Constantes de tempo de cada seção.

Constante de Tempo	Modelo Linear Completo	Método Proposto (Seção 4.2)	
		Constante de Tempo Estimada	Erro Relativo (%)
$\tau_{R,1}$	309,2	292,78	5,3
$\tau_{R,2}$	142,6	133,19	6,6
$\tau_{E,1}$	1135,5	26,6	97,6
$\tau_{E,2}$	20,25	9,95	50,9

O elevado erro relativo para a seção de esgotamento pode ser explicado a partir dos coeficientes de variação. Observe pela Tabela 5.23 que este é significativamente

superior para a seção de esgotamento. Fisicamente, isso indica que o perfil de concentrações da seção de retificação apresenta um comportamento menos não linear que o da seção de esgotamento (produto de fundo da coluna também é mais puro que o produto de topo, isto pode ser verificado a partir do perfil de concentrações molares estacionárias).

Tabela 5.23: Coluna F – Coeficientes de variação das composições de cada seção.

Seção	CV (%) Eq. 5.13	Erro Relativo (%)	
		$\tau_{S,1}$	$\tau_{S,2}$
Retificação	0,8	5,3	6,6
Esgotamento	27,9	97,6	50,9

A Coluna F é um caso para o qual o método proposto para aproximação de constantes de tempo (Seção 4.3) não se aplica. Contudo, a álgebra de blocos e os critérios para direcionalidade podem ser aplicados, uma vez que estes independem das limitações acima mencionadas, requerendo-se apenas um método alternativo para prever a constante de tempo da seção de esgotamento.

5.11 Resultados, Análises e Conclusões Parciais para a Coluna G

5.11.1 Predição das constantes de tempo de cada seção

Constantes de tempo das seções da Coluna G: A Tabela 5.24 apresenta a predição das constantes de tempo de cada seção da coluna.

Tabela 5.24: Seções da Coluna G – Constantes de tempo de cada seção.

Constante de Tempo	Modelo Linear Completo	Método Proposto (Seção 4.2)	
		Constante de Tempo Estimada	Erro Relativo (%)
$\tau_{R,1}$	1173,8	1148,7	2,1
$\tau_{R,2}$	418,7	422,1	0,8
$\tau_{R,1}/\tau_{R,2}$	2,8	2,72	2,9
$\tau_{E,1}$	1576,1	2002,3	27
$\tau_{E,2}$	254	356,3	40,3
$\tau_{E,1}/\tau_{E,2}$	6,2	5,6	9,4

Apesar das Colunas F e G serem significativamente distintas entre si, observe a similaridade entre os padrões de erros relativos para as constantes de tempo das seções de ambas. Isto também é verificado pelos coeficientes de variação da Tabela 5.25 (comparando-se com os da Tabela 5.23):

Tabela 5.25: Coluna G – Coeficientes de variação das composições de cada seção.

Seção	CV (%) Eq. 5.13	Erro Relativo (%)	
		$\tau_{S,1}$	$\tau_{S,2}$
Retificação	2	2,1	0,8
Esgotamento	23,2	27	40,3

5.11.2 Direcionalidade e respostas no tempo

A Tabela 5.26 apresenta as métricas para direcionalidade com base nas variações de composições molares para um determinado padrão de perturbações:

Tabela 5.26: Coluna G – Métricas para direcionalidade de cada seção.

Perturbações realizadas	$\frac{\Delta L}{F}$ $= -3,3 \cdot 10^{-5}$	$\Delta L = 0$	$\frac{\Delta L}{F} = -0,9$	$\frac{\Delta L}{F} = -0,0009$
	$\Delta V = -\Delta L$	$\frac{\Delta V}{F}$ $= -3,3 \cdot 10^{-5}$	$\Delta V = \Delta L$	$\Delta V = \Delta L$
$r_{x_2}, r_{x_{f-1}}$	10186 , 19,28	13762 , 14,48	154,68 , 257,44	5050 , 65,65
$r_{x_2} / r_{x_{f-1}}$	528,36	950,44	0,6	76,94
$e_{x_f}, e_{x_{n-1}}$	24,5 , 18236	39,63 , 11479	-554,54 , 150,82	-438,9 , 6900
$e_{x_f} / e_{x_{n-1}}$	0,001	0,003	-3,68	-0,064
Modelo escolhido	$R_{fast}E_{fast}$	$R_{fast}E_{fast}$	$R_{fast}E_{fast}$	$R_{fast}E_{fast}$
Vide figura(s)	5.16	5.16	5.17	5.17

Sequência de respostas dinâmicas G.1a:

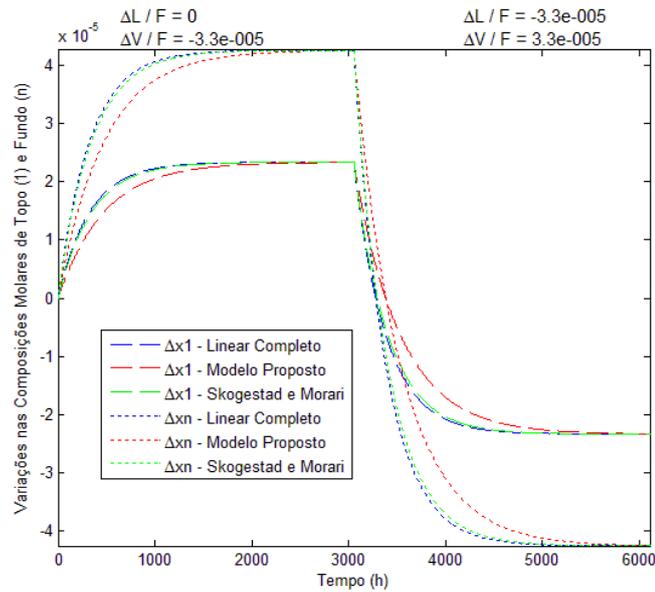


Figura 5.16: Coluna G – Respostas no tempo (G.1a).

De forma similar a coluna D, verifica-se que a coluna responde com uma dinâmica mais lenta do que a esperada. A partir da Tabela 5.24, observa-se que os erros relativos para as constantes de tempo da seção de esgotamento são elevados (e as constantes de tempo estão sendo superestimadas). Para verificar o quão estes erros influenciam a lentidão da resposta dinâmica, foi simulado novamente o sistema porém com os valores exatos desta constante de tempo:

Sequência de respostas dinâmicas G.1b:

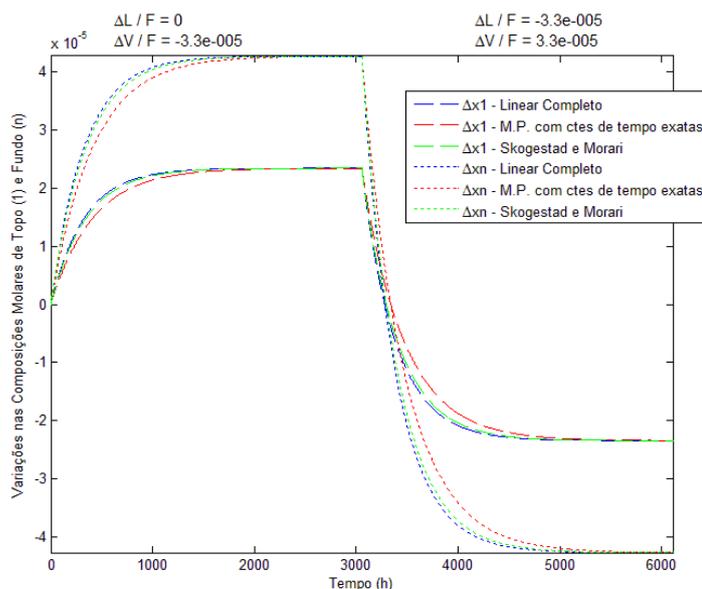


Figura 5.17: Coluna G – Respostas no tempo (G.1b).

Observe que mesmo utilizando-se as constantes de tempo exatas, a coluna ainda responde de forma mais lenta que o esperado. Esta resposta, entretanto, pode ser considerada satisfatória. Contudo, deve-se analisar a álgebra de blocos desta coluna, tal como foi feito para a Coluna D. Pode-se verificar que para o padrão de perturbações

$\Delta L = 0, \Delta V = -3,3 \cdot 10^{-5} F$, o produto $K_{x_{f-1},x_f} \Delta x_f$ é igual a 0,0224. Todos estes valores são superiores em módulo aos dos demais produtos, os quais são todos inferiores a 0,0001. Considerações análogas são verificadas para o padrão de perturbações $\Delta L = -3,3 \cdot 10^{-5} F, \Delta V = -\Delta L$ ($K_{x_{f-1},x_f} \Delta x_f = -0,059$). Considerando-se apenas a contribuição de $K_{x_{f-1},x_f} \Delta x_f$ (e também as dos equipamentos) para o diagrama de blocos, tem-se que os demais blocos contribuem apenas para a parte estática. Desta forma, o diagrama de blocos da Fig. 4.3 é simplificado para o seguinte diagrama:

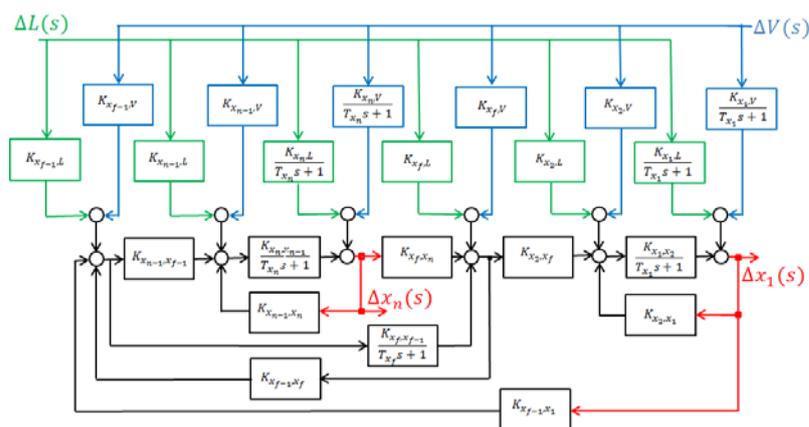


Figura 5.18: Coluna G – Álgebra de blocos simplificada.

Com esta simplificação da álgebra de blocos, as seguintes respostas dinâmicas foram obtidas, com um modelo mais simples e mesma precisão de G.1b:

Sequência de respostas dinâmicas G.1c:

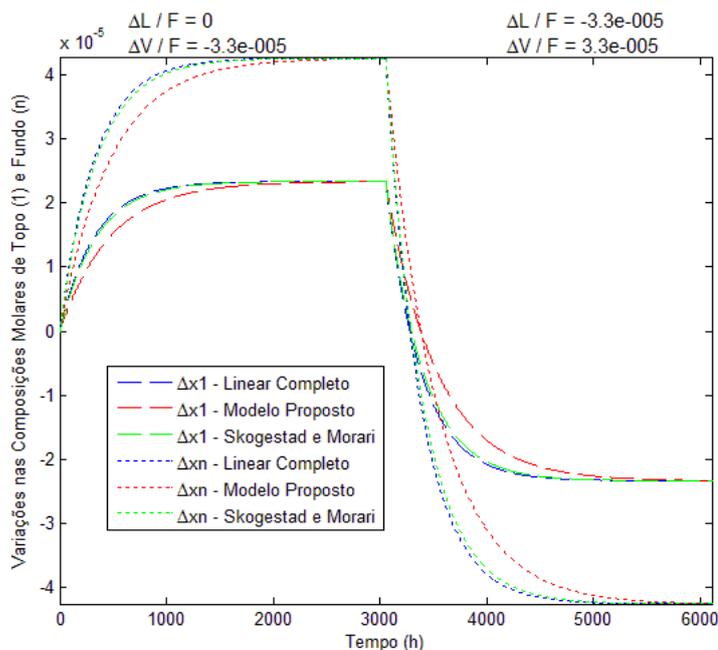


Figura 5.19: Coluna G – Respostas no tempo (G.1c).

Capítulo 6 – Considerações Finais

Foram desenvolvidas expressões simplificadas para a dinâmica dominante das seções de colunas de destilação, bem como critérios rápidos para predição da direcionalidade. Adicionalmente, uma álgebra de blocos que explicita a dinâmica dominante de colunas foi proposta. A partir de tais métodos propostos, almejou-se proporcionar entendimento físico do comportamento dinâmico, para auxiliar no projeto de unidades, otimização de operação e projeto de controladores para colunas, com compromisso entre acurácia para estas aplicações e simplicidade das equações.

Os modelos propostos foram implementados com ferramentas computacionais tipicamente disponíveis para pesquisadores, engenheiros, operadores e demais profissionais atuantes na universidade e na indústria. Para a validação do método proposto, foi considerada uma série de colunas distintas em seus parâmetros e operando em diversos cenários de operação. As comparações foram realizadas frente ao modelo linear completo e ao método das duas constantes de tempo de Skogestad e Morari. Algumas comparações com o modelo não linear também foram realizadas.

Foi verificado que é possível conceber um modelo simplificado com base em um modelo linearizado da coluna para representar satisfatoriamente a sua resposta inicial. Esta comparação foi feita com o modelo não linear, para distintas colunas, magnitudes e direções de perturbações.

A dinâmica dominante e a direcionalidade foram avaliadas com modelos linearizados da coluna. Foi verificado que a álgebra de blocos captura com precisão satisfatória as constantes de tempo dominantes dos sistemas. Esta predição, apesar de reforçada pelo grau de precisão observado pelas constantes de tempo simplificadas propostas para a seção da coluna, com erros relativos na maioria dos casos inferiores a 10 % ao se comparar com o modelo linear completo da seção, também se deve à álgebra de blocos. Isto é mais pronunciado para colunas de altíssima pureza em ambos os extremos (Coluna G), uma vez que a constante de tempo dominante para a coluna é de ordem de grandeza significativamente superior. Esta discrepância nas ordens de grandeza também explicita os efeitos dos refluxos dos equipamentos para a coluna e os existentes entre as seções de retificação e de esgotamento. Ao serem analisadas as contribuições de cada função de transferência para a dinâmica dominante do diagrama de blocos, pode-se evidenciar qual seção da coluna é a dominante, conforme verificado para as Colunas D e G, o que pode simplificar consideravelmente mais os modelos propostos.

O método proposto para captura da dinâmica dominante de uma seção de coluna é preciso e a sua concepção consiste em uma abordagem distinta das apresentadas na literatura para predição de autovalores. Para este, simplifica-se a matriz sem reduzir a sua ordem, e obtém-se o autovalor exato dessa matriz simplificada, ao invés de se aproximar o autovalor. As expressões oriundas de tal abordagem revelam-se simples, precisas e com significado físico. Entretanto, o método requer que algumas premissas sejam satisfeitas, mas estas se encaixam para as aplicações abordadas.

O método proposto para captura de direcionalidade, ao invés de considerar apenas as relações entre os refluxos de topo e de fundo com base nas direções de maior e menor ganho, considera a combinação dos efeitos de deslocamento e de deformação dos perfis de concentrações quando a coluna é sujeita a determinadas perturbações. Este, contudo, é aplicado a uma seção da coluna, de forma que as métricas não foram estendidas para a coluna completa. Porém, a álgebra de blocos se encarrega de prever a direcionalidade da coluna com base nas predições individuais de direcionalidade de cada seção.

Contudo, o método requer um modelo linear. Mesmo que tenha sido proposta uma forma exata de determinação dos ganhos estáticos, esta não prevê com precisão o ganho observado em simulações não lineares, mesmo que a resposta dinâmica inicial seja satisfatoriamente capturada.

É interessante que seja desenvolvido um modelo estático sem requerer a solução do modelo linearizado. Devido à estrutura complexa do sistema de equações algébricas quando se avalia o modelo não linear no estado estacionário, observa-se que há potencial para o desenvolvimento de alguma técnica rápida e precisa para a predição das soluções estáticas. Com $\eta = \eta(N_{seção})$, tem-se a influência do número de estágios da seção e, conseqüentemente, da posição da alimentação f , já que $f = f(N_{coluna}, N_{seção})$. A influência da composição de alimentação também deve ser inserida nos *shortcuts* em desenvolvimentos futuros. Isto pode ser possível com a inserção de uma seção adicional à álgebra de blocos. Desta forma, com as melhorias acima propostas, almeja-se obter uma versão aplicável em projetos industriais (mediante modelos caixa cinza, possivelmente) destes sistemas que não requeira um modelo linear prévio, auxiliando também em outras aplicações como ferramentas de treinamento de operadores e demais aplicações.

Referências Bibliográficas

BENALLOU, A.; SEBORG, D.E.; MELLICHAMP, D. A., "Dynamic compartmental models for separation processes". **AIChE Journal**. 32, p.1067-1078, 1986.

CHOE, Y.S.; LUYBEN, W.L., "Rigorous dynamic models of distillation columns". **Ind. Eng. Chem. Res.**, 26, p.2158, 1987.

DAVIDSON, J.F., "The transient behaviour of plate distillation columns". **Trans. Instn. Chem. Engrs.**, 34, p.44-52, 1956.

GILLERS, E.D.; RETZBACH, B., "Reduced models and control of distillation columns with sharp temperature profiles". **Proc. 19th IEEE Conf. on Design and Control**, p.865-870, 1980.

FELDER; RUSSEAU. **Elementary Principles of Chemical Processes**. 2005.

HORTON, R.R.; BEQUETTE, B.W.; EDGAR, T.F., "**Comput. Chem. Eng.**, 15, p.197-201, 1991.

HWANG, Y.L., "--". **AIChE Journal**. 37, p.705-723, 1991.

JACOBSEN, E.W.; LUNDSTRÖM, P; SKOGESTAD, S., "Modelling and identification for robust control of ill-conditioned plants - a distillation case study", **Proc. American Control Conference, Boston**, p.242-248, 1991.

KAPOOR, T.J.; MACAVOY, T.J.; MARLIN, T.E., "Effect of recycle structure on distillation tower time constants". **AIChE Journal**. 32, p.411, 1986.

KIRK-OTHMER, "Encyclopedia of Chemical Technology", 2004.

LEVY, R. E.; FOSS, A.S; GRENS II, E.A., "Response modes of a binary distillation column". **Ind. Engng. Chem. Fundam.** 8, p.765, 1969.

LJUNG, L., "System Identification: Theory for the user". **Prentice Hall**. 1999.

LUTVICA, K.; OSMIC, N.; JURIC, Z., "Identification of an ethane-ethylene distillation column system – a procedure for MIMO system identification using the IDENT toolbox". **21st Telecommunications forum TELFOR 2013**.

MOCZEK, J.S.; OTTO, R.E, WILLIAMS, T.J., "Approximation model for the dynamic response of large distillation columns". **Chem. Eng. Prog. Symp. Ser.**, 61, p.136-146, 1965.

PINTO, J.C.; BISCAIA JR, S.C., "Order reduction strategies for models of staged separation systems". **Comput. Chem. Eng.**, 12, p.821-831, 1988.

PICKMANN, H.; EGANA, J; SOTO, R., "External inverse eigenvalue problem for bordered diagonal matrices", **Linear Algebra and its Applications**, 2007.

RADEMAKER, O.J.; RIJNSDORP, J.E., MAARLEVELD, A., "Dynamics and control of continuous distillation columns", **Elsevier, Amsterdam**, 1975.

RYSKAMP, C.J, "New strategy improves dual composition column control". **Hydrocarbon Process**, 60, p.51-59, 1980.

SAGFORS, M.F.; WALLER, K.V, "Dynamic low-order models for capturing directionality in nonideal distillation". **Ind. Eng. Chem. Res.**, 34, p.2038-2050, 1995.

SEBORG, D.; MELLICHAMP, D.; EDGAR, T.; DOYLE, F., "Process Dynamics and Control", 3rd Edition. 2010.

SHINSKEY, F.G., "Distillation control". **2nd Edition. McGraw-Hill. New York**, 1984.

SKOGESTAD, S.; MORARI, M., "The dominant time constant for distillation columns". **Comput. Chem. Engng.**, 11, p.607-617, 1987.

SKOGESTAD, S, "Dynamics and control of distillation columns: a tutorial introduction". **Chemical Engineering Research and Design**, 75, p.539-562, 1997.

SKOGESTAD, S.; MORARI, M.; MARLIN, T.E., "Understanding the dynamic behavior of distillation columns". **Ind. Engng. Chem. Res.**, 1988.

STEWART, W.E.; LEVIEN, K.L.; MORARI, M., "Simulation of fractionation by orthogonal collocation". **Chem. Eng. Sci.** 40, p.409-421, 1983.

TULLEKEN, H., "Grey-box modelling and identification using physical knowledge and bayesian techniques". **Automatica**, 29, p.285-308, 1993.

TRUONG, H. S.; ISMAIL, I.; RAZALI, R., "Fundamental Modelling and Simulation of a Binary Continuous Distillation Column", **Electrical and Electronic Eng. Dept., Universiti Teknologi, Malaysia**, 2011.

WAHL, E.F.; HARRIOT, P., "Understanding and prediction of the dynamic behavior of distillation columns". **Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.**, 9, p.396-407, 1970..