

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS**

**FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA**

**ÁREA DE CONCENTRAÇÃO SISTEMAS DE PROCESSOS  
QUÍMICOS E INFORMÁTICA**

**APLICAÇÃO DOS POLINÔMIOS ORTOGONAIS DISCRETOS  
À MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE PROCESSOS DE  
SEPARAÇÃO POR ESTÁGIOS**

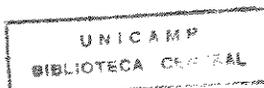
Autor: César Roberto Guimarães de Carvalho

Orientação: Prof. Dr. Mário de Jesus Mendes

Tese submetida à comissão de Pós-Graduação da Faculdade de Engenharia Química  
como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia  
Química.

Agosto de 1996

Campinas - SP



UNIDADE	BC
N.º CHAMADA:	T/UNICAMP
	C253a
V.	E.
TCMND BC/	29243
PROC.	667/96
C	<input type="checkbox"/>
D	<input checked="" type="checkbox"/>
PREÇO	R\$ 11,00
DATA	05/12/96
N.º CPD:	

CM.00095271-9

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA  
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA - BAE - UNICAMP

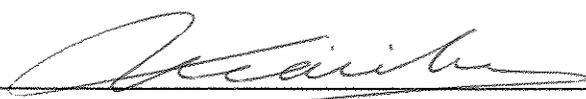
C253a

Carvalho, César Roberto Guimarães de  
Aplicação dos polinômios ortogonais discretos à  
modelagem e simulação de processos de separação por  
estágios / César Roberto Guimarães de Carvalho.--  
Campinas, SP: [s.n.], 1996.

Orientador: Mário de Jesus Mendes.  
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de  
Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Polinômios ortogonais. 2. Destilação - Modelos  
matemáticos. 3. Separação (Tecnologia). 4. Simulação  
(Computadores). I. Mendes, Mário de Jesus. II.  
Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de  
Engenharia Química. III. Título.

**Esta versão corresponde à redação final da dissertação de mestrado defendida pelo Engenheiro Químico César Roberto Guimarães de Carvalho e aprovada pela comissão julgadora em 26 de Agosto de 1996.**



---

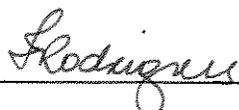
**Prof. Dr. Mário de Jesus Mendes**

**Dissertação defendida e aprovada em 26 de agosto de 1996, pela banca  
examinadora constituída pelos professores e doutores:**



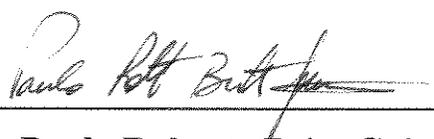
---

**Prof. Dr. Mário de Jesus Mendes**



---

**Profa. Dra. Maria Teresa Moreira Rodrigues**



---

**Dr. Paulo Roberto Brito Guimarães**

*Aos meus pais, Gildo e Léa, pelo carinho e incentivo*

## **Agradecimentos**

Ao Prof. Dr. Mário de Jesus Mendes pela orientação e atenção dedicada,

ao Prof. Dr. Roger Josef Zemp pela gentileza em ceder seu pacote de propriedades termodinâmicas,

aos meus companheiros de república pela excelente convivência durante todos estes anos,

a todos os colegas e amigos que tanto ajudaram neste período, e em especial a Marcone, Frede, o Conde Edílson e Ana Paula,

a todos os professores e funcionários do DESQ e da FEQ,

à CAPES pelo apoio financeiro.

## Nomenclatura

### Simbologias

$A$	Valor numérico da derivada $\frac{dl_k}{dz}$ avaliada nos pontos de colocação $z_j$
$b$	Vazão molar do componente no produto de fundo
$B$	Vazão total de produto de fundo
$d$	Vazão molar do componente no destilado
$D$	Vazão total do destilado
$E$	Eficiência de estágio
$f$	Vazão molar do componente na alimentação
$F$	Vazão total da alimentação
$h$	Entalpia parcial molar do componente
$h_n^{(\alpha,\beta)}(x, N)$	Polinômio de Hahn de grau $n$
$H$	Entalpia total
$K$	Constante de equilíbrio
$\ell$	Vazão molar do componente na fase líquida
$l_k(s)$	Polinômio interpolador de Lagrange
$L$	Vazão total de líquido
$M$	<i>Holdup</i> de líquido no prato
$n$	Número de pontos internos de colocação
$N$	Número total de pratos da coluna
$N_F$	Prato de alimentação
$NC$	Número de componentes
$NE$	Número de elementos finitos por secção de coluna
$p$	Pressão na interface de transferência de massa
$s$	Variável contínua que varia de $s = 0$ a $N-1$ em um elemento finito.
$s_k$	Ponto de colocação
$t$	Tempo
$v$	Vazão molar do componente na fase vapor
$V$	Vazão total de vapor
$x$	Fração molar da fase líquido

$y$	Fração molar da fase vapor
$z$	Variável espacial normalizada

### Letras Gregas

$\alpha$	Parâmetro do Polinômio de Hahn
$\beta$	Parâmetro do Polinômio de Hahn
$\Delta$	Primeira “forward difference”
$\Delta z$	Espaçamento entre os estágios ( $1/N$ )
$\nabla$	Primeira “backward difference”
$\tau$	Constante hidráulica do prato

### Índice inferior

$B$	Produto de Fundo
$C$	Condensador
$D$	Destilado
$F$	Corrente de alimentação
$i$	Componente
$j$	Índice do prato no modelo completo ou índice do ponto de colocação no modelo reduzido
$k$	Índice do ponto de colocação
$r$	Refervedor

### Índice superior

$E$	Secção de esgotamento
$L$	Fase líquida
$R$	Secção de retificação
$V$	Fase vapor

## Resumo

Um dos maiores problemas encontrados no estudo dos processos de separação por estágios é a grande dimensão dos modelos do processo. Deste modo, a simulação desses processos geralmente envolve um grande número de equações algébrico-diferenciais não-lineares cuja solução requer um elevado esforço computacional. Técnicas para reduzir a dimensão destes modelos facilitarão muito a aplicação da otimização *on-line* e do controle avançado de tais processos. Estas técnicas são chamadas de métodos de redução e os modelos por elas gerados recebem o nome de modelos reduzidos.

Neste trabalho a aplicação do método da colocação ortogonal é estendida à solução de equações às diferenças, a partir do desenvolvimento de uma metodologia que unifica o uso da colocação ortogonal tanto para a solução de equações diferenciais quanto para a de equações às diferenças.

O objetivo básico do trabalho é o desenvolvimento de modelos reduzidos para processos de separação por estágios. Para tal, as equações de balanço de massa e energia do modelo prato-a-prato original são reescritas na forma de equações às diferenças finitas e em seguida essas diferenças são aproximadas por técnicas de colocação ortogonal discreta.

Os resultados obtidos na simulação de alguns casos exemplos apresentaram uma concordância muito boa com os do modelo prato-a-prato, tanto no estado estacionário quanto no transiente, além de uma redução considerável na ordem do sistema e no tempo de processamento.

## Abstract

One major problem in the study of stage-based separation process is the large dimension of the process models. Hence, the simulation of these processes normally requires the solution of a large number of algebraic and differential equations, associated with prohibitive computational effort. For on-line optimization and advanced control, models with smaller dimensions would be desirable.

In this work the technique of orthogonal collocation is extended to the solution of difference equations, based on the development of an unified approach for the solution of differential and difference equations.

The main objective of this work is the development of reduced-order models for staged separation process. The mass and energy balance equations for the original tray-by-tray model are rewritten in the form of finite difference equations, and those are then solved by discrete orthogonal collocation.

The results obtained from the new approach compare very well with the original tray-by-tray model results, both for steady-state and dynamics conditions. The decrease in computational effort is considerable in the magnitude of the problem formulation as well as in the time required for the solution.

## Sumário

<b>1. INTRODUÇÃO.....</b>	<b>1</b>
1.1 MOTIVAÇÃO .....	2
1.2 DIVISÃO DO TRABALHO.....	3
<b>2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA .....</b>	<b>4</b>
2.1 OBJETIVOS GERAIS DO TRABALHO .....	11
<b>3. POLINÔMIOS ORTOGONAIS DISCRETOS E CÁLCULO DAS DIFERENÇAS FINITAS.....</b>	<b>12</b>
3.1 INTRODUÇÃO .....	13
3.1.1 <i>Polinômios Ortogonais</i> .....	13
3.1.2 <i>Polinômios Ortogonais de uma Variável Discreta</i> .....	15
3.2 OS POLINÔMIOS DE HAHN.....	17
3.2.1 <i>Condição de Ortogonalidade</i> .....	17
3.2.2 <i>Expansão em Série de Potências</i> .....	18
3.2.3 <i>Zeros ( Raízes ) dos polinômios de Hahn</i> .....	19
3.3 EXPANSÃO DE UMA FUNÇÃO NUMA SÉRIE DE POLINÔMIOS E INTERPOLAÇÃO .....	23
3.3.1 <i>Expansão numa Série de Polinômios</i> .....	23
3.3.2 <i>Expansão em Séries de Polinômios Ortogonais Discretos</i> .....	24
3.3.3 <i>O Polinômio Interpolador de Lagrange</i> .....	26
3.4 DIFERENÇAS FINITAS.....	30
3.4.1 <i>Definição das diferenças</i> .....	30
3.4.2 <i>Algumas propriedades de <math>\Delta</math> e <math>\nabla</math></i> .....	31
3.4.3 <i>Aproximação das Diferenças de uma Função utilizando o Polinômio Interpolador de Lagrange</i> .....	32
<b>4. APLICAÇÃO DOS POLINÔMIOS ORTOGONAIS DISCRETOS À MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE PROCESSOS DE SEPARAÇÃO POR ESTÁGIOS.....</b>	<b>36</b>
4.1 INTRODUÇÃO .....	37
4.2 DESENVOLVIMENTO DA METODOLOGIA DE REDUÇÃO DE ORDEM .....	37
4.3 APLICAÇÃO DOS MODELOS REDUZIDOS À SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO.....	50
4.3.1 <i>Caso 1 - Simulação de Colunas Binárias Ideais em Regime Estacionário</i> .....	50
4.3.2 <i>Caso 2 - Simulação de Colunas Binárias Ideais em Regime Transiente</i> .....	63
4.3.3 <i>Caso 3 - Simulação de uma coluna depropenizadora em regime estacionário</i> .....	75
<b>5. CONCLUSÕES E SUGESTÕES.....</b>	<b>79</b>
5.1 CONCLUSÕES .....	80
5.2 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS .....	81
<b>APÊNDICE .....</b>	<b>82</b>

<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....</b>	<b>86</b>
---	-----------

## **CAPÍTULO 1**

### **INTRODUÇÃO**

# 1. Introdução

## 1.1 Motivação

Em face a sua grande importância na indústria química a destilação é sem dúvida o processo de separação por estágios mais estudado, como revela a extensa bibliografia sobre modelagem e simulação de colunas de destilação. Um grande número de algoritmos tem sido desenvolvido que, aliado à grande evolução na capacidade de memória e no tempo de processamento dos computadores, tem permitido o estudo de colunas maiores e mais complexas. Apesar disto, ainda existem alguns casos em que há a necessidade do desenvolvimento de modelos de ordem reduzida, tais como:

– Otimização on-line:

A otimização de processos em tempo real, cujo objetivo é a determinação das condições ótimas de operação de uma planta ou unidade de processo em tempo real, requer o uso de modelos estáticos que representem o seu comportamento com exatidão. Os modelos mais comumente usados na simulação de colunas de destilação são os prato-a-prato. No entanto, estes apresentam uma grande dimensão, o que torna o esforço computacional para a otimização em estado estacionário bastante elevado, principalmente quando a coluna possui muitos pratos ou mais de uma unidade está envolvida.

– Controle Preditivo com Modelo:

Nesta estratégia de controle, o controlador utiliza o conhecimento da dinâmica do processo (um modelo explícito) para encontrar a trajetória da variável controlada sobre um horizonte de controle que otimiza a função objetivo num horizonte de predição. O algoritmo de controle usa a otimização e a solução do sistema de equações algébrico-diferenciais do modelo dinâmico para determinar a trajetória ótima da variável controlada a cada instante de amostragem. Os modelos prato-a-prato de colunas de destilação geram um problema de programação não-linear contendo um grande número de variáveis e restrições cuja solução requer um grande esforço computacional para cada instante de amostragem. Isto pode criar um grande atraso entre a amostragem e a implementação das ações de controle e, em casos extremos, o tempo de cálculo pode ser maior que o de amostragem.

### – Controle Ótimo no Tempo:

O controle ótimo no tempo é empregado quando deseja-se conduzir o estado de um sistema dinâmico de um ponto inicial para algum ponto final, no menor tempo possível. Isto envolve um problema de otimização onde as restrições incorporam o modelo dinâmico do processo. A exemplo do controle preditivo o algoritmo de controle requer a otimização e a solução do sistema de equações algébrico-diferenciais do modelo para determinar as ações de controle. No caso particular de colunas de destilação, que necessitam de um grande número de equações para descrever a sua dinâmica, um grande esforço computacional é requerido para a obtenção da solução ótima.

## **1.2 Divisão do Trabalho**

Uma vez apresentada a motivação para este trabalho, parte-se para a explicação da divisão do mesmo. Inicialmente no capítulo 2 será feita uma revisão da literatura sobre modelos reduzidos de colunas de destilação por estágios. Em seguida, com base numa análise crítica sobre os modelos reduzidos existentes, serão apresentados os objetivos gerais do presente trabalho.

No capítulo 3 será abordada a aplicação dos polinômios ortogonais de uma variável discreta ao cálculo das diferenças finitas, visando a solução de equações às diferenças.

Em seguida, no capítulo 4 será descrita a metodologia de redução de ordem aplicada a colunas de destilação. Para testar a eficiência dos métodos serão simulados alguns casos exemplo e os resultados comparados com os obtidos pelo modelo prato-a-prato.

Finalmente no capítulo 5 serão apresentadas as conclusões e sugestões para trabalhos futuros.

## **CAPÍTULO 2**

### **REVISÃO BIBLIOGRÁFICA**

## 2. Revisão Bibliográfica

Um problema que frequentemente surge no estudo de sistemas de separação por estágios, em especial colunas de destilação, é a grande dimensão dos modelos do processo. Um modelo prato-a-prato típico apresenta  $N(2NC+1)$  equações algébrico-diferenciais não-lineares, onde  $NC$  é o número de componentes e  $N$  o número de estágios da coluna, os quais devido ainda a eventuais problemas de rigidez, podem apresentar grandes dificuldades na sua solução. Para tentar contornar este problema vários pesquisadores têm proposto estratégias que reduzam o número de equações sem perda de precisão em relação ao modelo original. A estas técnicas dá-se o nome de métodos de redução de ordem e os modelos por elas obtidos são denominados modelos reduzidos.

Uma primeira categoria de modelos reduzidos, como os de Wahl e Harriot (1970) e Georgakis e Stoever (1982) utiliza modelos linearizados. Porém estes são de aplicação bastante restrita, pela própria natureza da linearização. Outra categoria é formada pelos chamados modelos compartimentais de España e Landau (1978) e Benallou *et al.* (1986), que baseiam-se no conceito de prato sensitivo. A grande desvantagem deste método, segundo Seferlis e Hrymak (1994a), é que o prato sensitivo não é definido explicitamente e sua localização tem um papel importante no tempo requerido para a simulação.

Wong e Luus (1980) desenvolveram um método de redução de ordem, baseado na idéia que os perfis de composição possam ser representados como variáveis contínuas ao longo da coluna. Neste trabalho os autores propuseram que as equações às diferenças do modelo original fossem transformadas em equações diferenciais parciais e estas em seguida resolvidas pelo método da colocação ortogonal, com os pontos de colocação localizados nas raízes do polinômio ortogonal de Jacobi. Foi observada uma redução considerável no número de equações, no entanto o balanço de massa no estado estacionário não era preservado. Esta metodologia é razoável para colunas de recheio, porém demonstra-se inadequada para colunas de pratos, pois não preserva a natureza discreta das equações às diferenças do modelo original.

Cho e Joseph (1983a,b, 1984) desenvolveram uma metodologia também baseada na continuidade dos perfis de composição e vazão. Duas abordagens foram desenvolvidas no trabalho. A primeira consistia em considerar as composições molares  $x$  e  $y$  das equações diferenciais às diferenças:

$$M \frac{dx_j}{dt} = V(y_{j+1} - y_j) - L(x_j - x_{j-1}) \quad , \quad (2.1a)$$

e

$$y_j = Kx_j \quad , \quad (2.1b)$$

como variáveis contínuas da variável espacial  $z$ , e em seguida, utilizando a notação da Figura 2.1a, escrever estas equações na forma de diferenças associadas a esta variável:

$$M \frac{dx_z}{dt} = V(y_{z+\Delta z} - y_z) - L(x_z - x_{z-\Delta z}) \quad , \quad (2.2a)$$

e

$$y_z = Kx_z \quad . \quad (2.2b)$$

Tal como proposto por Osborne (1971), as equações às diferenças (2.2) podem ser consideradas como resultantes da discretização espacial de um sistema de equações diferenciais, como ilustra o esquema da Figura 2.1b. Deste modo as equações (2.2) foram transformadas num sistema de equações diferenciais parciais:

$$M \frac{\partial x}{\partial t} = V \frac{\partial y}{\partial z} - L \frac{\partial x}{\partial z} \quad , \quad (2.3a)$$

$$y = Kx + \frac{\partial y}{\partial z} \Delta z \quad , \quad (2.3b)$$

e estas equações diferenciais foram então resolvidas pelo método da colocação ortogonal global clássica (Villadsen e Michelsen (1978)).

$$M \frac{dx_j}{dt} = V \left( \sum_{k=1}^{n+2} A_{jk} y_k \right) - L \left( \sum_{k=1}^{n+2} A_{jk} x_k \right) \quad j = 2, 3, \dots, n+2 \quad (2.4a)$$

$$y_j = Kx_j + \left( \sum_{k=1}^{n+2} A_{jk} y_k \right) \quad j = 1, 2, \dots, n+1 \quad . \quad (2.4b)$$

Esta abordagem apesar de ser bem mais elaborada que a de Wong e Luus, pois o balanço de massa no estado estacionário é preservado, também peca por não manter a estrutura discreta do modelo original.

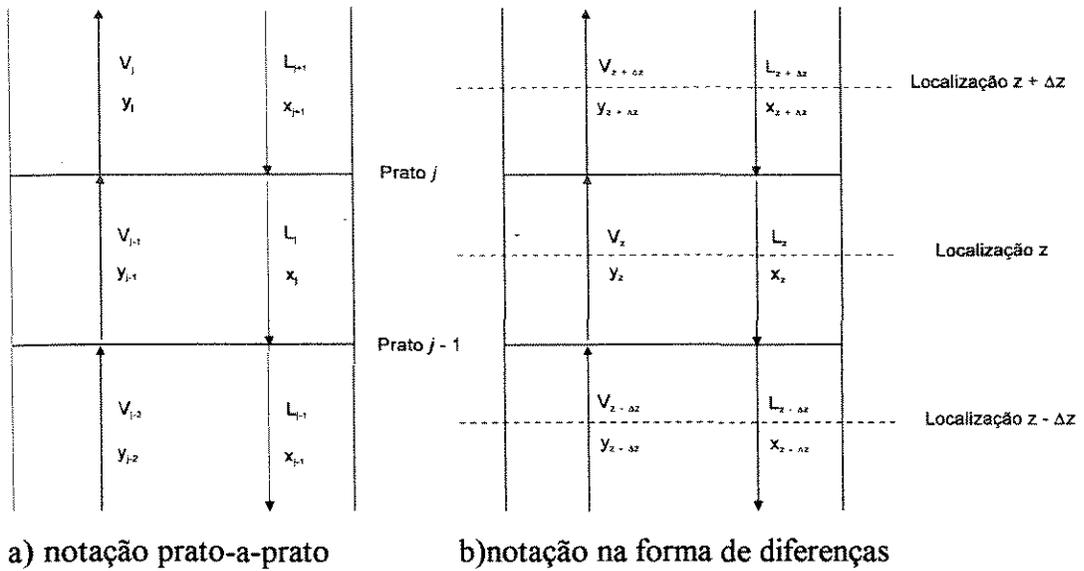


Figura 2.1 - Ilustração de parte de uma secção de coluna

Na segunda abordagem, a redução do modelo era obtida através de uma transição direta para a representação polinomial dos perfis de composição e vazão na coluna, evitando assim a aproximação por equações diferenciais parciais. As funções polinomiais eram expressas em termos de polinômios de Lagrange:

$$x(z) = \sum_{k=1}^{n+2} l_k(z) x_k \quad , \quad (2.5)$$

com esta aproximação as equações do modelo reduzido tomavam a forma:

$$M \frac{dx_j}{dt} = \sum_{k=1}^{n+2} [l_k(z_j - \Delta z) - l_k(z_j)] (Lx_k - Vy_k) \quad (2.6a)$$

$$y_j = \sum_{k=1}^{n+2} l_k(z_j + \Delta z) x_k \quad . \quad (2.6b)$$

Esta segunda abordagem apresentou resultados melhores que a primeira. No entanto, a estrutura discreta das equações às diferenças do modelo original só é mantida parcialmente, pois foi utilizado um procedimento de aproximação polinomial característico de funções contínuas, com pontos de colocação situados nos zeros do polinômio ortogonal contínuo de Jacobi.

Outra grande falha no procedimento proposto por Cho e Joseph é tentar aproximar os perfis de composição e temperatura por um único polinômio ao longo de toda a coluna. O grande inconveniente nisto é que nas regiões onde ocorrem descontinuidades (pratos de alimentação, refeedor, condensador e pratos com retiradas laterais) o polinômio não consegue aproximar bem os perfis de composição e vazão. Para solucionar este problema foi tentada uma

redefinição de variáveis entre as alimentações e saídas laterais, o que como pode ser visto nos trabalhos de Ravagnani (1988) e Xavier (1992), não foi suficiente para resolver a questão.

Stewart *et al.* (1985), a exemplo de Cho e Joseph, também aproximaram os perfis de composição por polinômios interpoladores de Lagrange, porém ao contrário destes, propuseram que os pontos de colocação fossem localizados nas raízes do polinômio ortogonal de Hahn. A justificativa para tal é que, segundo eles, a natureza discreta desta família de polinômios é mais adequada à característica discreta das equações às diferenças do modelo original, além de que estes possuem a importante propriedade de que quando o número de pontos internos de colocação é igual ao número de pratos, as raízes do polinômio coincidem com a localização exata dos estágios e a estrutura do modelo prato-a-prato é recomposta. Com isso as equações do modelo reduzido tomaram a forma:

$$M \frac{d}{dt} \tilde{x}(s_j, t) = \left[ \tilde{V}(s_j + 1, t) \tilde{y}(s_j + 1, t) - \tilde{L}(s_j, t) \tilde{x}(s_j, t) \right] - \left[ \tilde{V}(s_j, t) \tilde{y}(s_j, t) - \tilde{L}(s_j - 1, t) \tilde{x}(s_j - 1, t) \right] \quad (2.7a)$$

$$\left[ \tilde{x}(s_j - 1, t) - \tilde{x}(s_j, t) \right] = \tilde{E}(s_j, t) \left[ \tilde{x}(s_j - 1, t) - x^*(\tilde{p}(s_j, t), \tilde{y}(s_j, t)) \right] \quad (2.7b)$$

Uma grande vantagem do trabalho de Stewart *et al.* (1985) sobre os demais é que eles dividiram a coluna em módulos, em cada um dos quais é aplicado um polinômio interpolador diferente, e o condensador e o refeedor foram tratados como estágios de equilíbrio discretos. Esta formulação, que é similar à colocação ortogonal em elementos finitos, mostrou-se bem mais eficiente que a redefinição de variáveis proposta por Cho e Joseph (1984) para tratar as descontinuidades nos perfis de composição, vazão e temperatura causadas pelo refeedor, condensador e pratos com retiradas laterais.

Uma das falhas da metodologia é não considerar o prato de alimentação como um estágio discreto. Eles propõem que as partes líquida e vapor da corrente de alimentação sejam adicionadas às correntes de líquido e vapor que conectam as duas seções (esgotamento e retificação) da coluna, o que segundo Seferlis e Hrymak (1994a) só é correto no caso de colunas adiabáticas com vazões molares constantes. Outra falha, que é apontada pelos próprios autores do trabalho, é a dificuldade do método em descrever o comportamento de colunas que envolvam regiões onde há pouca variação nos perfis de composição.

Apesar de apresentar uma escolha mais adequada dos pontos de colocação que Cho e Joseph (1983a,b, 1984) e manter a natureza discreta das equações às diferenças do modelo

original, o modelo de Stewart *et al.* (1985) apresenta ainda uma nomenclatura bastante confusa que não permite a visualização imediata da aplicação do método da colocação ortogonal.

Baseados nestes dois trabalhos básicos de Cho e Joseph (1983a,b, 1984) e Stewart *et al.* (1985) vários pesquisadores centralizaram seus estudos em aspectos mais específicos da colocação ortogonal. Srivastava e Joseph (1985,1987a,b) prosseguindo os estudos de Cho e Joseph (1983a,b, 1984), criaram um índice chamado de parâmetro de redução de ordem (ORP), que combinado com a solução prato-a-prato no estado estacionário fornece uma boa estimativa do número e da localização dos pontos de colocação a serem usados no modelo reduzido. Foi observado que colunas com altos valores de ORP apresentam regiões onde praticamente não há variação no perfil de composição, combinadas com outras onde a variação é muito drástica, requerendo portanto um grande número de pontos de colocação e, em alguns casos, inviabilizando a redução de ordem. Para solucionar este problema os autores desenvolveram uma metodologia onde os componentes que não apresentam este tipo de comportamento sejam aproximados por um único polinômio em toda coluna, e os que o apresentam sejam aproximados por um polinômio de pequeno grau na região onde o perfil varia abruptamente e por uma constante onde a variação seja mínima. Drozdowicz e Martinez (1988) fizeram uso do fator de absorção, definido por  $L / KV$ , para determinação das regiões com perfil íngreme, e com o mesmo esquema de colocação global e local desenvolveram um simulador dinâmico para colunas de destilação. A vantagem do método desenvolvido por eles em relação ao de Srivastava e Joseph (1985, 1987a,b) é que a localização das zonas de perfil acentuado é feita durante o curso da solução dinâmica, não requerendo assim a necessidade do conhecimento prévio do perfil estacionário obtido através da solução prato-a-prato. Porém ambos os métodos mostraram-se bastante complexos, pois requerem a utilização de polinômios com graus diferentes para cada componente.

Pinto e Biscaia (1988) propuseram algumas modificações à metodologia de Stewart *et al.* (1985), como por exemplo o uso de outros polinômios que não os de Jacobi e Hahn e a utilização dos pontos extremos (condensador e refeedor) e do prato de alimentação como pontos de colocação e interpolação. Quatro estratégias foram estudadas: colocação seccional com e sem extrapolação, *spline* e global, sendo que só a colocação seccional sem extrapolação apresentou bons resultados. Apesar de conseguirem bons resultados com um número menor de

equações, o método proposto apresentou convergência mais lenta que o de Stewart *et al.* (1985). Além disso, os autores não apresentaram qualquer informação sobre a natureza dos polinômios aproximadores usados.

Seferlis e Hrymak (1994a,b) desenvolveram um modelo reduzido para a otimização em estado estacionário de colunas de destilação. Para tal utilizaram o mesmo esquema proposto por Stewart *et al.* (1985) de dividir a coluna em dois módulos, onde em cada um era aplicada a colocação em elementos finitos, e também consideraram o refeedor e o condensador como estágios de equilíbrio discretos. Porém, ao contrário destes, também consideraram o prato de alimentação como um estágio discreto. Esta nova formulação mostrou-se muito eficiente para aproximar o comportamento de colunas que apresentam perfil acentuado numa região e plano em outras, com a vantagem de ser conceitualmente mais simples que os métodos propostos anteriormente para resolver este tipo de problema. Foi também apresentado num destes trabalhos um método de colocação adaptativa para determinação do tamanho e do número de pontos ótimos para cada elemento.

Pode-se concluir, a partir desta revisão dos trabalhos existentes sobre a modelagem reduzida de colunas de destilação, que os modelos que fazem uso do método da colocação ortogonal são os mais eficientes, pois, além de manterem a natureza tipicamente não-linear do problema, não precisam de parâmetros de sintonização, são válidos tanto para o regime dinâmico quanto para o estacionário, são os que apresentam a maior redução no número de equações e são de fácil implementação computacional. Quanto a aspectos mais específicos, observou-se que a melhor localização dos pontos de colocação é obtida nos zeros do polinômio de Hahn e que a melhor formulação é a que divide a coluna em elementos finitos, sendo o refeedor, o condensador e o prato de alimentação tratados como estágios de equilíbrio discretos.

## **2.1 Objetivos Gerais do Trabalho**

O objetivo principal deste trabalho é a construção de modelos de ordem reduzida para sistemas de separação por estágios, em especial colunas de destilação. Dentro deste objetivo genérico, destacam-se como objetivos intermediários:

- Desenvolvimento de uma metodologia que unifique a aplicação do método da colocação ortogonal tanto para equações diferenciais quanto para equações às diferenças.
- Sistematizar o método em função dos tipos básicos de problemas.
- Avaliar a influência da discretização sobre a resposta dinâmica do processo, e em especial sobre o atraso de tempo devido à hidrodinâmica dos pratos.

## **CAPÍTULO 3**

# **POLINÔMIOS ORTOGONAIS DISCRETOS E CÁLCULO DAS DIFERENÇAS FINITAS**

### 3. Polinômios Ortogonais Discretos e Cálculo das Diferenças Finitas

#### 3.1 Introdução

Os **polinômios ortogonais** constituem uma classe de funções de grande interesse na análise matemática (Szegő, 1975) e, mais particularmente, na simulação de processos (Villadsen e Michelsen, 1978).

A teoria e aplicações dos chamados polinômios ortogonais clássicos (Jacobi, Hermite, Legendre) estão expostas nas referências citadas acima.

Neste trabalho é estudada a aplicação dos chamados polinômios ortogonais de variável discreta ao cálculo das diferenças finitas, visando a solução de equações às diferenças, encontradas por exemplo nos modelos matemáticos de processos de separação por estágios.

Como a teoria destas famílias de polinômios ortogonais não está ainda sistematizada, não havendo sequer uma notação unificada, na primeira parte do trabalho será feita uma apresentação condensada desta teoria, visando sobretudo as aplicações em engenharia. Sempre que possível, a notação seguida é a apresentada por Nikiforov *et al.* (1991).

#### 3.1.1 Polinômios Ortogonais

Para uma função  $\alpha(x)$ , monotônica não-decrescente no intervalo  $[a,b]$ , define-se o produto escalar de duas funções reais contínuas  $f(x)$  e  $g(x)$ ,  $x \in [a,b]$ , pela seguinte integral de Stieltjes-Lebesgue (Apostol, 1974)

$$(f, g) = \int_a^b f(x)g(x)d\alpha(x), \quad (3.1)$$

e a ortogonalidade de  $f(x)$  e  $g(x)$  em relação à distribuição  $d\alpha(x)$  pela condição:

$$(f, g) = \int_a^b f(x)g(x)d\alpha(x) = 0. \quad (3.2)$$

Se a função  $\alpha(x)$  for absolutamente contínua, o produto escalar (3.1) reduz-se a:

$$(f, g) = \int_a^b f(x)g(x)w(x)dx, \quad (3.3)$$

onde  $w(x) = d\alpha / dx$  é uma função não negativa, mensurável no sentido de Lebesgue, para a qual se tem  $\int_a^b w(x)dx > 0$ ;  $w(x)$  é chamada de função peso.

As funções  $f(x)$ ,  $g(x)$ , para as quais o produto escalar (3.1) existe, podem ser consideradas como “vetores” de um espaço vetorial, cujo produto interno é definido por (3.1), sendo a norma associada a este produto interno, para a função  $f(x)$ , dada por:

$$\|f\| = (f, f)^{1/2} \quad (3.4)$$

Seja  $d\alpha(x)$  uma distribuição no intervalo  $[a, b]$ . Os polinômios  $p_n(x)$  definidos pelas condições:

- (a)  $p_n(x)$  é um polinômio precisamente de grau  $n$ , para o qual o coeficiente de  $x^n$  é positivo;
- (b) O sistema  $\{ p_n(x) \}$  é ortonormal, isto é, tem-se:

$$\int_a^b p_n(x)p_m(x)d\alpha(x) = \delta_{nm}d_n^2, \quad n, m = 0, 1, \dots, n, \dots, \quad (3.5)$$

onde

$$\delta_{nm} = \begin{cases} 1, n = m \\ 0, n \neq m \end{cases}$$

formam uma família de polinômios ortogonais em relação à distribuição  $d\alpha(x)$ . Contudo, os polinômios ortogonais clássicos - Jacobi, Legendre, Laguerre e Hermite - satisfazem a uma condição de ortogonalidade  $(p_n, p_m) = 0$  ( $m \neq n$ ) em relação a uma distribuição do tipo  $w(x)dx$ . Em ambos os casos, as famílias de polinômios ortogonais obtidas apresentam um conjunto de propriedades gerais, das quais se destacam aqui três:

- (a) Relação de Recorrência - Todas as famílias de polinômios ortogonais em relação a uma distribuição  $d\alpha(x)$  ou  $w(x)dx$  satisfazem a uma relação de recorrência do tipo:

$$x p_n(x) = \alpha_n p_{n+1}(x) + \beta_n p_n(x) + \gamma_n p_{n-1}(x), \quad (3.6)$$

onde  $\alpha_n$ ,  $\beta_n$  e  $\gamma_n$  são constantes. Se representarmos o polinômio  $p_n(x)$  pela soma

$$p_n(x) = a_{n,n} x^n + a_{n,n-1} x^{n-1} + \dots + a_{n,0} \quad , \quad (3.7)$$

as constantes  $\alpha_n$ ,  $\beta_n$  e  $\gamma_n$  são dadas por:

$$\alpha_n = \frac{a_{n,n}}{a_{n+1,n+1}}$$

$$\beta_n = \frac{a_{n,n-1}}{a_{n,n}} - \frac{a_{n+1,n}}{a_{n+1,n+1}} \quad (3.8)$$

$$\gamma_n = \frac{a_{n-1,n-1}}{a_{n,n}} \frac{d_n^2}{d_{n-1}^2} \quad ,$$

onde  $d_n$  é a norma dada por

$$d_n = (p_n, p_n)^{1/2} \quad . \quad (3.9)$$

(b) Zeros dos Polinômios - Todos os zeros ( raízes )  $x_i$  de  $p_n(x)$  são reais e simples, e situados no intervalo  $[a,b]$ .

(c)Equação Diferencial - Todos os polinômios ortogonais clássicos são soluções de equações diferenciais hipergeométricas,

$$\sigma(x)p''(x) + \tau(x)p'(x) + \lambda p = 0 \quad , \quad (3.10)$$

onde  $\sigma(x)$  e  $\tau(x)$  são polinômios de, no máximo, 2º e 1º graus respectivamente, e  $\lambda$  é uma constante.

### 3.1.2 Polinômios Ortogonais de uma Variável Discreta

Seja  $d\alpha(x)$  uma distribuição no intervalo  $[a,b]$ . Supondo-se que  $\alpha(x)$  é uma função degrau em  $[a,b]$ , isto é, uma função constante por partes, apresentando um número finito de saltos (degraus) em  $[a,b]$ , e se for  $N$  o número de tais degraus, então a sequência

$$\{ 1, x, x^2, \dots, x^{N-1} \}$$

é ainda linearmente independente em relação a  $d\alpha(x)$ , isto é, a partir da sequência  $\{ x^n \}$  é possível, neste caso, formar uma família finita de polinômios ortogonais

$$\{ p_0(x), p_1(x), \dots, p_{N-1}(x) \} \quad .$$

Considerando-se então uma família de polinômios ortogonais  $\{ p_n(x) \}$  definida pela condição de ortogonalidade

$$\int_a^b p_n(x)p_m(x)d\alpha(x) = \delta_{nm}d_n^2 \quad , \quad (3.11)$$

se  $\alpha(x)$  for uma função degrau, com degraus de amplitude  $\rho_i$  nos pontos  $\{ x_i \}$  ( $i = 0, 1, \dots, N-1$ ), ter-se-á

$$d\alpha(x) = \sum_{i=0}^{N-1} \rho_i \delta(x - x_i),$$

e (3.11) toma a forma:

$$\sum_{i=0}^{N-1} p_n(x_i)p_m(x_i)\rho_i = \delta_{nm}d_n^2 \quad . \quad (3.12)$$

Os polinômios  $\{ p_n(x) \}$  que satisfazem a uma relação de ortogonalidade do tipo (3.12) são chamados de polinômios ortogonais de uma variável discreta (ou também de polinômios ortogonais discretos).

Nota-se que estes polinômios  $p_n(x)$  são na realidade funções contínuas da variável contínua  $x$ ; a designação “discreta” está associada às relações do tipo (3.12) e a outras propriedades destas famílias de polinômios.

Dentre os polinômios ortogonais de uma variável discreta, os mais conhecidos são os polinômios de **Hahn**, **Meixner**, **Kravchuck** e **Charlier** (Nikiforov *et al.*,1991), para os quais, na relação (3.12), se tem

$$x_{i+1} = x_i + 1 \quad . \quad (3.13)$$

Pode-se mostrar que estes polinômios, entre outras propriedades, satisfazem equações às diferenças obtidas por discretização das equações diferenciais geradoras dos polinômios ortogonais clássicos (Nikiforov *et al.*,1991). Estas equações às diferenças têm propriedades fundamentais semelhantes às das equações diferenciais originais, o que possibilita a construção de uma teoria dos polinômios ortogonais de uma variável discreta por analogia com a teoria dos polinômios ortogonais clássicos .

### 3.2 Os Polinômios de Hahn

Embora algumas das propriedades a seguir apresentadas sejam válidas para os polinômios ortogonais de uma variável discreta em geral, será dada particular atenção aos chamados polinômios de Hahn. Como foi visto, uma família de polinômios ortogonais pode ser definida de diversas maneiras. A seguir serão introduzidas algumas relações básicas referentes aos polinômios de Hahn.

#### 3.2.1 Condição de Ortogonalidade

A notação empregada para representar as diferentes famílias de polinômios ortogonais de variável discreta varia muito de autor para autor. Neste trabalho será utilizada, como foi dito, a notação usada por Nikiforov *et al.* (1991). Segundo estes, os polinômios de Hahn são representados por

$$h_n^{(\alpha, \beta)}(x, N) \quad , \quad (3.14)$$

onde  $n$  e  $N$  são inteiros positivos, sendo  $n$  a ordem ( grau ) do polinômio, com  $n \leq ( N - 1 )$ . Os parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$  são números reais, e que satisfazem à condição:

$$\alpha, \beta > -1 \quad . \quad (3.15)$$

De acordo com Nikiforov *et al.*, os polinômios de Hahn satisfazem à condição de ortogonalidade:

$$\sum_{x_i=0}^{N-1} h_n^{(\alpha, \beta)}(x_i, N) h_m^{(\alpha, \beta)}(x_i, N) \rho_i = \delta_{nm} d_n^2 \quad , \quad (3.16)$$

onde a função peso  $\rho_i$  é definida por:

$$\rho_i = \rho(x_i) \quad , \quad i = 0, 1, \dots, N-1$$

$$x_{i+1} = x_i + 1 \quad ,$$

sendo

$$\rho(x) = \frac{\Gamma(N + \alpha - x)\Gamma(x + \beta + 1)}{\Gamma(x + 1)\Gamma(N - x)} \quad (3.17)$$

onde  $\Gamma(x)$  é a função gama, definida para  $x > 0$  pela integral:

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{x-1} dt \quad (3.18)$$

A condição de ortogonalidade (3.16), juntamente com a função peso (3.17) definem os polinômios  $h_n^{(\alpha, \beta)}(x, N)$ , a menos de uma constante multiplicativa.

De acordo com a notação adotada, os polinômios  $h_n^{(\alpha, \beta)}(x, N)$  estão normalizados de tal modo que se tem:

$$(h_n, h_n) = \sum_{x_i=0}^{N-1} [h_n^{(\alpha, \beta)}(x_i, N)]^2 \rho(x_i) = d_n^2 \quad (3.19)$$

onde a norma quadrada  $d_n^2$  é dada por:

$$d_n^2 = \frac{\Gamma(\alpha + n + 1)\Gamma(\beta + n + 1)(\alpha + \beta + n + 1)_N}{(\alpha + \beta + 2n + 1)n!(N - n - 1)!} \quad (3.20)$$

Note-se que, como foi visto, são igualmente possíveis outras normalizações de  $h_n^{(\alpha, \beta)}(x, N)$ .

### 3.2.2 Expansão em Série de Potências

Em algumas situações é interessante conhecer o desenvolvimento de  $h_n^{(\alpha, \beta)}$  em potências de  $x^n$

$$h_n^{(\alpha, \beta)} = \sum_{k=0}^n a_{n,k} x^k \quad (3.21)$$

Como visto em Mendes (1995), essa expansão é dada por:

$$h_n^{(\alpha, \beta)}(x, N) = \frac{(-1)^n}{n!} (N-n)_n (\beta+1)_n \left\{ 1 + \sum_{m=0}^{\infty} \frac{n!(N-m-1)! \Gamma(\alpha + \beta + n + m + 1) \Gamma(\beta + 1)}{m!(n-m)!(N-1)! \Gamma(\alpha + \beta + n + 1) \Gamma(\beta + m + 1)} \left( \sum_{j=1}^m S_m^j x_j \right) \right\} \quad (3.22)$$

onde  $S_m^j$  são os números de Stirling do 1º tipo ( Jordan, 1965 ):

$$S_m^0 = 0 \quad ; \quad S_m^m = 1 \quad ; \quad S_{m+1}^j = S_m^{j-1} - m S_m^j$$

Embora complexa, a relação (3.22) permite calcular os valores dos coeficientes  $a_{n,k}$  de  $h_n^{(\alpha, \beta)}(x, N)$ . Em particular tem-se:

$$a_{n,n} = \frac{1}{n!} (\alpha + \beta + n + 1)_n = \frac{1}{n!} \frac{\Gamma(\alpha + \beta + 2n + 1)}{\Gamma(\alpha + \beta + n + 1)} \quad , \quad (3.23.a)$$

$$a_{n,n-1} = -\frac{(\alpha + \beta + n + 1)_{n-1}}{(n-1)!} \left[ (\beta + 1)(N-1) + \frac{n-1}{2} (\alpha - \beta + 2N - 2) \right] \quad , \quad (3.23.b)$$

e

$$h_n^{(\alpha, \beta)}(x=0, N) = a_{n,0} = \frac{(-1)^n}{n!} (N-n)_n (\beta+1)_n = \frac{(-1)^n (N-1)! \Gamma(n + \beta + 1)}{n! (N-n-1)! \Gamma(\beta + 1)} \quad , \quad (3.23.c)$$

### 3.2.3 Zeros ( Raízes ) dos polinômios de Hahn

Na grande maioria das aplicações o conhecimento dos zeros dos polinômios  $h_n^{(\alpha, \beta)}(x, N)$  é fundamental. É necessário pois desenvolver um método explícito e preciso para o cálculo destes zeros.

Considere-se a família de polinômios  $h_n^{(\alpha, \beta)}(x, N)$  com a expansão em série de potência

$$h_n^{(\alpha, \beta)}(x, N) = \sum_{k=0}^n a_{n,k} x^k \quad (3.24)$$

Estes polinômios, assim como os outros polinômios ortogonais, satisfazem à relação de recorrência (3.6). A partir dos polinômios  $h_n^{(\alpha, \beta)}(x, N)$  será construída uma família de polinômios  $\{ p_n(x) \}$  definida por:

$$p_n(x) = \frac{h_n^{(\alpha, \beta)}(x, N)}{a_{n,n}}, \quad (3.25)$$

ou seja,  $p_n(x)$  dados por (3.25) são polinômios de Hahn normalizados pela condição de se ter o coeficiente da potência  $x^n$  igual à unidade ,

$$p_n(x) = x^n + c_{n,n-1}x^{n-1} + \dots + c_{n,0}$$

ou

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^n c_{n,k} x^k \quad , \text{ com } c_{n,n} = 1. \quad (3.26)$$

É fácil de ver de (3.24) e (3.25) que se tem:

$$c_{n,k} = \frac{a_{n,k}}{a_{n,n}} \quad , \quad k = 0, 1, \dots, n \quad . \quad (3.27)$$

Por outro lado, os polinômios  $p_n(x)$  definidos por (3.25) satisfarão à condição de ortogonalidade:

$$\sum_{x_i=0}^{N-1} p_n(x_i) p_m(x_i) \rho(x_i) = \frac{1}{a_{n,n}^2} \sum_{x_i=0}^{N-1} h_n^{(\alpha, \beta)}(x_i, N) h_m^{(\alpha, \beta)}(x_i, N) \rho(x_i) = \delta_{mn} \frac{d_n^2}{a_{n,n}^2} \quad . \quad (3.28)$$

Deste modo, atendendo a (3.20) e a (3.23.a), a norma quadrada  $h_n^2$  para os polinômios  $p_n(x)$  será:

$$h_n^2 = \frac{d_n^2}{a_{n,n}^2} = \frac{n! \Gamma(\alpha + n + 1) \Gamma(\beta + n + 1) \Gamma(\alpha + \beta + N + n + 1) \Gamma(\alpha + \beta + n + 1)}{(N - n - 1)! \Gamma(\alpha + \beta + 2n + 2) \Gamma(\alpha + \beta + 2n + 1)} \quad . \quad (3.29)$$

Então, para os polinômios  $p_n(x)$  definidos por (3.25), a relação de recorrência (3.6) toma a forma:

$$xP_n(x) = \alpha_n P_{n+1}(x) + \beta_n P_n(x) + \gamma_n P_{n-1}(x) \quad , \quad (3.30)$$

com:

$$\begin{aligned} \alpha_n &= \frac{c_{n,n}}{c_{n+1,n+1}} = 1 \\ \beta_n &= c_{n,n-1} - c_{n+1,n} \\ \gamma_n &= \frac{h_n^2}{h_{n-1}^2} \end{aligned} \quad (3.31)$$

e portanto :

$$\beta_n = -\frac{n(\beta+1)(N-1)}{\alpha+\beta+2n} + \frac{(n+1)(\beta+1)(N-1)}{\alpha+\beta+2n+2} - \frac{n(n-1)(\alpha-\beta+2N-2)}{2(\alpha+\beta+2n)} + \frac{n(n+1)(\alpha-\beta+2N-2)}{2(\alpha+\beta+2n+2)}$$

ou

$$\beta_n = \frac{(\alpha+\beta)(\beta+1)(N-1)}{(\alpha+\beta+2n)(\alpha+\beta+2n+2)} + \frac{n(\alpha-\beta+2N-2)}{2} \left( \frac{2(\alpha+\beta+n+1)}{(\alpha+\beta+2n)(\alpha+\beta+2n+2)} \right)$$

ou

$$\beta_n = \frac{1}{(\alpha+\beta+2n)(\alpha+\beta+2n+2)} [(\alpha+\beta)(\beta+1)(N-1) + n(\alpha+\beta+n+1)(\alpha-\beta+2N-2)] \quad (3.32)$$

e

$$\gamma_n = \frac{h_n^2}{h_{n-1}^2} = \frac{n(\alpha+n)(\beta+n)(\alpha+\beta+N+n)(\alpha+\beta+n)(N-n)}{(\alpha+\beta+2n+1)(\alpha+\beta+2n)^2(\alpha+\beta+2n-1)} \quad (3.33)$$

Deste modo, de (3.30) obtém-se

$$P_{n+1}(x) = (x - \beta_n)P_n(x) - \gamma_n P_{n-1}(x) \quad , \quad (3.34)$$

com  $\beta_n$  e  $\gamma_n$  dados por (3.32) e (3.33) respectivamente.

Usando a relação (3.34), juntamente com (3.32) e (3.33) é possível calcular facilmente o valor de  $p_n(x)$  para qualquer valor de  $x$ , assim como o valor da derivada  $p'_n(x)$  e os zeros de  $p_n(x)$ , usando o método apresentado por Villadsen e Michelsen(1978). Os algoritmos para o cálculo das raízes de  $p_n(x)$  são apresentados no Apêndice.

**Nota 1-** Para completar a questão dos zeros dos polinômios de Hahn é interessante apresentar algumas propriedades gerais referentes a esses zeros.

1) Para  $\alpha > -1$  e  $\beta > -1$  e  $n \leq N-1$  os zeros dos polinômios de Hahn  $h_n^{(\alpha, \beta)}(x, N)$  são todos reais e simples e estão localizados no intervalo aberto  $(0, N-1)$ , sendo que para  $x_i \in (0, N-1)$  existe no máximo um zero no intervalo fechado  $[x_i, x_{i+1}]$ .

2) Para  $n = N$ , ou seja para o polinômio de Hahn  $h_N^{(\alpha, \beta)}(x, N)$ , os zeros são os inteiros  $\{0, 1, 2, \dots, N-1\}$ ;

3) Para  $n \geq N$  os polinômios de Hahn  $h_n^{(\alpha, \beta)}(x, N)$  têm, além de outros, os zeros  $\{0, 1, 2, \dots, N-1\}$ ;

**Nota 2-** A função peso  $\rho(x)$  definida por (3.17) é simétrica em relação às trocas  $\alpha \leftrightarrow \beta$  e  $x \leftrightarrow N-1-x$ , isto é, tem-se:

$$\rho(\alpha, \beta, x, N) = \rho(\beta, \alpha, N-1-x, N) \quad (3.35)$$

De (3.35) pode-se deduzir a relação de simetria para os polinômios de Hahn:

$$h_n^{(\alpha, \beta)}(x, N) = (-1)^n h_n^{(\beta, \alpha)}(N-1-x, N) \quad (3.36)$$

A relação (3.36) mostra que, se  $x_i$  é um zero do polinômio  $h_n^{(\alpha, \beta)}(x, N)$ , então  $(N-1-x)$  é um zero do polinômio  $h_n^{(\beta, \alpha)}(x, N)$ .

**Nota 3-** Os polinômios de Hahn com  $\alpha = \beta = 0$ , isto é, os polinômios  $h_n^{(0, 0)}(x, N)$ , são por vários autores chamados de Polinômios de Chebyshev Discretos e representados por

$$t_n(x) = h_n^{(0, 0)}(x, N) \quad (3.37)$$

A relação (3.36) com  $\alpha = \beta = 0$  mostra que, para estes polinômios, as raízes estão dispostas simetricamente no intervalo  $(0, N-1)$ , isto é, para cada raiz  $x_i$  existe uma raiz  $N-1-x_i$ .

Além disso, estes polinômios gozam de outra propriedade muito interessante:

$$\rho(x_i) = 1 \quad (3.38)$$

### 3.3 Expansão de uma Função numa Série de Polinômios e Interpolação

#### 3.3.1 Expansão numa Série de Polinômios

Considera-se uma família infinita de polinômios  $\{p_0(x), p_1(x), \dots, p_n(x), \dots\}$ , onde  $p_n(x)$  é um polinômio de grau  $n$ .

Sob certas condições, uma função  $f(x)$  pode ser expandida numa série dos polinômios  $p_n(x)$ :

$$f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} c_i p_i(x) \quad (3.39)$$

Contudo, se a série (3.39) for interrompida no termo em  $p_n(x)$ ,

$$f(x) = \sum_{i=0}^n c_i p_i(x) \quad (3.40)$$

e determinando-se as constantes  $c_i$  de tal modo que a relação (3.40) seja satisfeita para  $n+1$  valores de  $x$ ,  $\{x = x_0, x_1, \dots, x_n\}$ , então para qualquer outro valor de  $x$  o termo da direita de (3.40) fornecerá apenas uma aproximação de  $f(x)$  (Jordan, 1965). Nestas condições ter-se-á:

$$f(x_i) = \sum_{i=0}^n c_i p_i(x_i) \quad , \quad (i = 0, 1, \dots, n) \quad (3.41)$$

Para qualquer outro valor de  $x \neq x_i$  o resíduo da aproximação (3.39), que será representado por  $R_{n+1}(x)$ , será dado por (Jordan, 1965) :

$$R_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_n) \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \quad , \quad (3.42)$$

onde  $\xi$  é um valor situado no intervalo que contém os pontos  $(x, x_0, x_1, \dots, x_n)$ , isto é,  $\xi$  será uma função de  $x$  (mas uma vez escolhido o valor de  $x$  em (3.41),  $\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}$  será uma constante!)

Deste modo, a expansão:

$$f(x) = c_0 p_0(x) + c_1 p_1(x) + \dots + c_n p_n(x) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi) \quad , \quad (3.43)$$

é exata para qualquer valor de  $x$ , sendo  $\xi$  uma função de  $x$  !

A relação (3.42) é interessante, pois mostra que o resíduo  $R_{n+1}(x)$  depende apenas dos valores  $(x, x_0, x_1, \dots, x_n)$  e da derivada  $f^{(n+1)}(x)$  de  $f(x)$ , e não depende dos polinômios  $p_n(x)$  usados na expansão.

O desenvolvimento feito mostra ainda que, se  $f(x)$  for uma função polinomial de grau exatamente  $n$ , então a expansão (46) será exata, ou seja,  $R_{n+1}(x)$  será nulo para qualquer  $x$ .

### 3.3.2 Expansão em Séries de Polinômios Ortogonais Discretos

Considerando-se novamente uma função  $f(x)$ , e seja  $\{ p_n(x) \}$  uma família de polinômios ortogonais discretos definida pela condição de ortogonalidade

$$\sum_{x_i=0}^{N-1} \rho(x_i) P_n(x_i) P_m(x_i) = \delta_{mn} d_n^2 \quad . \quad (3.44)$$

Supõe-se, inicialmente, que  $f(x)$  é um polinômio de grau  $n < N$ .

Então , como foi visto acima, a expansão

$$f(x) = \sum_{i=0}^n c_i p_i(x) \quad , \quad (3.45)$$

com o cálculo adequado dos coeficientes  $c_j$ , será exata para todos os valores de  $x$ .

Multiplicando ambos os membros de (3.45) por  $p_n(x)p_m(x)$ , e somando para todos os  $x_i$  ( $x_i = 0, 1, \dots, N-1$ ) tem-se:

$$\sum_{x_i=0}^{N-1} \rho(x_i) f(x_i) p_m(x_i) = \sum_{x_i=0}^{N-1} \left( \sum_{j=0}^n c_j p_j(x_i) \rho(x_i) p_m(x_i) \right)$$

ou

$$\sum_{x_i=0}^{N-1} \rho(x_i) f(x_i) p_m(x_i) = \sum_{j=0}^n c_j \sum_{x_i=0}^{N-1} \rho(x_i) p_j(x_i) p_m(x_i) \quad (3.46)$$

Devido, contudo, à condição de ortogonalidade (3.44), obtém-se para (3.46):

$$c_j = \frac{\sum_{x_i=0}^{N-1} \rho(x_i) f(x_i) p_j(x_i)}{d_j^2} \quad (3.47)$$

Na situação mais geral  $f(x)$  será uma função não polinomial, e a série (3.45) deverá conter um número infinito de termos. Contudo, a expansão

$$f(x) \approx \sum_{j=0}^{N-1} c_j p_j(x) \quad (3.48)$$

será exata para os valores de  $x_i = 0, 1, \dots, N-1$ . Com efeito, como foi visto a propósito dos polinômios de Hahn, para os polinômios ortogonais discretos que satisfazem à condição (3.44), os polinômios de grau  $m \geq N$  têm todos, além de outras, as raízes  $x_i = 0, 1, \dots, N-1$ , de tal modo que para estes valores de  $x$  os termos de ordem superior a  $N-1$  na expansão em série (3.48) serão nulos, ou seja, para estes valores de  $x$  o resíduo da expansão (3.48) será nulo.

Os valores dos coeficientes  $c_j$  da expansão (3.45) dados por (3.47) são ótimos pelo critério dos mínimos quadrados, ou seja, estes valores dos  $c_j$  satisfazem à condição:

$$S_n = \sum_{i=0}^{N-1} \rho(x_i) \left\{ f(x_i) - \sum_{j=1}^n c_j p_j(x_i) \right\}^2 = Min \quad (3.49)$$

Com efeito, as condições de mínimo são:

$$\frac{\partial S_n}{\partial c_k} = 2 \sum_{i=0}^{N-1} \rho(x_i) \left\{ f(x_i) - \sum_{j=1}^n c_j p_j(x_j) \right\} p_k(x_i) = 0 \quad (3.50)$$

ou, devido à condição de ortogonalidade (3.44):

$$\sum_{i=0}^{N-1} \rho(x_i) f(x_i) p_j(x_i) = c_j \sum_{i=0}^{N-1} \rho(x_i) p_j^2(x_i)$$

ou

$$c_j = \frac{\sum_{i=0}^{N-1} \rho(x_i) f(x_i) p_j(x_i)}{d_j^2} \quad (3.51)$$

que é uma expressão idêntica a (3.47).

Estas considerações permitem chegar a uma conclusão muito importante (Jordan, 1965):

Para obter a melhor aproximação possível de uma função  $f(x)$ , definida para os  $(N+1)$  valores de  $x$   $\{x_0, x_1, x_2, \dots, x_{N-1}\}$ , por um polinômio de grau  $n$  de acordo com o princípio dos mínimos quadrados,

$$S_n = \sum_{i=0}^{N-1} \left[ f(x_i) - \sum_{j=0}^n c_j p_j(x_i) \right]^2 \equiv \text{Min}$$

basta expandir essa função numa série dos polinômios ortogonais discretos  $\{p_j(x) = h_j^{(0,0)}(x, N)\}$  e terminar a série no termo  $p_n(x)$ .

### 3.3.3 O Polinômio Interpolador de Lagrange

Colocando-se novamente o problema:

É dada uma função  $f(x)$  definida para os pontos equidistantes  $x_i = \{0, 1, 2, \dots, N-1\}$  e deseja-se aproximar essa função por um polinômio de grau  $n < N$ . Contudo, em vez de se usar uma expansão em polinômios ortogonais satisfazendo a (3.44) e determinar os coeficientes  $c_j$  por (3.47), o que daria a melhor aproximação possível segundo o princípio dos mínimos quadrados, deseja-se definir os  $c_j$  ( $j = 0, \dots, n$ ) escolhendo  $(n+1)$  pontos de colocação  $u_i$  ( $i = 0, \dots, n$ ), de tal modo que se tenha:

$$f(u_i) = \sum_{j=1}^n c_j p_j(u_i) \quad (i = 0, 1, \dots, n) \quad (3.52)$$

Então, de acordo com (3.42), o resíduo da expansão  $R_{n+1}(x)$  será:

$$R_{n+1}(x) = (x - u_0)(x - u_1)\dots(x - u_n) \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}, \quad (3.53)$$

onde  $\xi$  é função de  $x$ .

Como o resíduo da aproximação é apenas função dos  $u_i$  e de  $f^{(n+1)}(\xi)$ , tentar-se-á otimizar a seleção dos pontos de colocação de acordo com o princípio dos mínimos quadrados, isto é, de acordo com a condição:

$$S'_n = \sum_{i=0}^{N-1} \rho(x_i) \{R_{n+1}(x_i)\}^2 = \text{Min}, \quad (3.54)$$

onde, de acordo com (3.42) se tem:

$$R_{n+1}(x_i) = \alpha_{n+1}(x_i)(x_i - u_0)(x_i - u_1)\dots(x_i - u_n),$$

ou seja,  $R_{n+1}(x)$  é um polinômio de grau  $n+1$ , que pode ser escrito na forma:

$$R_{n+1}(x) = \alpha_{n+1}(x) \{x^{n+1} + \beta_{n+1,1}x^n + \dots + \beta_{n+1,n+1}\} \quad (3.55)$$

Substituindo-se (3.55) em (3.54) obtêm-se as condições de mínimo:

$$\frac{\partial S'_n}{\partial \beta_{n+1,k}} = 2 \sum_{x_i=0}^{N-1} \rho(x_i) R_{n+1}(x_i) \alpha_{n+1}(x_i) x_i^{n+1-k} = 0 \quad (3.56)$$

Fazendo-se

$$q_{n+1}(x) = (x - u_0)\dots(x - u_n) = x^{n+1} + \beta_{n+1,1}x^n + \dots + \beta_{n+1,n+1}$$

tem-se para (3.56):

$$\frac{\partial S'_n}{\partial \beta_{n+1,k}} = 2 \sum_{x_i=0}^{N-1} \rho(x_i) \alpha_{n+1}^2(x_i) q_{n+1}(x_i) x_i^{n+1-k} = 0 \quad (k = 1, \dots, n) \quad (3.57)$$

O sistema de equações (3.57) não pode ser resolvido diretamente pois, em princípio, se tem  $\alpha_{n+1}(x_i) \neq \alpha_{n+1}(x_k)$ , ( $i \neq k$ ). Contudo, seja  $\alpha_{max}$  um número tal que

$$\alpha_{max}^2 = \max_i \{ \alpha_{n+1}^2(x_i) \} \quad (3.58)$$

Nestas condições tem-se :

$$S_n'' = \alpha_{max}^2 \sum_{x_i=0}^{N-1} \rho(x_i) \{ q_{n+1}(x_i) \}^2 \geq S_n' \quad ,$$

ou seja, o mínimo de  $S_n''$  não coincide necessariamente com o mínimo de  $S_n'$ . Tomando contudo o ponto de mínimo de  $S_n''$  como uma aproximação da solução do problema (3.53), as condições (3.56) serão substituídas por:

$$\frac{\partial S_n''}{\partial \beta_{n+1,k}} = 2 \alpha_{max}^2 \sum_{x_i=0}^{N-1} \rho(x_i) q_{n+1}(x_i) x_i^{n-k} = 0 \quad , \quad (3.59)$$

o que mostra que  $q_{n+1}(x)$  é um polinômio da família dos polinômios ortogonais discretos definidos por (3.44).

Concluindo, pode-se afirmar que:

Uma aproximação subótima de uma função  $f(x)$  por um polinômio de grau  $n$ , no sentido do critério dos mínimos quadrados (3.54), consiste em construir este polinômio a partir dos pares de valores  $[u_j, f(u_j)]$ ,  $j = 0, \dots, n$ , onde os  $u_j$  são os zeros do polinômio ortogonal de grau  $n+1$  pertencente à família de polinômios ortogonais definidos por (3.44), ou:

- Dada uma função  $f(x)$ , definida nos pontos equidistantes  $x_i = \{ 0, 1, \dots, N-1 \}$ , um polinômio de grau  $n$  que aproxima subotimamente  $f(x)$  pode ser construído usando os pares de valores  $(u_j, f(u_j))$ ,  $j = 0, 1, \dots, n$ ,  $u_j \in (0, N-1)$ , onde os  $u_j$  são as raízes do polinômio ortogonal de grau  $n+1$  da família definida pela condição de ortogonalidade (3.44).

O critério dos mínimos quadrados (3.54), na realidade, atribui um peso  $\rho(x_i)$  diferente a cada um dos valores do resíduo  $R_{n+1}(x_i)$ . Na prática, a menos que haja uma razão especial em contrário, o polinômio aproximador  $\pi_n(x)$  é escolhido de modo a minimizar a função

$$S_n = \sum_{i=0}^{N-1} [R_{n+1}(x_i)]^2 \tag{3.60}$$

Óbviamente, o critério (3.60) equivale a escolher a família de polinômios ortogonais discretos que satisfaz à condição de ortogonalidade (3.44) com  $\rho(x_i)=1, i=0,1,\dots,N-1$ , ou seja, a família de polinômios de Hahn  $h_j^{(0,0)}(x,N)$ . Nestas condições, o polinômio aproximador  $\pi_n(x)$  desejado deverá ser construído usando os pares de valores  $\{u_j, f(u_j)\}, j=0,1,\dots,n$ , onde os  $u_j$  são os zeros do polinômio de Hahn  $h_{n+1}^{(0,0)}(x,N)$ .

Entre os vários métodos disponíveis para construir o polinômio  $\pi_n(x)$  de grau  $n$  assim definido, o mais frequentemente usado é o do chamado **Polinômio Interpolador de Lagrange**:

-Uma vez definidos os **pontos de colocação**  $u_j (j = 0, 1, \dots, n)$ , o polinômio de grau  $n$  que *interpola* os pontos  $[u_j, f(u_j)]$  é dado por:

$$\pi_n(x) = \sum_{j=0}^n l_j(x) f(u_j) \quad , \tag{3.61}$$

onde os  $l_j(x)$  são, por sua vez, polinômios de grau  $n$  definidos por:

$$l_j(x) = \frac{p_{n+1}(x)}{(x - u_j) p'_{n+1}(u_j)} \quad , \tag{3.62.a}$$

com:

$$p_{n+1}(x) = (x - u_0)(x - u_1)\dots(x - u_n) \quad . \tag{3.62.b}$$

A partir de (3.62.a-b) é fácil de ver que se tem:

$$\begin{aligned} l_j(u_j) &= 1 \quad , \tag{3.63} \\ l_j(u_k) &= 0 \quad , \quad k \neq j \end{aligned}$$

### 3.4 Diferenças Finitas

Nas aplicações é possível normalmente distinguir dois tipos de funções. Em primeiro lugar as funções  $f(x)$  para as quais a variável  $x$  pode tomar um valor qualquer num dado intervalo, isto é, a variável é contínua. Estas funções pertencem ao domínio do Cálculo Infinitesimal. Em segundo lugar, as funções para as quais a variável independente  $x$  apenas pode tomar determinados valores  $x_0, x_1, \dots, x_n$ , isto é, a variável é descontínua. Para estas funções aplica-se o Cálculo das Diferenças Finitas, o qual contudo pode ser aplicado a ambas as categorias de funções.

#### 3.4.1 Definição das diferenças

A teoria do Cálculo das Diferenças Finitas foi desenvolvida para o caso de funções  $\{f(x)\}$  definidas para valores discretos de  $x$ ,  $\{x_0, x_1, x_2, \dots, x_n, \dots\}$ , quando estes valores são equidistantes, isto é, quando se tem

$$x_{i+1} - x_i = h, \quad (3.64)$$

onde  $h$  é independente de  $i$ .

Neste caso, a teoria pode ser aplicada também a funções de variável contínua, e a 1ª diferença de  $f(x)$ , representada por  $\Delta f(x)$ , é definida por:

$$\Delta f(x) = f(x+h) - f(x) \quad (3.65)$$

onde  $h$  é constante independente do valor de  $x$ .

Vários autores chamam  $\Delta f(x)$ , definida por (3.65), de “primeira diferença para a frente” (*first forward difference*) (Kreyszig, 1993).

As fórmulas do Cálculo das Diferenças Finitas são extremamente simplificadas quando o incremento  $h = 1$ . É sempre possível reduzir a situação (70) ao caso  $h = 1$ , pela mudança de variável

$$x = a + h\xi,$$

de tal modo que

$$f(x) = F(\xi)$$

e

$$\Delta F(\xi) = F(\xi+1) - F(\xi) \quad (3.66)$$

Uma vez definida a diferença de ordem um, e supondo um valor de acréscimo  $h = 1$ , pode-se definir diferenças de ordem superior :

-Segunda diferença de  $f(x)$ ,  $\Delta^2 f(x)$ , definida por

$$\Delta^2 f(x) = \Delta[\Delta f(x)] = \Delta f(x+1) - \Delta f(x) \quad , \quad (3.67.a)$$

ou

$$\Delta^2 f(x) = f(x+2) - 2f(x+1) + f(x) \quad . \quad (3.67.b)$$

-Enésima diferença de  $f(x)$ ,  $\Delta^n f(x)$ , definida por:

$$\Delta^n f(x) = \Delta[\Delta^{n-1} f(x)] \quad . \quad (3.68)$$

Embora muitos autores não considerem explicitamente (Jordan, 1965), é frequente usar as chamadas “backward differences” ( Kreyszig, 1993 ).

-Primeira “backward difference” de  $f(x)$ ,  $\nabla f(x)$ ,

$$\nabla f(x) = f(x) - f(x-1) \quad . \quad (3.69.a)$$

-Enésima “backward difference” de  $f(x)$ ,  $\nabla^n f(x)$

$$\nabla^n f(x) = \nabla[\nabla^{n-1} f(x)] \quad . \quad (3.69.b)$$

### 3.4.2 Algumas propriedades de $\Delta$ e $\nabla$

-Propriedade Comutativa em relação a Constantes

$$\begin{aligned} \Delta[cf(x)] &= c\Delta f(x) \\ \nabla[cf(x)] &= c\nabla f(x) \end{aligned} \quad , \quad (3.70)$$

onde  $c$  é uma constante.

-Propriedade Distributiva:

$$\Delta[f_1(x) + f_2(x)] = \Delta f_1(x) + \Delta f_2(x) \quad . \quad (3.71)$$

-Propriedade Comutativa dos Operadores:

$$\Delta \nabla = \nabla \Delta \quad (3.72)$$

-Operadores Aplicados a Produtos:

$$\Delta [f_1(x)f_2(x)] = \Delta f_1(x).f_2(x) + \Delta f_2(x).f_1(x) + \Delta f_1(x).\Delta f_2(x). \quad (3.73.a)$$

$$\nabla [f_1(x).f_2(x)] = f_1(x).\nabla f_2(x) + f_2(x).\nabla f_1(x) - \nabla f_1(x)\nabla f_2(x). \quad (3.73.b)$$

### 3.4.3 Aproximação das Diferenças de uma Função utilizando o Polinômio Interpolador de Lagrange

Considerando-se uma função  $y(x)$  e um polinômio interpolador de Lagrange que aproxima a função com base nos  $n+1$  pontos de colocação  $u_i$  ( $i=0, 1, \dots, n$ ) :

$$y(x) \cong \sum_{i=0}^n l_i(x)y(u_i) \quad , \quad (3.74)$$

onde, de acordo com (3.62. a-b) se tem:

$$l_i(x) = \frac{p_{n+1}(x)}{(x-u_i)p'_{n+1}(u_i)} \quad , \quad (3.75.a)$$

e

$$p_{n+1}(x) = (x-u_0)(x-u_1)\dots(x-u_n) \quad (3.75.b)$$

Então, de acordo com (3.70) e (3.71) tem-se:

$$\Delta y(x) \cong \sum_{i=0}^n \Delta l_i(x)y(u_i) \quad (3.76)$$

Por outro lado, de (3.75.a) obtem-se:

$$(x - u_i)l_i(x) = \frac{p_{n+1}(x)}{p'_{n+1}(u_i)} \quad (3.77)$$

Usando a diferença do produto, Eq. (3.73.a), e atendendo a que se tem

$$\Delta(x - x_i) = (x + 1 - x_i) - (x - x_i) = 1,$$

obtem-se de (3.77):

$$l_i(x) + (x - u_i + 1)\Delta l_i(x) = \frac{\Delta p_{n+1}(x)}{p'_{n+1}(u_i)}$$

ou:

$$l_i(x) + (x - u_i + 1)\Delta l_i(x) = \frac{p_{n+1}(x+1) - p_{n+1}(x)}{p'_{n+1}(u_i)}$$

ou

$$\Delta l_i(x) = \frac{p_{n+1}(x+1) - p_{n+1}(x)}{(x - u_i + 1)p'_{n+1}(u_i)} - \frac{l_i(x)}{(x - u_i + 1)} \quad (3.78)$$

Nas aplicações está-se interessado em calcular os valores das diferenças nos pontos de colocação.

1º caso:  $\Delta l_i(u_i)$

Como se tem  $p_{n+1}(u_i) = 0$ , e como

$$\frac{p_{n+1}(x+1)}{(x - u_i + 1)} = \frac{\prod_{k=0}^n (x + 1 - u_k)}{(x + 1 - u_i)} = \prod_{k=0, k \neq i}^n (x + 1 - u_k) \quad , \quad (3.79.a)$$

e

$$l_i(u_i) = 1 \quad , \quad (3.79.b)$$

tem-se de (3.78):

$$\Delta l_i(u_i) = \frac{\prod_{k=0, k \neq i}^n (u_i - u_k + 1)}{p'_{n+1}(u_i)} - 1 \quad (3.80)$$

2º caso:  $\Delta l_i(u_{j \neq i})$

Como se tem

$$l_i(u_j) = 0, \quad j \neq i$$

e

$$p_{n+1}(u_i) = 0,$$

obtem-se de (3.78):

$$\Delta l_i(u_{j \neq i}) = \frac{\prod_{k=0, i}^n (u_j - u_k + 1)}{p'_{n+1}(u_i)}$$

Como para  $k = j$  se tem,  $u_j - u_k + 1 = 1$ , obtem-se finalmente:

$$\Delta l_i(u_{j \neq i}) = \frac{\prod_{k=0, (i, j)}^n (u_j - u_k + 1)}{p'_{n+1}(u_i)} \quad (3.81)$$

As relações (3.78), (3.80) e (3.81) valem para o cálculo da 1ª diferença “forward”.

Para a primeira diferença “backward”,  $(\nabla l_i(x))$  tem-se, partindo de (3.75) e por um método análogo:

$$(x - u_i - 1)\nabla l_i(x) + l_i(x) = \frac{\nabla p_{n+1}(x)}{p'_{n+1}(u_i)}$$

ou:

$$(x - u_i - 1)\nabla l_i(x) + l_i(x) = \frac{p_{n+1}(x) - p_{n+1}(x-1)}{p'_{n+1}(u_i)}$$

ou:

$$\nabla l_i(x) = \frac{p_{n+1}(x) - p_{n+1}(x-1)}{(x - u_i - 1)p'_{n+1}(u_i)} - \frac{l_i(x)}{x - u_i - 1} \quad (3.82)$$

Para os pontos de colocação tem-se:

3º caso:  $\nabla l_i(u_i)$

Como  $p_{n+1}(u_i) = 0$  e  $l_i(u_i) = 1$ , tem-se de (3.82):

$$\nabla l_i(u_i) = -\frac{\prod_{k=0, i}^n (u_i - u_k - 1)}{p'_{n+1}(u_i)} + 1 \quad (3.83)$$

4º caso:  $\nabla l_i(u_{j \neq i})$

Como  $p_{n+1}(u) = 0$  e  $l_i(u_{j \neq i}) = 0$  tem-se de (3.82):

$$\nabla l_i(u_{j \neq i}) = - \frac{\prod_{k=0, i}^n (u_j - u_k - 1)}{p'_{n+1}(u_i)},$$

e como  $u_j - u_{j-1} = -1 (k=j)$  tem-se finalmente:

$$\nabla l_i(u_{j \neq i}) = - \frac{\prod_{k=0, (i, j)}^n (u_j - u_k - 1)}{p'_{n+1}(u_i)} \quad (3.84)$$

## **CAPÍTULO 4**

# **APLICAÇÃO DOS POLINÔMIOS ORTOGONAIS DISCRETOS À MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE PROCESSOS DE SEPARAÇÃO POR ESTÁGIOS**

## 4. Aplicação dos Polinômios Ortogonais Discretos à Modelagem e Simulação de Processos de Separação por Estágios

### 4.1 Introdução

Neste capítulo será demonstrada a aplicação da colocação ortogonal discreta ao desenvolvimento de modelos reduzidos para sistemas de separação por estágios. Primeiramente será apresentada a metodologia de redução de ordem. Em seguida, através da simulação de alguns casos exemplo, será testada a eficiência do método, onde os perfis de composição e temperatura no estado estacionário e as respostas dinâmicas do modelo reduzido serão comparados com aqueles obtidos pelos modelos prato-a-prato.

### 4.2 Desenvolvimento da Metodologia de Redução de Ordem

O procedimento de redução de ordem será desenvolvido tomando como base uma coluna de destilação multicomponente com uma única alimentação e sem retiradas laterais, conforme ilustrado na Figura 4.1.

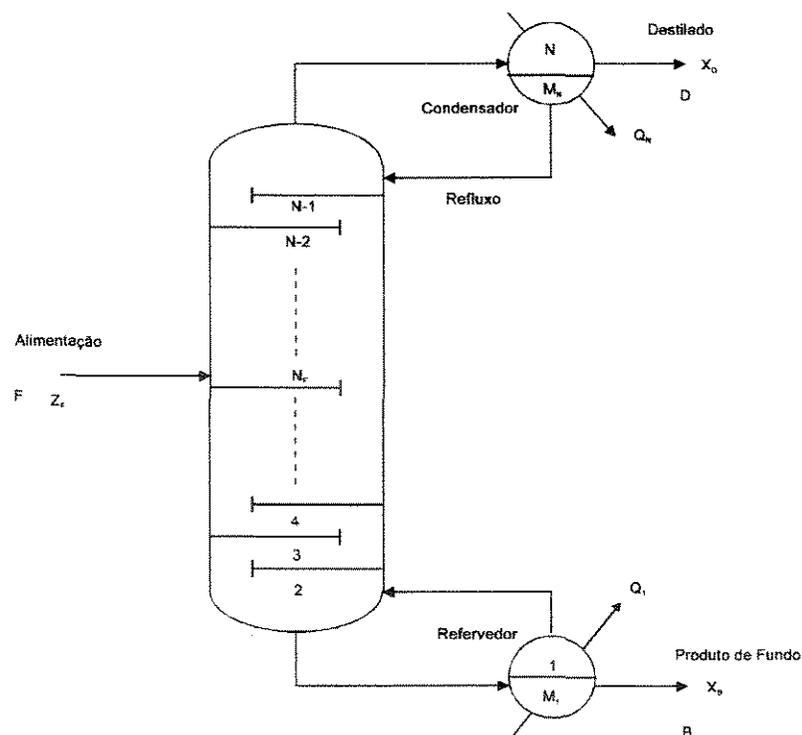


Figura 4.1 - Coluna de Destilação Multicomponente

Serão adotadas as seguintes hipóteses simplificadoras:

- (a) Mistura perfeita em cada prato;
- (b) *Holdup* do vapor desprezível;
- (c) Equilíbrio termodinâmico entre o líquido e o vapor que saem de cada prato;
- (d) Pressão constante ao longo da coluna;
- (e) O condensador e o refeedor serão tratados como estágios ideais.

Com isso, excluindo-se o prato de alimentação, o refeedor e o condensador, tem-se para um prato  $j$  da coluna (ilustrado pela Figura 4.2) as seguintes equações de balanço de massa e energia:

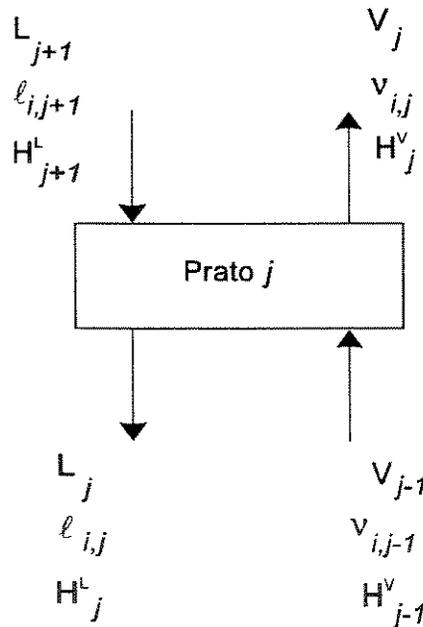


Figura 4.2 - Prato  $j$  da coluna de destilação

• Equações de Balanço de Massa por componente

$$\frac{d}{dt} \left( M_j \frac{\ell_{i,j}}{L_j} \right) = \ell_{i,j+1} - \ell_{i,j} + v_{i,j-1} - v_{i,j} \tag{4.1}$$

$$i = 1, \dots, NC$$

$$j = 2, \dots, N-1, (j \neq N_F)$$

• Equações de Balanço de Energia

$$\frac{d}{dt} \left( M_j \frac{H_j^L}{L_j} \right) = H_{j+1}^L - H_j^L + H_{j-1}^V - H_j^V \quad (4.2)$$

$$i = 1, \dots, NC$$

$$j = 2, \dots, N-1, (j \neq N_F)$$

Por se tratarem de estágios com descontinuidades nas vazões de líquido e/ou vapor, o prato de alimentação, o refeedor e o condensador são modelados separadamente:

• Prato de Alimentação:

$$\frac{d}{dt} \left( M_{N_F} \frac{\ell_{i,N_F}}{L_{N_F}} \right) = \ell_{i,N_F+1} - \ell_{i,N_F} + v_{i,N_F-1} - v_{i,N_F} + f_i \quad (4.3)$$

$$i = 1, \dots, NC$$

$$\frac{d}{dt} \left( M_{N_F} \frac{H_{N_F}^L}{L_{N_F}} \right) = H_{N_F+1}^L - H_{N_F}^L + H_{N_F-1}^V - H_{N_F}^V + FH_F \quad (4.4)$$

• Refeedor:

$$\frac{d}{dt} \left( M_1 \frac{b_i}{B} \right) = \ell_{i,2} - v_{i,1} - b_i \quad (4.5)$$

$$i = 1, \dots, NC$$

$$\frac{d}{dt} \left( M_1 \frac{H_1^L}{B} \right) = H_2^L - H_1^V - H_1^L \quad (4.6)$$

• Condensador:

$$\frac{d}{dt} \left( M_N \frac{d_i}{D} \right) = v_{i,N-1} - \ell_{i,N} - d_i \quad (4.7)$$

$$i = 1, \dots, NC$$

$$\frac{d}{dt} \left( M_N \frac{H_N^L}{D} \right) = H_{N-1}^L - H_N^L - H_N^V \quad (4.8)$$

Além das relações de balanço de massa e energia tem-se ainda para cada prato  $j$  as seguintes equações de equilíbrio termodinâmico e de hidráulica do prato:

• Relação de Equilíbrio Termodinâmico

$$v_{i,j} = K_{i,j} \ell_{i,j} \frac{V_j}{L_j} \quad (4.9)$$

$$i = 1, \dots, NC$$

$$j = 1, \dots, N$$

• Equação Hidráulica do Prato

$$M_j = \psi L_j \quad (4.10)$$

$$j = 1, \dots, N$$

Onde:

$$L_j = \sum_{i=1}^{NC} \ell_{i,j} \quad (4.11)$$

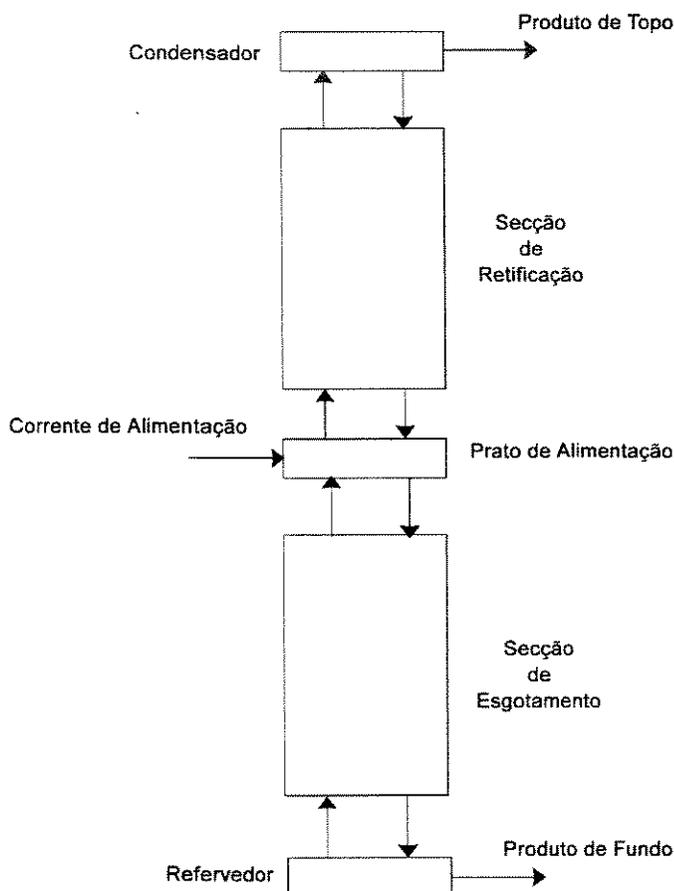
$$V_j = \sum_{i=1}^{NC} v_{i,j} \quad (4.12)$$

$$H_j^L = \sum_{i=1}^{NC} \ell_{i,j} h_{i,j}^L \quad (4.13)$$

$$H_j^V = \sum_{i=1}^{NC} v_{i,j} h_{i,j}^V \quad (4.14)$$

O índice  $i$  denota o componente e o índice  $j$  o número do prato.

O modelo reduzido será desenvolvido baseado nas mesmas considerações feitas para o modelo prato-a-prato. A metodologia de redução de ordem consiste em separar a coluna em duas secções (ou elementos), esgotamento e retificação, cada qual definida como o conjunto de pratos entre o prato de alimentação e um dos pontos extremos da coluna (refervedor e condensador), conforme ilustrado na Figura 4.3.



**Figura 4.3** - Representação da coluna na forma de elementos interconectados

Para cada prato dessa secção as equações de balanço de massa e energia, de equilíbrio termodinâmico e de hidráulica do prato são as definidas por (4.1), (4.2), (4.3) e (4.4). O desenvolvimento do modelo reduzido será ilustrado tomando como base a secção de retificação. Será introduzida uma variável espacial  $s$ , contínua no intervalo  $s \in [0, M^R - 1]$ , e que assume valores inteiros em cada prato  $s_j = \{0, 1, \dots, M^R - 1\}$ , onde  $M^R$  é o número de pratos da secção, como ilustrado na Figura 4.4.

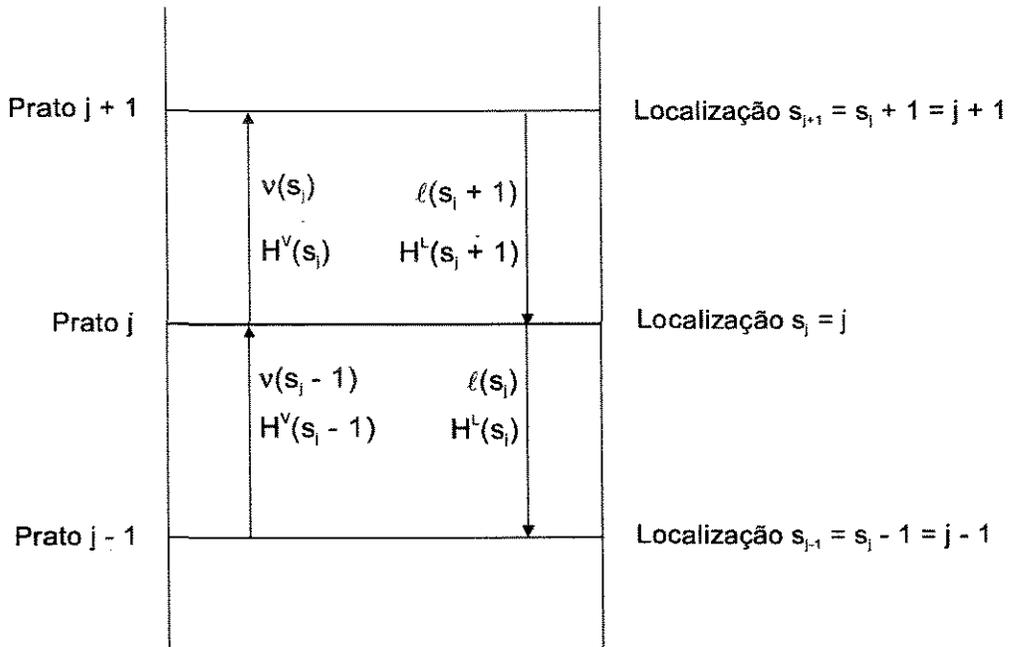


Figura 4.4 - Ilustração de parte da secção de retificação da coluna

Com isso as equações (4.1), (4.2), (4.3) e (4.4) podem ser reescritas para cada prato  $s_j$  da seguinte maneira:

$$\frac{d}{dt} \left( M(s=j) \frac{\ell_i(s=j)}{L(s=j)} \right) = \ell_i(s=j+1) - \ell_i(s=j) + v_i(s=j-1) - v_i(s=j) \quad (4.15)$$

$$\frac{d}{dt} \left( M(s=j) \frac{H^L(s=j)}{L(s=j)} \right) = H^L(s=j+1) - H^L(s=j) + H^V(s=j-1) - H^V(s=j) \quad (4.16)$$

$$v_i(s=j) = K_i(s=j) \ell_i(s=j) \frac{V(s=j)}{L(s=j)} \quad (4.17)$$

$$M(s=j) = \psi(L(s=j)) \quad (4.18)$$

Utilizando as definições de primeiras diferenças *forward* e *backward* tem-se que:

$$\Delta \ell_i(s=j) = \ell_i(s=j+1) - \ell_i(s=j) \quad (4.19)$$

$$\nabla v_i(s=j) = v_i(s=j) - v_i(s=j-1) \quad (4.20)$$

$$\Delta H^L(s=j) = H^L(s=j+1) - H^L(s=j) \quad (4.21)$$

$$\nabla H^V(s=j) = H^V(s=j) - H^V(s=j-1) \quad (4.22)$$

e as equações (4.15) e (4.16) podem ser escritas na seguinte forma de diferenças finitas:

$$\frac{d}{dt} \left( M(s=j) \frac{\ell_i(s=j)}{L(s=j)} \right) = \Delta \ell_i(s=j) - \nabla v_i(s=j) \quad (4.23)$$

$$\frac{d}{dt} \left( M(s=j) \frac{H^L(s=j)}{L(s=j)} \right) = \Delta H^L(s=j) - \nabla H^V(s=j) \quad (4.24)$$

As vazões molares dos componentes, bem como as entalpias de líquido e vapor na secção serão aproximadas por funções polinomiais da variável independente associada com a posição,  $s$ . Como foi visto no Capítulo 3, um polinômio de grau  $n$  que aproxima subotimamente estas funções pode ser construído através do Polinômio Interpolador de Lagrange usando os pares de valores  $(s_k, \ell_i(s_k)), (s_k, v_i(s_k)), (s_k, H^L(s_k)), (s_k, H^V(s_k)), k = 0, 1, \dots, n, s_k \in (0, M^R-1)$ , onde os  $s_k$  são as raízes do polinômio de Hahn  $h_{n+1}^{(0,0)}(x, M^R)$ .

Será utilizado na construção do polinômio interpolador um esquema de colocação ortogonal mista, pois além dos  $n$  pontos de colocação internos  $s_1, \dots, s_n$ , os pontos  $s_0 = 0$  e  $s_{n+1} = M^R-1$ , correspondentes aos pratos extremos da secção, serão também utilizados como pontos de colocação. A Figura 4.5 ilustra a localização dos pontos de colocação na secção de retificação. Assim as funções aproximação tomam a forma:

$$\ell_i(s) = \sum_{k=0}^{n+1} l_k(s) \ell_i(s_k) \quad (4.25)$$

$$v_i(s) = \sum_{k=0}^{n+1} l_k(s) v_i(s_k) \quad (4.26)$$

$$H^L(s) = \sum_{k=0}^{n+1} l_k(s) H^L(s_k) \quad (4.27)$$

$$H^V(s) = \sum_{k=0}^{n+1} l_k(s) H^V(s_k) \quad (4.28)$$

$$i = 1, \dots, NC$$

onde  $l_k(s)$  são os membros do Polinômio Interpolador de Lagrange.

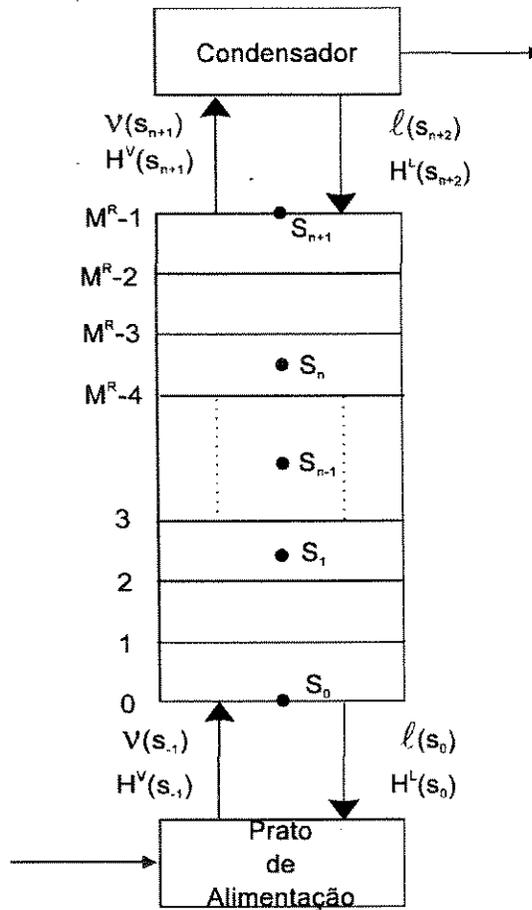


Figura 4.5 - Localização dos pontos de colocação na secção de retificação

Como foi visto no Capítulo 3, para uma função  $y(x)$  aproximada pelo Polinômio Interpolador de Lagrange:

$$y(x) \approx \sum_{k=0}^n l_k(x)y(x_k), \tag{4.29}$$

e a aproximação das diferenças dessa mesma função é dada por:

$$\Delta y(x) \approx \sum_{k=0}^n \Delta l_k(x)y(x_k) \tag{4.30}$$

Com isso as diferenças representadas pelas equações (4.19), (4.20), (4.21) e (4.22) podem ser aproximadas por:

$$\Delta \ell_i(s) = \sum_{k=0}^{n+1} \Delta I_k(s) \ell_i(s_k) \quad (4.31)$$

$$\nabla v_i(s) = \sum_{k=0}^{n+1} \nabla I_k(s) v_i(s_k) \quad (4.32)$$

$$\Delta H^L(s) = \sum_{k=0}^{n+1} \Delta I_k(s) H^L(s_k) \quad (4.33)$$

$$\nabla H^V = \sum_{k=0}^{n+1} \nabla I_k(s) H^V(s_k) \quad (4.34)$$

Substituindo-se as equações (4.25), (4.26), (4.27) e (4.28), juntamente com as (4.31), (4.32), (4.33) e (4.34) em (4.15), (4.16) e (4.17) e (4.18), obtém-se, para um ponto interno de colocação  $s_j$  da secção de retificação, as seguintes equações:

$$\frac{d}{dt} \left( M(s_j) \frac{\ell_i(s_j)}{L(s_j)} \right) = \sum_{k=0}^{n+1} \Delta I_k(s_j) \ell_i(s_k) - \sum_{k=0}^{n+1} \nabla I_k(s_j) v_i(s_k) \quad (4.35)$$

$$\frac{d}{dt} \left( M(s_j) \frac{H^L(s_j)}{L(s_j)} \right) = \sum_{k=0}^{n+1} \Delta I_k(s_j) H^L(s_k) - \sum_{k=0}^{n+1} \nabla I_k(s_j) H^V(s_k) \quad (4.36)$$

$$\ell_i(s_j) = K_i(s_j) v_i(s_j) \frac{L(s_j)}{V(s_j)} \quad (4.37)$$

$$M(s_j) = \psi(L(s_j)) \quad (4.38)$$

$$i = 1, \dots, NC$$

$$j = 1, \dots, n$$

onde :

$$L(s_j) = \sum_{i=1}^{NC} \ell_i(s_j) \quad (4.39)$$

$$V(s_j) = \sum_{i=1}^{NC} v_i(s_j) \quad (4.40)$$

**Nota** - Nas equações (4.35) a (4.40),  $s_j$  representa o ponto  $j$  de colocação ( $j = 0, 1, \dots, n+1$ ) e não a posição do prato  $j$ .

As equações (4.35) e (4.36) não são válidas nos pontos extremos da secção,  $s_0$  e  $s_{n+1}$ , pois como pode ser visto na Figura 4.5, os pontos  $s_{-1}$  e  $s_{n+2}$  não são pontos de interpolação da secção e portanto as diferenças *forward* e *backward* não podem ser calculadas para estes pontos. Em vez disso, os pontos  $s_{-1}$  e  $s_{n+2}$  serão considerados como estágios reais e as equações para estes serão as seguintes:

$$\frac{d}{dt} \left( M(s_0) \frac{\ell_i(s_0)}{L(s_0)} \right) = \sum_{k=0}^{n+1} \Delta I_k(s_0) \ell_i(s_k) + v_{i,f} - v_i(s_0) \quad (4.41)$$

$$\frac{d}{dt} \left( M(s_0) \frac{H^L(s_0)}{L(s_0)} \right) = \sum_{k=0}^{n+1} \Delta I_k(s_0) H^L(s_k) + H_f^V - H^V(s_0) \quad (4.42)$$

e

$$\frac{d}{dt} \left( M(s_{n+1}) \frac{\ell_i(s_{n+1})}{L(s_{n+1})} \right) = \ell_{i,c} - \ell_i(s_{n+1}) - \sum_{k=0}^{n+1} \nabla I_k(s_{n+1}) v_i(s_k) \quad (4.43)$$

$$\frac{d}{dt} \left( M(s_{n+1}) \frac{H^L(s_{n+1})}{L(s_{n+1})} \right) = H_c^L - H^L(s_{n+1}) - \sum_{k=0}^{n+1} \nabla I_k(s_{n+1}) H^V(s_k) \quad (4.44)$$

Para evitar as descontinuidades nos perfis de composição, o refeedor, o condensador e o prato de alimentação serão tratados como estágios de equilíbrio discretos, cada qual apresentando seus próprios balanços de massa e energia. As Figuras (4.6), (4.7) e (4.8) ilustram as formulações destes estágios.

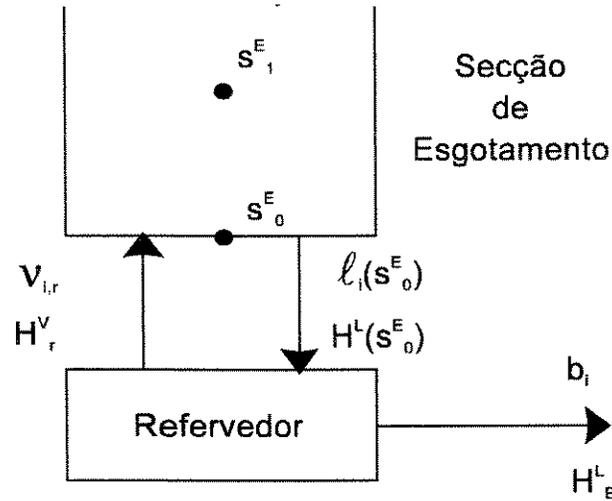


Figura 4.6-Formulação do refervedor no modelo reduzido

Refervedor:

$$\frac{d}{dt} \left( M_B \frac{b_i}{B} \right) = \ell_i(s_0^E) - b_i - v_{i,r} \quad (4.45)$$

$$\frac{d}{dt} \left( M_B \frac{H_B^L}{B} \right) = H^L(s_0^E) - H_B^L - H_r^V \quad (4.46)$$

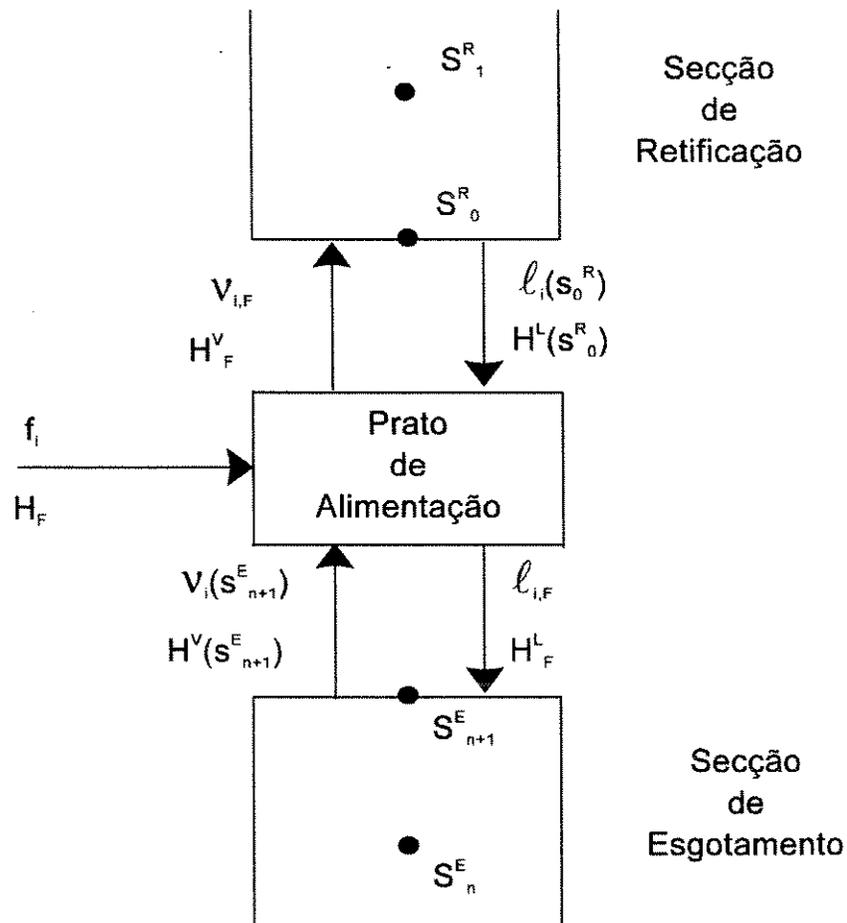


Figura 4.7-Formulação do prato de alimentação no modelo reduzido

Prato de Alimentação:

$$\frac{d}{dt} \left( M_F \frac{\ell_{i,F}}{L_F} \right) = \ell_i(s_0^R) + v_i(s_{n+1}^E) - \ell_{i,F} - v_{i,F} + f_i \quad (4.47)$$

$$\frac{d}{dt} \left( M_F \frac{H_F^L}{L_F} \right) = H^L(s_0^R) + H^V(s_{n+1}^E) - H_F^L - H_F^V + H_F \quad (4.48)$$

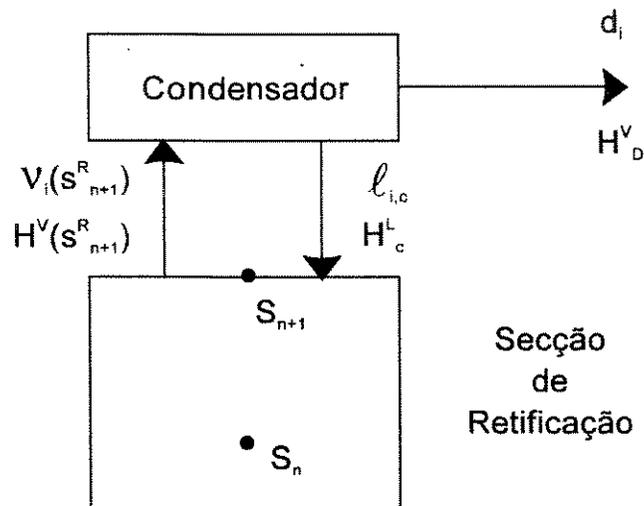


Figura 4.8-Formulação do condensador no modelo reduzido

Condensador:

$$\frac{d}{dt} \left( M_D \frac{d_i}{D} \right) = v_i(s_{n+1}^R) - l_{i,c} - d_i \quad (4.49)$$

$$\frac{d}{dt} \left( M_D \frac{H_D^L}{D} \right) = H^V(s_{n+1}^R) - H_c^L - H_D^V \quad (4.50)$$

Os índices *R* e *E* são usados para indicar as secções de retificação e esgotamento da coluna, respectivamente.

As equações do modelo reduzido para a secção de esgotamento da coluna poderão ser obtidas utilizando um procedimento análogo ao que foi usado para a de retificação.

### 4.3 Aplicação dos Modelos Reduzidos à Simulação de Colunas de Destilação

Para testar o desempenho dos modelos reduzidos desenvolvidos acima, alguns casos exemplo foram estudados, utilizando tanto a modelagem reduzida quanto a prato-a-prato, e os perfis no estado estacionário, bem como o comportamento dinâmico do sistema, foram comparados através de simulação computacional utilizando a linguagem FORTRAN. Os dois primeiros casos referem-se à simulação em regime estacionário e dinâmico, respectivamente, de colunas binárias e sem balanço de energia. No terceiro caso é estudada uma coluna mais complexa, com balanço de energia e um elevado número de pratos.

#### 4.3.1 Caso 1 - Simulação de Colunas Binárias Ideais em Regime Estacionário

A proposta do estudo deste caso simples é primeiramente verificar a capacidade do modelo reduzido de descrever com precisão os perfis de composição da coluna.

Será considerado um sistema binário com volatilidade relativa constante ao longo da coluna e pratos teóricos (100% de eficiência), isto é, o vapor saindo está em equilíbrio com o líquido que está no prato. Isto significa que uma relação de equilíbrio líquido-vapor simples pode ser usada:

$$y_j = \frac{\alpha x_j}{1 + (\alpha - 1)x_j}, \quad \text{onde } \alpha \text{ é a volatilidade relativa} \quad (4.51)$$

Outra consideração importante é que os calores molares de vaporização dos dois componentes são praticamente os mesmos, ou seja, quando um mol de vapor condensa, um mol de líquido vaporiza. As perdas de calor na coluna e as variações de temperatura de um prato para outro são consideradas desprezíveis. Estas considerações, conhecidas na literatura como *equimolar overflow*, implicam que as vazões de líquido e vapor ao longo de cada secção (esgotamento e retificação) da coluna sejam constantes e que não há necessidade de uma equação de balanço de energia para cada prato.

Serão utilizadas neste estudo três colunas propostas por Skogestad e Morari (1988), e cujas condições de operação são detalhadas na Tabela 4.1. A coluna A tem como característica principal ser de média pureza no topo e no fundo, a coluna C é de baixa pureza no topo e de alta pureza no fundo. Já a coluna G é de altíssima pureza tanto no topo quanto no fundo. Os pratos estão numerados de maneira que o refeedor é o prato 1 e o condensador o prato  $N$ .

**Tabela 4.1** - Especificações e condições operacionais das colunas A, C e G

Coluna	A	C	G
Número de Componentes	2	2	2
Número de Pratos	41	41	81
Prato de Alimentação	21	21	40
Vazão de Alimentação(Kmol/min)	1,0	1,0	1,0
Composição Molar da Alimentação	0,5	0,5	0,5
Condição da Alimentação	Líquido Saturado	Líquido Saturado	Líquido Saturado
Volatilidade Relativa	1,5	1,5	1,5
Composição Molar do Destilado	0,99	0,90	0,9999
Composição Molar do Fundo	0,01	0,002	0,0001
Vazão de Destilado (Kmol/min)	0,500	0,555	0,500
Vazão de Refluxo (Kmol/min)	2,706	2,737	2,635
Condensador	Total	Total	Total
Refrervedor	Equilíbrio	Equilíbrio	Equilíbrio

Nas simulações o número de pontos internos de colocação  $n$  em cada secção foi variado de dois a cinco, sendo utilizada a subrotina C05PBF da biblioteca NAG para a resolução do sistema de  $2(n + 2) + 3$  equações algébricas não-lineares, através do Método Híbrido de Powell (1970). A recomposição do perfil prato-a-prato será obtida através de Interpolação de Lagrange. Um diagrama de blocos simplificado do Programa é apresentado na Figura (4.9).

Tanto para a coluna A quanto para a C foi utilizado apenas um elemento por secção da coluna ( $NE = 1$ ). As Figuras (4.10.a,b,c) e as Tabelas (4.2) e (4.3) comparam os perfis de composição no estado estacionário do modelo reduzido com o prato-a-prato para a coluna A. A concordância entre os dois modelos é muito boa com  $n = 3$ , e com  $n = 5$  as duas curvas que representam os perfis praticamente se confundem, sendo o somatório do erro quadrático entre os dois perfis muito pequeno.

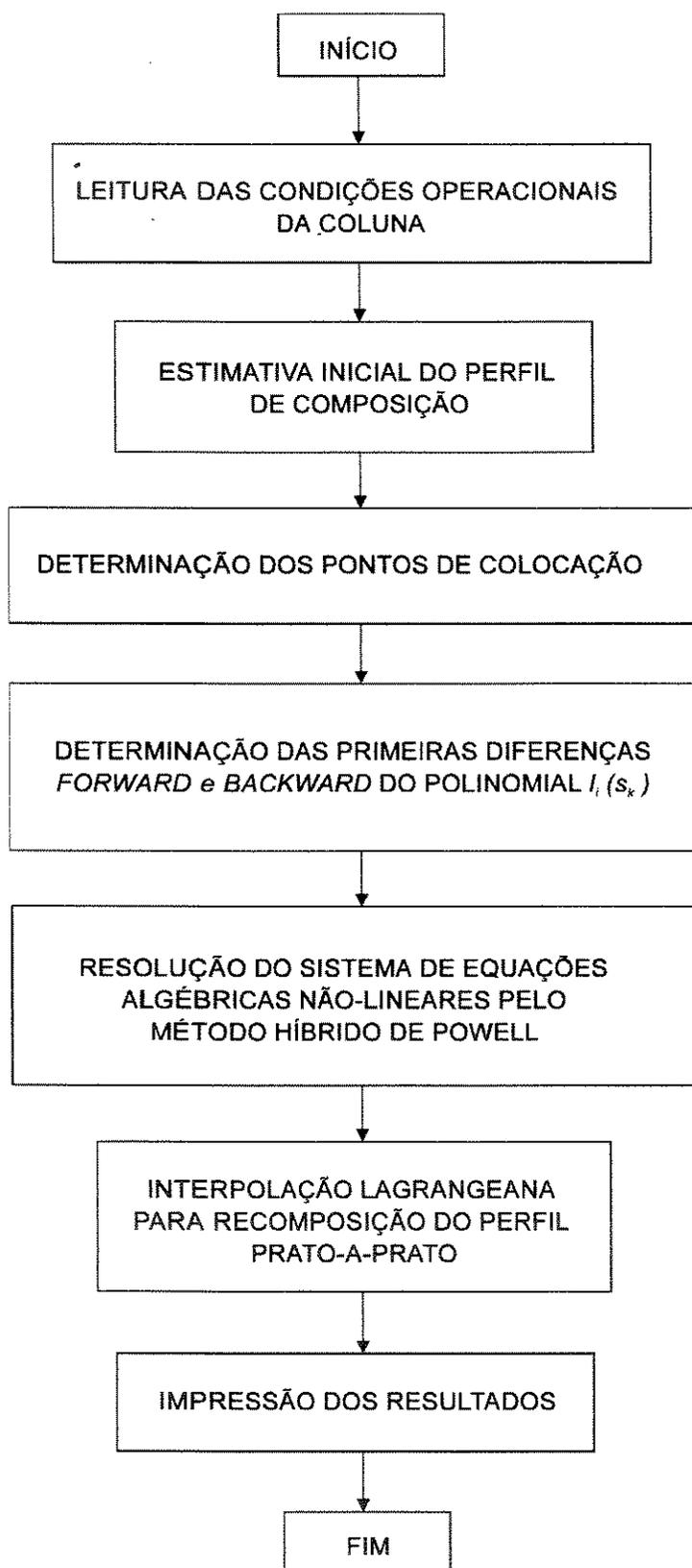


Figura 4.9 - Diagrama de blocos simplificado do programa de simulação em regime estacionário

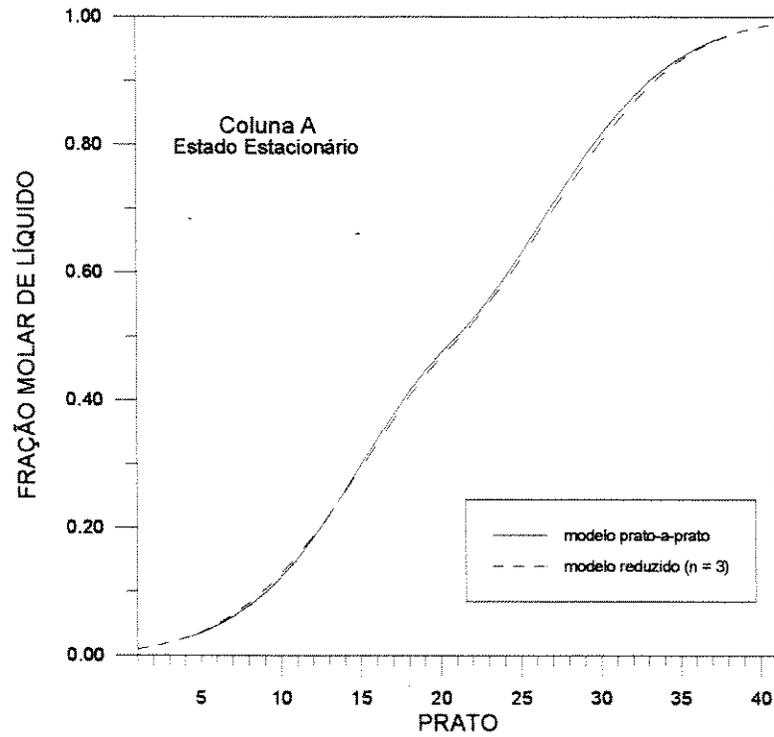


Figura 4.10.a - Comparação entre os perfis estacionários obtidos pelos modelos prato-a-prato e reduzido ( $n = 3$ ) para a coluna A

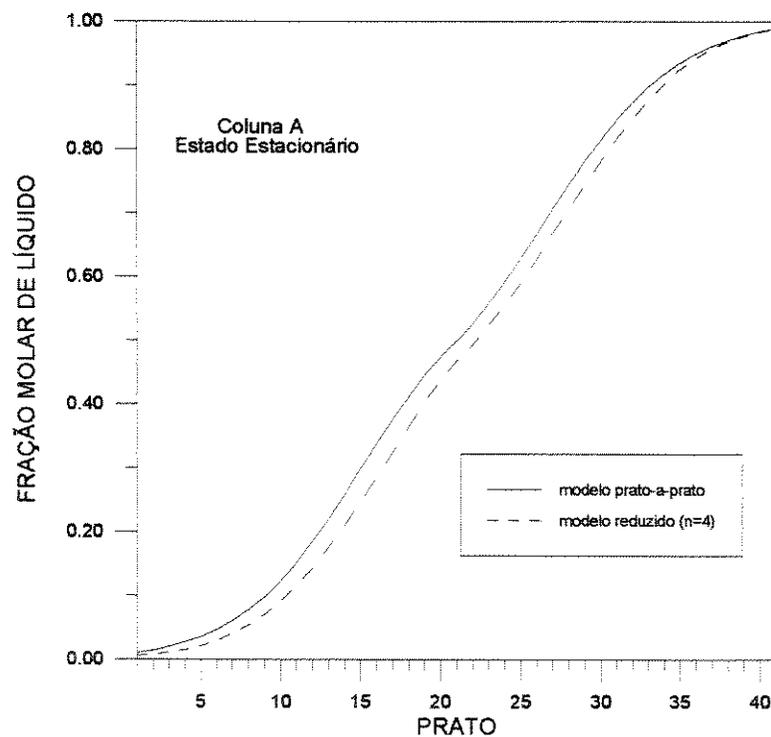


Figura 4.10.b - Comparação entre os perfis estacionários obtidos pelos modelos prato-a-prato e reduzido ( $n = 4$ ) para a coluna A

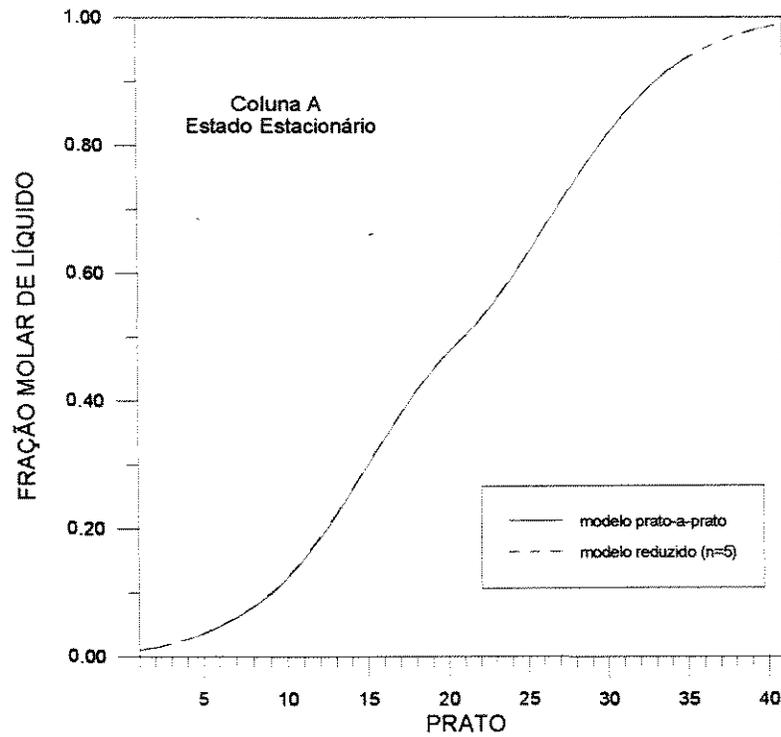


Figura 4.10.c - Comparação entre os perfis estacionários obtidos pelos modelos prato-a-prato e reduzido ( $n = 5$ ) para a coluna A

Tabela 4.2-Comparação entre os tempos de CPU para a coluna A

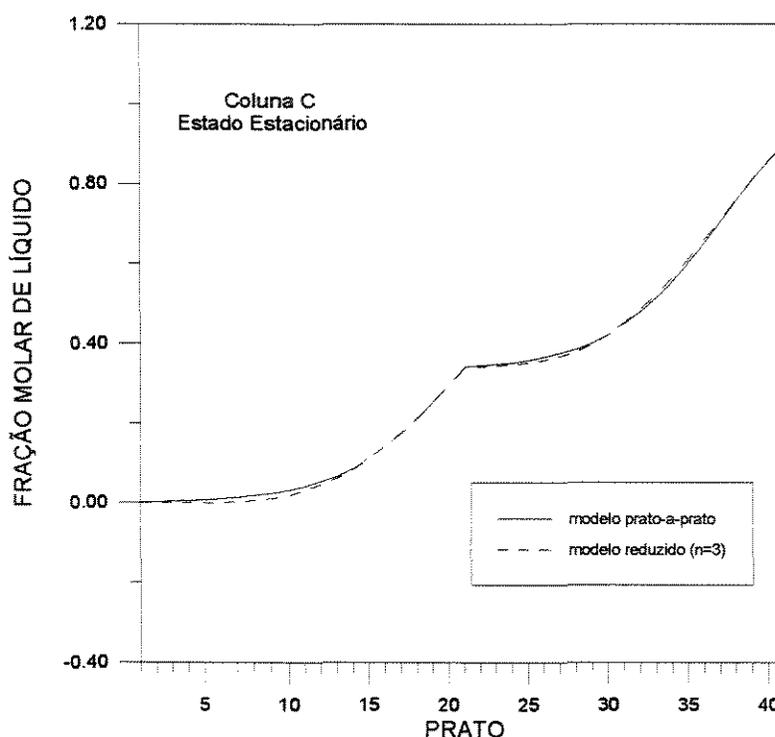
número de pontos internos de colocação ( $n$ )	Tempo de CPU (segundos)*	
	modelo prato-a-prato	modelo reduzido
3	0,44	0,05
4	0,44	0,05
5	0,44	0,1

\*PC 486 DX4 100MHz

**Tabela 4.3** - Comparação entre os erros e percentagem de redução de ordem para a coluna A

número de pontos internos de colocação ( $n$ )	somatório do erro quadrático entre os dois modelos	redução de ordem (%)
3	$1,5 \times 10^{-3}$	68
4	$4,0 \times 10^{-2}$	63
5	$1,2 \times 10^{-4}$	58

A concordância entre os perfis também é excelente para a coluna C, como pode ser visto nas Figuras (4.11.a,b,c) e na Tabela (4.3), sendo notável a capacidade do modelo reduzido em representar o *pinch* existente na alimentação.



**Figura 4.11.a** - Comparação entre os perfis estacionários obtidos pelos modelos prato-a-prato e reduzido ( $n = 3$ ) para a coluna C

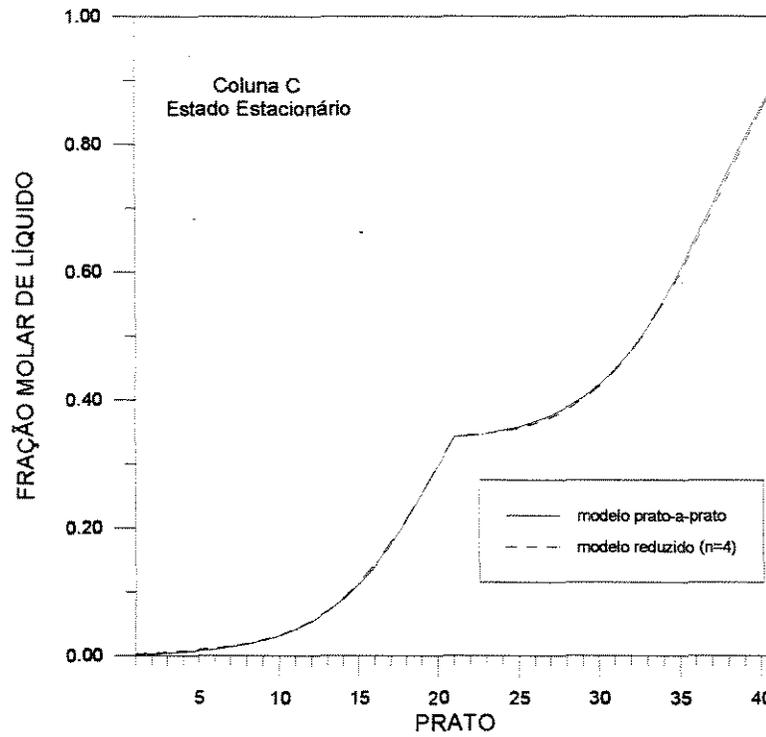


Figura 4.11b - Comparação entre os perfis estacionários obtidos pelos modelos prato-a-prato e reduzido ( $n = 4$ ) para a coluna C

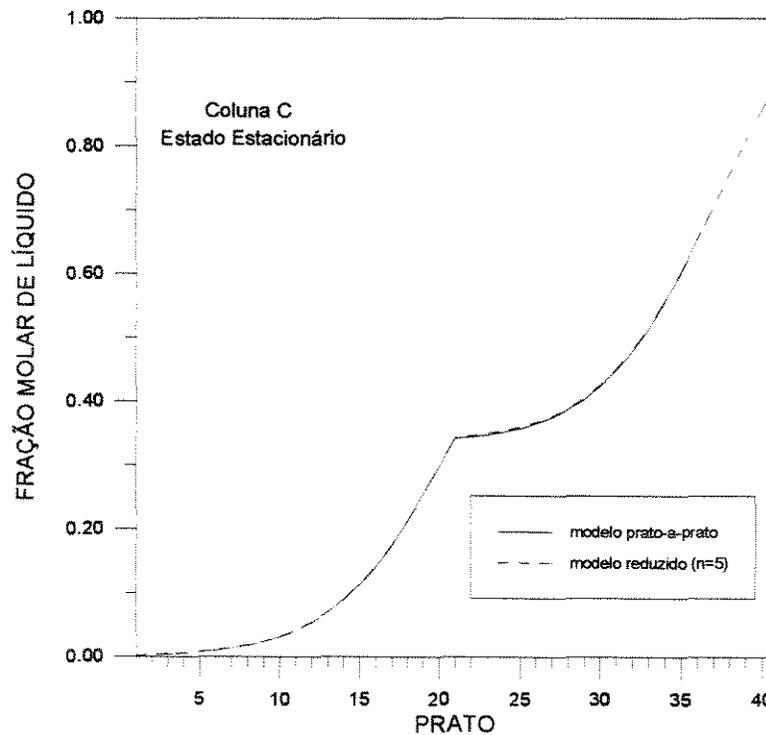


Figura 4.11.c - Comparação entre os perfis estacionários obtidos pelos modelos prato-a-prato e reduzido ( $n = 5$ ) para a coluna C

**Tabela 4.4** - Comparação entre os tempos de CPU para a coluna C

número de pontos internos de colocação ( $n$ )	Tempo de CPU (segundos)*	
	modelo prato-a-prato	modelo reduzido
3	0,49	0,05
4	0,49	0,05
5	0,49	0,05

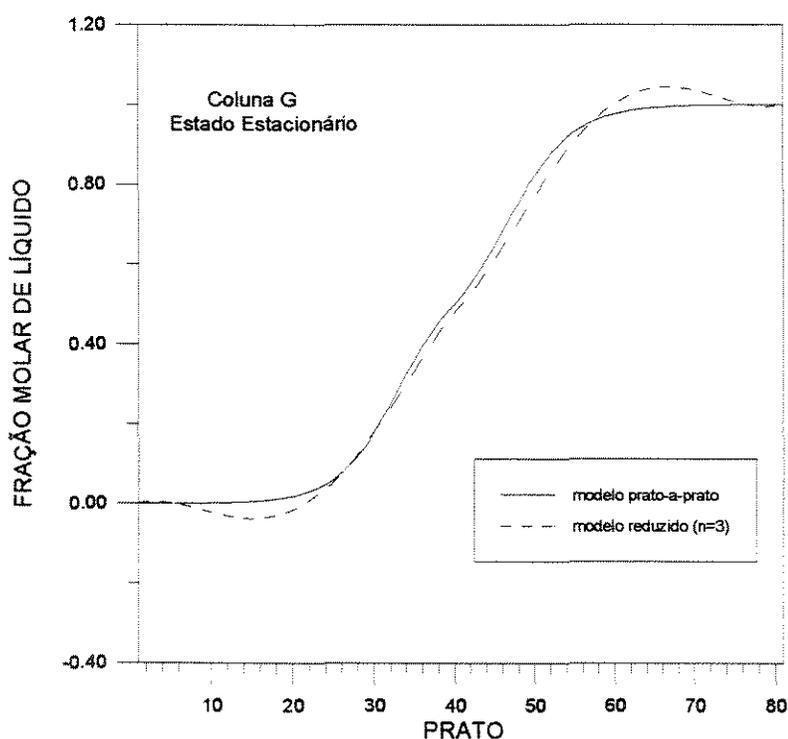
\*PC 486 DX4 100MHz

**Tabela 4.5**-Comparação entre os erros e percentagem de redução de ordem para a coluna C

número de pontos internos de colocação ( $n$ )	somatório do erro quadrático entre os dois modelos	redução de ordem (%)
3	$1,8 \times 10^{-3}$	68
4	$4,5 \times 10^{-4}$	63
5	$1,1 \times 10^{-4}$	58

Ao contrário das colunas A e C, para a coluna G o modelo reduzido não apresentou boa convergência quando foi utilizado como estimativa inicial um perfil linear de composição. A razão para isto é que o perfil de composição desta coluna apresenta regiões onde a variação de composição é bem pequena e outras onde a variação é bastante acentuada; com isso a discrepância entre o perfil linear da estimativa inicial e o perfil real da coluna é muito grande. Para tentar contornar este problema, uma nova estimativa inicial, baseada na solução do modelo prato-a-prato, foi feita. Com esta nova estimativa o modelo convergiu sem problemas, mas como pode ser visto nas Figuras (4.12a,b,c) os resultados não foram satisfatórios, com várias oscilações no perfil e composições menores que zero e maiores que um, principalmente nas regiões próximas aos extremos da coluna. A causa deste comportamento oscilatório é que como o perfil de composição em cada secção apresenta uma região plana seguida de uma

região íngreme, é impossível descrever este tipo de perfil com um único polinômio por secção. Para tentar solucionar isto cada secção da coluna foi dividida em dois elementos finitos, como ilustrado na Figura (4.13). Cada elemento foi dimensionado com um número de pratos igual a metade do número de pratos de sua secção, o primeiro elemento da secção de esgotamento engloba os pratos de número 2 a 20 e o segundo os de número 21 a 39. O primeiro elemento da secção de retificação engloba os pratos de número 41 a 60 e o segundo os de número 61 a 80.



**Figura 4.12.a** - Comparação entre os perfis estacionários da coluna G obtidos pelos modelos prato-a-prato e reduzido ( $NE = 1$  e  $n = 3$ )

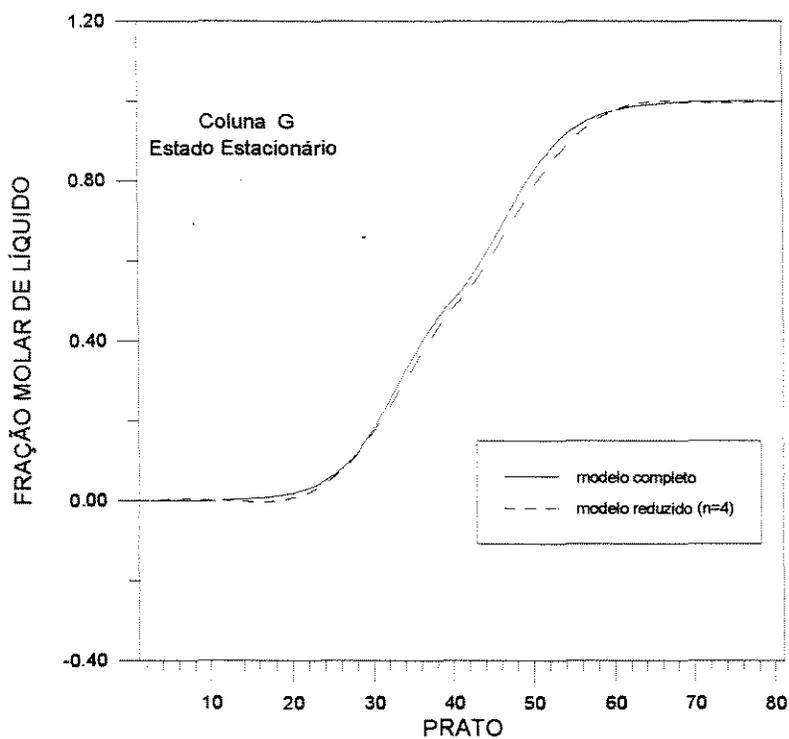


Figura 4.12.b - Comparação entre os perfis estacionários da coluna G obtidos pelos modelos prato-a-prato e reduzido (  $NE = 1$  e  $n = 4$  )

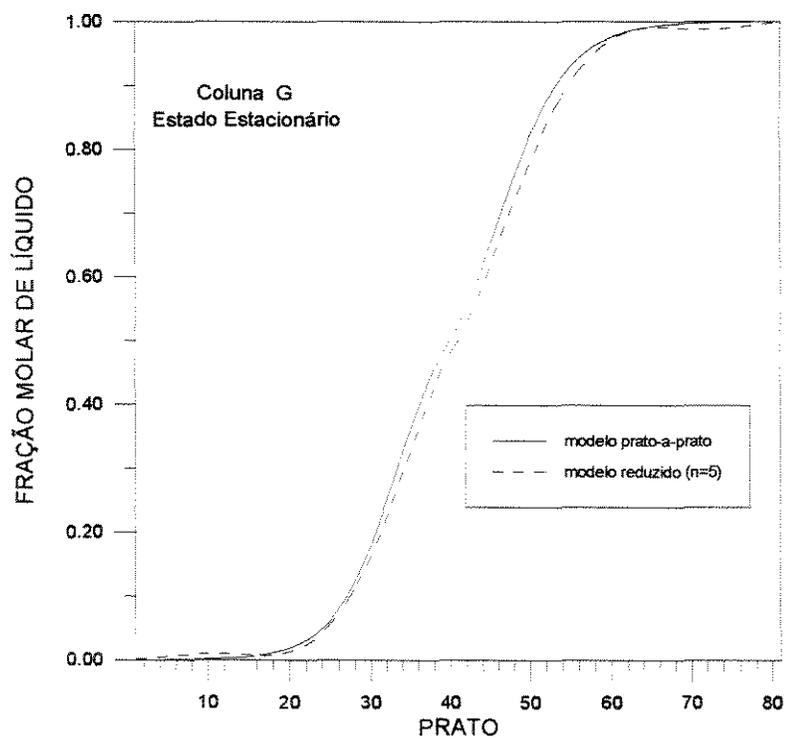
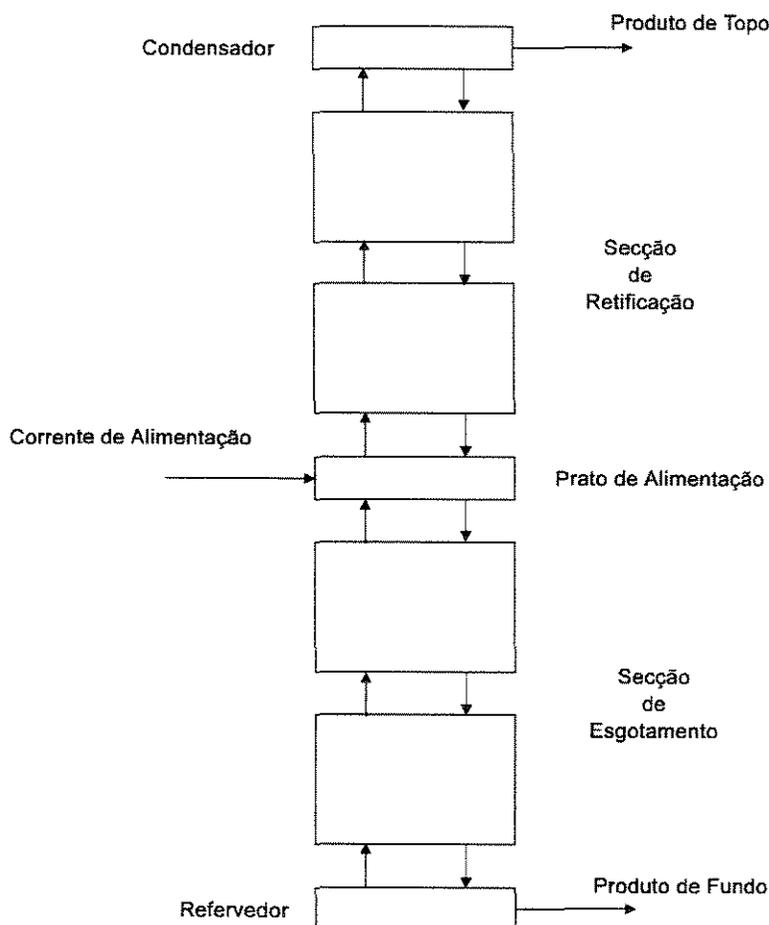


Figura 4.12.c - Comparação entre os perfis estacionários da coluna G obtidos pelos modelos prato-a-prato e reduzido (  $NE = 1$  e  $n = 5$  )



**Figura 4.13-**Formulação da coluna com dois elementos por secção (NE = 2)

As Figuras (4.14.a,b,c) e a Tabelas (4.6) e (4.7) comparam o perfil do modelo reduzido com dois elementos por secção com o perfil obtido pelo modelo prato-a-prato. A concordância entre os modelos com  $n = 5$  é excelente, mesmo utilizando como estimativa inicial um perfil linear de composição, com uma redução no número de equações na ordem de mais de 60% e com um tempo de CPU quase seis vezes menor.

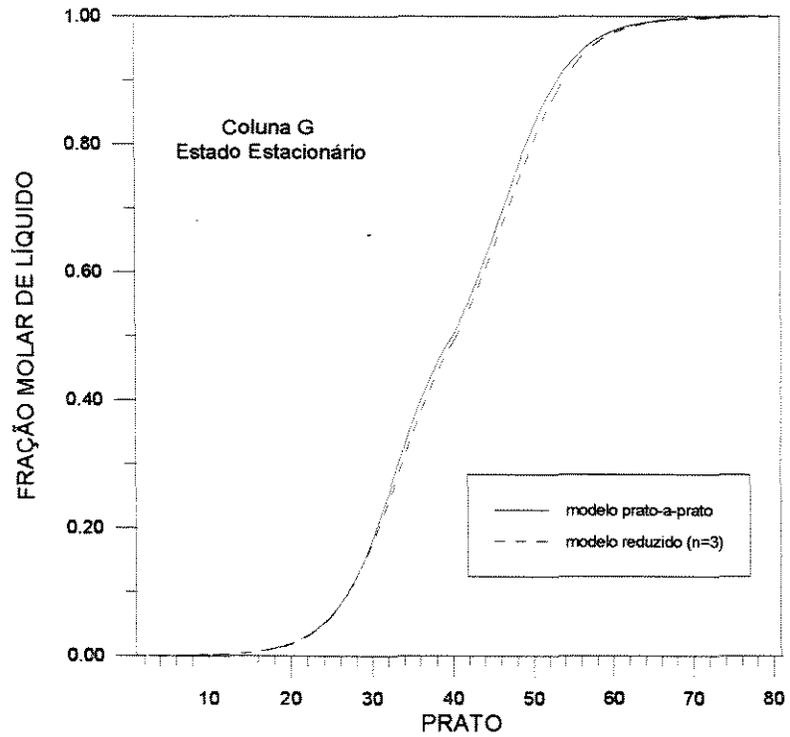


Figura 4.14.a - Comparação entre os perfis estacionários da coluna G obtidos pelos modelos prato-a-prato e reduzido (  $NE = 2$  e  $n = 3$  )

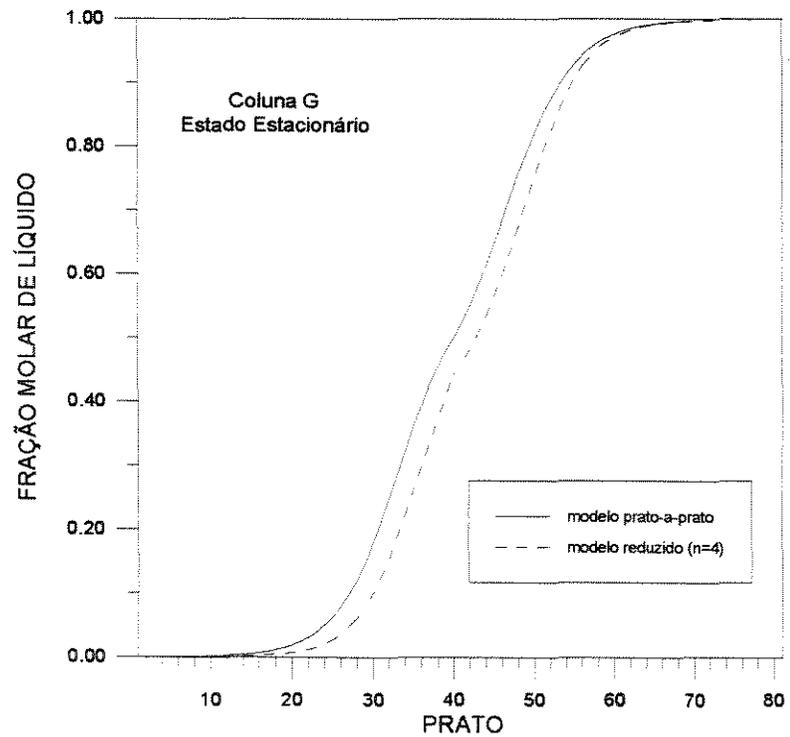
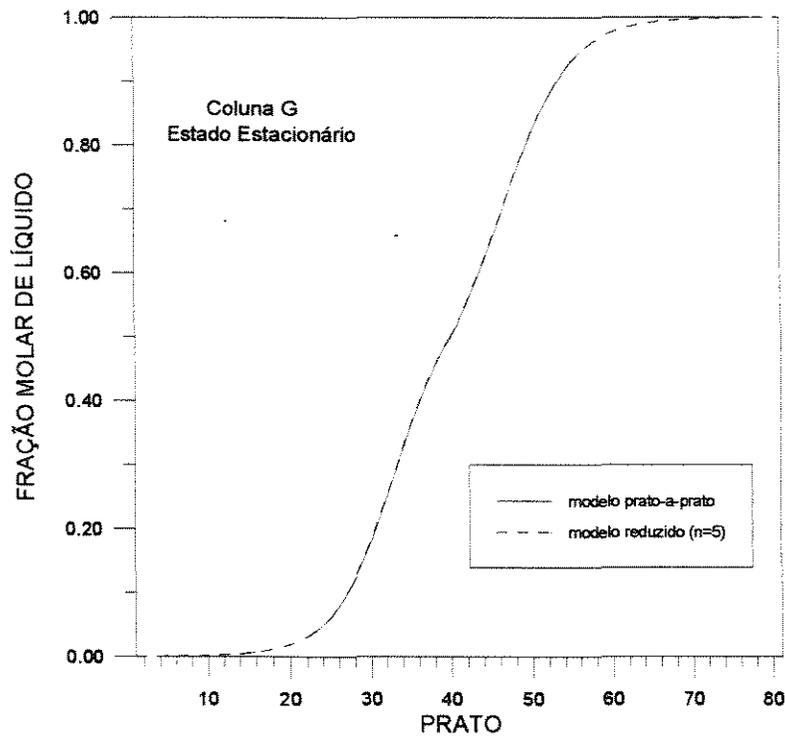


Figura 4.14.b - Comparação entre os perfis estacionários da coluna G obtidos pelos modelos prato-a-prato e reduzido (  $NE = 2$  e  $n = 4$  )



**Figura 4.14.c** - Comparação entre os perfis estacionários da coluna G obtidos pelos modelos prato-a-prato e reduzido ( NE = 2 e n = 5)

**Tabela 4.6**-Compração entre os tempos de CPU para a coluna G

número de pontos internos de colocação ( n )	Tempo de CPU (segundos)*	
	modelo prato-a-prato	modelo reduzido
3	1,59	0,55
4	1,59	0,82
5	1,59	0,27

\*PC 486 DX4 100MHz

**Tabela 4.7**-Comparação entre os erros e percentagem de redução de ordem para a coluna G

número de pontos internos de colocação ( n )	somatório do erro quadrático entre os dois modelos	redução de ordem ( % )
3	$8,1 \times 10^{-3}$	72
4	$1,6 \times 10^{-1}$	67
5	$3,4 \times 10^{-4}$	62

### 4.3.2 Caso 2 - Simulação de Colunas Binárias Ideais em Regime Transiente

A proposta do estudo deste caso é primeiramente verificar a capacidade do modelo reduzido em descrever as respostas dinâmicas do sistema quando submetido a perturbações. É analisado também a habilidade do modelo em descrever os atrasos de tempo decorrentes da hidráulica dos pratos.

Serão feitas as mesmas considerações simplificadoras do Caso 1. No entanto, as vazões de líquido não serão as mesmas, pois elas são função da hidráulica do prato. Será utilizada a seguinte expressão para relacionar o acúmulo de líquido no prato ( $M_j$ ) com a vazão de líquido que deixa o prato ( $L_j$ ):

$$L_j = L_{0j} + \frac{M_j - M_{0j}}{\tau}, \quad (4.52)$$

onde:

$L_j$ : Vazão de Líquido no prato  $j$  num instante  $t$

$L_{0j}$ : Vazão de Líquido no prato  $j$  no estado estacionário

$M_j$ : Acúmulo Molar de Líquido no prato  $j$  num instante  $t$

$M_{0j}$ : Acúmulo Molar de Líquido no prato  $j$  no estado estacionário

$\tau$ : Constante hidráulica do prato

Será assumido que todos os pratos são idênticos, com isso a constante hidráulica do prato pode ser calculada pela seguinte relação (Skogestad e Morari, 1988):

$$\tau = \frac{2M_{0j}M_I}{3M_jL} \quad (4.53)$$

onde :

$$\frac{M_{0j}}{M_j} \cong 0,5 \quad \text{e} \quad M_I = \sum_{j=1}^N M_j \quad (4.54)$$

Será desprezado o acúmulo de vapor, assim como o atraso de tempo na linha de vapor que vai do topo da coluna para o tambor de refluxo e da linha de refluxo que retorna ao último prato da coluna. Também não serão consideradas as dinâmicas do condensador e do refeedor, pois a resposta dinâmica destes é bem mais rápida que a da coluna em si, sendo considerado o controle perfeito do nível.

Serão utilizadas neste estudo as mesmas três colunas abordadas no Caso 1, cujas condições operacionais são detalhadas na Tabela (4.1). O acúmulo de líquido em cada prato no

estado estacionário será considerado  $M_{0i} = 0,5$  Kmol e o do refeedor e do condensador  $M_B = M_D = 0,5$  Kmol, para as três colunas.

Na simulação dinâmica, o número de elementos NE por secção e o número de pontos internos  $n$  por elemento para cada coluna foram determinados a partir da solução estacionária, ou seja, foram escolhidos os valores de NE e  $n$  que melhor aproximaram o perfil de concentração no estado estacionário. A Tabela (4.5) apresenta o valor destes parâmetros para cada coluna.

**Tabela 4.8**-Número de elementos por secção e de pontos de colocação por elemento para cada coluna

Coluna	NE	$n$
A	1	5
C	1	5
G	2	5

No procedimento de cálculo, a cada instante  $t$  são conhecidos todos os acúmulos de líquido  $M_j$  e todas as vazões molares de líquido  $\ell_j$ . Com isso o programa segue as seguintes etapas:

- 1)As vazões molares de vapor  $v$  em cada ponto de colocação  $j$  são calculadas pela relação de equilíbrio (4.51)
- 2)As vazões de líquido são calculadas pela equação (4.52)
- 3)As equações diferenciais são integradas no tempo e o passo 1 é repetido até o tempo final de integração  $t_f$ .

Como o sistema de equações diferenciais que compõe o modelo dinâmico da coluna apresenta uma característica rígida, foi utilizado o algoritmo de integração numérica implícita LSODES. O diagrama de blocos simplificado do programa está representado na Figura 4.15.

Para testar a capacidade do modelo reduzido de representar o comportamento dinâmico do sistema, foi aplicada primeiramente uma perturbação do tipo degrau na vazão de refluxo de cada uma das colunas estudadas e as respostas dinâmicas em malha aberta foram comparadas com as do modelo prato-a-prato. As Figuras (4.16.a,b), (4.17.a,b) e (4.18.a,b) comparam as respostas da concentração de líquido no fundo e no topo de cada coluna a um acréscimo de

0,1 Kmol/min na vazão de refluxo. A Tabela (4.6) compara os tempos de CPU requeridos para cada modelo.

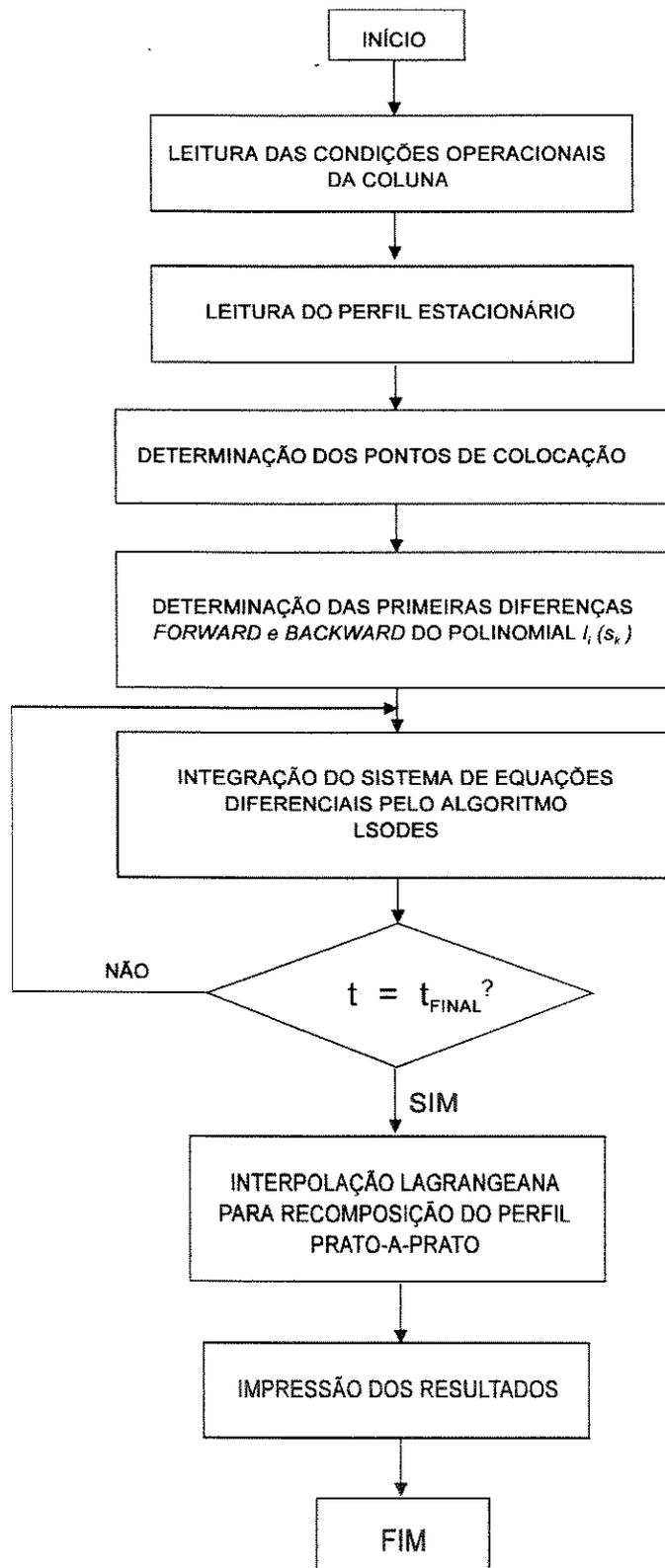
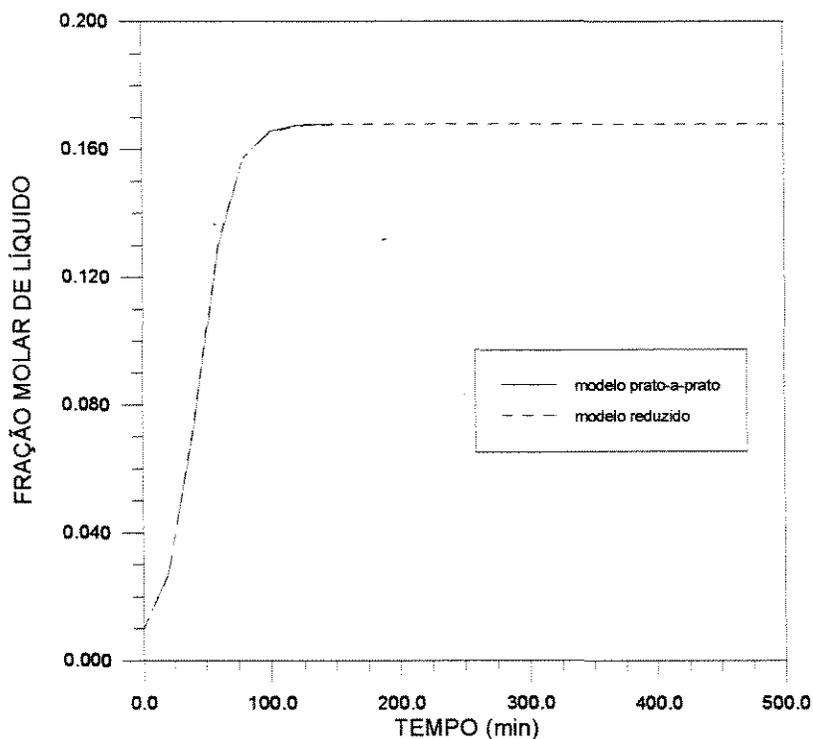
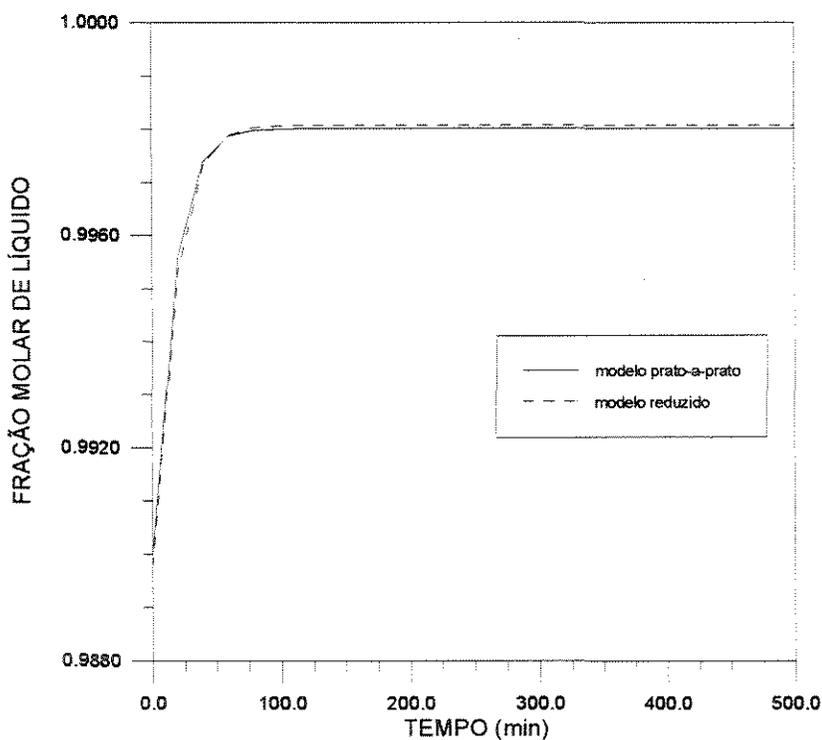


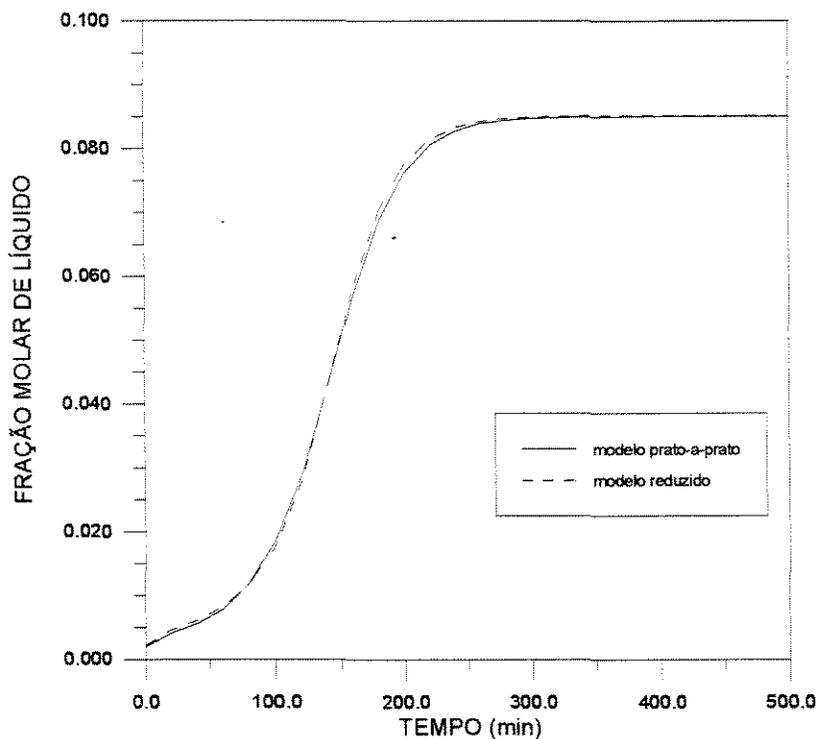
Figura 4.15-Diagrama de blocos simplificado do programa de simulação dinâmica



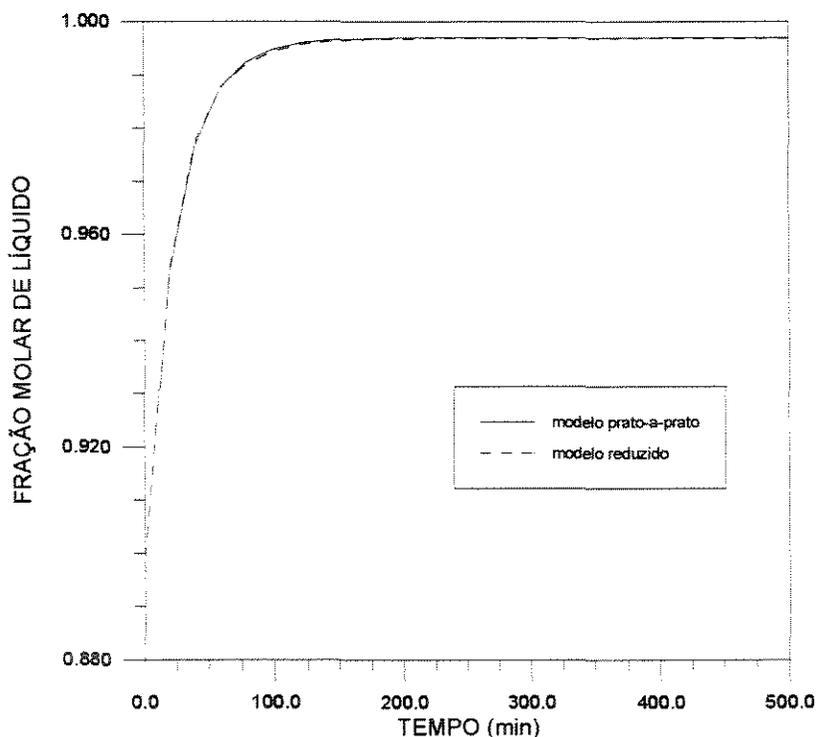
**Figura 4.16.a** - Resposta dinâmica da composição do produto de fundo da coluna A a uma perturbação de 0,1 Kmol/min na vazão de refluxo



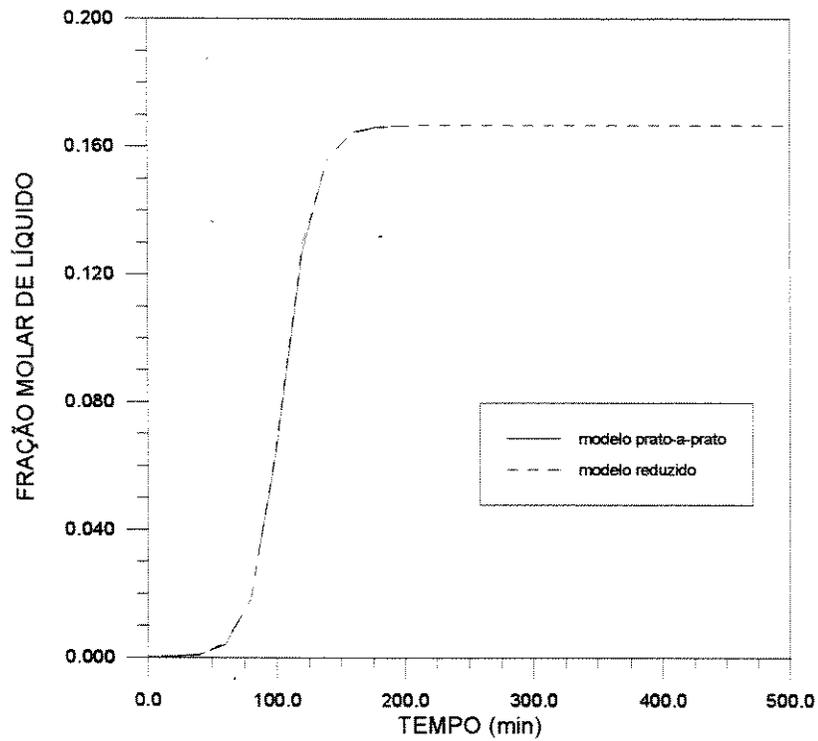
**Figura 4.16.b** - Resposta dinâmica da composição do destilado da coluna A a uma perturbação de 0.1 Kmol/min na vazão de refluxo



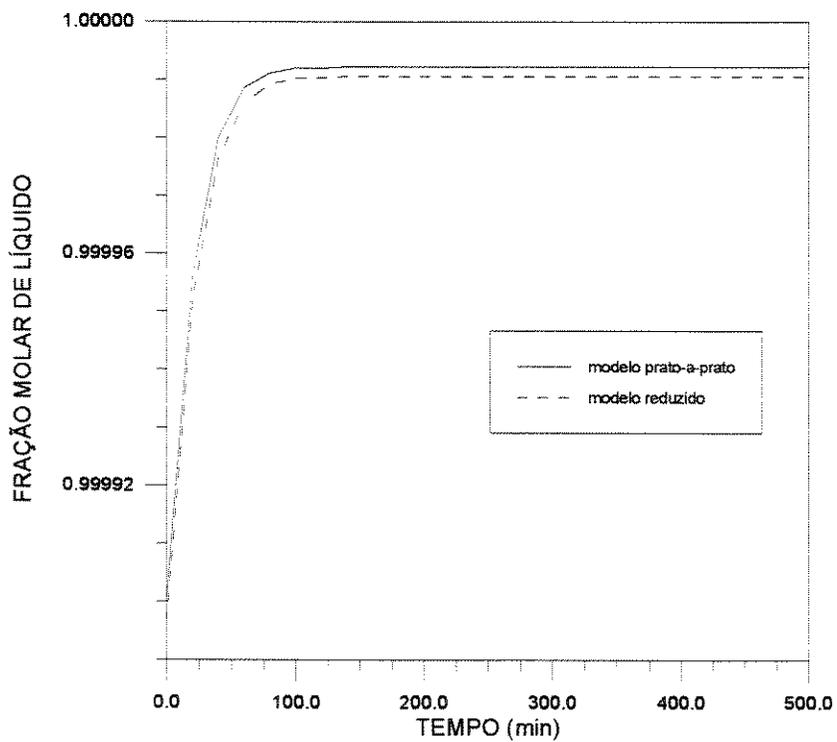
**Figura 4.17.a** - Resposta dinâmica da composição do produto de fundo da coluna C a uma perturbação de 0,1 Kmol/min na vazão de refluxo



**Figura 4.17.b** - Resposta dinâmica da composição do destilado da coluna C a uma perturbação de 0,1 Kmol/min na vazão de refluxo



**Figura 4.18.a** - Resposta dinâmica da composição do produto de fundo da coluna G a uma perturbação de 0,1 Kmol/min na vazão de refluxo



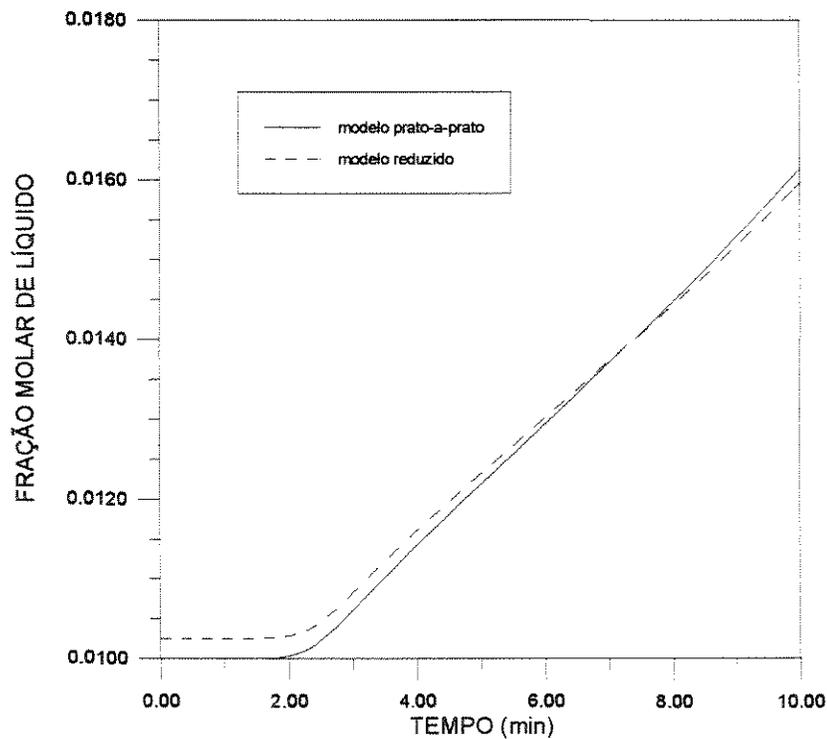
**Figura 4.18.b** - Resposta dinâmica da composição do destilado da coluna G a uma perturbação de 0,1 Kmol/min na vazão de refluxo

**Tabela 4.9**-Comparação entre os tempos de CPU

Coluna	Tempo de CPU (segundos)*	
	modelo prato-a-prato	modelo reduzido
A	1,3	0,5
C	1,8	0,6
G	4,4	1,2

\*SUN SPARCstation 20

Com a finalidade de analisar a capacidade do modelo reduzido em reproduzir o atrasos de tempo devido à hidrodinâmica dos pratos, foi estudada também a parte inicial da resposta em malha aberta. As Figuras (4.19.a,b,c) comparam as respostas da concentração de líquido no fundo de cada coluna a um acréscimo de 0,1 Kmol/min na vazão de refluxo. Percebe-se que o modelo reduzido consegue descrever com precisão os atrasos de tempo, sendo que as diferenças entre os dois perfis é exatamente o erro entre os dois modelos na simulação estacionária, cujo valor em termos de ordem de grandeza é desprezível.



**Figura 4.19.a** - Resposta dinâmica inicial da composição do produto de fundo da coluna A a uma perturbação de 0,1 Kmol/min na vazão de refluxo

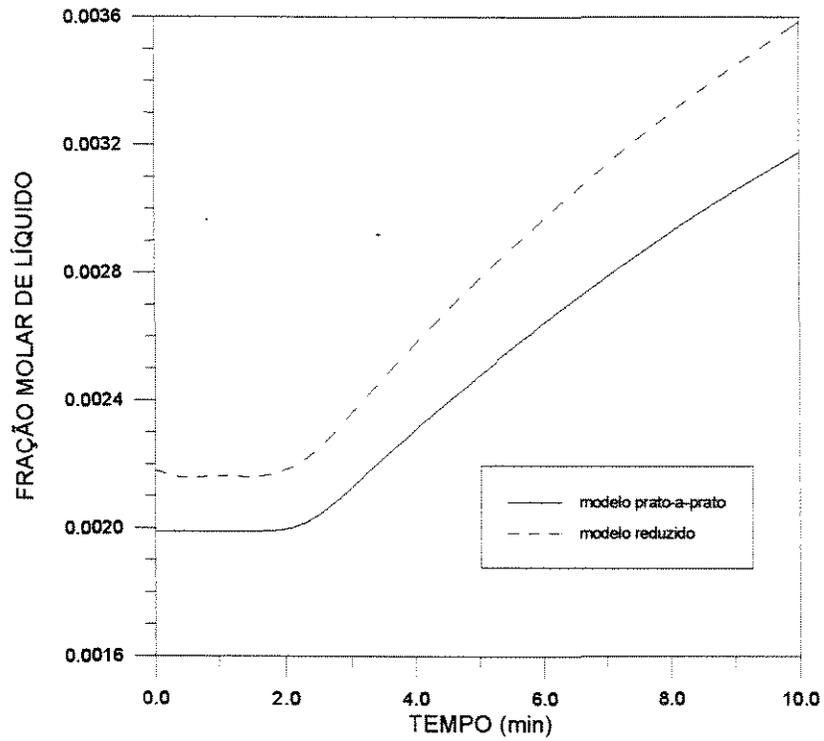


Figura 4.19.b - Resposta dinâmica inicial da composição do produto de fundo da coluna C a uma perturbação de 0,1 Kmol/min na vazão de refluxo

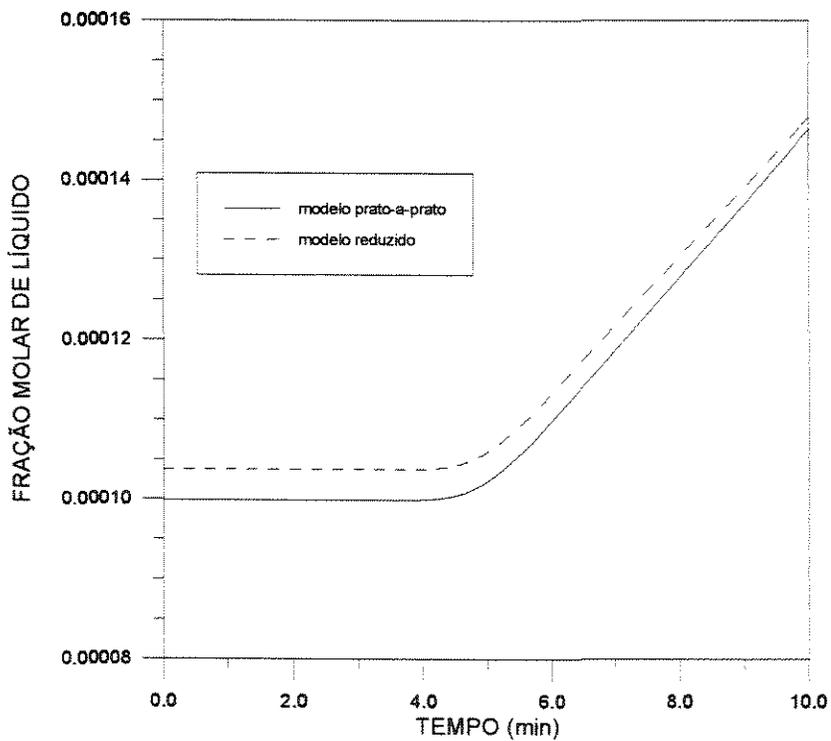
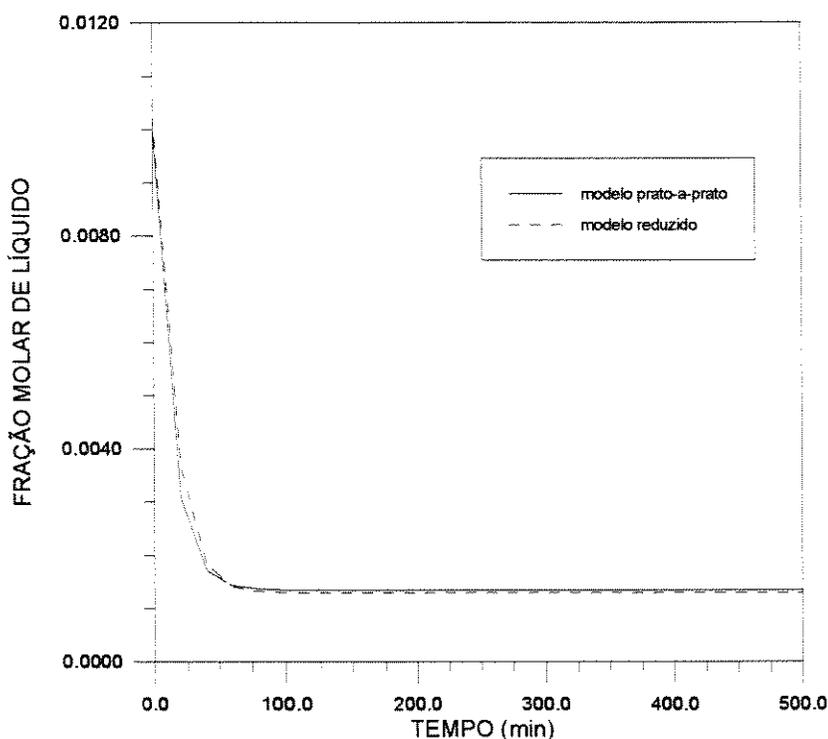


Figura 4.19.c-Resposta dinâmica inicial da composição do produto de fundo da coluna G a uma perturbação de 0,1 Kmol/min na vazão de refluxo

Por fim, foram comparadas as respostas dinâmicas dos dois modelos quando submetidos a uma perturbação do tipo degrau na vazão de vapor que sai do refeedor. As Figuras (4.20.a,b), (4.21.a,b) e (4.22.a,b) comparam as respostas da concentração de líquido no fundo e no topo de cada coluna a um acréscimo de 0,1 Kmol/min na vazão de vapor. A Tabela (4.10) compara os tempos de CPU consumidos para cada modelo. Novamente foi observada uma grande concordância entre os modelos, tanto na resposta dinâmica quanto no novo estado estacionário.



**Figura 4.20.a** - Resposta dinâmica da composição do produto de fundo da coluna A a uma perturbação de 0,1 Kmol/min na vazão de vapor

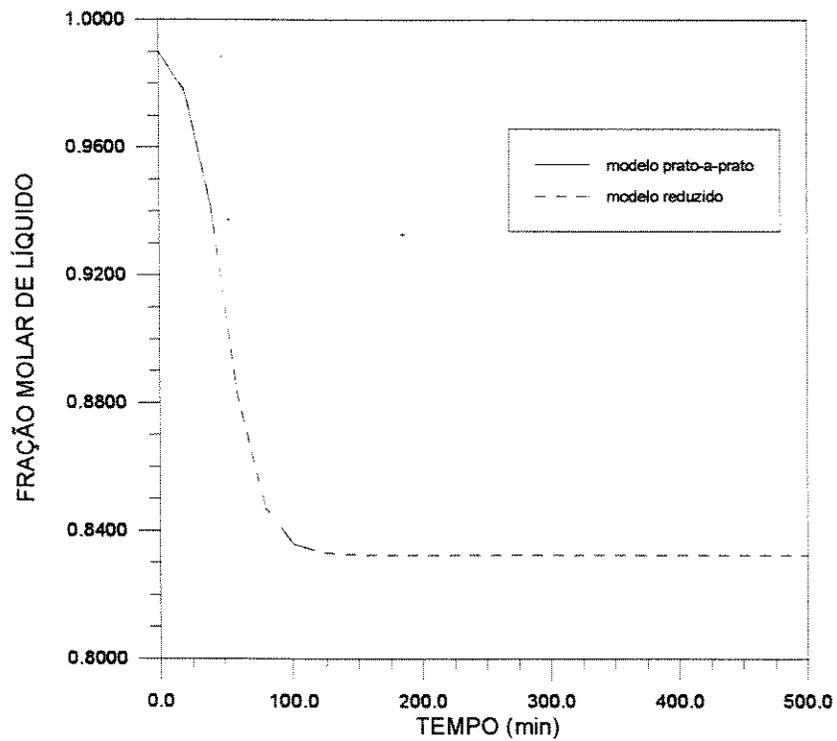


Figura 4.20.b - Resposta dinâmica da composição do destilado da coluna A a uma perturbação de 0,1 Kmol/min na vazão de vapor

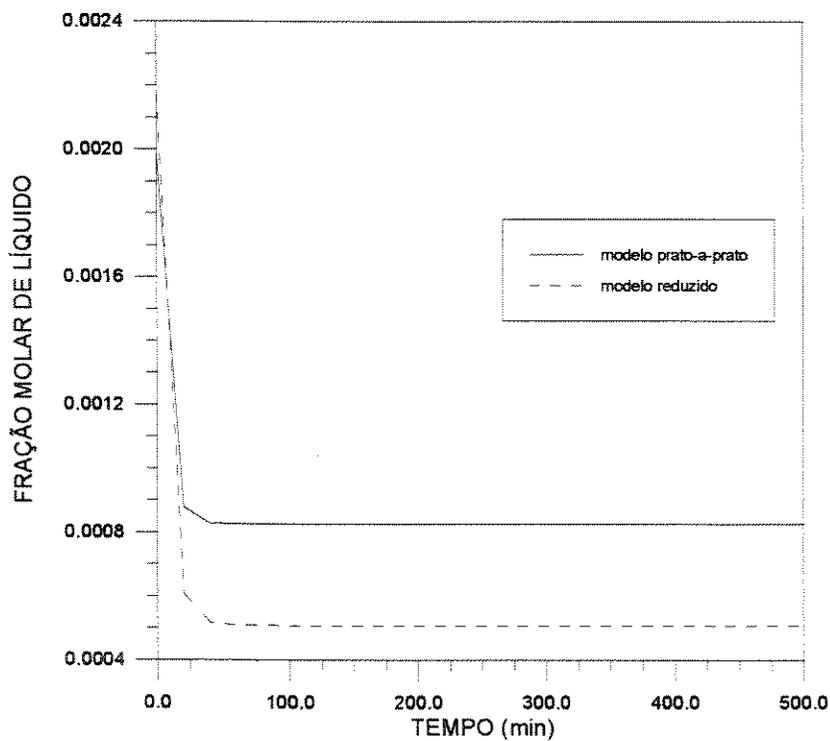
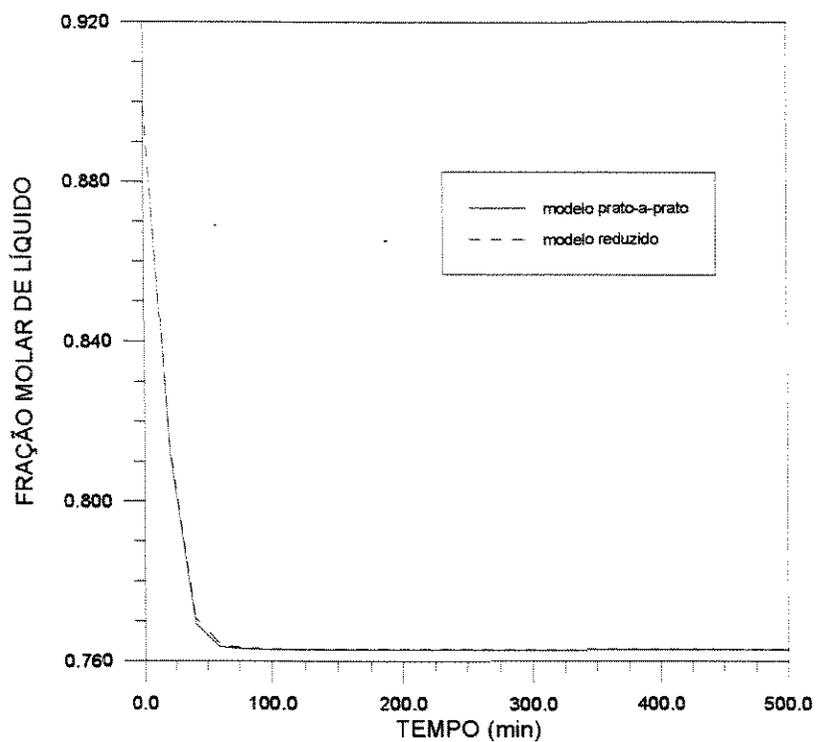
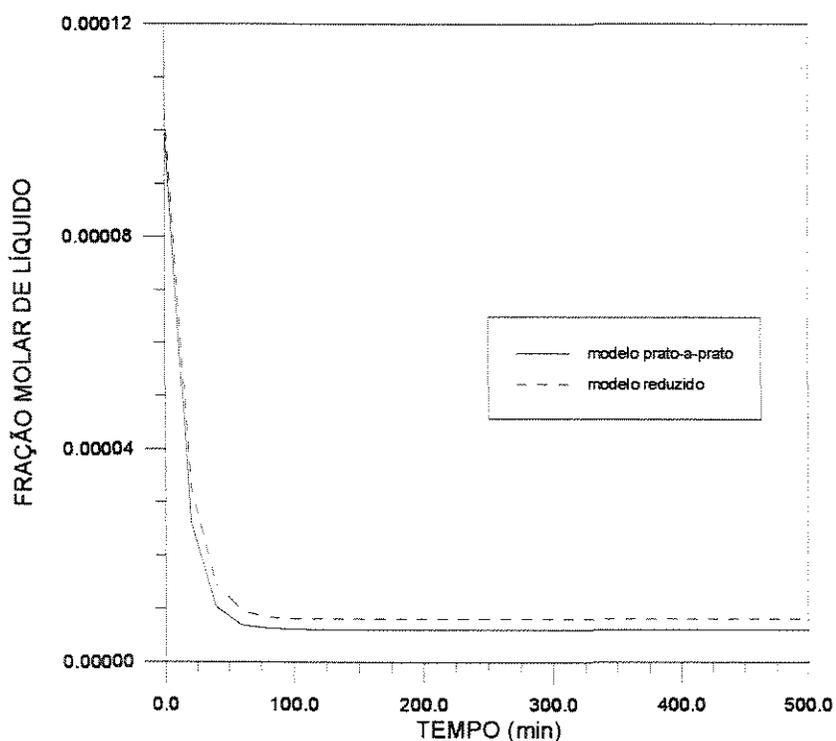


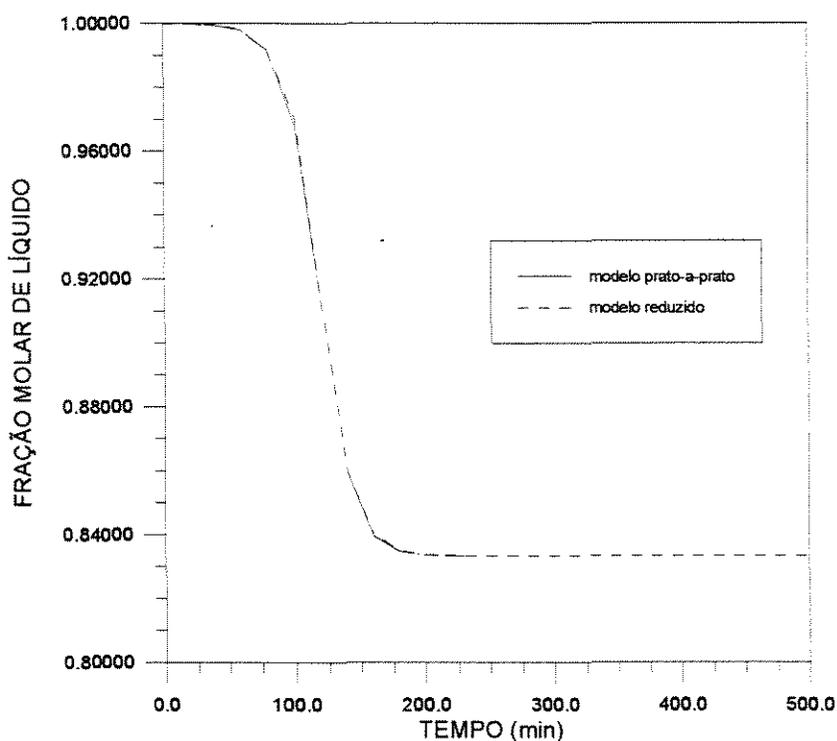
Figura 4.21.a - Resposta dinâmica da composição do produto de fundo da coluna C a uma perturbação de 0,1 Kmol/min na vazão de vapor



**Figura 4.21.b**-Resposta dinâmica da composição do destilado da coluna C a uma perturbação de 0,1 Kmol/min na vazão de vapor



**Figura 4.22.a** - Resposta dinâmica da composição do produto de fundo da coluna G a uma perturbação de 0,1 Kmol/min na vazão de vapor



**Figura 4.22.b** - Resposta dinâmica da composição do destilado da coluna G a uma perturbação de 0,1 Kmol/min na vazão de vapor

**Tabela 4.10**-Comparação entre os tempos de CPU

Coluna	Tempo de CPU (segundos)*	
	modelo prato-a-prato	modelo reduzido
A	1,1	0,4
C	0,8	0,4
G	3,0	0,9

\*SUN SPARCstation 20

### 4.3.3 Caso 3 - Simulação de uma coluna depropenizadora em regime estacionário

No caso 1 foi testada a eficiência do modelo reduzido em descrever com precisão os perfis de composição de colunas de destilação binária, com volatilidade relativa e vazões molares constantes. Neste caso o estudo será estendido a uma coluna mais real, onde o balanço de energia não pode ser desprezado e que apresenta uma relação de equilíbrio-líquido vapor mais complexa, e será analisada a capacidade do modelo em representar os perfis de composição e temperatura da coluna.

A coluna utilizada no estudo será um separador de propeno-propano descrito por Seferlis e Hrymak (1994). Este tipo de coluna caracteriza-se pelo elevado número de estágios, devido a baixa volatilidade relativa entre os dois componentes, e por elevadas razões de refluxo. As especificações e condições operacionais são apresentadas na Tabela (4.11).

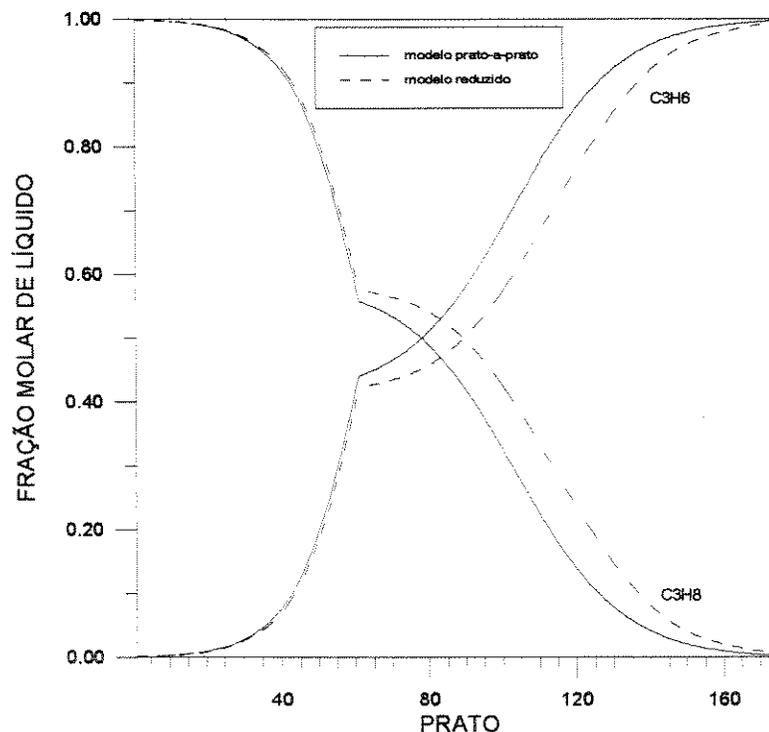
**Tabela 4.11**-Especificações do separador de propeno-propano

Número de pratos	175
Prato de alimentação	61
Composição da alimentação	propeno: 0,8973 propano: 0,1027
Vazão de alimentação (Mmol/d)	1,0734
Temperatura da alimentação (°C)	46,11
Pressão de operação (kPa)	1860,60
Razão de refluxo	19,7
Vazão de destilado (Mmol/d)	0,965
Tipo de refeedor	equilíbrio
Tipo de condensador	equilíbrio

Por tratar-se de uma mistura de hidrocarbonetos foi escolhido o modelo termodinâmico Peng-Robinson para representar o equilíbrio líquido-vapor, sendo utilizado o pacote de propriedades termodinâmicas desenvolvido por Zemp (1995).

A exemplo do caso 1 foram utilizados perfis lineares de composição, vazão e temperatura como estimativas iniciais e o sistema de equações não-lineares foi resolvido pelo método Híbrido de Powell (1960), com uma tolerância igual à raiz quadrada da precisão da máquina. Como modelo prato-a-prato foi utilizado o código desenvolvido por Fredeslund *et al* (1977), que utiliza o método de Naphtali e Sandholm (1971), com a substituição do modelo termodinâmico de UNIQUAC para Peng-Robinson.

Na simulação com o modelo reduzido foi utilizado apenas um elemento por secção e o número de pontos internos de colocação em cada elemento foi variado de três a oito. A melhor concordância entre os dois modelos foi obtida quando foram utilizados seis pontos internos na secção de esgotamento. As Figuras (4.23.a,b,c) comparam os perfis obtidos com o modelo prato-a-prato e os obtidos pelo modelo reduzido com seis pontos internos na secção de esgotamento e seis, sete e oito, respectivamente, para a secção de retificação. A concordância entre os dois modelos é muito boa quando são utilizados seis pontos na secção de esgotamento e oito na de retificação, como pode ser observado na Figuras 4.23c e 4.24 . A Tabela 4.12 compara o número de equações dos dois modelos e o tempo de CPU requerido por cada um.



**Figura 4.23.a** - Comparação entre os perfis obtidos pela solução prato-a-prato e o modelo reduzido com  $n=6$  na secção de esgotamento e  $n = 6$  na de retificação

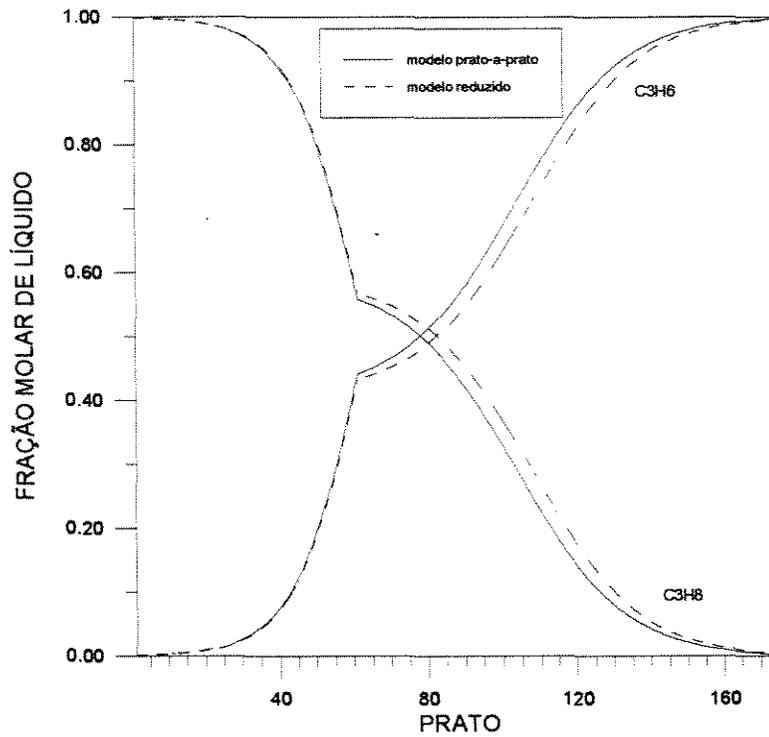


Figura 4.23.b - Comparação entre os perfis obtidos pelos solução prato-a-prato e o modelo reduzido com  $n=6$  na secção de esgotamento e  $n = 7$  na de retificação

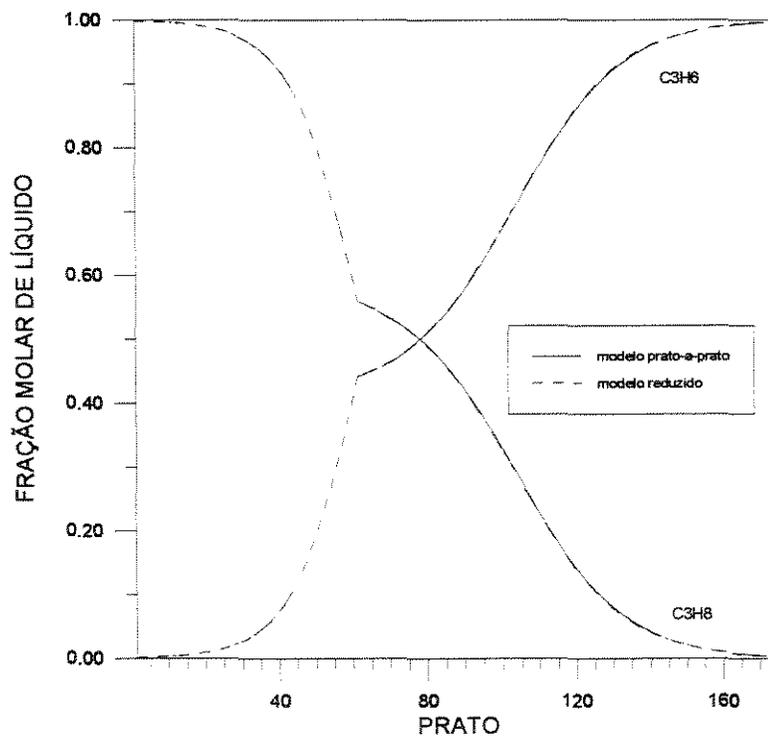
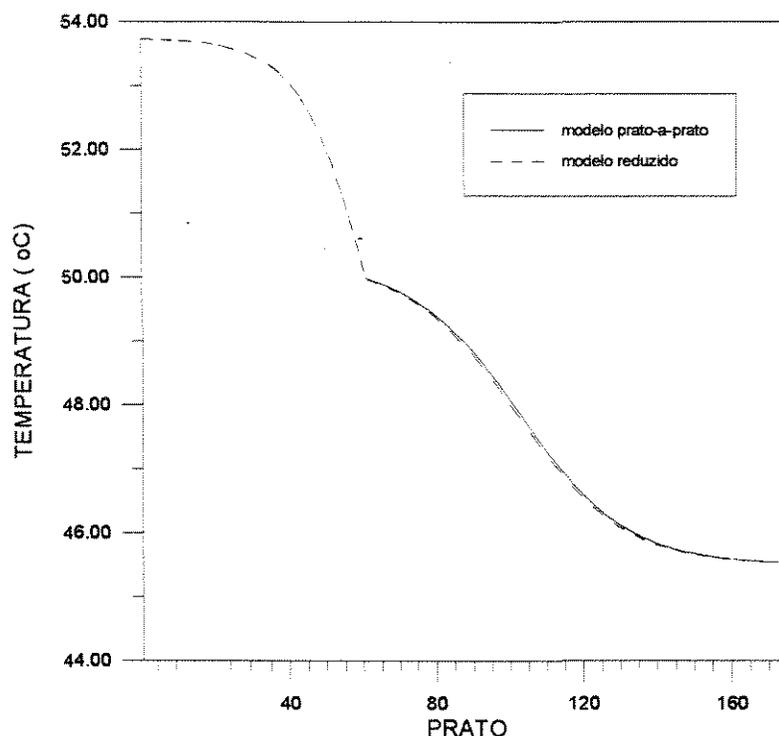


Figura 4.23.c - Comparação entre os perfis obtidos pelos solução prato-a-prato e o modelo reduzido com  $n=6$  na secção de esgotamento e  $n = 8$  na de retificação



**Figura 4.24** - Comparação entre os perfis de temperatura obtidos pela solução prato-a-prato e o modelo reduzido com  $n=6$  na secção de esgotamento e  $n = 8$  na de retificação

**Tabela 4.12**-Comparação entre os tempos de CPU e o número de equações requeridos pelo modelo prato-a-prato e pelo modelo reduzido ( $n_e = 6$  e  $n_r = 8$ ) na simulação estacionária do separador de  $C_3$

modelagem	número de equações do modelo	Tempo de CPU (segundos)*
prato-a-prato	875	133,7
reduzida	105	87,4

\*PC 486 DX2 66 Mhz

## **CAPÍTULO 5**

### **CONCLUSÕES E SUGESTÕES**

## 5. Conclusões e Sugestões

### 5.1 Conclusões

O objetivo básico do presente trabalho foi a construção de modelos reduzidos para sistemas de separação por estágios. Para tal foi desenvolvida, a partir da teoria dos polinômios ortogonais discretos, uma metodologia de redução de ordem que unificou em torno de um tratamento matemático semelhante a aplicação do método da colocação tanto para a solução de equações diferenciais quanto para equações às diferenças.

Os modelos reduzidos para colunas de destilação obtidos a partir da aplicação desta metodologia, além de preservarem a natureza discreta das equações dos modelos prato-a-prato, apresentam um equacionamento mais simples e mais compacto que os demais modelos de ordem reduzida encontrados na literatura.

Os resultados das simulações demonstram uma concordância muito boa, tanto em regime estacionário quanto dinâmico, entre a modelagem reduzida e a prato-a-prato, sendo notável a capacidade dos modelos reduzidos em representar os atrasos de tempo devido à hidrodinâmica dos pratos.

A redução no número de equações foi bastante considerável, principalmente nas colunas com grande número de estágios, como por exemplo a coluna G e o separador de C3, onde foram obtidas reduções na ordem do sistema de 62% e 88%, respectivamente.

Quanto a questão do tempo computacional, os modelos reduzidos obtiveram uma redução de até 90% no estado estacionário e 72% no regime dinâmico em relação ao modelo prato-a-prato, o que viabiliza a sua aplicação em problemas que envolvam otimização e controle de processos.

A divisão de cada secção da coluna em elementos finitos mostrou-se bastante adequada para representar o comportamento de colunas onde os perfis de concentração apresentam regiões onde a variação de composição é bem pequena e outras regiões onde a variação é bastante acentuada, como é o caso da coluna G.

Uma das dificuldades encontradas na utilização, não só dos modelos reduzidos desenvolvidos neste trabalho, mas em geral de todos os modelos reduzidos que são baseados no método da colocação ortogonal, é a ausência de uma regra geral para determinação do número de pontos de colocação ideal para a obtenção da melhor aproximação dos perfis da

coluna, sendo que na maioria das vezes este número de pontos é obtido por métodos de tentativa e erro.

Não há vantagem na utilização dos modelos reduzidos para colunas com menos de 20 pratos, pois como a própria estrutura do modelo de ordem reduzida requer que sejam utilizados  $(n + 2)$  pontos de colocação por elemento mais as equações do refeedor, do prato de alimentação e do condensador, a redução no número de equações e no tempo computacional para estas colunas é mínima, sendo preferível a utilização dos modelos prato-a-prato.

## **5.2 Sugestões para Trabalhos Futuros**

- Estender o estudo feito neste trabalho para colunas de destilação multicomponente.
- Desenvolver uma metodologia que determine o menor número de elementos finitos e de pontos de colocação no modelo reduzido que resulte numa melhor aproximação do modelo prato-a-prato.
- Aplicação dos modelos reduzidos desenvolvidos neste trabalho a problemas de otimização on-line, controle preditivo com modelo e controle ótimo no tempo.

## **APÊNDICE**

## Apêndice

### Cálculo dos Zeros dos Polinômios de Hahn

Para construir o algoritmo para o cálculo dos zeros dos polinômios de Hahn  $p_n(x)$  definidos por (3.26), isto é, dos polinômios  $h_n^{(\alpha, \beta)}(x, N)$  normalizados de tal modo que o coeficiente do termo em  $x^n$  é igual a 1, parte-se da relação de recorrência (3.34), que aqui é colocada na forma:

$$p_j = (x - g_j) p_{j-1} - h_j p_{j-2} \quad , \quad (\text{A.1})$$

com:

$$g_j = \frac{1}{(\alpha + \beta + 2j)(\alpha + \beta + 2j - 2)} \left[ \begin{array}{l} (\alpha + \beta)(\beta + 1)(N - 1) + \\ + (j - 1)(\alpha + \beta + j)(\alpha - \beta + 2N - 2) \end{array} \right] \quad (\text{A.2})$$

$$h_j = \frac{(j - 1)(\alpha + j - 1)(\beta + j - 1)(\alpha + \beta + N + j - 1)(\alpha + \beta + j - 1)(N - j + 1)}{(\alpha + \beta + 2j - 1)(\alpha + \beta + 2j - 2)^2 (\alpha + \beta + 2j - 3)} \quad (\text{A.3})$$

De (A.1) obtém-se para as derivadas:

$$p'_j = (x - g_j) p'_{j-1} + p_{j-1} - h_j p'_{j-2} \quad . \quad (\text{A.4})$$

De acordo com a condição de normalização tem-se:

$$p_0 = 1 \quad , \quad p'_0 = 0 \quad . \quad (\text{A.5})$$

sendo que, para iniciar a iteração, se tem:

$$p_{-1} = p'_{-1} = \text{qualquer valor} .$$

Por outro lado, de (A.2) e (A.3) tem-se:

$$g_1 = \frac{(N-1)(\beta+1)}{(\alpha+\beta+2)} \quad \left( \text{para } \alpha = \beta \Rightarrow g_1 = \frac{N-1}{2} \right) , \quad (\text{A.6})$$

$$h_1 = 0 \quad ; \quad h_2 = \frac{(N-1)(\alpha+1)(\beta+1)(\alpha+\beta+N+1)}{(\alpha+\beta+2)^2(\alpha+\beta+3)} \quad (\text{A.7})$$

Seguindo o algoritmo proposto por Villadsen e Michelsen (1978), para calcular as raízes de

$$p_n(x) = \text{const} \times h_n^{(\alpha,\beta)}(x, N),$$

procede-se do seguinte modo:

- Começando-se com  $x=0$  e usando-se o método de Newton

$$x_j^{(i+1)} = x_j^{(i)} - \frac{p_n(x_j^{(i)})}{p_n'(x_j^{(i)})} , \quad (\text{A.8})$$

obtem-se a raiz  $x_1$  mais próxima de 0 .

- Para calcular a segunda raiz  $x_2$  , parte-se do polinômio quociente

$$q_{n-1}(x) = \frac{p_n(x)}{x - x_1} , \quad (\text{A.9})$$

ou:

$$\ln q_{n-1}(x) = \ln p_n(x) - \ln(x - x_1) ,$$

ou:

$$\frac{d}{dx} \ln q_{n-1}(x) = \frac{d}{dx} \ln p_n(x) - \frac{d}{dx} \ln(x - x_1) ,$$

ou:

$$\frac{q'_{n-1}(x)}{q_n(x)} = \frac{p'_n(x)}{p_n(x)} - \frac{1}{(x-x_1)} \quad (\text{A.10})$$

Então tem-se:

$$x_2^{(i+1)} = x_2^{(i)} - \frac{q_{n-1}(x_2^{(i)})}{q'_{n-1}(x_2^{(i)})}$$

ou, atendendo-se a (A.10):

$$x_2^{(i+1)} = x_2^{(i)} - \frac{\left[ p_n(x_2^{(i)}) / p'_n(x_2^{(i)}) \right]}{1 - \left\{ p_n(x_2^{(i)}) / [p'_n(x_2^{(i)}) (x_2^{(i)} - x_1)] \right\}} \quad (\text{A.11})$$

A iteração (A.11) é iniciada com um valor

$$x_2^{(i)} = x_1 + \varepsilon \quad , \text{ com } \varepsilon \approx 10^{-4} .$$

- Da mesma maneira, uma vez calculadas as raízes  $x_1, x_2, \dots, x_k$  ( $k < n$ ), para calcular a raiz  $x_{k+1}$  tem-se

$$x_{k+1}^{(i+1)} = x_{k+1}^{(i)} - \frac{p_n(x_{k+1}^{(i)}) / p'_n(x_{k+1}^{(i)})}{1 - \left[ p_n(x_{k+1}^{(i)}) / p'_n(x_{k+1}^{(i)}) \right] \left\{ \sum_{j=1}^k \left[ 1 / (x_{k+1}^{(i)} - x_j) \right] \right\}} \quad (\text{A.12})$$

Como se vê, o cálculo das raízes de  $p_n(x)$  pressupõe cálculos sucessivos de  $p_n(x)$  e de  $p'_n(x)$  para diferentes valores de  $x$ , usando as relações de recorrência (A.1) e (A.4).