

# Redução de ordem de uma coluna de destilação baseada no método dos momentos

Trabalho da disciplina COQ862

Denis Pires Rodrigues Alves

Professor: Argimiro R. Secchi  
PEQ - COPPE - UFRJ

14 de dezembro de 2017

# Sumário

- 1 **Introdução**
  - Introdução
- 2 **Modelagem da coluna de destilação**
  - Modelagem da coluna de destilação
- 3 **A técnica de redução de ordem baseada no método dos momentos**
  - A técnica de redução de ordem baseada no método dos momentos
- 4 **Resultados e Discussões**
  - Resultados e Discussões
- 5 **Conclusões**
  - Conclusões

# Sumário

- 1 **Introdução**
  - **Introdução**
- 2 **Modelagem da coluna de destilação**
  - Modelagem da coluna de destilação
- 3 **A técnica de redução de ordem baseada no método dos momentos**
  - A técnica de redução de ordem baseada no método dos momentos
- 4 **Resultados e Discussões**
  - Resultados e Discussões
- 5 **Conclusões**
  - Conclusões

- Processos de separação são muitos importantes na indústria química.
- Uma importante aplicação é a separação do petróleo em seus vários componentes da mistura.
- Balanços de massa e energia, juntamente com relações de equilíbrio termodinâmico e equações de fechamento, devem ser resolvidos para se prever a fração de cada componente separado da mistura.

- Em colunas com muitos estágios, o sistema de equações é grande e o custo computacional é alto.
- Modelos de redução de ordem de colunas de destilação baseados em resíduos ponderados foram desenvolvidos para solucionar esse problema.
- Objetivo: Expor a técnica de redução de ordem aplicando o método dos momentos e aplicar a um modelo como exemplo.

# Sumário

- 1 Introdução
  - Introdução
- 2 Modelagem da coluna de destilação
  - Modelagem da coluna de destilação
- 3 A técnica de redução de ordem baseada no método dos momentos
  - A técnica de redução de ordem baseada no método dos momentos
- 4 Resultados e Discussões
  - Resultados e Discussões
- 5 Conclusões
  - Conclusões

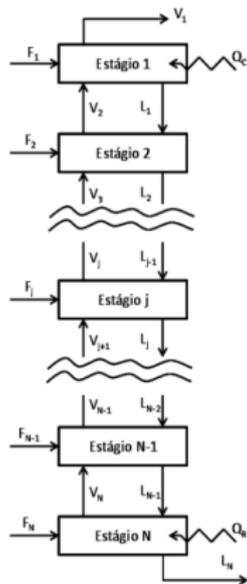


Figura: Esquema de uma coluna de destilação.

# Equações MESH - estado estacionário

Balanço de massa:

Nas seções de retificação e esgotamento ( $j = 2, \dots, N - 1$ ):

$$F_j - V_j - L_j + V_{j+1} + L_{j-1} = 0, \quad (1)$$

$$F_j z_{i,j} - V_j y_{i,j} - L_j x_{i,j} + V_{j+1} y_{i,j+1} + L_{j-1} x_{i,j-1} = 0. \quad (2)$$

Equações de equilíbrio de fases para cada estágio  $j$ :

$$y_{i,j} = K_{i,j}x_{i,j} . \quad (3)$$

Equações de fechamento dadas pelo somatório das frações molares para cada estágio  $j$ :

$$\sum_{i=1}^{n_{comp}} y_{i,j} = 1 \quad \text{ou} \quad \sum_{i=1}^{n_{comp}} x_i = 1, \quad (4)$$

Equação do balanço de energia (ou entalpia):

Nas seções de retificação e esgotamento ( $j = 2, \dots, N - 1$ ):

$$F_j H_j^F - V_j H_j^V - L_j H_j^L + V_{j+1} H_{j+1}^V + L_{j-1} H_{j-1}^L = 0, \quad (5)$$

Sistema ideal (gás ideal e mistura líquida ideal)

$$K_{i,j}(T_j, P_j) = \frac{P_i^{sat}(T_j)}{P_j} \quad , \quad \text{Lei de Raoult} \quad (6)$$

$$H^V = \sum_i^{n_{comp}} y_i \hat{H}_i^{V,id} \quad , \quad H^L = \sum_i^{n_{comp}} x_i \hat{H}_i^{L,id} \quad , \quad (7)$$

sendo que as entalpias de gás ideal para cada componente são dadas por:

$$\hat{H}_i^{id}(T_j) = h_{f,i}^{gi}(T_0) + \int_{T_0}^{T_j} C_{p,i}^{gi}(T) dT - I \Delta H_{vap,i}(T_j) \quad (8)$$

# Sumário

- 1 Introdução
  - Introdução
- 2 Modelagem da coluna de destilação
  - Modelagem da coluna de destilação
- 3 A técnica de redução de ordem baseada no método dos momentos
  - A técnica de redução de ordem baseada no método dos momentos
- 4 Resultados e Discussões
  - Resultados e Discussões
- 5 Conclusões
  - Conclusões

Equações genéricas de balanço no estado estacionário:

$$f(\mathbf{x}_{j-1}) + g(\mathbf{x}_j) + h(\mathbf{x}_{j+1}) = 0, j = 0, 1, 2, \dots, N + 1 \quad (9)$$

Reescalonamento:

$$s = \frac{i}{Norm}$$

Na seção de retificação:  $i = 1, 2, \dots, N_F + 1$

Na seção de esgotamento:  $i = N_F, N_{F+1}, \dots, N + 1$

Aproximação polinomial:

$$x_j \approx P^{(n+1)}(s^{(1)}) = \sum_{k=0}^{n+1} \ell_k(s^{(1)}) P^{(n+1)}(s_k^{(1)})$$

Para cada ponto de interpolação ( $i = 0, 1, 2, \dots, n + 1$ ):

$$R^{(n+1)}(s^{(i)}) \equiv f[P^{(n+1)}(s^{(i)} - 1/Norm)] + g[x_i] + h[P^{(n+1)}(s^{(i)} + 1/Norm)]$$

Diferenças de primeira ordem positiva e negativa:

$$f[P^{(n+1)}(s^{(i)} - 1/Norm)] \approx \sum_{j=0}^{n+1} \ell_j(s^{(i)} - 1/Norm) f[x_j] =$$

$$\sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j}^- f[x_j]$$

$$h[P^{(n+1)}(s^{(i)} + 1/Norm)] \approx \sum_{j=0}^{n+1} \ell_j(s^{(i)} + 1/Norm) h[x_j] =$$

$$\sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j}^+ h[x_j]$$

Expressão do resíduo:

$$R^{(n+1)}(s^{(i)}) \equiv \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j}^- f[x_j] + g[x_i] + \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j}^+ h[x_j]$$

Método dos momentos: anular os resíduos ponderados:

$$R_k^{(n+1)} = \sum_{i=1}^N (s_i)^{k-1} R^{(n+1)}(s_i) = 0, k = 1, 2, \dots, n$$

Avaliação das somas de resíduos ponderados usando uma forma discreta da quadratura de Gauss-Lobatto:

$$R_k^{(n+1)} = \sum_{j=0}^{n+1} \omega_j (s^{(j)})^{k-1} R^{(n+1)}(s^{(j)})$$

$$R_k^{(n+1)} = \sum_{j=0}^{n+1} M_{k,j} R^{(n+1)}(s^{(j)}), \quad k = 1, 2, \dots, n$$

A equação anterior pode ser reescrita como:

$$R^{(n+1)}(s^{(i)}) + V_{i,0} R^{(n+1)}(s^{(0)}) + V_{i,1} R^{(n+1)}(s^{(n+1)}) = 0$$

$$i = 1, 2, \dots, n$$

onde  $V_{i,0} = \tilde{M}^{-1} b_0$  e  $V_{i,1} = \tilde{M}^{-1} b_1$ , sendo  $b_{k,0} = M_{k,0}$ ,

$b_{k,1} = M_{k,1}$  e  $\tilde{M}$  é a matriz quadrado com remoção da primeira e da última coluna de  $\mathbf{M}$ .

Substituindo-se a expressão dos resíduos:

$$\sum_{j=0}^{n+1} B_{i,j}^- f[x_j] + G[x_i] + \sum_{j=0}^{n+1} B_{i,j}^+ h[x_j] = 0, i = 1, 2, \dots, n$$

onde

$$B_{i,j}^- = A_{i,j}^- + V_{i,0} A_{0,j}^- + V_{i,1} A_{n+1,j}^- ,$$

$$B_{i,j}^+ = A_{i,j}^+ + V_{i,0} A_{0,j}^+ + V_{i,1} A_{n+1,j}^+ e$$

$$G[x_i] = g[x_i] + V_{i,0} g[x_0] + V_{i,1} g[x_{n+1}]$$

Somadas as condições de contorno:  $n+2$  equações.

# Sumário

- 1 Introdução
  - Introdução
- 2 Modelagem da coluna de destilação
  - Modelagem da coluna de destilação
- 3 A técnica de redução de ordem baseada no método dos momentos
  - A técnica de redução de ordem baseada no método dos momentos
- 4 Resultados e Discussões
  - Resultados e Discussões
- 5 Conclusões
  - Conclusões

Exemplo de separação de uma mistura que contém propano, isobutano, n-butano, isopentano e n-pentano:

**Tabela:** Especificações para o modelo exemplo.

<b>Variável</b>	<b>Valor</b>
Número de estágios	11
Estágio de alimentação	6
Pressão de alimentação	827kPa
Pressão em cada estágio	$P_j = 827\text{kPa}$
Taxa de calor em cada estágio	$Q_j = 0$
Vazão de vapor pro condensador	$V_2 = 22,05\text{kmol/s}$
Vazão de destilado	$D = 6,1614\text{mol/s}$

## Dados disponíveis:

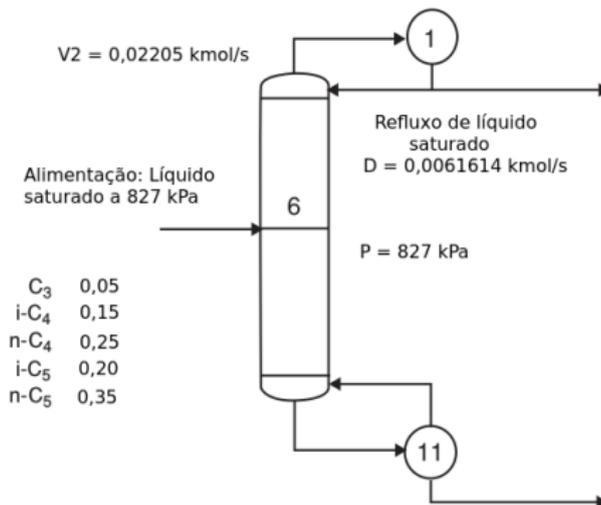
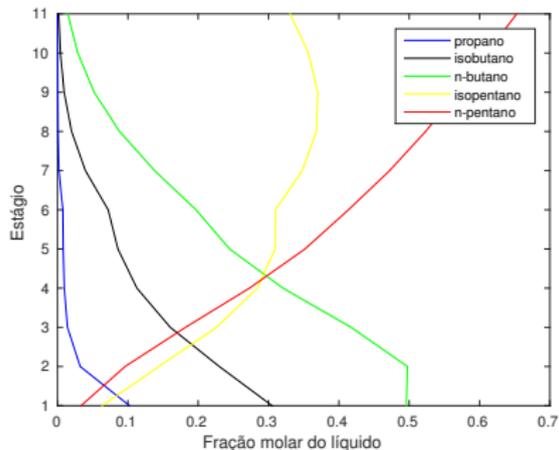
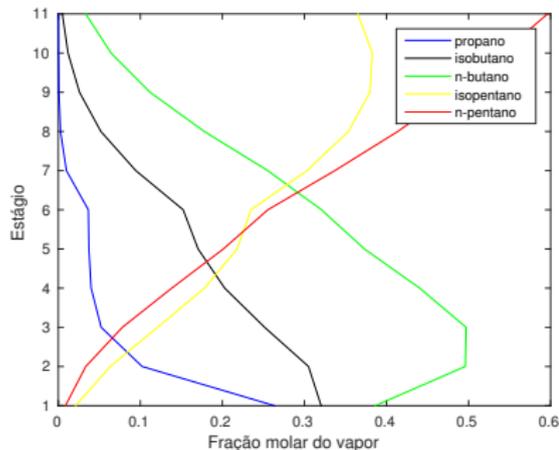
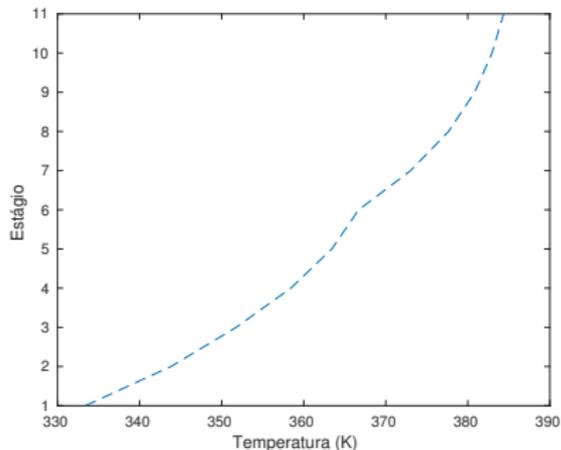
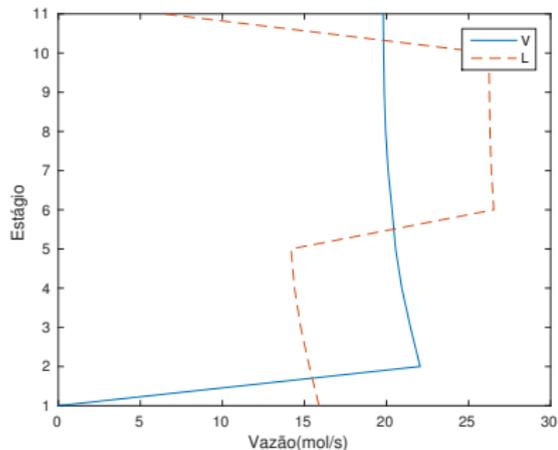


Figura: Representação do problema exemplo.

Perfis de fração molar de vapor e de líquido da coluna completa:



Perfis das vazões e de temperatura para a coluna completa:



# Sumário

- 1 Introdução
  - Introdução
- 2 Modelagem da coluna de destilação
  - Modelagem da coluna de destilação
- 3 A técnica de redução de ordem baseada no método dos momentos
  - A técnica de redução de ordem baseada no método dos momentos
- 4 Resultados e Discussões
  - Resultados e Discussões
- 5 Conclusões
  - Conclusões

- A redução de ordem pelo método dos momentos é um bom método para se aproximar soluções de problemas discretos.
- Além disso, essa técnica possibilita um custo computacional menor e diminui o tempo para convergência da solução.