



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

L.D. RIBEIRO¹, A.R. SECCHI¹, E.C. BISCAIA Jr.¹

¹Universidade Federal do Rio de Janeiro, PEQ-COPPE
e-mail: {ldorigo, arge, evaristo}@peq.coppe.ufrj.br

RESUMO – Neste trabalho é apresentada uma nova técnica de redução de ordem de modelo aplicada à operação de estágios. O método proposto reduz a dimensão do sistema original baseado na anulação da soma dos resíduos ponderados dos balanços de massa e energia por estágio real. Para o cômputo dos pesos da soma dos resíduos foi utilizada a forma discreta da quadratura de Gauss-Lobatto, permitindo um alto grau de precisão nos cálculos. Os balanços nos equipamentos de fundo e topo (tais como condensador, refeedor, e o prato de alimentação da coluna de destilação) são considerados condições de contorno do sistema de equações diferenciais de diferenças. A dimensão do modelo reduzido é determinada pelo número de momentos, sendo menor que a dimensão do modelo completo e independente do tamanho do mesmo. O reescalonamento da variável independente discreta relativo ao número de estágios foi fundamental para a implementação computacional do método proposto, evitando o acúmulo de erros de arredondamento presente na aproximação polinomial de baixo grau da variável discreta original. Simulações dinâmicas de exemplos de colunas de destilação foram realizadas para verificar o desempenho da técnica proposta de redução e, a natureza algébrico-diferencial das equações foi explorada. Os resultados obtidos mostram a superioridade do novo procedimento em comparação com o método tradicional de Colocação Ortogonal. Os balanços de massa e energia global são validados nesse novo método. Além disso, no método tradicional de colocação ortogonal os pontos onde os resíduos são nulos são fixos, enquanto no método proposto os pontos obtidos da colocação são variáveis, caracterizando uma natureza desejável de adaptação desta técnica. Uma redução dos custos computacionais das simulações dinâmicas foi obtida com o uso do modelo reduzido, porém a capacidade preditiva do modelo completo foi mantida, demonstrando que esta nova técnica pode ser usada em aplicações em tempo real.

PALAVRAS-CHAVE: Redução de ordem de modelos, domínio discreto, resíduos ponderados, colocação ortogonal, coluna de destilação.

1. INTRODUÇÃO

Modelos matemáticos rigorosos de processos de separação por estágios, com balanços de massa e energia, resultam em um conjunto de equações algébrico-diferenciais de dimensão elevada, tornando-os

impraticáveis para aplicações em tempo real. O desafio para reduzir o custo computacional de tais sistemas motivou o desenvolvimento de várias técnicas de redução de ordem, tais como os modelos compartimentais (Espania e Landau, 1978; Benallou *et al.*, 1986; Musch e Steiner, 1993) e suas variantes de



modelagem agregada (Lévine e Rouchon, 1991; Linhart e Skogestad, 2009) e separação de escalas de tempo (Kumar e Daoutidis, 2003) baseadas na análise de perturbações singulares, propagação de onda não-linear (Marquardt, 1986; Kienle, 2000), linearização de modelo (Georgakis e Stoeber, 1982) e colocação ortogonal.

Wong e Luus (1980) foram os primeiros a aplicarem a colocação ortogonal para a redução de ordem de sistemas de separação por estágios. Os autores transformaram as equações diferenciais de diferenças em equações diferenciais parciais com posterior aplicação do método da colocação ortogonal no domínio contínuo. Cho e Joseph (1983) mostraram que é possível aplicar o método da colocação ortogonal diretamente no domínio discreto pela seleção adequada dos polinômios. Posteriormente, Stewart *et al.* (1985) mostraram que a família dos polinômios de Hahn é a melhor escolha em termos de resultados e obtenção de modelos reduzidos confiáveis. Seguindo esta técnica, Pinto e Biscaia (1987) apresentaram quatro estratégias diferentes de redução de ordem para tratar das descontinuidades que ocorrem entre as seções de estágios de um sistema de separação. Por outro lado, Seferlis e Hrymak (1994) trataram todos os estágios com descontinuidades como estágios discretos e aplicaram a redução de ordem somente para as seções entre estes estágios discretos, usando a técnica de colocação ortogonal em elementos finitos com polinômios diferentes para as fases líquida e vapor.

Neste trabalho é apresentada uma nova técnica de redução de ordem de modelo aplicada a estágios de separação. O método proposto reduz a dimensão do sistema original baseado na anulação da soma dos resíduos ponderados pelos momentos dos balanços de massa e energia por estágio real. Para o cômputo dos pesos da soma dos

resíduos foi utilizada a forma discreta da quadratura de Gauss-Lobatto, permitindo um alto grau de precisão nos cálculos. Os balanços nos equipamentos de fundo e topo (tais como condensador, refeedor, e o prato de alimentação da coluna de destilação) são considerados condições de contorno do sistema de equações diferenciais de diferenças.

Propõe-se também uma técnica de reescalonamento da variável independente discreta relativa ao número de estágios, que foi fundamental para a implementação computacional do método de redução de ordem, evitando o acúmulo de erros de arredondamento presente nas aproximações polinomiais de variável discreta, mesmo que de baixo grau.

Simulações dinâmicas de exemplos de colunas de destilação foram realizadas para verificar o desempenho da técnica proposta de redução e a natureza algébrico-diferencial das equações foi explorada.

2. TÉCNICA DE REDUÇÃO DE ORDEM

Com o objetivo de introduzir a técnica proposta de redução de ordem de modelo, adotou-se uma representação genérica de uma seção de um sistema de estágio de separação descrito pelo seguinte conjunto de equações diferenciais de diferenças:

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

Com as condições de contorno $x_0(t) = p(t)$ e $x_{N+1}(t) = q(t)$. Aplicando a aproximação polinomial de grau $n + 1$ na variável de estado $x_j(t)$, usando o seguinte



reescalonamento para a variável independente representativa dos estágios do sistema:

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

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

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

Onde $\ell_j(s)$ são os polinômios interpoladores de Lagrange e utilizou-se a seguinte notação $x_j(t) \equiv x(s^{(j)},t)$. Para cada ponto de interpolação, $i = 0, 1, 2, \dots, n+1$, as seguintes funções resíduos são definidas:

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

Onde as diferenças de primeira ordem positiva e negativa são calculadas como:

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

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

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

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

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

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

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

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



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

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

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

$$k = 1, 2, \dots, n \quad (10)$$

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

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

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

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

Como as n equações em Eq. (11) são lineares, elas podem ser reescritas com a seguinte forma abaixo:

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

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

Substituindo a Eq. (6) na Eq. (4), a seguinte expressão pode ser encontrada:

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

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

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

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

$$G[x_i(t)] = g[x_i(t)] + V_{i,0} g[x_0(t)] + V_{i,1} g[x_{n+1}(t)] \quad (14)$$

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

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

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



3. EXEMPLO ILUSTRATIVO

A fim de ilustrar a aplicação do método proposto, uma coluna de destilação para separar propano e propileno foi usada, como descrito por Seferlis e Hrymak (1994) e com especificação dada na Tabela 1.

Tabela 1 – Especificações da coluna de destilação

Número de pratos	175
Prato de alimentação	116
Composição da carga (propileno, propano)	[0,8973, 0,1027]
Vazão de alimentação (kmol/d)	1073,4
Temperatura da carga	46,11
Pressão de operação (kPa)	1860,60
Razão de refluxo	19,7
Vazão de destilado (kmol/d)	965

A equação de estado de Peng-Robinson foi usada para calcular as propriedades termodinâmicas; o modelo matemático e o procedimento de redução de ordem foram implementados no simulador de processos EMSO (Soares e Secchi, 2003). No modelo reduzido, para a seção de retificação foram usados 5 pontos internos, e para a seção de absorção apenas 3 pontos internos, i.e., uma redução de 95%.

Nas Figuras 1 e 2, são apresentados os perfis de temperatura e de fração molar de líquido no estado estacionário para o modelo completo e para os modelos reduzidos, usando o método proposto e o método tradicional da colocação ortogonal. Observa-se nestes resultados a superioridade da nova aproximação em comparação com o método tradicional nas variáveis de saída, principalmente no fundo da coluna.

Os resultados são melhor visualizados nas Tabelas 2 e 3, onde os erros quadráticos

relativos ao modelo completo em cada estágio são expressos como (1) a soma destes erros sobre todos os estágios, (2) erro máximo, (3) erro no condensador, (4) erro no refeedor, e (5) erro no prato de alimentação.

Tabela 2 – Resultados para a temperatura

Erro	Momento	Col. Ort
Global	12,172	14,787
Maximo	0,202	0,283
Topo	0,004	0,012
Fundo	0,043	0,122
Carga	0,025	0,028

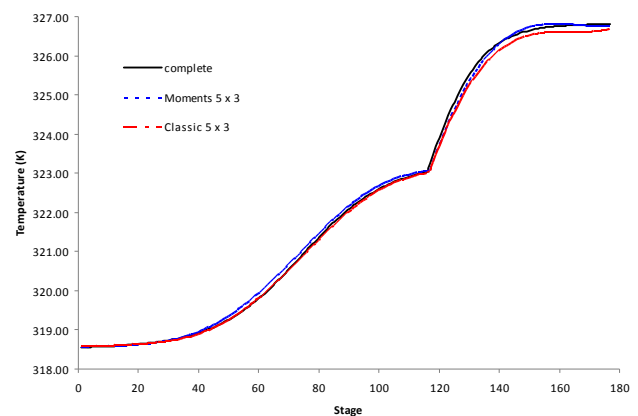


Figura 1 – Perfis de temperatura no estado estacionário dos modelos completo, proposto e da colocação ortogonal.

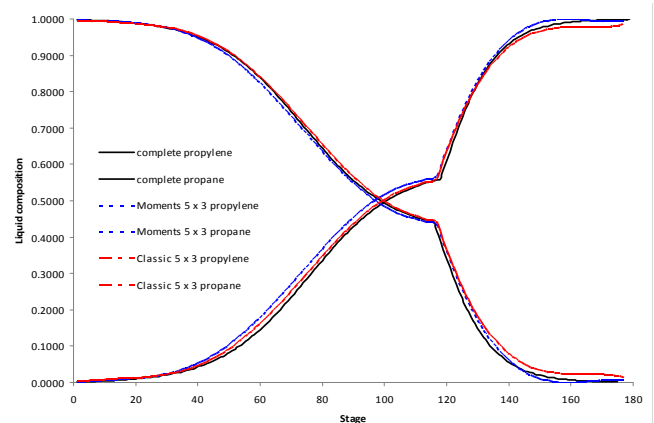


Figura 2 – Perfis de frações molares no estado estacionário dos modelos completo, proposto e da colocação ortogonal.



Tabela 3 – Resultados para a composição

Erro	Momento	Col. Ort
Global	2,92937	3,4605
Maximo	0,02358	0,03273
Topo	0,00055	0,00155
Fundo	0,00487	0,01379
Carga	0,00590	0,01721

Para ilustrar o comportamento dinâmico, um degrau foi aplicado na razão de refluxo no tempo de 0,4h, mudando de 19,7 para 22, partindo de uma condição estacionária. Na Figura 3 é mostrada a resposta ao degrau na composição do propileno e na temperatura do destilado, mostrando a capacidade preditiva do modelo reduzido durante um transiente.

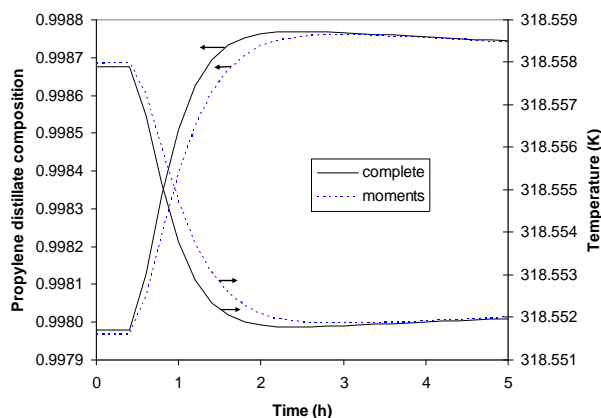


Figura 3 – Resposta ao degrau da composição e da temperatura para os modelos completo e reduzido.

4. CONCLUSÕES

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

Os balanços de massa e energia global são sempre satisfeitos nesse novo método. Além disso, no método tradicional de colocação ortogonal os pontos onde os

resíduos são nulos são fixos, enquanto no método proposto os pontos obtidos da colocação são variáveis, caracterizando uma natureza desejável de adaptação desta técnica.

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

Uma redução dos custos computacionais das simulações dinâmicas foi obtida com o uso do modelo reduzido, porém a capacidade preditiva do modelo completo foi mantida, demonstrando que esta nova técnica pode ser usada em aplicações em tempo real.

Os resultados das simulações dinâmicas da coluna de destilação mostraram que a técnica proposta pode ser aplicada para objetivos de controle e aplicações em tempo real.

5. AGRADECIMENTOS

Agradecimentos ao CNPq pelo suporte financeiro.

6. REFERÊNCIAS

- BENALLOU, A.; SEBORG, D.E.; MELLICHAMP, D.A. Dynamic Compartmental Models for Separation Processes, *AIChE J.*, 32, 1067-1078, 1986.
- CHO, Y.S.; JOSEPH, B. Reduced-Order Steady-State and Dynamic Models for separation Processes, *AIChE J.*, 29 (2) 261-276, 1983.
- GEORGAKIS, C.; STOEVER, M.A. Time Domain Order Reduction of Tridiagonal Dynamics of Staged Processes – I. Uniform



Lumping, Chem. Engng. Sci., 37 (5) 687-697, 1982.

ESPAÑA, A.; LANDAU, L.D. Reduced Order Bilinear Models for Distillation Columns, Automatica, 14, 345-355, 1978.

KIENLE, A. Low-Order Dynamic Models for Ideal Multicomponent Distillation Processes Using Nonlinear Wave Propagation Theory, Chem. Engng. Sci., 55, 1817-1828, 2000.

KUMAR, A.; DAOUTIDIS, P. Nonlinear Model Reduction and Control for High-Purity Distillation Columns, Ind. Eng. Chem. Res., 42, 4495-4505, 2003.

LÉVINE, J.; ROUCHON, P. Quality Control of Binary Distillation Columns via Nonlinear Aggregated Models, Automatica, 27, 463-480, 1991.

LINHART, A.; SKOGESTAD, S. Computational Performance of Aggregated Distillation Models, Comp. Chem. Engng., 33, 296-308, 2009.

MARQUARDT, W. Nonlinear Model Reduction for Binary Distillation, In IFAC Symposium Dyn. and Control of Chemical Reactors and Distillation Columns, Bournemouth, UK, 123-128, 1986.

MUSCH, H.-E.; STEINER, M. Order Reduction of Rigorous Dynamic Models for Distillation Columns, Comput. Chem. Engng., 17 (S1) 311-316, 1993.

PINTO, J.C.; BISCAIA Jr., E.C. Order Reduction Strategies for Models of Staged Separation Systems, Comput. Chem. Engng., 12 (8) 821-831, 1987.

SEFERLIS, P.; HRYMAK, A.N. Adaptive Collocation on Finite Elements Models for Optimization of Multistage Distillation Units,

Chem. Engng. Science, 49 (9) 1369-1382, 1994.

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

STEWART, W.E.; LEVIEN, K.L.; MORARI, M. Simulation of Fractionation by Orthogonal Collocation. Chem. Engng. Sci. 40, 409-421, 1985.

WONG, K.T.; LUUS, R. Model Reduction of High-Order Multistage Systems by the Method of Orthogonal Collocation, Can. J. Chem. Engng., 58, 382-388, 1980.