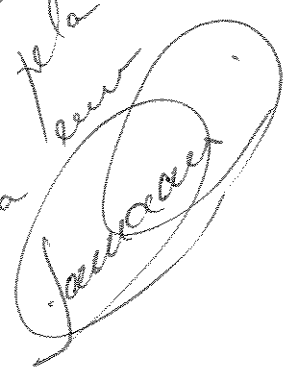


UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

FACULDADE DE ENGENHARIA ELÉTRICA

DEPARTAMENTO DE TELEMÁTICA

*exemplos correspondente
redação final da tese
Gomes e aprovada por Francisco José
Oliveira Ilgoda pela
20/12/89.*



MODELAGEM, CONTROLE ADAPTATIVO E OTIMIZAÇÃO

DE UM PROCESSO NÃO-LINEAR

FRANCISCO JOSÉ GOMES

Orientador : Prof. Dr. Akebo Yamakami

Tese apresentada à Faculdade de Engenharia Elétrica de Campinas, da Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP, como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de DOUTOR EM ENGENHARIA ELÉTRICA.

- Dezembro/1989-

À Bete, Vitor, Pedro e Leandro,

pela paciência e compreensão durante este período.

Dedico este trabalho à meus Pais

RESUMO

Efetua-se neste trabalho a modelagem de uma coluna de destilação de alta pureza utilizada na indústria de semicondutores visando a obtenção de um ambiente adequado à análise de algoritmos de controle adaptativo. As equações e interrelacionamentos do processo são selecionados de maneira a garantir o aparecimento das complexidades (ganhos, constantes de tempo e atrasos com variação não-linear) gerando um algoritmo preciso, robusto e computacionalmente eficiente. Para solução das equações diferenciais do processo foram utilizados métodos de Runge-Kutta Diagonalmente Implícitos com estabilidades A e S garantindo resultados estáveis.

A performance de diversos algoritmos de controle adaptativo foi então avaliada para rejeição de carga e rastreamento de referência. Foram implementados algoritmos adaptativos lineares (variância mínima, alocação de polos, preditivo e "deadbeat") e não-linear.

Efetua-se finalmente a otimização em estado estacionário do processo utilizando uma função objetivo que expressa as perdas existentes e o custo energético associado a um determinado estado. A minimização desta função é efetuada através do algoritmo das coordenadas cíclicas, associado à um algoritmo específico para solução das restrições de igualdade.

ABSTRACT

The modelling of a high-purity distillation column utilized in the semiconductor industry is realized giving an adequate environment for adaptive control algorithms analysis. The model contains all the complexities of the real process (gain, time constants and dead time that change nonlinearly) but is simple, robust and computationally efficient. For solving the stiff differential equations of the process the Diagonally Implicit Runge-Kutta Formulae with A and S stability has been utilized.

The performance of several adaptive control algorithms has been evaluated for load rejection and setpoint tracking. It was implemented several linear algorithms (minimum variance, pole-placement, generalized predictive and deadbeat) and a nonlinear one.

The steady-state optimization of the process was then realized. A objective function tha express the material losses and utilities cost has been minimized through the ciclic coordinates algorithm associated with techniques for solving the operational restrictions of the process.

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. Akebo Yamakami, por todo o apoio e orientação fornecidos durante o desenrolar deste trabalho,

Ao Prof. Eduardo Pinheiro, da UFSC, pelo auxílio no tocante aos aspectos químicos e termodinâmicos relacionados com o processo analisado,

Ao Prof. Antonio Coelho, da UFPA, pela ajuda, esclarecimentos e auxílio no desenvolvimento e implementação dos algoritmos de estimação e controle adaptativos,

A todos os colegas e amigos do Departamento de Telemática pela convivência durante estes anos,

A CAPES, pelo auxílio financeiro.

ÍNDICE

Capítulo 1 - Considerações Iniciais

1.1 - Introdução	1
1.2 - Controle das Colunas de Destilação de Alta Pureza	4
1.3 - Otimização Operacional das Colunas de Destilação	13

Capítulo 2 - Modelagem Dinâmica do Processo

2.1 - Introdução	18
2.2 - Histórico	24
2.3 - Equações Aplicáveis	
2.3.1. - Formulação Geral do Problema	32
2.3.2. - Balanços Aplicáveis	33
2.3.2.1. - Balanço de Massa	37
2.3.2.2. - Balanço Energético	39
2.3.3. - Retenções nos Estágios	40
2.3.3.1. - Retenção Molar Constante	41
2.3.3.2. - Retenção Volumétrica Constante	41
2.3.3.3. - Retenção Variável	43
2.3.4. - Simulação do Condensador	44
2.3.5. - Retenção em Fase Vapor	47
2.4 - Conjunto de Funções $P = f_2(z, r, t)$	49
2.4.1. - Entalpias	49
2.4.2. - Relações de Soma e Equilíbrio	51
2.4.3. - Eficiência da Separação e Propr. Físicas	54
2.5 - Algoritmo Final	55
2.6 - Simbologia	58

Capítulo 3 - Métodos Numéricos Associados a Dinâmica de uma Coluna de Destilação

3.1 - Introdução	60
3.2 - Rigidez Numérica em Colunas de Destilação	66
3.3 - Estabilidade dos Métodos Numéricos	
3.3.1 - Métodos A-Estáveis	71
3.3.2 - Métodos S-Estáveis	77
3.4 - Métodos de Runge-Kutta Diagonalmente Implícitos	80
3.5 - Fórmulas DIRK(p,q)	85
3.5.1 - Pontos Intermediários $z(t_{n+\tau ih})$	87
3.5.2 - Ajuste de h para DIRK(3,3)	91
3.6 - Método de Liniger-Willoughby	92
3.6.1 - Método de LW de 1ª Ordem	93
3.7 - Simbologia	97

Capítulo 4 - Caracterização do Sistema e Análise dos Métodos Numéricos

4.1 - Introdução	98
4.2 - Considerações sobre a Modelagem	99
4.3 - Métodos de Integração : Esforço computacional e Precisão	101
4.3.1 - Precisão dos Métodos	103
4.3.2 - Jacobiano e Tolerancias : Influências nos Resultados	110
4.4 - Conclusões Relativas aos Métodos de Integração	116
4.5 - Caracterização das Colunas de Alta Pureza	117

Capítulo 5 - Controle Adaptativo das Colunas de Destilação

5.1 - Introdução	146
5.2 - Controle Adaptativo das Colunas de Destilação : um breve Histórico	149
5.3 - Controlador Adaptativo Auto-Ajustável Não-Linear	152
5.3.1 - Introdução	152
5.3.2 - Algoritmo Não-linear	154
5.3.3 - Modelos Reduzidos Linear e Não-Linear	160
5.3.3.1 - Modelamento Não-Linear	164
5.3.4 - Algoritmo Não-linear : Implementação	165

5.4 - Controlador Adaptativo Auto-ajustável Linear com Integrador Implícito	169
5.4.1 - Algoritmo Linear : Implementação	173
5.5 - Controlador Adaptativo Auto-ajustável Linear com Integrador Implícito e Alocação de Polos	176
5.5.1 - Implementação à Coluna	179
5.5.2 - Algoritmo Final	181
5.6 - Controle Preditivo Generalizado	183
5.6.1 - Introdução	183
5.6.2 - Algoritmo do Controle Preditivo	186
5.6.3 - Implementação à Coluna	190
5.7 - Controlador com Tempo de Estabilização Finito	191

Capítulo 6 - Implementação dos algoritmos Adaptativos

6.1 - Introdução	194
6.2 - Estimação de Parâmetros	196
6.3 - Algoritmos : Implementação e Resultados	202
6.4 - Simbologia	230

Capítulo 7 - Otimização Operacional

7.1 - Introdução	231
7.2 - Escolha da Função Objetivo	233
7.3 - Equacionamento do Problema	237
7.3.1 - Restrições Operacionais	238
7.3.2 - Restrições de Projeto	239
7.3.3 - Restrições de Mercado	240
7.4 - Técnica de Solução	241
7.4.1 - Atualização das Variáveis sujeitas às Restrições de Desigualdades	243
7.4.2 - Satisfação das Restrições de Igualdades	244
7.5 - Resultados Obtidos	245
7.6 - Extensão do Algoritmo	247
7.7 - Conclusões Finais	250
7.8 - Notação Utilizada	251

Capítulo 8 - Conclusões Finais	253
Apêndice 1	259
Apêndice 2	265
Apêndice 3	277
Referências Bibliográficas	280

CAPÍTULO 1 - CONSIDERAÇÕES INICIAIS

1.1 - Introdução

A presente tese de doutoramento tem como objeto de estudo a modelagem, controle adaptativo e otimização de uma classe de processos com características não-lineares e comportamento dinâmico complexo : colunas de destilação para obtenção de compostos de alta pureza. Dentre esta classe nosso estudo abordou um particular processo : as colunas de destilação utilizadas no processo de obtenção do silício policristalino de grau eletrônico, material este fundamental na moderna indústria microeletrônica.

Várias razões motivaram esta escolha; uma melhor visão do problema, em suas origens e complexidades pode ser obtida a partir da colocação, ainda que de forma extremamente sumária, do processo de obtenção e purificação do silício policristalino de grau eletrônico. Para tal vamos nos reportar à Figura 1.1 que apresenta um fluxo esquemático desta purificação. O processo se inicia com a reação, em alta temperatura (cerca de 300 °C) do silício de grau metalúrgico (pureza típica de 98,5%) com o Cloreto de Hidrogênio anidro (pureza típica de 99,9 %) em um reator de leito fluidizado, reação esta que produz, em condições normais, uma mistura de 80% de Triclorosilano (SiHCl_3) e 20% de Tetracloreto de Silício, além de traços de uma série de outros compostos.

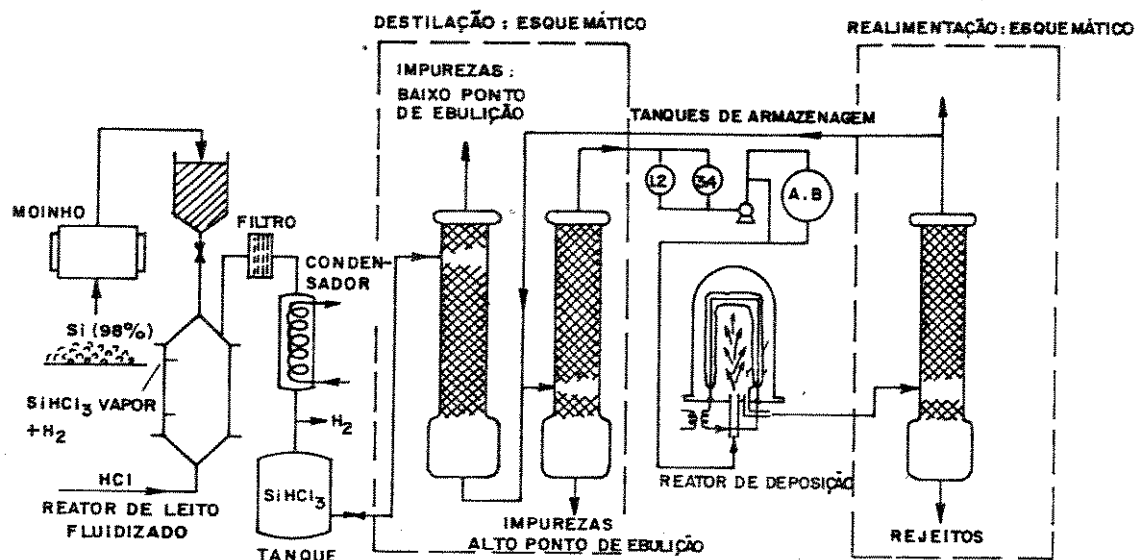
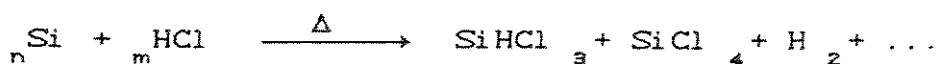


Figura 1.1 - Processo de obtenção do silício-poli (esquemático)



A mistura de Clorosilanos, dado o baixo ponto de ebulição de seus dois componentes básicos (31,8°C para o SiHCl₃ e 57,6°C para o SiCl₄) é separada mediante destilação fracionada visando obter o SiHCl₃ com pureza mínima de 0,999 em fração molar. Esta separação e purificação ocorre em um conjunto de colunas de destilação interligadas (geralmente 6 ou 7) representadas esquematicamente na Figura 1.1 por duas colunas separando as frações leves e pesadas, respectivamente.



O produto obtido, SiHCl₃, de grau eletrônico, reage, em fase

vapor, com o Hidrogênio, também de grau eletrônico (pureza típica de 99,99 %) em um reator de deposição apropriado gerando como resultado final o silício policristalino de grau eletrônico com pureza mínima de 99,999%.



Este material sofre a seguir um processamento mecânico apropriado (fusão e puxamento em fornos Czochralski ou refino zonal) visando obter o monocristal utilizado na confecção dos circuitos integrados; esta etapa do processamento, contudo, já se encontra fora de nossa área de interesse e vamos nos restringir ao fluxo constante da Figura 1.1.

Dois aspectos fundamentais ligados à este processamento podem ser listados :

1) a obtenção de um material final (silício-poli) que satisfaça aos severos requisitos de qualidade exigidos pela indústria eletrônica depende, fundamentalmente, da obtenção, manutenção e repetibilidade do grau de pureza do triclorossilano que vai alimentar o reator de deposição. Esta suposição, obviamente, parte do pressuposto que os efluentes situados fora dos limites de bateria satisfazem aos requisitos impostos pelo controle da qualidade.

2) a rentabilidade proporcionada pelo processo, para uma escala mínima de produção [Gomes,1986a,b] depende fundamentalmente de uma correta realimentação dos efluentes do reator de deposição no processo de destilação [Gomes, 1985] evitando o aparecimento de rejeitos e reaproveitando os clorosilanos mediante adequada opção tecnológica.

Estes itens colocam duas necessidades que, embora inseridas no mesmo processo, podem ser separadas para efeitos de análise e que

vieram a constituir o tema de nosso trabalho :

- estabelecimento de uma adequada política de controle para as colunas de destilação de alta pureza existentes no processo, que possa garantir a manutenção dos requisitos de pureza estabelecidos, mediante o desenvolvimento de algoritmos de controle robustos, com capacidade de rejeição de carga e rastreamento de referência.
- estabelecimento de uma política de operação ótima para o processo, mais especificamente para o sistema de realimentação dos efluentes do reator que garantam economicidade ao processo não só em condições normais de funcionamento, mas principalmente na ocorrência de alterações de mercado, quer no tocante aos valores dos produtos e custo dos insumos, quer no tocante às quantidades e qualidades demandadas.

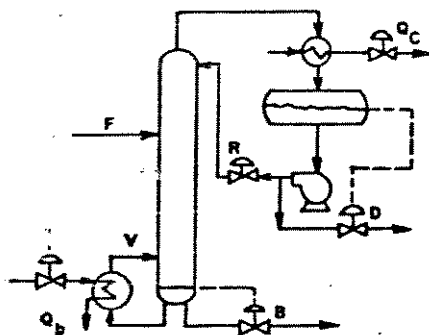
Efetuamos, inicialmente, um estudo abrangendo estes dois assuntos procurando verificar seu estado-da-arte, as pesquisas em andamento na área e as aplicações existentes buscando nortear nossos trabalhos em continuidade às soluções já preconizadas e/ou implementadas anteriormente. Analisaremos a seguir cada um destes tópicos.

1.2 - Controle das colunas de destilação de alta pureza

Para maior facilidade no entendimento dos termos e análises deste capítulo apresentaremos uma explicação sucinta da operação de uma coluna de destilação binária convencional (Figura 1.2); um entendimento mais detalhado poderá ser obtido quando da estudo de sua modelagem (Capítulo 2). Mediante o fornecimento de determinada quantidade de energia - Q_b - à base da coluna são gerados vapores, os quais passando através de diversos estágios de contato alcançam o topo da coluna, onde são condensados,

total ou parcialmente. Parte do material condensado, do qual consta uma fração x_D do componente mais volátil, é retirado como destilado - D - e parte retorna ao interior da coluna na forma de refluxo líquido - R -. A alimentação F, contendo uma fração x_F do componente mais volátil é inserida no estágio de alimentação, situado geralmente em um ponto médio da coluna. Parte do material é retirado através da vazão na base - B -, na qual consta uma fração x_B do componente mais volátil. O enfoque geral de controle para este processo consiste em garantir que a composição das vazões terminais (x_B , x_D ou ambos) satisfaçam à requisitos de purezas estabelecidos para a destilação.

O controle das colunas de destilação constitui um dos mais estudados temas dentro da área de controle de processos. Uma idéia dos trabalhos efetuados nesta área pode ser obtida em "surveys" existentes sobre o tema [McAvoy,1986; Tolliver,1980], nos diversos livros específicos sobre o assunto [Nisenfeld,1983; Shinskey,1984; Rademaker,1975] ou nas diversas teses de mestrado e doutorado existentes sobre o tema [Wood,1973 ; Wong,1985, Fuentes,1983;



- F - alimentação, moles/h
- V - vazão de vapor, moles/h
- R - taxa de refluxo
- B - vazão na base, moles/h
- D - vazão no topo, moles/h
- Q_b - energia na base, Mcal/h
- Q_c - energia no destilado, Mcal/h

Figura 1.2 - Coluna de destilação típica

Economopoulos,1978 ; Shunta,1972; Foss,1983; Stathaki,1985; Hu,1972;

Beaverstock,1973 e outros]. Este interesse sobre o tema deriva das complexas características apresentadas pelas colunas de destilação, entre as quais as de maior interesse para a engenharia de controle são :

- Caráter não-linear : o comportamento dinâmico das colunas de destilação apresenta características não-lineares (ver Capítulo 2), variantes não somente com as condições nominais de operação para uma mesma coluna, mas de uma coluna para outra, dependendo das propriedades dos compostos sendo destilados e do projeto da coluna.
- Caráter multivariável : colunas de destilação apresentam múltiplas entradas e saídas, cuja combinação permite a obtenção de estratégias diversificadas para seu controle . Ainda que utilizadas em caráter monovariável, estas diversas entradas e saídas do processo permitem a adoção de malhas múltiplas cuja escolha adequada constitui objeto de interminável discussão na literatura [veja-se, p. exemplo, MacCune,1973; Shinsky,1981; McAvoy,1981; Waller,1988a,b; Skogestad,1987; Wood,1973 e outros]
- Atrasos variáveis : dependendo da particular concepção adotada para a malha de controle, o atraso entre as entradas do processo e suas saídas apresenta variações, não só para colunas diversas, mas inclusive para a mesma coluna em diferentes condições operacionais.
- Dinâmicas diferenciadas : devido ao deslocamento de material no interior da coluna e às interações térmicas entre os compostos, presentes em duas fases (líquida e vapor), diferentes constantes de tempo podem ser associadas ao processo, dependendo da malha específica considerada (exemplo, balanço de massa ou balanço energético).
- Ganho variável : o ganho do processo, considerado como a

alteração percentual na variável de saída para uma variação na entrada do processo não só é variável, como ainda o é com características não-lineares. Esta forma de variação pode ainda se alterar não só de uma coluna para outra como ainda para a mesma coluna, para condições operacionais diversas.

- Dinâmica Assimétrica : a forma e tempo de resposta da saída do processo, para uma alteração positiva de uma variável de entrada, podem ser completamente diversos para a mesma perturbação, quando aplicada com a mesma magnitude porém em sentido contrário. Esta não-linearidade específica, apresentada pelas colunas de destilação, é denominada geralmente como dinâmica assimétrica.

Estas características listadas, embora não esgotem a lista de complexidades apresentadas pelas colunas de destilação servem como uma ilustração das dificuldades existentes para o estabelecimento de uma adequada política de controle, que mantenha as variáveis de saída dentro de limites especificados, na ocorrência de perturbações externas.

As colunas de destilação de alta pureza constituem uma classe específica dentro deste espectro traçado. Tal especificidade deriva do fato que algumas das complexidades acima listadas tendem a ser aguçadas quando a região de operação da coluna se desloca para regiões da alta pureza. Mountiziaris [Mountiziaris,1988] sugere, para efeitos didáticos, dividir as colunas de destilação, no tocante à complexidade de seu controle em três categorias :

-Colunas de baixa pureza : exibem geralmente um comportamento próximo a um processo linear . Esta classe de colunas abrange sistemas com pureza do destilado atingindo a faixa de 0,90 em fração molar.

-Colunas de média pureza : apresentam ganhos com variação

não-linear, mas a variação das constantes de tempo e dos atrasos não é tão acentuada quanto o ganho. A composição terminal do destilado para estes casos se situa na faixa de até 0,99 em fração molar.

-Colunas de alta pureza : para este caso pode-se considerar que os ganhos, as constantes de tempo e os atrasos variam não-linearmente. Para estes sistemas a composição terminal se situa na faixa de 0,999 em fração molar.

Apesar destas importantes características apresentadas pelas colunas de destilação de alta-pureza para a área de controle um fato curioso é que existe um número reduzido de trabalhos publicados na área. O grupo mais atuante nesta área se localiza na Universidade de Lehigh, em Bethlehem, Pennsylvania, com o principal pesquisador da área sendo William L. Luyben, que participa praticamente de todos os trabalhos importantes publicados sobre o tema. Esta ausência de um maior interesse por esta classe de processos é assinalada por Luyben [Fuentes,1983] que estranha o fato, quando se considera que estas colunas possuem destacada importância industrial . Após uma busca na literatura conseguimos localizar somente os artigos tratando especificamente do tema que são comentados a seguir.

Boyd [Boyd,1975] implementou um controle regulatório para uma coluna de destilação industrial em Trieste, Itália, utilizada para separação de benzeno-tolueno com purezas terminais na faixa de 50 ppm (partes por milhão). Boyd tentou tirar proveito do perfil térmico específico da coluna, utilizando como variável de saída o valor diferencial das temperaturas de 4 estágios distintos do processo, considerados dois a dois e como variável de controle a vazão do destilado no topo da coluna. Os resultados reportados são de um bom desempenho da concepção utilizada, apesar de problemas de sintonia devido ao alto ganho da malha, que foi implementada com um controlador PI convencional.

Fuentes [Fuentes,1983] realizou um estudo um pouco mais

abrangente do tema analisando a influencia de fatores tais como volatilidade relativa, pureza dos produtos, efeito do atraso introduzido pelo sistema de amostragem no comportamento dinâmico de colunas de alta pureza, assinalando a existência de respostas altamente não-lineares para o sistema. Foi ainda testado uma concepção de controle monovariável utilizando um controlador PI em cascata com a temperatura de um estágio intermediário da coluna.

Georgiou [Georgiou,1988] implementou uma concepção multivariável do Controle com Matriz Dinâmica de Cutler [Cutler,1980] para colunas com diferentes graus de pureza. Georgiou assinala que o controle para a coluna de altíssima-pureza só foi possível após efetuar-se uma transformação não-linear na variável medida (utilização do logaritmo natural da saída desviada do processo); sem esta transformação o controle desestabilizou o processo.

Mountiziaris [Mountiziaris,1988], baseado na concepção da Matriz de Ganho Relativo (" RGA - Relative Gain Array ") introduzido por Shinskey [Shinskey,1984] e no conceito de Índice Estático de Resiliência (" SRI - Static Resiliency Index "), uma extensão do Índice de Resiliência de Morari ("MRI = Morari Resiliency Index ") [Grosdidier, 1985] implementou uma concepção de controle não-linear multivariável , sintetizado através do uso hierárquico das condições de projeto (RGA, SRI) em regime da coluna.

Outros artigos localizados, embora façam referência à colunas de alta pureza [Skogestad,1987b,c] trabalham na realidade com colunas puras (composição de 0,99 em fração molar), não chegando à região de alta pureza. Outros artigos localizados, embora utilizem colunas de alta pureza não o fazem sob o enfoque de controle [Shunta,1975]. Uma concepção de controle específica para o problema de ciclo-limite gerado por colunas puras com alta volatilidade relativa pode ainda ser encontrada em Luyben [Luyben, 1971,1972]. Há assinalado na literatura uma tese de Doutorado na Universidade de

Leigh [Chiang,1985] que, pelas informações da literatura, trabalhou também com sistema de controle utilizando cascata composição/temperatura para colunas de alta-pureza, mas não conseguimos, infelizmente, ter acesso a seu trabalho. Finalmente há um trabalho de Luyben [Luyben,1987] que propõe uma metodologia específica para o levantamento de funções de transferência para colunas de alta pureza.

Desta breve análise podem ser extraídas as seguintes conclusões :

- 1) As colunas de destilação de alta pureza, objeto de nosso trabalho, que constituem uma importante classe de processos para a engenharia de controle, receberam a atenção somente de alguns poucos, embora altamente qualificados, pesquisadores, constituindo um tema ainda em aberto para pesquisas e implementações de algoritmos variados de controle, principalmente as versões adaptativas.
- 2) As técnicas de controle adaptativo, tal como conceituadas e utilizadas neste trabalho - ver capítulo 5 - embora venham sendo aplicadas em diversas colunas de destilação não foram ainda aplicadas e testadas nas colunas de destilação de alta pureza, processo este com características e complexidades específicas.
- 3) Não conseguimos localizar referências à implementação da mais recente concepção de controle adaptativo, o Controle Preditivo Generalizado, na formulação desenvolvida pelo grupo de Oxford [Clarke,1987a,b], quer para colunas de baixa, média ou alta-pureza, concepção esta implementada no presente trabalho; idêntico comentário pode ser também efetuado para o controlador adaptativo com alocação de polos na formulação CARIMA ("Controlled Auto-Regressive Integrated Moving Average") ou para o Controlador Adaptativo com tempo de estabilização finito ("Deadbeat Controller")[Matko,1984].

Baseado nestes fatos optamos por realizar um estudo abrangendo uma análise da performance dos controladores adaptativos auto-ajustáveis para o controle das colunas de destilação de alta pureza, assunto este, como já mencionado, ainda inexplorado. Como nosso interesse reside em um sistema particular, no caso as colunas de alta pureza integrantes do processo de obtenção do silício policristalino de grau eletrônico, as mesmas foram projetadas visando simular, da melhor maneira possível, as condições industriais existentes para este processo. Todos os dados disponíveis, no tocante às condições industriais e aos compostos envolvidos foram utilizados em seu projeto [Gomes,1985].

O primeiro problema concreto surgido, ao iniciarmos os nossos estudos, se relacionou com o seguinte item: como simular adequadamente a dinâmica deste complexo processo, para que seu comportamento pudesse ser caracterizado e a performance dos algoritmos de controle adaptativo avaliada, visto que inexistem tais colunas no país. Para implementação da única solução possível - a simulação em computador digital - tornava-se necessário efetuar a modelagem do processo, uma vez que inexistia qualquer infra-estrutura anterior relativa ao assunto que pudesse ser aproveitada. Tornou-se necessário, portanto, como primeiro passo para início dos trabalhos, realizar uma modelagem adequada das colunas de destilação de alta pureza gerando um modelo dinâmico não-linear que fornecesse um ambiente adequado para implementação e avaliação da performance dos diversos algoritmos adaptativos a serem implementados.

O desenvolvimento dos trabalhos de modelagem levantou outra questão concreta associada à solução das equações diferenciais do processo, equações estas que apresentam um elevado grau de rigidez numérica ("stiffness ratio"), exigindo o concurso de métodos de integração implícitos A ou S-estáveis, que garantam um compromisso entre estabilidade e precisão dos resultados, associados à um baixo esforço computacional. Neste item também verificamos que, embora

existam diversos estudos sobre o desempenho de métodos numéricos de integração para solução das equações diferenciais de colunas de destilação, os mesmos não abrangem as colunas de alta-pureza, onde existe um acirramento das condições de rigidez numérica associado à necessidade de alta precisão dos resultados, condições estas que devem ser analisadas levando-se em conta a elevada dimensão das equações diferenciais de uma coluna, que exigem o emprego dos máximos incrementos de integração possíveis. Efetuamos, relativamente a este item, o estudo de uma classe de métodos implícitos particularmente adequada ao presente caso : os Métodos de Runge-Kutta Diagonalmente Implícitos ("DIRK - Diagonally Implicit Runge-Kutta") que , dada a particular formulação das equações das colunas de destilação, apresentam uma série de vantagens. Foram implementados os métodos DIRK de terceira ordem em dois e três estágios, A- e S-estáveis, este último com controle local de erro e também o método de Liniger-Willhoughby, de primeira ordem, A-estável, com ajuste automático de ponderação.

As características dinâmicas do sistema foram avaliadas buscando verificar aspectos como não-linearidades, ganho do processo para diferentes perturbações, atrasos e outros mais, além de uma avaliação do desempenho dos diversos métodos de integração no tocante à precisão e esforço computacional.

A etapa seguinte consistiu, finalmente, na implementação dos diversos algoritmos adaptativos para controle da coluna, tendo sido implementado :

- controlador adaptativo auto-ajustável linear
- controlador adaptativo auto-ajustável linear com alocação de polos.
- controlador adaptativo auto-ajustável não-linear
- controlador preditivo generalizado
- controlador com tempo de estabilização finito e "deadbeat".

Estas implementações utilizaram diferentes formulações : os

controladores não-linear e de tempo finito o modelo posicional ("CARMA - Controlled Auto-Regressive Moving Average") que permitiu analisar o problema de erro de regime associado às mudanças de carga e técnicas para sua solução (utilização de um termo integral e estimação de nível contínuo); os algoritmos lineares utilizaram modelo incremental com integrador implícito (CARIMA), formulação esta recentemente proposta na literatura [Tuffs, 1985]; todos os controladores foram projetados segundo o enfoque indireto. Uma vez implementados os controladores, sua performance foi avaliada para diversas perturbações de carga e rastreamento de referência.

1.3 - Otimização Operacional das colunas de destilação

O problema de otimização do processo de produção do silício-policristalino envolve uma série de opções ditadas por fatores tais como mercado para os sub-produtos gerados (p.ex, sílica coloidal, silicato de etila, purificação do SiCl_4 para epitaxia), opção tecnológica para reciclagem dos produtos provenientes do reator de deposição (separação e refino do SiHCl_3 , hidrogenação do SiCl_4 , deposição com SiH_2Cl_2) que ditarão a filosofia ótima a ser implementada. Em qualquer hipótese, contudo, a reciclagem dos produtos provenientes do reator de deposição é uma necessidade econômica inquestionável [Gomes, 1986a, b].

Os efluentes do reator de deposição contém, basicamente, uma mistura de SiHCl_3 - SiCl_4 e diversos outros clorosilanos que, após devidamente purificada das impurezas leves e pesadas em colunas de destilação apropriada, deverá ser realimentada no processo. Dependendo das opções tecnológicas e de mercado disponíveis estas frações podem apresentar valores econômicos diferenciados, o que permite uma política de otimização adequada para as colunas de realimentação. Nossa proposta se concentrou então no estabelecimento de algoritmos adequados de otimização para uma coluna de destilação, que pudessem ser aplicados à coluna de realimentação dos efluentes

do reator.

Uma análise dos trabalhos existentes na área de otimização de colunas de destilação mostrou que :

- a otimização das colunas de destilação constitui um assunto bastante complexo pela necessidade de se conhecer adequadamente os custos associados aos fluxos de materiais e energia do processo, tarefa esta nem sempre imediata [Shinskey,1984].

- alguns procedimentos recomendados ou utilizados para otimização de colunas [Rademaker,1974; Shinskey,1984] ou trabalham com funções extremante simples, que não se coadunariam com o nosso problema, ou utilizam procedimentos também desaconselháveis para o nosso caso [Lucia,1987].

- trabalhos envolvendo otimização de processos químicos em caráter de maior generalidade [Arkun,1980], ao tratarem do problema das colunas de destilação, utilizam "pacotes" específicos (simulador CHESS associado com subrotinas PROPS - Universidade do Missouri), não disponíveis ao usuário interessado.

Face a esta situação tornou-se necessário desenvolver e implementar um algoritmo específico para o presente problema de otimização utilizando técnicas de programação não-linear. As características do processo mostraram a existência de determinados fatores tais como função objetivo não-diferenciável e conjunto de restrições que, embora altamente estruturado, contém relações não-lineares impedindo a utilização direta de algoritmos convencionais como o Método do Gradiente, Gradiente Reduzido ou outros correlatos [Luenberger,1984]. Para solução deste problema foi implementado um método de otimização irrestrita sem gradiente [Bazaraa,1979] acoplado a subrotinas específicas para satisfação das

restrições não-lineares, bem como técnicas para restrição das variáveis limitadas.

A divisão do trabalho ficou estruturada da seguinte forma :

- o capítulo 2 trata dos aspectos ligados ao estabelecimento de equações e procedimentos aplicáveis à modelagem das colunas de destilação de alta-pureza que reproduzam suas complexas características, de interesse para a engenharia de controle, porém equacionadas de forma mais simples possível, gerando um modelo final robusto, preciso e computacionalmente eficiente.

- o capítulo 3 trata da escolha e implementação de métodos numéricos específicos para solução das equações diferenciais associadas à dinâmica das colunas de destilação. Foram selecionados os métodos de Runge-Kutta Diagonalmente Implícitos, A e S-estáveis de terceira ordem em dois e três estágios, respectivamente, e o método implícito A-estável de primeira ordem de Liniger-Willhoughby. A implementação dos métodos implícitos procura tirar partido de particularidades associadas à matriz Jacobiana da coluna, o que permite o uso de algoritmos específicos para solução das equações implícitas não-lineares geradas por estes métodos de integração.

- o capítulo 4 mostra os resultados obtidos com a modelagem da coluna, bem como um estudo comparativo do desempenho dos métodos numéricos de integração no tocante à precisão, estabilidade e esforço computacional. Procura-se também realizar um estudo do processo sob análise verificando-se a forma de resposta de fatores tais como não-linearidades, atrasos e ganho para diferentes perturbações, com intensidades e sentidos diversos.

- o capítulo 5 trata do desenvolvimento e implementação dos algoritmos de controle adaptativos à coluna de destilação : adaptativo auto-ajustável não-linear, adaptativo auto-ajustável linear, adaptativo auto-ajustável linear com alocação de polos, preditivo generalizado e adaptativo "deadbeat" com tempo de

estabilização finito. São apresentados, em cada caso, o desenvolvimento genérico e a implementação à coluna utilizando-se modelos reduzidos do processo. Nas implementações utilizou-se um modelo posicional ("CARMA") para os controladores não-linear e com tempo de estabilização finito; para os demais utilizou-se a formulação incremental ("CARIMA") permitindo uma verificação das características a eles associadas.

- o capítulo 6 contém os resultados obtidos com a aplicação dos algoritmos de controle à coluna. Os problemas associados a estimação de parâmetros, bem como as técnicas utilizadas em sua solução ("congelamento" de parâmetros, reinicialização da matriz de covariância, filtragem) são discutidos. A performance dos controladores, no tocante à rejeição de carga e rastreamento de referência, é analisada para diversas perturbações no processo.

- a parte relativa à otimização é o objeto do capítulo 7. Apresenta-se inicialmente o desenvolvimento de um algoritmo apropriado que possibilita tratar as complexidades do processo (restrições não-lineares e função objetivo não-diferenciável) utilizando-se o método das coordenadas cíclicas, bem como os resultados de sua implementação à coluna. Características específicas do processo (variação do calor de vaporização com a temperatura e redistribuição de energia entre base e alimentação) permitem melhorar os resultados preliminares obtidos na otimização.

- o capítulo 8 contém as conclusões do trabalho. Procuramos efetuar uma análise crítica dos estudos realizados, em seus pontos positivos e negativos, bem como as sugestões e idéias para futuros trabalhos na área.

Algumas considerações finais :

- os diversos capítulos lidam com temas bastante distintos entre si, que possuem, por vezes, uma simbologia já plenamente solidificada na área (p. ex, $y(\cdot)$ na parte de modelagem e cálculo

de colunas designa, tradicionalmente, a fração molar em fase vapor de um determinado composto ao passo que na área de controle é geralmente utilizada para expressar a saída de um processo) razão pela qual optamos por utilizar simbologia diversa para os diversos capítulos, mantendo a nomenclatura consagrada; tal procedimento, a nosso ver, é preferível que redefinir simbologias universalmente estabelecidas.

- a execução deste trabalho exigiu o levantamento de um considerável acervo bibliográfico relativo aos temas de controle, modelagem e otimização, que consideramos extremamente útil para os interessados nestas áreas. Assim, todas as referências utilizadas no trabalho, ainda que não explicitamente citadas, constam da bibliografia anexa, que constitui um ponto de partida bastante detalhado para interessados nestes temas.

- foram incluídos três anexos ao trabalho: o Apêndice 1 contém o equacionamento e correlações das propriedades dos compostos utilizadas para a modelagem da coluna; o Apêndice 2 contém o cálculo completo da coluna cujos dados foram utilizados para simulação do processo e avaliação da performance dos algoritmos de controle; o Apêndice 3 contém os dados das três colunas utilizadas para avaliação da performance dos métodos de integração, bem como o cálculo da matriz Jacobiana da coluna. Consideramos os Apêndices 1 e 2 particularmente importantes como complementos ao Capítulo 2 pois mostram como determinadas correlações da modelagem são totalmente empíricas e/ou aproximadas, exemplificando a impropriedade de se prender, por vezes, à preciosismos numéricos totalmente equivocados.

CAPÍTULO 2 - MODELAGEM DINÂMICA DO PROCESSO

2.1 - Introdução

O comportamento dinâmico de uma coluna de destilação constitui um assunto bastante específico dentro da área de modelagem e simulação de processos, especificidade esta que deriva fundamentalmente de dois aspectos :

- Algumas das relações dinâmicas existentes em uma coluna de destilação se baseiam em procedimentos heurísticos, ainda não totalmente conhecidos e/ou modelados, o que obriga ao uso de funções aproximadas, simplificações e/ou correlações empíricas, fornecendo assim somente uma idéia aproximada, embora bastante real, do processo físico. Veja-se, por exemplo, os procedimentos recomendados para determinação da eficiência de separação de uma coluna [Van Winckle, 1967] ou a sequência de cálculos envolvidos em seu projeto [Apêndice 2].

- Outras relações, já suficientemente conhecidas e modeladas, se consideradas com o devido rigor analítico exigiriam o emprego de uma série de equações e correlações que demandariam a utilização de computadores de grande porte, dado o esforço computacional e capacidade de memória necessários à sua solução, requisitos estes que podem eliminar a praticidade do

programa. Veja-se, p. ex, o modelo completo proposto por Gani [Gani, 1986a,b]. Por outro lado simplificações excessivas, embora facilmente implementáveis, podem conduzir a respostas totalmente diversas daquelas fornecidas pelo processo real ou obtidas a partir de um modelamento mais rigoroso conduzindo à conclusões totalmente equivocadas no tocante ao comportamento dinâmico da coluna.

O surgimento destas questões, principalmente o ponto abordado no segundo item, deriva do fato de que a simulação da dinâmica desta classe de processos é obtida mediante a solução, através de métodos de integração numérica apropriados, de um conjunto de equações diferenciais ordinárias não-lineares de primeira ordem, com coeficientes variantes e elevada dimensão (podendo ser da ordem de várias centenas), juntamente com a resolução de um conjunto de procedimentos adicionais a cada incremento de integração. Uma ilustração do problema envolvido na modelagem desta classe de processos pode ser compreendida a partir da figura 2.1 que apresenta, em forma esquemática, a variação da composição de um componente x_i , expressa em fração molar, em um estágio genérico de uma coluna de destilação resultante de uma perturbação representada por uma alteração em degrau na vazão do refluxo :

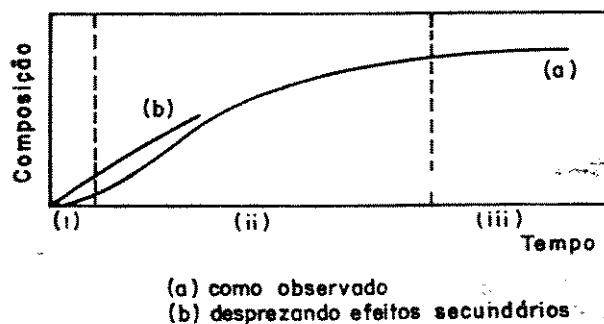


Figura 2.1 - Variação da composição de um componente x_i em um estágio genérico decorrente de uma alteração na vazão do refluxo.

Se a modelagem do processo envolve somente um balanço de massa, ou seja, as relações secundárias são desprezadas, a resposta do processo terá a forma descrita pela curva (b). Se, contudo, as relações secundárias são consideradas a forma da resposta será como descrito pela curva (a), que pode ser sub-dividida em três regiões :

.uma primeira região perto da origem , onde os efeitos secundários são proeminentes, determinando a forma da curva na região I.

.uma região intermediária onde passam a predominar os efeitos de primeira ordem, ou seja, transferência de massa, que se tornam preponderantes sobre os efeitos secundários.

.um novo valor de regime, dominado fundamentalmente pelos efeitos de primeira ordem e que, sob certos aspectos, constitui parte integrante da região II, podendo contudo ser obtido mais facilmente que esta (através do cálculo dos valores de regime do processo).

As regiões (I) e (II) são, respectivamente, as que maiores dificuldades apresentam para seu cálculo por envolverem correlações e efeitos que muitas vezes, como dito anteriormente, não são ainda modelados com a necessária precisão ou então exigem cálculos complexos e demorados.

As curvas de resposta do sistema, mostradas em forma esquemática na figura 2.1, ilustram a questão fundamental que deve norteiar a modelagem : a finalidade prevista para o modelo , que passa a determinar (ou não), a necessidade de se considerar, e em que grau, as relações secundárias na modelagem da coluna. É claro que as considerações efetuadas, por exemplo, por um engenheiro químico que vise estudar a hidrodinâmica dos estágios de separação será bastante diferente daquelas utilizadas por um engenheiro de controle, cujo objetivo principal será, geralmente, o controle das composições terminais da coluna. Mas, mesmo para um engenheiro de controle o problema não tem solução imediata. As curvas da figura

2.1, mostram que as considerações, ou não, dos efeitos secundários, ou mesmo a maneira de considerá-los poderá ser decisiva : se o objetivo de determinada filosofia de controle utiliza como saída do processo a composição x_i no estágio genérico analisado da coluna a dinâmica da lei de controle resultante será diferente conforme se utilize a curva (a) ou (b).

O que se pode observar, fundamentalmente, é que a definição e implementação de modelos se assenta sobre o compromisso : finalidades previstas x reprodutibilidade do processo real. Assim, à medida que mais considerações são efetuadas aumenta de maneira análoga o esforço computacional envolvido na sua solução, mesmo para computadores rápidos e facilmente disponíveis como ,p.ex., micros PC - AT com processador de ponto flutuante, esforço este que pode inviabilizar sua utilização em aplicações onde se necessite uma resposta mais rápida. Portanto, quando de sua implementação deve-se ter em mente um compromisso entre os seguintes itens :

- . equipamentos disponíveis para solução do problema
- . finalidades do modelo
- . tipo de aplicações
- . tempo de resposta necessária
- . usuário potencial

O que se busca, portanto, no tocante à modelagem do processo, não é simplesmente o estabelecimento das equações utilizadas , mas principalmente as simplificações efetuadas, que possam garantir, no conjunto, a obtenção do seguinte compromisso : resultados adequados x finalidades que se deseja atingir. O estabelecimento deste compromisso, para o presente trabalho, assume uma dimensão especial visto que estaremos trabalhando com colunas de destilação de alta pureza onde as composições terminais, a serem controladas, exibem conteúdos de impurezas, no topo e base da coluna, da ordem de 10^2 ppm , o que significa que estaremos utilizando resultados na 5ª casa decimal. As imprecisões envolvidas na modelagem do processo,

portanto, podem conduzir a erros desta magnitudes ou mesmo superiores, gerando conclusões totalmente equivocadas.

É importante que se introduza, para efeitos de esclarecimento e precisão terminológica, o significado de duas concepções de modelos que serão utilizadas ao longo deste trabalho evitando assim confusões de nomenclatura. Dependendo dos objetivos finais, bem como das restrições existentes podem ser destacadas duas classes de modelos:

.Modelos de alta ordem (" High-order models ") - este termo designa a modelagem para a qual se considera um balanço de massa, balanço energético e relações de equilíbrio para cada estágio da coluna, podendo ainda incluir ou não determinados efeitos secundários. Estas considerações geram como resultado final um modelo com alto grau de não-linearidade e dimensão elevada (podendo ser de várias centenas), sendo expresso através das equações diferenciais ordinárias não-lineares de primeira ordem com coeficientes variantes, com sua solução podendo exigir esforço computacional e capacidade de memória só disponíveis em computadores de grande porte. A este tipo de modelo se denominará como de ordem completa.

.Modelos de baixa ordem (" Low-order models ") - são modelos obtidos através de simplificações, linearização ou redução de ordem dos modelos completos. Sua forma final depende das considerações efetuadas para sua obtenção e pode se apresentar como uma função de transferência, equação de estado, equações bilineares e outros mais. Estes modelos são utilizados, geralmente, para sintonia e implementação de algoritmos de controle, treinamento de operadores, levantamento preliminar de correlações, etc. Para aplicações na área de controle um modelo completo, p. exemplo, se utilizado no espaço de estados, pode apresentar várias centenas de variáveis, o que praticamente inviabiliza sua implementação em tempo real. A este modelo denominaremos de ordem reduzida.

Deve ficar portanto claro que o modelo sob análise neste capítulo é um modelo de ordem completa, que será utilizado para simular o comportamento dinâmico da coluna de destilação de alta pureza a ser estudada neste trabalho, devendo reproduzir suas complexidades de forma mais realista possível, pelo menos no que se refere à área de controle. A questão dos modelos reduzidos será abordada no capítulo 4, quando serão definidos e analisados modelos apropriados para implementação dos algoritmos de controle adaptativos.

O modelo completo reproduz de maneira mais realista o processo físico real; esta fidelidade, contudo, ocorre às custas de um aumento de complexidade não só da simulação - e naturalmente do esforço computacional envolvido em sua solução - mas também na obtenção dos dados e correlações diversas necessárias à implementação do programa. Além disto, o trabalho associado ao levantamento e obtenção de dados e correlações necessárias, para um usuário não especializado no assunto, pode, na prática, inviabilizar seu uso. A grande utilização do modelo completo, contudo, reside no fato de mesmo servir como uma réplica bastante aproximada do processo real permitindo o estabelecimento e mesmo validação dos próprios modelos reduzidos, quando não existe uma coluna real que possa permitir tal procedimento.

O presente capítulo trata de considerações utilizadas para modelagem e implementação do programa para simulação digital do comportamento dinâmico de uma coluna de destilação de alta pureza, através de um modelo de ordem completa. Sua implementação foi norteada pelas finalidades previstas para a tese, considerando os seguintes aspectos :

. o modelo obtido não visa a reprodução do comportamento de uma coluna real já existente, visto a mesma não se encontrar disponível, porém deve reproduzir as características básicas inerentes a este processo. A reprodução da dinâmica de colunas

reais inclui geralmente o levantamento de correlações empíricas a partir do modelo real, como p. exemplo, considerações sobre arraste em fase líquida e vapor [Loud,1978], que não são proeminentes no nosso caso, como veremos ao longo deste capítulo.

. sua utilização visa o estudo do comportamento dinâmico de uma coluna específica, no tocante à sua controlabilidade. Esta coluna é utilizada para separação de uma mistura binária consistindo de SiHCl_3 - SiCl_4 e constitui parte integrante do processo de obtenção do silício policristalino de grau eletrônico [Gomes, 1984,1985,1986a,b]. Deve portanto ser capaz de reproduzir fenômenos fundamentais para a engenharia de controle, tais como não-linearidades, dinâmica assimétrica, atrasos e outros aspectos que serão analisados com mais profundidade no capítulo 4.

. dada a infra-estrutura disponível, o programa final deve ser capaz de ser utilizado em micro-computadores do tipo PC, preferencialmente com processador de ponto flutuante. O programa final será considerado com um desempenho aceitável se a simulação de uma hora do comportamento dinâmico da coluna puder ser efetuado em questão de minutos.

. o modelo deve possibilitar simulações diversas na área de controle de processos, tais como teste e sintonia de malhas diversas, estimação de parâmetros, validação de modelos reduzidos e implementação de algoritmos diversos de controle adaptativo.

2.2 - Histórico

A definição de um modelo apropriado, adequado às finalidades do nosso trabalho, conforme descrito no item anterior, exigiu um levantamento bibliográfico bastante detalhado do assunto. A complexidade do assunto pode ser avaliada pelo grande número de teses de mestrado e doutorado existentes localizadas na literatura

[Benallou,1986; Gani,1980; Ruiz,1984; Economopoulos,1973; Howard,1970; Wong,1985 e outros mais]. Uma colocação mais clara do problema pode ser obtida através de um breve histórico, mediante a escolha e análise sucinta de alguns momentos mais destacados deste processo, mais especificamente a maneira de se resolver as dificuldades existentes na formulação e solução deste conjunto de equações não-lineares.

Historicamente , a primeira tentativa de simulação do comportamento dinâmico de uma coluna de destilação data de 1937 [Huffman,1937], e se relaciona com a separação de isótopos de oxigênio. Neste trabalho, o que se entendia como " simulação do comportamento dinâmico " da coluna de separação dos isótopos (H_2O^{16} e H_2O^{18}) era "simplesmente" o correlacionamento de dados visando o desenvolvimento de uma fórmula para previsão da variação temporal da concentração de H_2O^{18} , sendo obtida a seguinte expressão :

$$(1 - N) \log \left[\frac{1 - N}{1 - N_0} \right] + N \log \left[\frac{N}{N_0} \right] = k \frac{\log \alpha}{H} Kt$$

onde n é a fração molar do constituinte pesado em um ponto da coluna, N a fração molar do material original, N_0 a fração molar em regime, K representa a taxa de transporte de material, t o tempo, α é a volatilidade relativa dos compostos e finalmente, k representa o número de estágios por unidade de comprimento. Os autores reportam erros médios da ordem de 3%, erros estes que tendiam a crescer com a concentração de H_2O^{18} .

Logo a seguir, na década de 40 e 50 pode-se assinalar um intenso trabalho envolvendo a modelagem dinâmica da destilação contínua e em bateladas. Um dos fatores que impulsionaram estes estudos, além das necessidades industriais, foi a possibilidade de se solucionar equações diferenciais ordinárias não-lineares com coeficientes variantes mediante procedimentos numéricos através dos analisadores diferenciais e computadores analógicos. Entre os mais importantes trabalhos desta época pode-se citar Marshall

[Marshall,1947] que pela primeira vez utilizou equações diferenciais a diferença para modelagem de uma coluna. Marshall modelou uma coluna de pratos através de um balanço de massa e suposição de relação linear de equilíbrio ($y_n = \alpha x_n$) que aplicado a um estágio n fornece :

$$(CH/L) \dot{x}_n = x_{n-1} - (1+\alpha)x_n + \alpha x_{n+1}$$

onde H representa a retenção molar no estágio considerado, L as vazões da coluna, x_n a composição da fase líquida no estágio n e y_n a composição em fase vapor no mesmo estágio.

A solução destas equações foi obtida mediante aplicação da transformada de Laplace fornecendo uma solução da forma

$$x_n = \frac{A_0}{\alpha^n} + \sum_{m=0}^{N+1} A_m X_{n,m} e^{-\beta_m (L/H)}$$

com a determinação da menor constante β_0 , preponderante na resposta do sistema, envolvendo a solução de uma equação transcendental mediante procedimentos de tentativa e erro.

Logo a seguir Pigford [Pigford,1951] estudou o efeito da retenção molar na separabilidade de compostos binários com taxa de refluxo constante para destilação em bateladas utilizando um analisador diferencial mecânico. Dada as limitações do equipamento foi utilizado um modelo com retenção em fase vapor nula, estágios ideais, ausência de gradientes de concentração, retenção e vazão molar constantes. O grande problema, representado pelas relações não-lineares de equilíbrio entre fases foi resolvido mediante uma equação simples

$$y_n = \alpha x_n - (\alpha - 1)x_n^2$$

onde α = constante arbitrária que satisfaça o melhor possível a equação de volatilidade relativa e x_n e y_n definidos como

anteriormente.

Outro trabalho da mesma época que merece ser referenciado é o de Davidson [Davidson,1956] que simulou uma coluna com alimentação no topo e sem retirada na base adotando suposições semelhantes às adotadas por Marshall [Marshall,1947]. A inovação introduzida por Davidson em relação à Marshall consistiu no uso da equação de Rayleigh para determinação da constante β_0 mediante analogia entre uma coluna de destilação e as vibrações de um sistema mecânico, evitando assim a necessidade de se solucionar equações transcendentais mediante tentativa e erro.

As possibilidades abertas pela simulação dinâmica das colunas de destilação foram logo percebidas pelos engenheiros da área de controle com Wilkinson [Wilkinson,1957] publicando talvez os primeiros trabalhos de simulação visando especificamente o controle de colunas. O sistema estudado foi uma coluna de pratos, com as equações convencionais do balanço de massa mas com suposição de relações lineares de equilíbrio (diferentes para cada seção da coluna). O estudo efetuado procurou verificar a resposta da composição do destilado, δx_D , à perturbações na concentração da alimentação. As equações diferenciais do sistema foram transformadas de ordinárias para parciais e solucionadas por Laplace; a resposta do destilado à uma entrada em degrau na alimentação foi obtida a partir da integral de Duhamel [Cheng,1972]:

$$\delta x_D = \frac{d}{dt} \int_0^t \phi_D(t - \xi) \delta y_F(\xi) d\xi$$

Foi publicado logo a seguir um dos primeiros trabalhos de simulação de colunas envolvendo a utilização de computadores digitais [Rose,1957]. O trabalho mais importante, contudo, e considerado como realmente o pioneiro na área de simulação digital pode ser creditado a Rosenbrock [Rosenbrock, 1958a,b,c]. Nestes trabalhos as relações de equilíbrio, expressando correlações ainda

bastante complexas para cálculo nos computadores então disponíveis foram substituídas por dados tabelados (máximo de 101 pontos); as equações do balanço de massa foram as convencionais.

A introdução dos computadores digitais, embora tenha, por um lado, permitido a aplicação de condições mais realistas para as relações de equilíbrio introduziu, por outro, complexidades ainda não existentes e que se relacionavam com a estabilidade dos métodos numéricos utilizados. Rosenbrock utilizou inicialmente um processo de integração simples de Euler

$$\delta x_n = (\delta t / H_n) \left[L_{n+1} x_{n+1,i} - L_n x_{n,i} + V_{n-1} y_{n-1,i} - V_n y_{n,i} \right]$$

com $\delta x_n = x_n(t_2) - x_n(t_1)$, $\delta t = t_2 - t_1$, $V_n =$ vazão de vapor no estágio n e L_n , x_n e y_n definidos como anteriormente, mas os problemas de instabilidade obrigaram-no à utilização de um incremento de integração extremamente curto inviabilizando a utilização prática do método. Foi então utilizado um método ponderado

$$\delta x_n = \delta t \left[(1-\theta) / (H_n) \right] \left[L_{n+1} x_{n+1,i} - L_n x_{n,i} + V_{n-1} y_{n-1,i} - V_n y_{n,i} \right]^{(t_1)} +$$

$$\left[\theta / (H_n) \right] \left[L_{n+1} x_{n+1,i} - L_n x_{n,i} + V_{n-1} y_{n-1,i} - V_n y_{n,i} \right]^{(t_2)}, \quad 0 < \theta < 1$$

que melhorou os resultados da simulação, mas mesmo assim estas ficaram reduzidas a sistemas binários visto que sistemas multicomponentes apresentaram problemas de memória e erros de arredondamento no trato com traços de compostos. As simulações de Rosenbrock envolveram somente a dinâmica da coluna partindo de um estado inicial até alcançar o estado de regime.

Logo no início da década de 60 a disponibilidade de computadores digitais e analógicos com maior capacidade de memória e processamento permitiu a simulação de sistemas mais complexos, com a

adoção de condições menos restritivas no tocante às equações utilizadas e técnicas de solução já bastante elaboradas, mas não permitindo ainda a utilização de técnicas iterativas a cada incremento de integração.

Um aspecto importante a ser observado é que o interesse da engenharia de controle sobre a simulação digital de colunas tendeu a crescer com Lamb [Lamb,1961] utilizando uma abordagem eminentemente de controle para a simulação de uma coluna. Neste trabalho a resposta em frequência do processo, bem como seu comportamento transitório foram simulados através de variáveis perturbadas linearizadas, com as relações de equilíbrio, expressas por uma função genérica $\phi(\bar{x}_n)$, substituídas por uma série de linhas retas, uma para cada estágio da coluna, com cada tangente à curva no ponto considerado correspondendo à composição em regime das fases líquidas e vapor. Os transitórios nas composições no estágios, resultantes de alterações na composição da alimentação e vazão de refluxo foram calculadas mediante computação analógica.

Os problemas de instabilidade suscitados pela utilização de integração numérica, bem como a crescente capacidade de cálculo e memória dos computadores na década de 60, aliados às limitações apresentadas pela computação analógica para trabalhos com sistemas de maior porte fizeram surgir não só diversos estudos no tocante aos problemas numéricos, mas também soluções mais ousadas, onde as teorias de controle ocupavam lugar de destaque, visando a reprodução de um comportamento real das colunas.

Um estudo bastante completo foi efetuado por Mah [Mah,1962] e Sargent [Sargent,1963] que através de equações linearizadas propuseram um método utilizando uma matriz de transição de estado com coeficientes constantes durante intervalos especificados de tempo. Ao final de cada intervalo o erro envolvido na linearização era estimado (através das relações de equilíbrio) e, se necessário, as constantes eram então reavaliadas. Os autores efetuaram a integração em computador digital, testando diversos métodos

numéricos para solução das equações diferenciais, entre os quais Kutta-Simpson, Euler, o método utilizado por Rosenbrock [Rosenbrock,1958] e a solução por eles proposta.

Um importante trabalho foi realizado por Huckaba [Huckaba,1963] que simulou em computador digital uma coluna contínua procurando verificar a resposta do sistema à alterações em degrau na vazão do refluxo, porém procurou simular um sistema real utilizando correlações empíricas para as relações de equilíbrio, entalpia, capacidade calorífica e eficiência de separação. As simulações foram efetuadas em um computador IBM650 utilizando o método de integração de Adam modificado, inicializado pelo método de Runge-Kutta-Gill.

Outra solução foi proposta por Waggoner [Waggoner, 1965] através de conversão das equações diferenciais em algébricas, solucionadas então iterativamente mediante a utilização de um método similar ao cálculo do estado estacionário da coluna (dentro de um intervalo especificado de tempo) para solução dos balanços energéticos e de massa.

Uma importante simplificação prática foi introduzida inicialmente por Svreck [Svreck,1967] e utilizada logo após por Distefano [Distefano,1968] que, mediante combinação apropriada das equações do balanço de massa e energia, bem como aproximação numérica das taxas de variação da entalpia e da retenção molar explicitou as vazões líquidas e de vapor diretamente, assegurando ainda um comportamento aproximado da dinâmica do balanço energético e hidráulico.

Na década de 70 a simulação do comportamento dinâmico das colunas de destilação visando não só uma análise de sua dinâmica, mas principalmente a performance de malhas de controle já era uma realidade . Um importante trabalho desta época foi realizado por McCune [McCune,1973] que analisou concepções diversas de controle para colunas de destilação utilizando para teste das malhas a simulação digital do processo em um System/360 com linguagem CSMP.

A partir de então diversos trabalhos de simulação podem ser localizados na literatura, cada qual com enfoque e solução diversa, dependendo da finalidade almejada. Assim é possível citar o trabalho de Gani [Gani,1986a,b] que procurou expressar todas as relações da coluna utilizando os dados de projeto das partes internas da mesma; Osborne [Osborne,1971] utilizou um modelagem com equações diferenciais parciais; Economopoulos [Economopoulos,1978] trabalhou com métodos de integração ponderado de primeira ordem, linearizando a coluna ponto a ponto após conveniente transformação das derivadas totais em parciais; Morris [Morris,1981] efetuou modelagem diversa dos balanços convencionais geralmente adotados utilizando as equações de estado de Peng-Robison; Choe [Choe,1987] modelou uma coluna com considerações sobre a retenção em fase vapor procurando verificar o efeito desta consideração nos resultados finais. O assunto, contudo, longe de se esgotar, continua sendo objeto de estudos e publicações, como se pode verificar nesta bibliografia mais recente citada.

O modelo utilizado neste trabalho, como já dito anteriormente, foi desenvolvido para levantamento das características básicas do sistema a ser estudado e simulações na área de controle, de uma maneira bem ampla (testes e sintonia de concepções diversas de malhas de controle, estimação de parâmetros, estabelecimento e validação de modelos reduzidos, etc.), para utilização em micros do tipo PC, preferencialmente com processador de ponto flutuante e destinado a usuários com conhecimento elementar do processo, sem necessidade de maior especialização na área. Os dados e correlações necessárias à sua utilização foram selecionados de maneira a serem obtidos a partir das propriedades básicas dos compostos envolvidos. Os detalhes, considerações e simplificações utilizadas são apresentadas a seguir.

2.3. Equações Aplicáveis

2.3.1 - Formulação geral do problema

O comportamento dinâmico de uma coluna de destilação pode ser expresso por um conjunto de equações diferenciais de primeira ordem, não-lineares, com coeficientes variantes, formuladas como

$$\dot{z} = f_1(z, P, t), \quad (2.1)$$

$$\dot{z} \in \mathbb{R}^n, \quad P \in \mathbb{R}^m, \quad t \in [a, b] \quad \text{e} \quad f_1: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^1 \longrightarrow \mathbb{R}^n$$

onde as equações diferenciais expressam os balanços de massa e energia nos n estágios, P um conjunto de relações entre as diversas variáveis do processo, t o tempo e dimensão de $[n, m]$ dependendo das considerações efetuadas na modelagem.

O conjunto de funções P pode ser expresso em sua formulação geral por

$$P = f_2(z, r, t), \quad (2.2)$$

$$r \in \mathbb{R}^l \quad \text{e} \quad f_2: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^l \times \mathbb{R}^1 \longrightarrow \mathbb{R}^m$$

onde r expressa um conjunto de variáveis e relações da coluna abrangendo itens tais como configuração dos internos, propriedades físicas dos compostos e outros e dimensão de $[l]$ dependente também das considerações adotadas. A simulação dinâmica do processo, efetuada mediante integração numérica das equações (2.1) e solução dos procedimentos (2.2) parte do pressuposto básico que as constantes de tempo envolvidas na dinâmica do processo, para cada estágio n e composto i , são bastante superiores ao incremento de

integração adotado para o processo. Baseado nesta suposição, o procedimento para solução do problema consiste em, tendo-se o valor de z em um determinado instante de tempo t avaliar seu novo valor no instante $t + \Delta h$, onde Δh é o incremento de tempo utilizado na solução numérica das equações diferenciais :

1. A partir do estado atual do processo avaliar as relações r_t e o conjunto de funções P_t , utilizando-se f_2
2. Avaliar o conjunto de equações diferenciais \dot{z}_t com o auxílio das funções f_1
3. Mediante um método de integração apropriado avaliar $z_{t+\Delta h}$
4. Faça $z_t = z_{t+\Delta h}$; retornar ao passo 1.

Sob este enfoque veremos que as complexidades associadas à modelagem do comportamento dinâmico das colunas de destilação residem nos seguintes aspectos :

- considerações efetuadas para o conjunto de funções P (equações utilizadas e simplificações possíveis) e, em parte, das relações f_1 .
- procedimentos apropriados para avaliação de $x_{t+\Delta h}$ (escolha e implementação de métodos numéricos adequados à solução do problema).

Veremos neste capítulo a primeira questão, relativa aos procedimentos para avaliação de P e f_1 . A análise dos métodos numéricos será objeto do capítulo três.

2.3.2 - Balanços Aplicáveis

Uma coluna de destilação constitui um sistema de múltiplos

estágios interligados, aos quais se aplicam simultaneamente um balanço de massa (total e parcial), um balanço energético, relações de soma e equilíbrio além de uma avaliação do conjunto de correlações descrito por (2.2). As equações aplicáveis, referindo-se à figura 2.2, podem ser expressos da seguinte forma (os símbolos, quando não citados explicitamente, podem ser encontrados no final do texto):

. Balanço total de massa para um estágio genérico n :

$$\begin{aligned} \overset{\circ}{U}_n = & F_{v,n} + F_{l,n} + L_{n+1} - L_n + V_{n-1} - V_n - P_{l,n} - P_{v,n} - E_{l,n} \\ & + E_{v,n+1} + E_{l,n-1} - E_{v,n} \end{aligned} \quad (2.3)$$

. Balanço parcial de massa para o estágio n e composto i :

$$\begin{aligned} \frac{\overset{\circ}{U}_n x_{n,i}}{U_n} = & F_{v,n} y_{Fn,i} + F_{l,n} x_{Fn,i} + L_{n+1} x_{n+1,i} - L_n x_{n,i} + \\ & V_{n-1} y_{n-1,i} - V_n y_{n,i} - P_{l,n} x_{n,i} - P_{v,n} y_{n,i} \\ & - E_{l,n} x_{n,i} + E_{v,n+1} y_{n+1,i} + E_{l,n-1} x_{n-1,i} - E_{v,n} y_{n,i} \end{aligned} \quad (2.4)$$

. Balanço energético para um estágio genérico n :

$$\begin{aligned} \frac{\overset{\circ}{U}_n h_n}{U_n} = & F_{v,n} H_{F,n} + F_{l,n} h_{F,n} + L_{n+1} h_{n+1} - L_n h_n + V_{n-1} H_{n-1} \\ & - P_{l,n} h_n - P_{v,n} H_n - E_{l,n} h_n + E_{v,n+1} H_{n+1} + E_{l,n-1} h_{n-1} \\ & - V_n H_n - E_{v,n} H_n \end{aligned} \quad (2.5)$$

onde h_n e H_N expressam, respectivamente, as entalpias em fase líquida e vapor para o enésimo estágio.

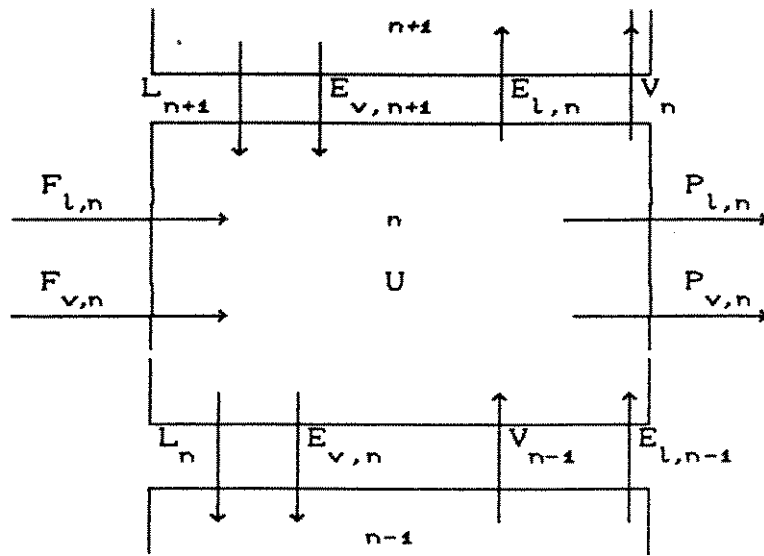


Figura 2.2 - Estágio genérico de uma coluna de destilação

Como analisado anteriormente torna-se necessário, para o estabelecimento dos balanços e relações aplicáveis, efetuar uma série de considerações e simplificações relativas à coluna. Dentre estas hipóteses, aquelas que ou forem de uso comum nos trabalhos de modelagem de colunas ou que, de maneira inequívoca não interferirem diretamente nos resultados pretendidos para o modelo em estudo serão adotadas sem análises adicionais ; as que considerarmos mais problemáticas e cuja adoção ou eliminação puderem influir nos resultados pretendidos para a coluna serão discutidos com mais profundidade. Para a primeira classe serão adotadas as seguintes hipóteses :

. A coluna constitui um sistema adiabático, com capacidade térmica desprezível. Interações térmicas com o meio-ambiente ocorrerão somente através de variações energéticas no refulvedor, condensador e na alimentação do processo.

. Nos diversos estágios, condensador e refulvedor é suposta a

existência de mistura perfeita, completamente homogênea, sem gradientes térmicos ou de composição, para ambas as fases.

. A eficiência da separação será expressa, em cada estágio, pela equação de eficiência em fase vapor de Murphree (equação 2.42), permitindo ao usuário adotar um valor de eficiência constante para toda a coluna ou variável para cada estágio.

. É suposta a existência, em todo instante, de equilíbrio perfeito entre fases em todos os estágio, condensador e refeedor.

. A distribuição de pressão é suposta linear ao longo da coluna, a partir de um valor estabelecido para o topo ou base, com queda constante para cada estágio. Esta suposição é utilizada na maioria dos trabalhos de simulação e configura uma situação bastante próxima da realidade, além de facilitar enormemente o cálculo do equilíbrio entre fases.

. O refeedor opera como um estágio de equilíbrio.

. Os termos de arraste E_v e E_l ("entrainment" em fase vapor e líquida) afetam principalmente a eficiência da coluna ao efetuarem o transporte de material entre estágios adjacentes. Seu valor, quando do projeto da coluna não deve ultrapassar um determinado limite (geralmente 10%, para as vazões máximas consideradas em projeto) [Ver Apendice 2]. Em condições nominais representam parcela pouco significativa do transporte de massa da coluna razão pela qual não serão considerados nos balanços efetuados. Entre os diversos trabalhos de modelagem somente aqueles que tratam de reproduzir, mediante simulação, as mesmas condições de uma coluna real assinalam, por vezes, a necessidade de sua utilização [Howard,1970] sendo que nos trabalhos gerais de simulação para finalidades de controle, como no presente caso, são sempre desprezados.

A introdução e retirada de material no processo, representados pelos termos F_l , F_v , P_l e P_n serão consideradas existentes somente no estágio de alimentação (introdução), base e topo da coluna (retirada). Embora existam colunas com múltiplas alimentações e retiradas, alimentação pelo topo ou base e múltiplas retiradas de material, a coluna que analisaremos será do tipo convencional, com uma alimentação intermediária e retirada de material pelo topo e base. Adicionalmente, podemos afirmar que praticamente 100% dos trabalhos de simulação e controle de colunas lidam com equipamentos deste tipo.

2.3.2.1 - Balanço de massa :

Efetuando-se as considerações mencionadas no item anterior a equação do balanço parcial de massa, para um estágio genérico será :

$$\dot{U}_n x_{n,i} = L_{n+1} x_{n+1,i} - L_n x_{n,i} + V_{n-1} y_{n-1,i} - V_n y_{n,i} \quad (2.6)$$

Desmembrando-se a derivada do primeiro membro

$$U_n \dot{x}_{n,i} + \dot{U}_n x_{n,i} = L_{n+1} x_{n+1,i} - L_n x_{n,i} + V_{n-1} y_{n-1,i} - V_n y_{n,i} \quad (2.7)$$

Uma consideração geralmente utilizada nos trabalhos de simulação consiste na suposição de retenção molar, U_n , constante. Não adotaremos esta suposição pelas implicações que pode acarretar nos resultados finais da simulação, especialmente para respostas a perturbações que envolvam alterações das vazões líquidas internas. Esta consideração será discutida em maiores detalhes no item 2.3.3. Considerando-se a equação do balanço total de massa a expressão acima fica :

$$U_n \dot{x}_{n,i} + \left(L_{n+1} - L_n + V_{n-1} - V_n \right) x_{n,i} =$$

$$L_{n+1} x_{n+1,i} - L_n x_{n,i} + V_{n-1} y_{n-1,i} - V_n y_{n,i} \quad (2.8)$$

que devidamente manipulada fornece para a base, estágios genéricos, estágio de alimentação e topo da coluna :

-Base :

$$\dot{x}_{B,i} U_B = L_1 (x_{1,i} - x_{B,i}) - V_B (y_{B,i} - x_{B,i}) \quad (2.9)$$

-Estágio genérico n :

$$\dot{x}_{n,i} U_n = V_{n-1} (y_{n-1,i} - x_{n,i}) + L_{n+1} (x_{n+1,i} - x_{n,i})$$

$$- V_n (y_{n,i} - x_{n,i}) \quad (2.10)$$

-Estágio de alimentação:

$$\dot{x}_{nf,i} U_{nf} = V_{nf-1,i} (y_{nf+1,i} - x_{nf,i}) + L_{nf+1} (x_{nf+1,i} - x_{nf,i})$$

$$- V_{nf} (y_{nf,i} - x_{nf,i}) + F_L (x_{F,i} - x_{nf,i}) \quad (2.11)$$

-Estágio acima da alimentação :

$$\dot{x}_{n,i} U_n = V_{n-1} (y_{n-1,i} - x_{n,i}) + L_{n+1} (x_{n+1,i} - x_{n,i}) - V_n (y_{n,i} - x_{n,i}) +$$

$$F_V (y_{F,i} - x_{n,i}) \quad (2.12)$$

-Topo:

$$\dot{x}_{nT,i} U_{nT} = R (x_{D,i} - x_{nT,i}) + V_{nT-1} (y_{nT-1,i} - x_{nT,i}) -$$

$$V_{nT} (y_{nT,i} - x_{nT,i}) \quad (2.13)$$

2.3.2.2 - Balanço energético :

Desmembrando-se a derivada do balanço energético (equação 2.5) e efetuando-se as mesmas considerações adotadas para o balanço de massa obtém-se :

$$\dot{U}_n h_n + U_n \dot{h}_n = L_{n+1} h_{n+1} - L_n h_n + V_{n-1} H_{n-1} - V_n H_n \quad (2.14)$$

A equação do balanço total de massa será substituída na expressão acima fornecendo

$$\left[L_{n+1} - L_n + V_{n-1} - V_n \right] h_n + U_n \dot{h}_n = L_{n+1} h_{n+1} - L_n h_n + V_{n-1} H_{n-1} - V_n H_n \quad (2.15)$$

que devidamente manipulada fornece, algebricamente, as vazões de vapor nos diversos estágios :

.Base da coluna :

$$V_B = \frac{L_1 (h_1 - H_B) + Q_B - U_B \dot{h}_B}{H_B - h_B} \quad (2.16)$$

.Estágio genérico n:

$$V_n = \frac{L_{n+1} (h_{n+1} - h_n) + V_{n-1} (H_{n-1} - h_n) - U_n \dot{h}_n}{H_n - h_n} \quad (2.17)$$

.Estágio de alimentação:

$$V_n = \frac{L_{n+1} (h_{n+1} - h_n) + V_{n-1} (H_{n-1} - h_n) + F_L (h_F - h_n) - U_n \dot{h}_n}{H_n - h_n} \quad (2.18)$$

. Estágio acima da alimentação:

$$V_n = \frac{L_{n+1} (h_{n+1} - h_n) + V_{n-1} (H_{n-1} - h_n) + F_v (H_F - H_n) - U_n h_n}{H_n - h_n} \quad (2.19)$$

. Topo da coluna :

$$V_{nT} = \frac{R (h_D - h_{nT}) + V_{nT-1} (H_{nT-1} - h_{nT}) - U_{nT} h_{nT}}{H_{nT} - h_{nT}} \quad (2.20)$$

Esta formulação algébrica do balanço energético foi inicialmente proposta por Svreck [Svreck,1967], sendo utilizada em praticamente todos os trabalhos de simulação analisados. O ponto controverso a seu respeito está relacionado com o cálculo da derivada da entalpia sobre o qual existem algumas divergências na literatura, pois enquanto alguns autores enfatizam sua necessidade [McCune,1973] outros não a consideram necessária [Luyben,1973]. Neste trabalho optamos pela sua utilização, visto que o esforço computacional suplementar será insignificante e sua não utilização, segundo alguns autores, pode acarretar erros consideráveis [Distefano,1968]. A questão que surge é o cálculo de $\partial h / \partial t$ que analizaremos no item 2.4.1.

As equações associadas aos balanços, representativas dos efeitos de primeira ordem na coluna, constituem um ponto pouco controverso na literatura, sendo geralmente implementadas com pequenas variações em relação às formulações apresentadas. Os pontos mais controversos serão analisados a seguir.

2.3.3 - Retenções nos estágios :

Para cálculo das retenções nos estágios três suposições podem ser utilizados :

- Retenção molar constante
- Retenção volumétrica constante
- Retenção variável

Cada uma das hipóteses acima possui suas vantagens e desvantagens e, como todo o resto da análise efetuada neste capítulo, deverá ser adotada a partir do compromisso mencionado no item 2.1. As considerações e implicações relativas a cada uma das três possibilidades acima serão rapidamente analisadas.

2.3.3.1 - Retenção molar constante

É a hipótese de mais fácil implementação e cálculo, além de ser talvez a mais utilizada nos trabalhos de simulação, porém a menos realista. Nesta hipótese o balanço de massa é sempre nulo para cada estágio, o que permite explicitar algebricamente as vazões líquidas para os estágios, refeedor e topo da coluna a partir das equações do balanço de massa

$$L_{n+1} = L_n - V_{n-1} + V_n \quad (2.24)$$

que, iniciadas a partir de um extremo da coluna, fornecem, recursivamente todas as vazões ao longo da mesma. O volume molar retido em cada estágio afeta diretamente a composição em cada estágio (Equações 2.9 a 2.13), além de afetar não-linearmente as vazões líquidas na coluna (equação 2.25). A suposição de retenção constante, portanto, não só pode introduzir erros no cálculo das composições nos estágios como ainda, visivelmente, degrada a dinâmica assumida para o processo.

2.3.3.2 - Retenção volumétrica constante

É uma suposição muito próxima do comportamento real de um estágio e sua implementação, embora mais elaborada que a anterior, é ainda relativamente simples. Neste caso, se a retenção volumétrica é

constante a retenção molar pode ser expressa por

$$U_n = U_v \rho_n \quad (2.22)$$

onde U_v representa o volume líquido no enésimo estágio e $\rho_n = f_n(T_n, P_n, x_{i,n})$ a densidade da mistura líquida no mesmo estágio como função da temperatura, pressão e concentração dos componentes. Qualquer alteração na coluna que altere seus perfis de composição, temperatura e pressão acarretará uma alteração δ_n na retenção molar que se manifesta então no balanço de massa. Para este caso as vazões líquidas podem ser calculadas mediante dois procedimentos :

-Aproximação numérica da dinâmica da retenção : para este caso manipula-se a equação do balanço de massa de modo a explicitar as vazões líquidas diretamente :

$$L_{n+1} = L_n - V_{n-1} + V_n + \dot{U}_n \quad (2.23)$$

onde \dot{U}_n será expresso por uma aproximação numérica de primeira ordem dada por

$$\dot{U}_n = \frac{U_n^{t+\Delta t} - U_n^t}{\Delta t} \quad (2.24)$$

Este enfoque, embora mais realista que o anterior, contém porém dois aspectos negativos : a suposição de uma relação linear e com atraso nulo entre as retenções e as vazões líquidas além de adicionalmente, estar sujeita aos problemas numéricos decorrentes do cancelamento subtrativo [MacCracken,1980].

-Utilização da equação de Francis : caso se disponha dos dados referentes aos internos da coluna pode-se utilizar a equação de Francis [Van Winckle,1967] que relaciona as vazões líquidas com os novos valores obtidos para a retenção molar, através da altura do líquido sobre o vertedouro ("weir equation") :

$$h_v = .48 F_v \left\{ \frac{L_{ps}}{l_v} \right\}^{.67} \quad (2.25)$$

onde h_v representa a altura do líquido sobre o vertedouro (polegadas) ; F_v é um fator de correção (ver Apêndice 2); L_{ps} significa a vazão líquida (gpm) e l_v o comprimento do vertedouro(pés), com o valor de h_v sendo obtido a partir das correlações geométricas da coluna (ver Apêndice 2). Esta formulação supõe uma dinâmica não-linear e com atraso entre as retenções e as vazões.

2.3.3.3 - Retenção variável

Neste caso procura-se exprimir de maneira mais completa possível a dinâmica de um estágio com o auxílio dos dados geométricos e propriedades físicas dos compostos. Mesmo nesta hipótese o grau de suposições e simplificações varia, podendo-se calcular as novas retenções a partir das equações diferenciais (2.3) e a seguir utilizar-se a correlação empírica de Francis citada acima. Outra suposição consiste na avaliação da retenção molar nos estágios e das novas vazões líquidas mediante correlação física e geométrica dos compostos e internos da coluna utilizando-se dados de projeto de maneira bastante mais elaborada que o caso anterior (ver Apêndice 2), hipótese esta adotada por Gani [Gani,1986a,b] :

$$U_n = \beta_n (h_v + h_v) \frac{A_n \rho_{L,n}}{M_{L,n}} + (h_n + h_n^{DA} + h_n^L) \frac{\rho_{L,n} A_D}{M_{L,n}} \quad (2.26)$$

Esta suposição, claramente, implica em um esforço computacional sensivelmente maior que a anterior em virtude dos diversos cálculos a serem realizados bem como um conhecimento detalhado dos parâmetros de projeto da coluna.

Para definição da hipótese a ser utilizada nas nossas simulações optamos por um teste prático : implementação das

suposições 2.3.3.2 e 2.3.3.3 e análise dos resultados verificando o grau de diferença entre os mesmos. Caso a hipótese de retenção variável apresente resultados discrepantes em relação à hipótese de retenção volumétrica constante seremos obrigados a adotá-la pagando o tributo do esforço computacional adicional. Os resultados obtidos [ver Capítulo 4], felizmente, mostraram que ambas as hipóteses forneceram resultados praticamente iguais, não justificando a sobrecarga de cálculos impostos pela retenção variável. Utilizamos no presente trabalho a hipótese 2.3.3.2 : retenção volumétrica constante e cálculo das novas vazões pela correlação de Francis.

2.3.4 - Simulação do condensador

As equações do condensador podem ser bastante variadas, envolvendo desde a dinâmica dos trocadores de calor até a simples suposição de um condensador total e perfeito, com a definição da formulação apropriada dependendo das mesmas considerações efetuadas para o resto da coluna. Há que se considerar que o condensador constitui importante fonte de distúrbios do processo, quer pelas oscilações naturais que apresenta na prática como também pela possibilidade de se inserir perturbações diversas no sistema em casos de teste e performance de malhas de controle. Uma suposição geralmente utilizada em simulações é um condensador total e perfeito, no qual a energia retirada do processo, a cada iteração, é sempre igual à quantidade necessária para condensação total, no ponto de bolha, da vazão total proveniente do último estágio da coluna. Esta suposição, embora idealizada, tem o atrativo de expressar toda a dinâmica do topo da coluna e condensador através de um único balanço energético diminuindo o esforço computacional e acelerando a simulação. Nesta hipótese teríamos um balanço expresso por

$$\begin{cases} V_{NT} = R + D \\ V_{nT} H_{nT} = D h_D + R h_R \\ x_D = y_{NT} \end{cases} \quad (2.27)$$

Esta hipótese, embora atraente do ponto de vista computacional não é a melhor sob a hipótese de controle uma vez que supõe a existência de uma situação sempre perfeita no conjunto topo da coluna/acumulador dificultando assim a introdução de distúrbios e degradando a dinâmica real do processo. No presente modelo optou-se pelo desenvolvimento de um modelo mais complexo que permitisse a propagação de perturbações ao longo da coluna e uma dinâmica mais realista, sem contudo incluir cálculos elaborados dos trocadores de calor. Foi então estabelecido o seguinte modelo para o conjunto topo da coluna/condensador :

- . A energia retirada do condensador é constante (dada pelo seu valor de regime) podendo contudo ser alterada a qualquer instante pelo usuário.

- . dentro de cada intervalo de integração o condensador é suposto em regime. Tal hipótese pode ser adotada, visto que a constante de tempo associada ao condensador é bastante superior às constantes associadas aos diversos estágios da coluna.

- . a troca de calor é suposta perfeita e homogênea para todo o material.

- . O tanque do refluxo, dentro de cada incremento de integração, é suposto em regime, comportando uma mistura homogênea .

Face à estas considerações a dinâmica do conjunto condensador/tanque do refluxo envolve duas hipóteses :

1) A energia retirada no condensador (Q_c) é inferior à necessária (Q_{MIN}) para condensação total do material : neste caso somente uma fração D_l será condensada , sendo expressa por

$$D_l = \frac{Q_c V_{NT}}{Q_{MIN}} \quad (2. 28)$$

com a temperatura do material condensado sendo igual à temperatura do ponto de bolha da mistura. O restante do destilado é retirado em fase vapor. Um exemplo típico desta situação ocorre quando houver um acréscimo na energia fornecida ao refulvedor com o conseqüente aumento das vazões de vapor.

2) A energia retirada no condensador (Q_c) é igual ou superior à necessária para condensação total do material (Q_{MIN}): parte da energia será utilizada para mudança de fase e o restante para resfriamento do condensado, cuja temperatura final será dada por

$$T_{cond} = \frac{V_{NT} \lambda_{cond} T_{NT} - (Q_c - Q_{MIN}) \mu}{V_{NT} \lambda_{cond}} \quad (2.29)$$

onde μ representa um coeficiente de sub-resfriamento permitido para o topo (especificado pelo usuário) e λ_{cond} a capacidade calorífica associada ao material condensado. Um exemplo típico deste caso, situação inversa à anterior, ocorre para o caso em que houver decréscimo na energia fornecida ao refulvedor, com o refluxo retornando sub-resfriado à coluna. Para este caso a temperatura final do tanque do refluxo será obtida pela equação de regime, para cada incremento de integração :

$$T_{dist}^{(k)} = \frac{D_l \lambda_{NT} \Delta_t T_{cond} + U_R \lambda_R T_{dist}^{(k-1)}}{D_l \lambda_{NT} \Delta_t + U_R \lambda_R} \quad (2.30)$$

onde o índice k representa a iteração e Δ_t o incremento de tempo considerado.

Esta dinâmica suposta para o condensador, embora ainda bastante idealizada, permite a propagação de distúrbios através da coluna gerando uma dinâmica mais real para o processo e uma malha de

realimentação mais complexa para o controle. Considerando-se ainda que o condensador possui uma constante de tempo elevada comparada ao resto da coluna a aproximação por uma derivada de primeira ordem não oferece problemas numéricos.

2.3.5 - Retenção em fase vapor

A consideração de retenção molar nula para a fase vapor é uma hipótese também adotada em praticamente todos os trabalhos que pudemos analisar. Há que se ressaltar, contudo, que estes trabalhos não visavam a dinâmica de colunas de alta pureza, mas colunas de baixa e, no máximo, média pureza. O fator preponderante na omissão da retenção em fase vapor no balanço de massa reside no fato que, devido à sua baixa densidade, quando comparado com a fase líquida, o volume retido representa um percentual não significativo do volume total do estágio não chegando a afetar as equações do balanço de massa. Esta situação, contudo, pode se alterar em duas oportunidades :

- a pressão de trabalho do sistema for elevada, acarretando o aumento do número de moles retido em fase vapor que passa então a ser significativo, a despeito de sua baixa densidade.
- a conjunção de alguns fatores, tais como dados de projeto da coluna (diâmetro, espaçamento entre estágios) e propriedades físicas dos componentes, mesmo para baixas pressões, pode gerar a retenção de um volume molar significativo retido em fase vapor.

A presente simulação, como já enfatizado, procura reproduzir as condições de uma coluna industrial real utilizando os dados disponíveis sobre a mesma [Gomes, 1985,1986a,b]. Esta classe de colunas opera normalmente em baixas pressões, da ordem de 1 atm. Portanto o problema de aumento da retenção em fase vapor, decorrente de altas pressões de trabalho não precisa ser considerado.

É necessário então avaliar o percentual da retenção em fase vapor; para este cálculo é necessário a utilização dos dados de projeto da coluna [Apendice 2] e dos dados físicos dos compostos [Apendice 1] que, aplicados à Equação (2.26) fornecem o valor da retenção em fase líquida. O valor da retenção vapor pode ser estimado também a partir dos mesmos dados utilizando-se uma correlação geométrica mais simples

$$U_n(\text{vapor}) = \frac{\pi D_{\text{col}}^2 [S - h_{\text{ov}} - h_{\text{v}}] \rho_{\text{vapor}}}{4 P_m} \quad (2.31)$$

com D_{col} expressando o diâmetro da coluna, S o espaçamento entre os estágios e P_m o peso molecular dos compostos no estágio considerado.

O único trabalho que conseguimos localizar onde se efetua uma análise das consequências da retenção vapor nos resultados de simulação de colunas é devido a Choe [Choe,1987]. O autor simulou diversas colunas com diferentes condições operacionais, com e sem consideração para a retenção em fase vapor verificando que os resultados obtidos, para percentuais da retenção em fase vapor de até 3% da retenção líquida, não apresentavam qualquer diferença.

Aplicando-se então as equações (2.31) e (2.26) à coluna de alta pureza projetada, para um estágio intermediário e com a hipótese de uma mistura em fração molar igual a 50% obteve-se os seguintes resultados (ver dados utilizados nos Apêndices 1 e 2) :

- Retenção vapor :

$$U_n(\text{vapor}) = 2,08 \text{ moles}$$

-Retenção líquida :

$$U_n(\text{liquida}) \cong 67 \text{ moles}$$

Os valores obtidos indicam que, para a coluna de alta pureza considerada, a retenção em fase vapor constitui um percentual da retenção líquida da ordem de 3%, estando dentro dos limites sugeridos por Choe [Choe,1987] para os quais a mesma não afeta os resultados. A retenção vapor não foi considerada no modelo desenvolvido neste trabalho.

2.4 - Conjunto de Funções $P = f_2(z, r, t)$

Como visto no item (2.3) as equações diferenciais do processo envolvem, a cada incremento de integração, a avaliação de um conjunto de funções $P = f_2(z, r, t)$ relacionadas com aspectos construtivos da coluna e com os compostos em separação. Estas funções serão analisadas a seguir.

2.4.1 . Entalpias

Um elemento fundamental no estabelecimento de um correto balanço energético está associado ao cálculo da entalpia em cada estágio do processo. Para os compostos de maior aplicação industrial, tais como elementos orgânicos, a entalpia dos compostos pode ser obtida a partir de funções tabeladas [Holand,1963], geralmente na forma de uma função do tipo

$$h_n = f_h(\text{Temperatura, Pressão, } x_n)$$

$$H_n = f_H(\text{Temperatura, Pressão, } y_n)$$

onde h_n e H_n representam as entalpias das fases líquida e vapor para o estágio n , respectivamente. Para os compostos utilizados neste trabalho não foi possível a obtenção destes dados. A solução adotada foi expressar a entalpia através da capacidade calorífica

C_p , tal que para o a fase líquida do composto i no estágio n

$$h_{n,i} = C_{p,n} (T) T_n \quad (2. 32)$$

onde T representa a temperatura absoluta. Para a fase vapor considera-se um termo correspondente à mudança de fase

$$H_{n,i} = C_{p,n} (T) T_n + \Delta_{mist} \quad (2. 33)$$

Obtendo-se a entalpia dos componentes puros, e desprezando-se o calor de mistura dos componentes, a entalpia da mistura pode ser expressa por

$$h_n = \frac{\sum_{i=1}^{ic} x_{n,i} h_{n,i} M_i}{\sum_{i=1}^{ic} x_{n,i} M_i} \quad H_n = \frac{\sum_{i=1}^{ic} y_{n,i} H_{n,i} M_i}{\sum_{i=1}^{ic} y_{n,i} M_i} \quad (2. 34)$$

onde M_i é o peso molecular do i ésimo componente envolvido.

Esta hipótese para expressão da entalpia é amplamente utilizada em projetos, modelagem e simulação de processos químicos [Luyben, 1973; Vann Winckle, 1967] constituindo um procedimento bastante consolidado. A fim de se garantir melhor precisão e confiabilidade dos resultados a capacidade calorífica C_p e o calor de vaporização, Δ_{mist} , utilizados na expressão de mudança de fase, foram considerados variantes com a temperatura (ver Apendice 1). Esta hipótese, como posteriormente verificado durante as diversas simulações realizadas, se revelou altamente consistente pois o gradiente térmico da coluna, da ordem de 30°C acarretou diferenças consideráveis neste valores, com resultados importantes no tocante à otimização do processo (capítulo 7).

Surge agora a questão, levantada no item 2.3.2, de avaliar a expressão $\partial h / \partial t$ visto à mesma ser função implícita do tempo. A solução deste problema envolve diversas opções sendo que, entre estas, consideramos como mais plausível a aproximação por uma derivada de primeira ordem. Esta solução, utilizada por alguns autores [Distefano, 1968], consiste em avaliar \dot{h} por

$$\dot{h}_n = \frac{h_n^{t+\Delta t} - h_n^t}{\Delta t} \quad (2.95)$$

que constitui um procedimento extremamente simples, mas contém um risco já mencionado de ocorrência de problemas numéricos devido ao cancelamento subtrativo [MacCracken, 1980]. Este procedimento, portanto, deve ser preferencialmente implementado com precisão dupla. Esta nossa escolha se deve ao fato que outros procedimentos analisados [Howard, 1970], embora utilizem uma formulação mais elaborada para o problema, necessitam efetuar este mesmo procedimento para outros termos da expressão, não eliminando o risco do cancelamento subtrativo.

2.4.2. - Relações de soma e equilíbrio entre fases

As relações de soma, em ambas as fases, para um estágio genérico n serão expressas por

$$\sum_{i=1}^{i_c} x_{n,i} = 1.0 \quad e \quad \sum_{i=1}^{i_c} y_{n,i} = 1.0 \quad (2.96)$$

As relações de equilíbrio entre fases, funções altamente não lineares da temperatura, pressão, composição e concentração do sistema, constituem talvez um dos mais analisados temas da engenharia química no tocante à separabilidade de compostos com

mudança de fase, e consiste fundamentalmente na determinação da fração molar em fase vapor do iésimo componente que se encontra em equilíbrio termodinâmico com a fase líquida, para as condições existentes de temperatura, pressão, composição e concentração do sistema no estágio considerado. Os problemas existentes para um correto equacionamento destas relações ficam claros a partir dos diversos exemplos citados no item 2.2, onde se mostra a diversidade de soluções tentadas visando o estabelecimento de procedimentos aceitáveis para as possibilidades de cálculo então existentes.

A solução das equações (2.36), dado seu caráter não-linear pode ser feita mediante técnicas iterativas como, por exemplo, Newton-Raphson. Como o número de componentes do sistema é conhecido, a determinação de suas frações molares em fase líquida, que representa a solução de (2.36) passa a ser efetuada com duas variáveis independentes : pressão e temperatura do sistema no estágio considerado. Duas situações distintas podem ocorrer :

- a pressão e a temperaturas são variáveis : constitui o caso mais complexo e raramente considerado. Nesta situação é necessário resolver iterativamente a equação (2.36), utilizando uma relaxação entre as duas variáveis , P_n e T_n , verificando a convergência do sistema mediante a introdução de uma variável auxiliar (no caso, a entalpia do sistema no estágio considerado).

- A pressão se distribue linearmente ao longo da coluna : esta hipótese, bastante próxima da situação real de uma coluna, permite que a equação (2.36) seja solucionada iterativamente utilizando-se apenas a temperatura como variável independente, evitando o emprego de relaxação.

Adotando-se a segunda hipótese e supondo-se que, para os compostos e condições de trabalho da coluna o afastamento das condições de idealidade não é significativo (como no presente caso) pode-se aplicar a lei de Raoult [Gerasimov,1974] :

$$P = \sum_{i=1}^{i_c} x_i P_i^{\circ} \quad (2.37)$$

onde P é a pressão do estágio considerado e P_i° a pressão de vapor para o i -ésimo componente.

A questão de como expressar analiticamente a pressão de vapor de uma mistura de compostos é uma questão complexa, dada a grande diversidade de equações disponíveis. Uma análise bastante prática deste problema pode ser encontrada em Miller [Miller,1964] que, através da utilização de quase 50 opções possíveis selecionou as fórmulas mais apropriadas a determinados grupos de compostos e faixa de pressão, verificando que a formulação não-reduzida da equação de Antoine, para a faixa de 0 a 1500 mm Hg fornece excelente previsão da pressão de vapor, falhando somente para alguns compostos (H_2 , Ne, NO, N_2O e S_nCl_4). A avaliação de P_i° será então efetuada através da equação de Antoine [Miller,1964] :

$$\ln P_i^{\circ} = A_i + \frac{B_i}{C_i + T_n} \quad (2.38)$$

onde A_i , B_i e C_i são coeficientes adequados à cada composto [Apêndice 1].

O procedimento para cálculo de (2.36), utilizando-se a temperatura como variável independente consiste em avaliar iterativamente as i -ésimas pressões P_i° pela equação (2.38), verificando-se a convergência do sistema pela equação (2.37). Uma vez que se obtenha convergência, com determinação da temperatura T_n , é necessário determinar as frações $y_{n,i}$ em fase vapor correspondentes à fração $x_{n,i}$ em fase líquida.

Uma das alternativas possíveis para expressão destas relações consiste na utilização do coeficiente de equilíbrio entre fases, $K_{n,i}$, tal que para o i -ésimo composto no n -ésimo estágio tem-se a seguinte relação [Holland,1963] :

$$y_{n,i} = K_{n,i} x_{n,i} \quad (2.39)$$

Para muitos compostos é possível encontrar-se funções de correlação empíricas que fornecem o valor de $K = f(T, P, x)$. Quando tal não for possível e adicionalmente, os compostos apresentarem um comportamento não muito distante das condições de idealidade pode-se utilizar [Van Winckle, 1967] :

$$K_{n,i} = \frac{\gamma_{n,i} P_{n,i}^0}{v_{n,i} P_{n,i}} \quad (2.40)$$

onde γ_i e v_i são os coeficientes de atividade e fugacidade, respectivamente, que compensam desvios dos compostos em relação ao comportamento ideal, solução esta adotada no presente trabalho. Estes termos da equação (2.40) foram calculados pela seguinte metodologia :

$-\gamma_{n,i}$ = os coeficientes de atividade foram calculados através das equações de van Laar [Van Winckle, 1967] que para o caso binário é dada por [Apêndice 1]:

$$T(\ln \gamma_1) = \frac{B}{\left[1 + A \left(x_1/x_2\right)\right]^2}, \quad T(\ln \gamma_2) = \frac{A B}{\left[A + \left(x_2/x_1\right)\right]^2} \quad (2.41)$$

$-v_{n,i}$ = o coeficiente de fugacidade é de interesse maior para sistemas com pressão elevada, situação esta que não se aplica ao presente trabalho. Foi portanto considerado $v_{n,i}$ unitário.

2.4.3 - Eficiência da separação e propriedades físicas

A expressão da eficiência de separação, em cada estágio, é dada

por [Holand,1963] :

$$y_{n,i}^* = E_{M,n} y_{n,i} + (1 - E_{M,n}) y_{n-1,i} \quad (2.42)$$

onde $E_{M,n}$ é a eficiência de Murphree associada ao estágio n e $y_{n,i}^*$ é a fração molar real em fase vapor do componente i , calculada pelas relações de equilíbrio. A utilização da eficiência em fase vapor de Murphree permite o uso de valores diferentes da eficiência para cada estágio ao longo da coluna, desde que se disponha de informações que permitam traçar este perfil. Uma solução mais usual consiste na implementação de dois valores diferentes, porém constantes, para cada seção da coluna.

As propriedades físicas do compostos, em fase líquida e vapor (densidade, calor de vaporização, capacidade calorífica) foram expressas considerando-se sua correlação com a temperatura e concentração dos componentes (ver Apêndice 1). Para tal levantou-se os dados existentes na literatura sobre os componentes do sistema a ser estudado, com o estabelecimento das correlações devidas.

2.5 - Algoritmo Final

Definidas todas as considerações, simplificações e correlações utilizadas na modelagem vamos apresentar o algoritmo de simulação da coluna. A única restrição diz respeito ao método de integração utilizado para solução das equações diferenciais, que será objeto do próximo capítulo. O algoritmo final tem a seguinte estrutura :

I - Inicialização :

0)-Carregar o programa com os valores de regime do processo consistindo dos perfis de temperatura, vazões líquidas e de vapor, composições e pressões, bem como os dados térmicos, geométricos e físicos da coluna, além das propriedades dos

compostos (densidade, peso molecular, capacidade calorífica, calor de vaporização, constantes da equação de Antoine e van Laar) e composições, bem como os dados geométricos e térmicos da coluna, além dos dados físicos dos compostos.

II - Simulação :

1) Calcular, a partir do estado atual da coluna, iniciando por uma extremidade (base, p. ex.) e chegando até o topo, os perfis de temperatura e entalpias, com a devida consideração para os estágios ligados à alimentação, refeedor e condensador :

1.1. Temperaturas : utilizar as relações de soma (equação 2.36) solucionadas iterativamente por Newton-Raphson com a temperatura como variável independente na equação de Antoine (equação 2.38) para satisfação da lei de Raoult (equação 2.37) das pressões parciais ($\sum_{i=1}^n x_i P_i^0 = P$). Para as novas temperaturas T_n avaliar os coeficientes de atividade $\gamma_{n,i}$ pelas equações de van Laar (equações 2.41).

1.2. Frações molares em fase vapor : avaliar, para a base, os n estágios e o topo, as composições ideais em fase vapor $y_{n,i}$ (equação 2.39) pelo coeficiente de equilíbrio $K_{n,i}$ (equação 2.40). Calcular $y_{n,i}^*$ real pela equação da eficiência (equação 2.42) para a base, n estágios e topo da coluna.

1.3. Entalpias : para os atuais perfis de temperatura e composição calcule as propriedades físicas dos compostos [Apêndice 1], as entalpias em fase líquida e vapor para cada estágio n , refeedor e condensador pelas equações (2.32) e (2.33). Avaliar as entalpias das misturas pelas equações (2.34).

1.4. Avaliar a dinâmica do conjunto topo da coluna/condensador, mediante as equações (2.27), (2.28) e (2.29).

1.5. Avaliar o valor das derivadas das entalpias para a base, os n estágios e topo da coluna pela equação (2.35).

2) Calcular, utilizando os valores das entalpias em fase líquida, vapor e as respectivas derivadas, as vazões de vapor na base e nos n estágios utilizando as equações (2.16), (2.17), (2.18), (2.19) e (2.20).

3) Avaliar, a partir das equações (2.9), (2.10), (2.11), (2.12) e (2.13) as equações diferenciais $\dot{x}_{n,i}$ para a base, os n estágios e topo da coluna.

4) Mediante método de integração apropriado (ver capítulo 3) efetuar a integração de $x_{n,i}^{(t+\Delta h)}$ obtendo o novo perfil de composições $x_{n,i}^{(t+\Delta h)}$ para a coluna.

5) Para as novas composições $x_{n,i}^{(t+\Delta h)}$ e temperatura $T_n^{(t+\Delta h)}$ na base, em cada estágio e no topo da coluna avaliar a nova retenção molar pelas equação (2.22).

6) Calcular as novas vazões hidráulicas a partir da equação de Francis (equação 2.25)

7) Fazer $x_{n,i}^{(t+\Delta h)} = x_{n,i}^{(t)}$, retornar ao passo 1 e repetir este procedimento até alcançar o tempo estipulado de simulação.

2.6 - Simbologia

Os símbolos utilizados, quando não referenciados especificamente no texto, possuem o seguinte significado :

A, B, C = constantes da equação do coeficiente de atividade.

B = vazão na base da coluna, moles/hora

C_p = capacidade calorífica, cal/g °C

D = vazão do destilado, moles/hora

D_l = vazão líquida do destilado, moles/hora

E = arraste da coluna

F = vazão de alimentação, moles/hora

F_v = constante (equação 2.25)

H = entalpia, fase vapor, cal/g

h = entalpia, fase líquida, cal/g

h_v = altura do líquido sobre o vertedouro, polegadas

K = coeficiente de separação entre fases

L = vazão líquida, moles/hora

L_{ps} = vazão líquida, galões/min (equação 2.25)

l_v = comprimento do vertedouro, polegadas

P = pressão no estágio n

P_i^o = pressão de vapor do composto i

P_l = material líquido retirado na coluna no enésimo estágio.

P_v = material vapor retirado na coluna no enésimo estágio.

Q = energia entregue ou retirada da coluna, Mcal/hora

R = refluxo, moles/hora

T = temperatura, unidade compatível com a equação utilizada.

U = retenção, moles

V = vazão de vapor, moles/hora

x = fração molar, fase líquida

y = fração molar, fase vapor

y^* = fração molar real, fase vapor.

γ = coeficiente de atividade

ν = coeficiente de fugacidade (considerado unitário)

Subscritos :

B = valores associados à base da coluna

D = valores associados ao destilado

F = valores associados à alimentação

l = fase líquida

n = estágio

NT = topo da coluna

V = fase vapor

i = referente ao iésimo composto

n = referente ao enésimo estágio

CAPÍTULO 3 : MÉTODOS NUMÉRICOS ASSOCIADOS A DINÂMICA
DE UMA COLUNA DE DESTILAÇÃO.

3.1 - Introdução

Vimos no capítulo anterior que o comportamento dinâmico de uma coluna de destilação pode ser expresso mediante um conjunto de equações diferenciais de primeira ordem, não-lineares e com coeficientes variantes, expresso por

$$\dot{z} = f_1(z, P, t) \quad (3.1)$$

$$\dot{z} \in \mathbb{R}^n, \quad P \in \mathbb{R}^m, \quad t \in [a, b], \quad f_1: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^1 \longrightarrow \mathbb{R}^n$$

onde as equações diferenciais expressam os balanços de massa e energia nos diversos estágios, P um conjunto de relações entre as diversas variáveis do processo, t o tempo e dimensão de [n, m] dependendo das considerações efetuadas na modelagem.

O conjunto de funções P pode ser expresso em sua formulação

geral por

$$P = f_2(z, r, t) \quad (8.2)$$

$$r \in \mathbb{R}^l, \quad f_2: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^l \times \mathbb{R}^1 \longrightarrow \mathbb{R}^m$$

onde r expressa um conjunto de variáveis e relações da coluna abrangendo itens tais como configuração dos internos, propriedades físicas dos compostos e outros, com dimensão de [1] dependente também das considerações efetuadas.

As equações de conservação de massa e energia do processo de destilação, expressas através de \dot{z} , apresentam características importantes no tocante à sua solução :

1) Os coeficientes das funções f_1 são calculados, principalmente, a partir das vazões líquidas, vazões de vapor e relações de soma e equilíbrio existentes no processo, parâmetros estes dependentes das condições operacionais às quais a coluna se encontra submetida. As equações (3.1), portanto, apresentam coeficientes variantes no tempo.

2) As relações hidrodinâmicas, de soma e de equilíbrio entre fases, parte integrante do conjunto de correlações P são caracterizadas por um alto grau de não-linearidade, fenômeno este também dependente das condições operacionais do sistema. As equações (3.1), portanto, além de coeficientes não-estacionários, possuem comportamento altamente não-linear.

3) Colunas de destilação são equipamentos industriais que apresentam dezenas e, por vezes, centenas de estágios de separação. Como as equações são aplicadas à cada estágio, a dimensão de \dot{z} é geralmente elevada, podendo alcançar várias centenas.

Estas características, claramente, inviabilizam o emprego de

métodos analíticos para solução de (3.1), como discutido no capítulo anterior. A busca de alternativas outras que não métodos analíticos clássicos de solução começaram a surgir com o aparecimento dos computadores. Historicamente, verifica-se que, já com o aparecimento dos integradores diferenciais, monstruosas engenhocas mecânicas da década de 50, a solução de tais equações começou a ser possível [Pigford,1951] ainda que para modelos bastante simplificados e com reduzido número de estágios. A etapa seguinte veio, com a introdução dos computadores analógicos [Lamb,1961] onde sistemas mais complexos, embora com número ainda reduzido de estágios já foram simulados. Chega-se assim à utilização dos computadores digitais [Rosenbrock,1958; Mah,1962] e, naturalmente, dos respectivos problemas envolvendo os métodos numéricos utilizados. Diversos estudos podem ser localizados na literatura [Mah,1962; Sargent,1963; Distefano,1968] abrangendo a precisão e estabilidade de diversos métodos numéricos [Runge-Kutta, Kutta-Milne, Heun, etc.] utilizados para solução das equações dinâmicas de uma coluna de destilação, estudos estes que receberam forte impulso a partir da década de 60 chegando até os dias atuais [Lagar,1987; Cameron,1988]

Um dos mais importantes pontos envolvendo a utilização de métodos numéricos para solução de equações diferenciais - que transcende o problema das colunas de destilação - se relaciona com a estabilidade numérica do método e suas consequências no tocante à precisão e esforço computacional necessários à obtenção de soluções aceitáveis para equações da classe (3.1).

O problema matemático (3.1) pode ser classificado como instável, ultra-estável ou com estabilidade neutra, dependendo do comportamento de suas soluções na vizinhança de um estado particular. Nesta vizinhança elas podem ser aproximadas por uma solução linearizada

$$\dot{z} = f_1(w, P, t) + J(w, t)(z - w) \quad (3.9)$$

onde $J(w,t)$ denota a matriz jacobiana do sistema avaliada em (w,t) . O comportamento do sistema pode ser caracterizado pelos autovalores λ_i de $J(w,t)$, $\lambda_i = 1(1)n'$ que fornecem o grau de rigidez ("stiffness ratio") do sistema : um elevado grau de rigidez indica que a solução está se alterando lentamente em relação à parte real mais negativa dos autovalores. Se todos os autovalores são negativos, porém com pouca variação em seus módulos, o processo possui estabilidade neutra enquanto autovalores com parte real positiva caracterizam um processo instável. Se os autovalores são negativos, porém com módulos não muito diferenciados entre si os problemas associados à solução numérica de $\dot{z}(t)$ não são tão significativos. Se, contudo, os autovalores apresentam parte real negativa com módulos bastante distanciados entre si os problemas numéricos associados à sua solução podem ser bastante sérios, exigindo cuidados especiais. Esta classe de processos é denominada ultra-estável.

Uma indicação dos problemas relacionados com a estabilidade da solução numérica de um sistemas de equações diferenciais acopladas pode ser mostrado a partir de um exemplo numérico simples [Aiken,1974]. Seja o sistema linear invariante

$$\dot{x} = A x, \quad x(0) = x_0 \quad (2)$$

$$x \in \mathbb{R}^2, \quad A \in \mathbb{R}^{2 \times 2}, \quad e \quad A = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ k & \lambda_2 \end{bmatrix}$$

com solução analítica $x_1(t) = x_1(0) \exp^{(\lambda_1 t)}$, $x_2(t) = C_1 \exp^{(\lambda_1 t)} + C_2 \exp^{(\lambda_2 t)}$ e as constantes $C_1 = \frac{k x(0)}{\lambda_1 - \lambda_2}$ e $C_2 = x_2(0) - C_1$.

Se $\lambda_2 \ll \lambda_1 < 0$ e $C_2 = C_1 = 1$, a solução do problema tem a forma descrita pela figura 3.1, que contém uma componente de dinâmica extremamente rápida (associado a λ_1), mas cuja contribuição para a solução final não é decisiva, uma vez que praticamente se anula a partir do instante t_1 .

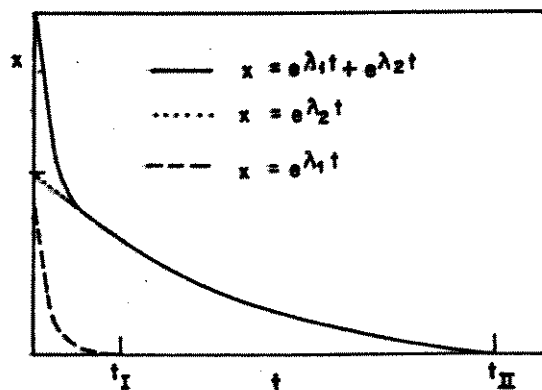


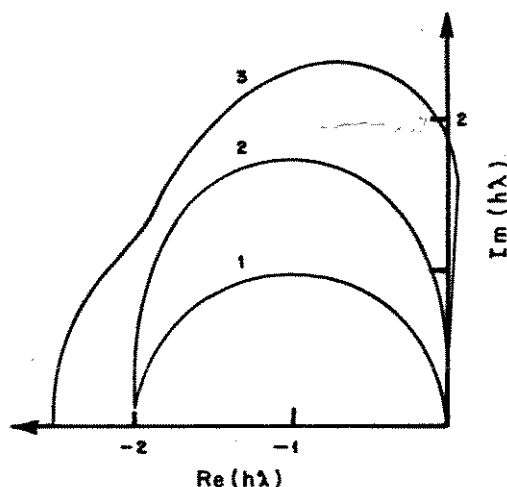
Figura 3.1 - Processo rígido ou ultra estável

As limitações de estabilidade para um método de integração, quando aplicado a um sistema multidimensional, contudo, exigem que $\|h\lambda\|_{\max}$, onde h é o incremento de integração, seja limitado, situação esta que coloca restrições sobre o valor máximo do incremento admissível para obtenção de uma solução estável para o problema. Tal situação decorre do fato que, embora a região estável de integração no plano $h\lambda$ (ver figura 3.2) seja determinada pelo componente com dinâmica lenta, o incremento de integração é determinado pelo componente correspondente à dinâmica rápida. Assim se o processo a ser integrado possui um autovalor de módulo elevado o incremento de integração h deve ser extremamente reduzido para garantir que $\|h\lambda\|$ esteja dentro dos contornos da região estável. Esta classe de funções com os módulos dos autovalores largamente espaçados constitui um problema específico no tocante à sua integração numérica pela necessidade de se estabelecer um compromisso entre a precisão necessária à sua solução e o esforço computacional necessário à obtenção da mesma. Vamos então introduzir a seguinte definição:

Definição 1 : " Um sistema de equações diferenciais ordinárias, com valor inicial e formulação

$$\dot{x} = F(x,t) , \quad x(0) = x_0 , \quad \dot{x} \in \mathbb{R}^n \quad (3.4)$$

é dito ser um sistema rígido, ou ultra-estável, ("stiffness system") se o Jacobiano local $\left(\frac{\partial F}{\partial x} \right)$ contém pelo menos um autovalor que não contribui significativamente em todo o domínio de interesse da solução."



1. = Contorno do método de Euler
2. = Contorno do método de 2ª ordem
3. = Contorno do método de 3ª ordem

Figura 3.2 - Região de estabilidade para métodos RK explícitos.

Baseado na definição acima é fácil verificar que, se o processo é altamente estável - caso de uma coluna de destilação - $\left(\frac{\partial}{\partial x} \right) \left(\frac{dx}{dt} \right)$ possui valor elevado e, para uma solução analítica real, qualquer perturbação no processo é rapidamente amortecida. Se, contudo, a solução é computada numericamente utilizando valores de (dx/dt) baseada nos valores estimados de x então um pequeno erro em x se propaga rapidamente para a solução final através de (dx/dt) , que pode divergir rapidamente. Esta classe de problemas, portanto, exige ou a utilização de métodos específicos de integração numérica ou a necessidade de cuidados especiais no tocante aos intervalos de

integração com consequências diretas sobre o esforço computacional necessário à sua solução.

Em se tratando da questão da estabilidade de métodos numéricos para solução de equações diferenciais rígidas são vários os pontos e tipos de estabilidade a serem abordados. Nosso interesse, contudo, não reside em estudos teóricos de estabilidade numérica, mas simplesmente na escolha e implementação de métodos estáveis (computacionalmente eficientes) adequados à solução do tipo de problemas com os quais estaremos lidando : equações diferenciais ordinárias de 1^o ordem, não-lineares, ultra-estáveis com coeficientes variantes, provenientes da modelagem dinâmica de colunas de destilação de alta pureza. Verificaremos, inicialmente, de forma breve, a condição de ocorrência do problema de rigidez nas colunas sob análise; serão analisados a seguir os requisitos associados aos métodos numéricos de integração específicos para processos rígidos.

Nos estudos efetuados verificamos que uma garantia efetiva de confiabilidade nos resultados obtidos mediante integração numérica de equações rígidas implica na adoção de métodos com estabilidade A e/ou estabilidade S. Os conceitos de estabilidade A e S serão discutidos no ítem 3.3. A seguir serão discutidos e implementados os métodos de Runge-Kutta Diagonalmente Implícitos (métodos de terceira ordem em dois e três estágios, respectivamente) e o método de Liniger-Whillhoughby (primeira ordem em um estágio) que satisfazem as condições de estabilidade necessárias a este trabalho; um maior aprofundamento destas questões pode ser encontrado na bibliografia citada.

3.2 - Rigidez Numérica em Colunas de Destilação

Colunas de destilação constituem uma classe de processos cuja

modelagem dinâmica apresenta as características de rigidez numérica anteriormente descritas. O problema que se coloca é verificar a ocorrência, e em que grau, das características de rigidez nas colunas de destilação de alta pureza, objeto de nosso trabalho. Esta verificação se revela procedente visto que são vários os fatores causadores de rigidez em colunas de destilação (pressão de trabalho, volatilidade relativa dos componentes, grau de pureza dos produtos), cada qual influenciando de maneira diversa esta ocorrência [Tyreus,1975b]. Esta verificação pode ser efetuada a partir de dois enfoques :

- análise das características dos autovalores do sistema sob estudo, calculados a partir da matriz Jacobiana dos coeficientes do processo (ver Apêndice 3).
- confrontação das características do sistema sob estudo com os resultados e análises existentes na literatura .

1. Autovalores do sistema : Para esta análise foram selecionadas três colunas com teores de pureza no destilado iguais a 0,99, 0,999 e 0,9999 em fração molar , respectivamente, correspondendo a colunas pura, de alta e altíssima-pureza e doravante referenciadas como colunas 1, 2, e 3, respectivamente [Apêndice 3]. As matrizes Jacobianas dos coeficientes dos sistemas foram obtidas e os autovalores λ_i , $i=1(1)NT+2$ calculados. O procedimento clássico de avaliação do grau de rigidez (GR) de um processo consiste em se calcular

$$GR = \frac{\| \lambda_i \|_{\max}}{\| \lambda_i \|_{\min}} \quad (3.5)$$

associando este valor ao grau de rigidez do sistema. Os resultados obtidos para as colunas 1, 2 e 3 são mostrados na Tabela 3.1

Tabela 3.1 - Rigidez numérica dos sistemas 1, 2 e 3

SISTEMA NUM.	$\ \lambda \ _{\max}$	$\ \lambda \ _{\min}$	GR	λ_2 / λ_1
1	2057.4	18.7	110	1,05
2	1585.6	14.0	114	2,71
3	1047.8	9.8	116	3,94

Os resultados mostram que :

-as condições de rigidez do sistema são acentuadas, porém praticamente constantes para as três colunas, com ligeira variação à medida que o sistema se torna mais puro.

-à medida que o sistema se torna mais puro o autovalor dominante decresce, indicando maior constante de tempo e processo mais estável.

- a relação entre os dois menores autovalores do sistema, λ_1 e λ_2 , aumenta para o sistema mais puro indicando a existência de um autovalor dominante .

2. - Resultados na literatura : As causas de rigidez em colunas de destilação foram estudadas por Tyreus [Tyreus,1975b]. Entre os resultados por ele obtidos que nos interessam mais diretamente podemos relacionar os seguintes :

- Problemas de rigidez em colunas de destilação tendem a ser crescentes com a pureza dos produtos obtidos : esta conclusão está perfeitamente de acordo com os resultados apresentados pelos autovalores obtidos para o nosso sistema, ficando mais uma vez evidenciado que estamos lidando com um processo rígido.

- Volatilidade relativa : para uma mesma pureza do destilado a relação de rigidez do sistema tende a crescer inversamente à volatilidade relativa dos compostos presentes, ou seja, colunas de alta pureza com baixa volatilidade relativa tendem a apresentar maiores taxas de rigidez. A volatilidade relativa do nosso sistema possui um valor médio ($\cong 2,5$) confirmando suas condições de rigidez .

- A retirada das equações hidráulicas não diminui a rigidez do sistema : consideremos as equações da coluna expressas numa formulação linear por

$$\dot{x} = A x + B L \quad (3.6)$$

$$\dot{L} = F L$$

onde x e L são os vetores das composições e vazões líquidas. Os autovalores de A podem ser obtidos a partir de (ver item 3.5.1):

$$\left(\frac{L_n + K_{i,n} V_n}{U_n} \right)_{\max} \leq \| \lambda \|_{\max} \leq 2 \left(\frac{L_n + K_{i,n} V_n}{U_n} \right)_{\max} \quad (3.7)$$

Os autovalores de F , associado às equações hidráulicas podem ser obtidos a partir da fórmula de Francis (ver Apêndice 2):

$$\| \lambda_n \|_F = \left\{ 1,5 k_1 k_2 (h_{ov})^{0,5} \right\} k_2 \quad (3.8)$$

onde k_1 e k_2 são constantes apropriadas. Tyreus [Tyreus,1975b] analisando condições diversas para diferentes colunas obteve como resultado que $\| \lambda \|_{\max}^F \cong \| \lambda \|_{\max}^A$ o que significa, na prática, que a eliminação das equações diferenciais relativas à hidrodinâmica das colunas não altera o grau de rigidez do sistema: ou seja, ainda que se adote uma solução simplificada para as vazões líquidas o problema de rigidez do processo

permanece inalterado, impondo a necessidade da utilização de métodos apropriados para integração das equações (3.1).

Estas características existentes no sistema sob análise (alta pureza, volatilidade relativa 2,5 , grau de rigidez > 100) configurando um sistema ultra-estável impuseram a necessidade de definir e implementar métodos numéricos apropriados que garantam uma solução estável, precisa e com esforço computacional adequado às necessidades do trabalho.

Similarmente ao ocorrido para o caso da modelagem das colunas, verificamos na bibliografia a que tivemos acesso , os seguintes pontos :

- Alguns estudos envolvendo métodos numéricos de integração para colunas de destilação enfocaram geralmente métodos explícitos.
- Alguns estudos mais recentes utilizando métodos explícitos trabalharam com subrotinas prontas tipo GEAR [Lagar,1987]
- O emprego de métodos de Runge-Kutta implícitos, quando aplicados a processos [Cameron,1988] não enfocam especificamente o aspecto das colunas de alta pureza, além de utilizarem troca de métodos durante a integração.

Verificamos, portanto, que o problema de métodos adequados à solução das equações diferenciais da coluna, além de representar uma necessidade para o nosso trabalho, ganha dimensão especial pela necessidade de se obter precisão na faixa de 10^2 ppm, aliada à necessidade de baixo esforço computacional, não tendo sido objeto de análise específica na literatura. Assim optamos pela implementação de métodos implícitos A e S-estáveis (ver item 3.3), de diferentes ordens, para as colunas com diferentes graus de pureza visando analisar a influência da ordem dos métodos na precisão obtida para os resultados, bem como os ganhos computacionais envolvidos. Assim, além de implementar a infraestrutura adequada ao nosso trabalho,

procuramos efetuar uma análise do desempenho destes métodos para esta classe de processos.

Embora não se tenha a intenção de efetuar análises teóricas de estabilidade de métodos numéricos de integração, mas sim verificar de maneira prática seu desempenho, torna-se necessário a introdução dos conceitos básicos inerentes à estabilidade numérica necessária a este trabalho, bem como a evolução dos métodos de Runge-Kutta Diagonalmente Implícitos e o método de Liniger-Whillhoughby, a serem implementados.

3.3 - Estabilidade dos Métodos Numéricos

3.3.1 - Métodos A-estáveis

Seja um método de integração numérica, linear, de múltiplos estágios, para avaliação numérica aproximada da solução $x = x(t)$ de um sistema de equações diferenciais ordinárias de primeira ordem

$$\dot{x} = f(t, x), \quad x(0) = x_0, \quad x \in \mathbb{R}^n, \quad t \geq 0 \quad (3.9)$$

com a formulação genérica

$$\sum_{i=0}^k \alpha_{k-i} x_{n+k-i} = h \left(\sum_{i=0}^k \beta_{k-i} f_{n+k-i} \right) \quad (3.10)$$

$$\alpha_i, \beta_i \in \mathbb{R}^1, \quad i = 0(1)k., \quad \alpha_k \neq 0, \quad h > 0$$

cuja equação característica [Seinfeld, 1970] é expressa pelo polinômio de ordem k em μ

$$\mu^k - \sum_{i=1}^k \alpha_i \mu^{k-i} - h \lambda \sum_{i=0}^k \beta_i \mu^{k-i} = 0 \quad (3.11)$$

com k soluções na forma das raízes μ_i , $i = 1(1)k$. Se o método for utilizado para computação numérica aproximada de (3.9) que, para efeitos de simplicidade e sem perda de generalidade pode ser considerada em formulação escalar

$$\dot{x} = \lambda x, \quad x_0 = 1 \quad (3.12)$$

com solução analítica $x(n) = x_0 \exp(\lambda t)$ conduzirá a uma solução numérica da forma

$$x_n = d_1 \mu_1^n + d_2 \mu_2^n + \dots + d_k \mu_k^n \quad (3.13)$$

com a raiz principal μ_1 aproximando uma expansão em Taylor da solução real

$$\mu_1 = \exp(h\lambda) + O(h^{p+1}), \quad h \longrightarrow 0 \quad (3.14)$$

Definindo uma função erro $e_n = x_n - x(n)$, ou seja, a diferença entre o valor aproximado obtido mediante integração numérica e a solução analítica real do problema como

$$e_n = c_1 \mu_1^n + c_2 \mu_2^n + \dots + c_k \mu_k^n \quad (3.15)$$

verifica-se que, para a obtenção de um resultado estável, esta função não pode crescer com n , o que mostra que as raízes da equação característica do método utilizado vão, em última análise, determinar sua estabilidade. Portanto um método linear de passo múltiplo é dito ser

- Absolutamente estável, se $|\mu_i| < 1$, $i = 1(1)k$.
- Relativamente estável, se $|\mu_i| \leq |\mu_1|$, $i = 1(1)k$.

Vimos, no início do capítulo, que as dificuldades para obtenção de estabilidade numérica para um processo podem ser inferidas a partir de uma análise de seus autovalores; sob o ponto de vista do

método utilizado esta estabilidade se reflete no comportamento das raízes de sua equação característica. Os autovalores de um processo e as raízes da equação característica do método utilizado devem, portanto, estar intimamente relacionados. Seinfeld [Seinfeld,1970] efetivamente, mostrou o interrelacionamento entre estes valores que achamos válido reproduzir. Para tal considere a equação

$$\dot{y} = A y, \quad y(0) = y_0 \quad (3.16)$$

cujas soluções pelo método de Euler e Euler modificado são, respectivamente,

$$y_{n+1} = y_n + h \dot{y} \quad \text{e} \quad y_{n+1} = y_n + h/2 (\dot{y}_{n+1} + \dot{y}_n) \quad (3.17)$$

Um incremento na solução exata desta equação a partir do ponto n será dado por

$$y(n+1) = \exp(hA) y(n) \quad (3.18)$$

enquanto a solução numérica, com um método de estágio único, para o mesmo ponto fornece

$$y_{n+1} = M(hA) y_n \quad (3.19)$$

tal que $y(n+1) - y_{n+1} \longrightarrow 0$ se $M(hA) \longrightarrow \exp(hA)$.

Para o método de Euler $M(hA) = I + hA$, ou seja, os dois primeiros termos da expansão de $\exp(hA)$. Para a regra trapezoidal, $M(hA) = (I - 1/2hA)^{-1}(I + 1/2hA)$ correspondendo à aproximação de Padé para $\exp(hA)$ [Calahan,1967]. Para um sistema de equações diferenciais ordinárias do tipo dado por (3.16), $y \in \mathbb{R}^m$, define-se uma transformação de similaridade $y = Pz$, o que conduz a $z^* = P^{-1}APz$, $z(0) = P^{-1}y_0$ que se reduz a $z^* = \Lambda z$, onde Λ é a matriz diagonal dos autovalores, se $\lambda_i = \lambda_j, \forall i \neq j$. A solução de (3.16) será

$$y(n+1) = P \exp(\Lambda h) P^{-1} y(n) \quad (8.20)$$

A convergência do método linear de passo simples exige que

$$M(P \Lambda P^{-1} h) = P \exp(\Lambda h) P^{-1} \quad (8.21)$$

A forma geral da aproximação de Padé que inclui todas as raízes características é

$$M(B) = \left(\sum_{i=1}^n b_i B^i \right)^{-1} \left(\sum_{i=1}^m a_i B^i \right). \quad (8.22)$$

Seja $B = P \Lambda P^{-1}$, o que fornece

$$M(P \Lambda P^{-1}) = \left(\sum_{i=1}^n b_i (P \Lambda P^{-1})^i \right)^{-1} \left(\sum_{i=1}^m a_i (P \Lambda P^{-1})^i \right) \quad (8.23)$$

$$M(P \Lambda P^{-1}) = P \left(\sum_{i=1}^n b_i \Lambda^i \right)^{-1} \left(\sum_{i=1}^m a_i \Lambda^i \right) P^{-1} \quad (8.24)$$

$$M(P \Lambda P^{-1}) = P M(\Lambda) P^{-1} \cong \exp(\Lambda h) \quad (8.25)$$

onde cada elemento da diagonal de $M(\Lambda h)$ se aproxima do correspondente elemento de $\exp(\Lambda h)$. Visto que cada elemento da diagonal de M é a raiz característica μ_i do método de passo simples,

$$\mu_i(h\lambda_i) \cong \exp(h\lambda_i), \quad i = 1(1)m. \quad (8.26)$$

o que evidencia claramente a relação entre os autovalores do sistema e as raízes da equação característica.

Os conceitos de estabilidade numérica dos métodos de integração foram inicialmente estudados por Dahlquist [Dahlquist, 1963] que introduziu o conceito de métodos A-estáveis :

Definição 2 - " Um método linear de múltiplos estágios é dito

ser A-estável se todas as soluções de (3.10) tendem a zero, para $n \longrightarrow \infty$, quando o método é aplicado com h fixo e positivo a qualquer equação diferencial ordinária (EDO) da forma

$$\dot{x} = q x \quad (3.27)$$

com $q \in \mathbb{C}$, $\text{Re}(q) < 0$, $\forall h > 0$."

Um método A-estável, portanto, não impõe qualquer restrição ao valor máximo do passo admissível no tocante à questão da estabilidade dos resultados; somente questões de precisão necessária aos resultados determinam limitações de incremento admissível h . É importante ainda ressaltar que o conceito de estabilidade acima diz respeito ao método, visto que estamos supondo que o processo sob análise é inerentemente estável, ou seja, $\text{Re}(\lambda_i) < 0$, $\forall i$.

Ao introduzir o conceito de estabilidade A Dahlquist [Dahlquist, 1963] provou ainda dois importantes teoremas relativos à estabilidade dos métodos lineares de ordem p com k estágios :

Teorema 1 : " Um método explícito de k estágios não possui estabilidade A".

Teorema 2 : " A ordem p de um método linear de k estágios não pode exceder 2, com o menor erro de truncamento sendo obtido para a regra do trapézio, com $p = 2$ e $k = 1$."

A partir da introdução destes teoremas, provando a impossibilidade de se obter simultaneamente estabilidade e precisão para métodos explícitos as pesquisas visando a obtenção de estabilidade e precisão para os métodos numéricos evoluíram segundo duas direções básicas :

1) Desenvolvimento de métodos lineares de múltiplos estágios satisfazendo condições de estabilidade menos restritivas [por

exemplo, Nørsett, 1969; Widlund, 1967]

2) Desenvolvimento de outras classes de métodos A estáveis com alta precisão dos resultados [por exemplo, Treador, 1966; Ehle, 1968]

Para o primeiro caso pode-se citar o trabalho de Widlund [Widlund, 1967] que generalizou o conceito de estabilidade A introduzindo o conceito de estabilidade $A(\alpha)$:

Definição 3 : " Um método linear de k estágios é dito ser $A(\alpha)$ estável, $\alpha \in (0, \pi/2)$, se todas as soluções de (3.10) tendem a zero para qualquer $h > 0$, quando $n \rightarrow \infty$, quando (3.10) é aplicado à equação

$$\dot{y} = \lambda y, \quad \lambda \in \mathbb{C}, \quad \lambda \in S(\alpha), \quad (3.28)$$

$$S(\alpha) = \{z \in \mathbb{C}; \arg(-z) < \alpha, \alpha \neq 0\}."$$

O método é dito possuir estabilidade do tipo $A(\pi/2)$ se for $A(\alpha)$ estável, $\forall \alpha \in (0, \pi/2)$ e $A(0)$ estável se existe $\alpha \in (0, \pi/2)$ para o qual se tenha estabilidade do tipo $A(\alpha)$. O conceito de estabilidade tipo A introduzido por Dahlquist constitui, portanto, o caso mais restritivo da estabilidade $A(\alpha)$ de Widlund, ou seja, estabilidade do tipo $A(\pi/2)$. Com o abrandamento da condição de estabilidade Widlund [Widlund, 1967], considerando EDOs da forma

$$\dot{x} = Q x(t) + f(t), \quad x(0) = x_0 \quad (3.29)$$

com os autovalores de Q de maior módulo localizados não somente no semiplano-esquerdo, mas delimitados a uma região S_α mostrou que, $\forall \alpha \in (0, \pi/2)$ existem métodos implícitos $A(\alpha)$ estáveis de ordem 3 e 4, embora, para α próximo de $\pi/2$ alguns valores de α_i e β_i são demasiados elevados inviabilizando seu uso na prática.

Para a segunda hipótese podem ser considerados os trabalhos de

Treanor [Treanor,1965] que, para EDOs da classe de (3.29), com Q constante e $f(t)$ quadrática desenvolveu métodos de integração com solução exata ; Nørsett [Nørsett,1969] desenvolveu condições para garantia de estabilidade $A(\alpha)$ fornecendo os valores máximos de α para métodos com $k = 3,4,5$ e 6 ; Ehle [Ehle, 1968] centrou suas atenções em métodos de passo simples de ordem arbitrariamente alta que satisfazem os requisitos de estabilidade do tipo $A(\pi/2)$ assinalando, entre outros pontos, que os métodos de Runge-Kutta implícitos , com n estágios e ordem $2n$ são $A(\pi/2)$ estáveis para $n = 1,2,3,\dots$.

Entre os diversos estudos de utilização de métodos $A(\alpha)$ estáveis, Protero [Protero, 1974] , aplicando métodos de estágio simples a sistemas de EDOs não-lineares verificou que :

- 1) alguns métodos com estabilidade tipo A forneceram soluções altamente instáveis.
- 2) a precisão das soluções obtidas para tais equações não pareciam guardar relação com a ordem do método utilizado, indicando problemas de instabilidade.

Estes estudos levaram-no a sugerir a revisão dos conceitos de estabilidade até então utilizados introduzindo o conceito mais restritivo de métodos S-estáveis.

3.3.2 - Métodos S-estáveis

Consideremos a EDO não-linear de valor inicial dada por

$$\dot{y} = f(x,y) , \quad y = y_0, \quad \forall x = 0. \quad (3.30)$$

cuja aproximação, nas imediações da solução $y = g(x)$ pode ser dada por

$$\dot{y} = f(x, g(x)) + J(x)(y - g(x)) \quad (3.31)$$

$$y = \dot{g}(x) + J(x)(y - g(x)) \quad (3.32)$$

onde J denota a matriz Jacobiana $J(x) = f_y[x, g(x)]$.

O problema não-linear (3.30) é dito ser numericamente rígido se os autovalores $\lambda(x)$ de $J(x)$ são tais que

$$\max_{\lambda} (\operatorname{Re}(-\lambda(x))) \gg \max_{\lambda} (\operatorname{Re}(\lambda(x))) \quad (3.33)$$

para um domínio x da solução. Para muitos problemas da classe (3.30), contudo, é possível definir um subconjunto \mathcal{S} de "autovalores rígidos" tais que

$$-\operatorname{Re}(\lambda(x)) \gg \max_{\lambda \in \mathcal{S}} |\operatorname{Re}(\lambda(x))| = \bar{\lambda}(x) \quad (3.34)$$

Para tais situações existe uma matriz $J_{\mathcal{S}}(x)$, com autovalores não-nulos iguais aos autovalores $\lambda(x) \in \mathcal{S}$ tal que

$$J_{\mathcal{S}}(x) = J(x) + O(\bar{\lambda}(x)) \quad (3.35)$$

Quanto maior a separação entre os dois conjuntos de autovalores em (3.34) mais próxima estarão as equações (3.31) e (3.32) na forma das equações

$$\dot{y} = \dot{g}(x) + J_{\mathcal{S}}(x) [y - g(x)] \quad (3.36)$$

e maior a semelhança das equações (3.36) com as propriedades de rigidez do sistema não-linear (3.30). É claro, portanto, que as dificuldades numéricas relacionadas com a solução de (3.30) serão as dificuldades relacionadas com a solução de (3.36). Sem perda de generalidade consideremos (3.36) em formulação escalar

$$\dot{y} = \dot{g}(x) + \lambda(x) [y - g(x)] \quad (3.37)$$

onde $\lambda \in \mathbb{C}$, $\text{Re}(\lambda) < 0$ e $\dot{g}(x)$ sendo uma função definida e limitada no intervalo $x \in [0, \bar{x}]$. Para equações do tipo (3.37), Protero [Protero, 1974] introduziu o conceito de estabilidade tipo S :

Definição 4: " Um método de estágio simples é dito possuir estabilidade do tipo S se, para uma equação diferencial ordinária da classe (3.37) e para λ_0 , $\forall \lambda_0 \in \mathbb{R}$ e $\lambda_0 \geq 0$ existe uma constante real positiva h tal que

$$\left\| \frac{y_{n+1} - g(x_{n+1})}{y_n - g(x_n)} \right\| < 1 \quad (3.38)$$

para $y_n \neq g(x_n)$, $0 < h < h_0$ e todo complexo λ com $\text{Re}(\lambda) \geq \lambda_0$, $x_n \in [0, \bar{x}]$. Se as condições acima forem válidas somente para $|\arg(-h\lambda)| < \alpha$, o método é dito ser $S(\alpha)$ estável. Um método de estágio simples com estabilidade S é dito ser fortemente S-estável se

$$\frac{y_{n+1} - g(x_{n+1})}{y_n - g(x_n)} \longrightarrow 0 \quad (3.39)$$

quando $\text{Re}(-\lambda) \longrightarrow \infty$, $\forall h > 0$ tal que $x_n, x_{n+1} \in [0, \bar{x}]$."

Vê-se, portanto, que quando $\dot{g}(x) = 0$ os conceitos acima são equivalentes à estabilidade tipo A e forte estabilidade A para métodos de um estágio. Uma extensão dos conceitos acima bem como um desenvolvimento de alguns métodos apropriados para para solução de problemas do tipo analisado pode ser encontrada em Protero [Protero, 1974]. Para as necessidades do nosso trabalho estes conceitos são suficientes.

Vejamos a seguir o desenvolvimento dos métodos de Runge-Kutta Diagonalmente Implícitos sobre os quais a nossa implementação estará baseada, bem como o método de Liniger-Willhoughby (LW), métodos estes

com estabilidades A e S e que serão implementados para solução do problema apresentado pelas equações dinâmicas das colunas de destilação de alta pureza.

3.4 - Métodos de Runge-Kutta Diagonalmente Implícitos (DIRKO)

A concepção básica de um método de Runge-Kutta consiste em aproximar a solução $y : (0, t) \in \mathbb{R}^m$ de um problema de valor inicial

$$\dot{y} = f(y, t), \quad y(0) = y_0, \quad f: \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}^m, (0, t) \quad (3.40)$$

em um ponto $t_{n+1} = t_n + h$, onde h é o incremento de integração, pela integral

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, y(t)) dt \quad (3.41)$$

utilizando a fórmula de quadratura

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + h \sum_{i=1}^q b_i f(t_{n+\tau_i h}, y(t_{n+\tau_i h})) + \text{erro} \quad (3.42)$$

onde τ_1, \dots, τ_q são pontos de quadratura e b_1, \dots, b_q são as respectivas ponderações. Se denominarmos $t_{n+\tau_i h}$ por $t_{n,i}$ e partindo-se de um ponto $y(t_n)$ para o qual dispõe-se de uma aproximação y_n , é necessário ter-se os valores $y_{n,i}$ para o cálculo de $y(t_{n,i})$. Tais pontos serão também aproximados por uma quadratura numérica da mesma forma

$$y_{n,i} = y_n + h \sum_{j=1}^q a_{i,j} f(t_{n,j}, y_{n,j}), \quad i = 1(1)q \quad (3.43)$$

As relações (3.43) representam um conjunto de equações implícitas que deverão ser solucionadas para $y_{n,i}$ e que,

substituídas em (3.42), fornecerão o próximo valor de y :

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^q b_i f(t_{n,i}, y_{n,i}) \quad (3.44)$$

Seguindo Butcher [Butcher, 1964a,b] é conveniente introduzir a notação da matriz de Butcher para os coeficientes numéricos do método de Runge-Kutta

$$\begin{array}{c|c} A & T \\ \hline B & \end{array}$$

onde $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $B \in \mathbb{R}^{1 \times n}$ e $T \in \mathbb{R}^{n \times 1}$, com $\tau_i = \sum_{j=1}^n a_{i,j}$. Os elementos $a_{i,j}$ da matriz A são as ponderações da quadratura numérica para avaliação dos pontos intermediários $y_{n,i}$; os elementos $b_{i,j}$ da matriz B as ponderações da quadratura numérica para avaliação do novo ponto $y(t_{n+1})$ e os elementos τ_i de T os incrementos relativos ao intervalo de integração. Os valores numéricos utilizados nas ponderações da Matriz de Butcher definirão as diversas classes de métodos de Runge-Kutta :

- Explícitos : Métodos para os quais $a_{i,j} = 0, \forall j \geq i$
- Semi-implícitos : Métodos para os quais $a_{i,j} = 0, \forall j > i$
- Implícitos : Classe restante dos métodos de RK.

O grande problema associado aos métodos implícitos reside na necessidade de se resolver iterativamente o conjunto de equações (3.43) para cada valor do incremento de integração, o que pode significar um esforço computacional excessivo inviabilizando, em muitos casos, sua implementação prática pela necessidade de inversões de matrizes de dimensões elevadas a cada iteração. O problema representado, por um lado, pela necessidade de se utilizar métodos implícitos com garantias efetivas de estabilidade A e S e,

por outro, o esforço computacional envolvido levou a estudos de comparação entre a ordem de diversos métodos e a precisão conseguida, visando não só o estabelecimento de alternativas para um compromisso entre esforço computacional e precisão, mas também garantias de estabilidade tanto do tipo S como do tipo A.

Butcher [1964a,b] , o primeiro a propor e analisar os métodos de Runge-Kutta Semi-Implicitos, utilizando fórmulas de quadratura de Gaus-Legendre e Radau verificou que os ganhos de precisão entre os métodos implícitos e explícitos, para a mesma ordem, não excedia uma potência de h (incremento de integração) e em alguns casos, quando comparados aos semi-implícitos, não chegavam sequer a apresentar este ganho. Estes resultados mostraram a potencialidade apresentada pelos métodos semi-implícitos que, com esforço sensivelmente menor, apresentavam para muitos casos, a mesma precisão dos métodos implícitos.

Os métodos de Runge-Kutta Diagonalmente Implícitos (DIRK) foram propostos em 1977 como uma alternativa a mais visando o estabelecimento do compromisso entre esforço computacional e precisão de resultados associados à utilização dos métodos implícitos. Alexander [Alexander, 1977], seguindo os trabalhos de Cruzoix [Cruzoix,1975] e Butcher [Butcher,1964a,b], propôs a denominação de Métodos de Runge-Kutta Diagonalmente Implícitos (DIRK) para o caso dos métodos semi-implícitos cuja matriz A apresenta todos os elementos $a_{ii} = a_{jj}$, $\forall i=j$. O principal motivo da proposição desta classe de métodos reside nos seguintes fatos :

- 1) Métodos implícitos de q -estágios com ordem $2q$ possuem estabilidade A [Alexander, 1977].
- 2) A solução de um sistema de equações diferenciais, com dimensão m para um método implícito com q estágios e matriz de posto completo exige a solução simultânea de mq equações implícitas (geralmente não-lineares) em cada iteração.
- 3) Se, contudo, a matriz A de Butcher for triangular inferior

as equações (3.43) podem ser resolvidas em q estágios sucessivos, com a solução de um sistema de dimensão m a cada iteração.

4) Baseado no fato que a solução das equações implícitas (3.43) mediante técnicas de Newton utiliza uma formulação matricial do tipo $I - h A \frac{\partial f}{\partial y}$, pode-se então usar repetidamente o armazenamento da equação numa fatorização tipo LU, se todos os elementos $a_{ii} = a_{jj}$, $\forall i=j$ [ver, p. ex, Paloschi, 1986].

Alexander [Alexander, 1977] desenvolveu então métodos de Runge-Kutta da classe DIRK com estabilidade S de ordem 2 em 2 estágios e de ordem 3 em 3 estágios, mostrando ainda ser impossível a obtenção de estabilidade S para métodos de ordem 4 em 4 estágios. Baseado nos trabalhos de Cruzoix [Cruzoix, 1975] que apresentou métodos semi-implícitos com estabilidade A de ordem 3 em 2 estágios e ordem 4 em 3 estágios, mostrou a impossibilidade de se obter estabilidade A para métodos de ordem 5 em 4 estágios.

Dentre os métodos DIRK propostos por Alexander [Alexander, 1977] nossa escolha recaiu sobre o método DIRK(2,3) ou seja, método de terceira ordem em 2 estágios com estabilidade A pelas razões :

1) É nosso interesse determinar a fórmula de menor ordem possível, dado o esforço computacional envolvido, que possa garantir precisão suficiente, mesmo para colunas de alta e altíssima pureza, cujas necessidades de precisão são da ordem de 10^2 ppm.

2) O método DIRK(3,4) apresentado por Alexander, com estabilidade A, embora de maior ordem, apresenta os termos da diagonal $a_{ii} \cong 1,06$, o que significa que uma equação implícita deve ser resolvida para um intervalo superior ao incremento adotado, o que seguramente gerará problemas de arredondamento.

Seguindo o trabalho de Alexander, Cash [Cash, 1979] desenvolveu

métodos da classe DIRK de ordem 3 em 3 estágios e ordem 4 em 5 estágios com forte estabilidade tipo S e controle local de erro. O fato atraente destas fórmulas é as mesmas efetuarem estimativas de erro baseadas, respectivamente, em fórmulas de segunda e terceira ordem "embutidas" ("embedded"), sem necessidade de esforço computacional adicional. A introdução de técnicas para controle local de erro não foi considerada na implementação de DIRK(2,3). O método clássico para se efetuar tal procedimento, partindo-se de um estado $z(t_n)$, se baseia na avaliação de um novo ponto, $z_1(t_n + \Delta h)$, inicialmente com o valor do incremento h e a seguir mediante duas avaliações sucessivas com $h/2$, obtendo-se $z_2(t_n + \Delta h)$. O erro de truncamento é então considerado como:

$$E_n = \| z_1(t_n + \Delta h) - z_2(t_n + \Delta h) \| / (2^p - 1) \quad (3.45)$$

adotando-se um procedimento de aumento ou diminuição do incremento h conforme o erro E_n esteja ou não dentro de limites estabelecidos para o problema em questão. A sobrecarga computacional imposta por esta técnica é evidente: para um mesmo ponto serão necessários três avaliações, das quais duas serão utilizadas somente para ajuste do incremento. Optou-se assim pela utilização do método DIRK(2,3) com h fixo, utilizando-se o controle local de erro somente no método DIRK(3,3) pela fórmula de Cash, que envolve esforço computacional adicional praticamente nulo. A técnica proposta por Cash consiste na utilização do método DIRK(3,3), S-estável, proposto por Alexander, porém, a partir dos pontos intermediários de quadratura utilizar uma nova Matriz de Butcher relativa a um método DIRK(2,2), A-estável para avaliação do mesmo ponto a ser obtido por DIRK(3,3), verificando o erro envolvido e ajustando o valor de h .

Processos descritos por equações diferenciais rígidas podem passar por determinadas regiões onde a taxa de rigidez é reduzida ou praticamente inexistente. Uma vez em regiões com baixa taxa de RN o tamanho do incremento fica limitado somente por questões de precisão dos cálculos, ligados precisamente aos erros de truncamento. Uma

solução atraente consiste na utilização de técnicas de detecção de RN para ajuste de passo [Shampine - 1977] ou mesmo a troca de métodos utilizados de acordo com a RN do sistema na particular região sendo integrada [Petzold , 1983]. Tais testes, contudo, envolvem geralmente um esforço computacional adicional como , p. ex., cálculo dos autovalores do sistema que, ainda que calculados somente à um determinado número de iterações podem anular todo o ganho proveniente da troca de passo ou de métodos. Por tal motivo o método de Cash de incremento variável se revela especialmente atraente.

3.5 - Fórmulas DIRK(p, q)

Partindo-se de um vetor conhecido $z(t_n)$ avalia-se um novo vetor $z(t_{n+1})$ pela fórmula de quadratura

$$z(t_{n+1}) = z(t_n) + h \sum_{i=1}^q b_i f \left\{ t_{n+\tau_i h}, z(t_{n+\tau_i h}) \right\} \quad (3.46)$$

desprezando-se o erro de truncamento. Os pontos intermediários $z(t_{n+\tau_i h})$ serão também avaliados pela quadratura

$$z(t_{n+\tau_i h}) = z(t_n) + h \sum_{j=1}^q a_{i,j} f \left\{ t_{n+\tau_j h}, z(t_{n+\tau_j h}) \right\} \quad (3.47)$$

que, dada a formulação da matriz de Butcher para os métodos DIRK(2,3) e DIRK(3,3) podem ser desmembrados nas equações de 2 e 3 estágios, respectivamente :

-DIRK(2,3) : pontos intermediários de quadratura

.Estágio 1 :

$$z(t_{n+\tau_1 h}) = z(t_n) + h a_{1,1} f \left\{ t_{n+\tau_1 h}, z(t_{n+\tau_1 h}) \right\} \quad (3.48)$$

. Estágio 2 :

$$z(t_{n+\tau_2 h}) = z(t_n) + h \left[a_{2,1} f \left\{ t_{n+\tau_1 h}, z(t_{n+\tau_1 h}) \right\} + a_{2,2} f \left\{ t_{n+\tau_2 h}, z(t_{n+\tau_2 h}) \right\} \right] \quad (3.49)$$

-DIRK(3,3) : pontos intermediário de quadratura

Os estágios 1 e 2 para este método serão iguais aos anterior, (com as diferentes ponderações) acrescentando-se porém o terceiro estágio :

$$z(t_{n+\tau_3 h}) = z(t_n) + h \left[a_{3,1} f \left\{ t_{n+\tau_1 h}, z(t_{n+\tau_1 h}) \right\} + a_{3,2} f \left\{ t_{n+\tau_2 h}, z(t_{n+\tau_2 h}) \right\} + a_{3,3} f \left\{ t_{n+\tau_3 h}, z(t_{n+\tau_3 h}) \right\} \right] \quad (3.50)$$

Uma vez calculado os pontos intermediários $z(t_{n+\tau_i h})$ os novos pontos do vetor $z(t_{n+1})$ serão obtidos por

DIRK(2,3) : obtenção do novo vetor $z(t_{n+1})$

$$z(t_{n+1}) = z(t_n) + h \left[b_1 f \left\{ t_{n+\tau_1 h}, z(t_{n+\tau_1 h}) \right\} + b_2 f \left\{ t_{n+\tau_2 h}, z(t_{n+\tau_2 h}) \right\} \right] \quad (3.51)$$

DIRK(3,3) : obtenção do novo vetor $z(t_{n+1})$

$$z(t_{n+1}) = z(t_n) + h \left[b_1 f \left\{ t_{n+\tau_1 h}, z(t_{n+\tau_1 h}) \right\} + \right.$$

$$b_2 f \left\{ t_{n+\tau_2 h}, z(t_{n+\tau_2 h}) \right\} + b_3 f \left\{ t_{n+\tau_3 h}, z(t_{n+\tau_3 h}) \right\} \quad (3.52)$$

3.5.1 - Obtenção dos pontos intermediários $z(t_{n+\tau_i h})$

Vimos que a utilização dos métodos semi-implícitos para os quais os elementos $a_{i,j} = 0, \forall i > j$ da Matriz de Butcher elimina a necessidade de se solucionar as $p \times q$ equações não-lineares implícitas de ordem p simultaneamente; que podem então ser resolvidas em q estágios sucessivos. As colunas de destilação apresentam, adicionalmente, uma importante característica que torna o emprego desta classe de métodos especialmente atraente : o caráter tridiagonal (na pior das hipóteses, pentagonal) de sua matriz Jacobiana, o que permite solução rápida dos estágios intermediários $z(t_{n+\tau_i h})$, $i=1(1)q$ pelo uso de algoritmos específicos para solução de equações envolvendo inversão matricial. Para obtenção dos pontos de quadratura $z(t_{n+\tau_i h})$, $i=1(1)q$ nos métodos DIRK utilizou-se um procedimento iterativo com técnicas de Newton-Raphson, juntamente com o algoritmo de Thomas [Holland,1963]. A implementação foi efetuada segundo o seguinte procedimento : ao estado $z(t_{n+\tau_i h})$ associa-se um vetor $Z(t_n)$

$$Z(t_n) = z(t_{n+\tau_i h}) - z(t_n) - h \sum_{i=1}^q a_{i,j} f \left\{ t_{n+\tau_i h}, z(t_{n+\tau_i h}) \right\} \quad (3.53)$$

equação esta resolvida sucessivamente para os estágios $i=1(1)q$ e cuja solução será o valor de $z(t_{n+\tau_i h})$ que fornece $Z(t_n) = 0$. O procedimento para solução desta equação é iterativo : para o e nésimo estágio e a k -ésima iteração, à qual corresponde um valor de $z(t_{n+\tau_i h})^{(k)}$, calcula-se o acréscimo $\Delta z(t_n)^{(k)}$ para a próxima iteração $(k+1)$ tal que

$$z(t_{n+\tau_i h})^{(k+1)} = z(t_{n+\tau_i h})^{(k)} + \Delta z(t_n)^{(k)} \quad (8.54)$$

com o valor do acréscimo $\Delta z(t_n)^{(k)}$ sendo fornecido por

$$\Delta z(t_n)^{(k)} = - \frac{Z(t)^{(k)}}{\frac{\partial}{\partial z(t_{n+\tau_i h})} \left\{ Z(t_n)^{(k)} \right\}} \quad (8.55)$$

Aplicado às equações em questão este procedimento fica :

$$\frac{\partial}{\partial z(t_{n+\tau_i h})} \left\{ Z(t_n)^{(k)} \right\} = \frac{\partial}{\partial z(t_{n+\tau_i h})} \left[z(t_{n+\tau_i h}) - z(t_n) - h \sum_{i=1}^q a_{i,j} f \left\{ t_{n+\tau_i h}, z(t_{n+\tau_i h}) \right\} \right] \quad (8.56)$$

$$\frac{\partial}{\partial z(t_{n+\tau_i h})} \left\{ Z(t_n)^{(k)} \right\} = - \left[\mathbb{I} - h \sum_{i=1}^q a_{i,j} J(z_n) \right] \quad (8.57)$$

onde $J(z_n)$ é a matriz Jacobiana do sistema dada por

$$J(z_n) = \frac{\partial}{\partial z(t_{n+\tau_i h})} f \left\{ t_{n+\tau_i h}, z(t_{n+\tau_i h}) \right\} \quad (8.58)$$

O incremento $\Delta z(t_n)^{(k)}$ ao valor $z(t_{n+\tau_i h})^{(k)}$ será obtido por

$$\Delta z(t_n)^{(k)} = - \left[\mathbb{I} - h \sum_{i=1}^q a_{i,j} J(z_n)^{(k)} \right]^{-1} Z(t_n)^{(k)} \quad (8.59)$$

onde \mathbb{I} é a matriz identidade. O lado direito da expressão (3.59), para uma coluna de destilação, apresenta formulação tridiagonal, como já mencionado. Baseado neste fato a avaliação de $\Delta z(t_n)^{(k)}$ fica computacionalmente simplificada, mesmo para sistemas de dimensão elevada, pela utilização de algoritmos específicos : neste trabalho

utilizou-se o algoritmo de Thomas que, utilizando uma fatorização LU de $[0 - h a_{i,j} J(z_n^{(k)})]$, $\forall i,j$ obtém $\Delta z(t_n)^{(k)}$ recursivamente, sem necessidade de se efetuar inversão matricial.

Para os métodos DIRK(2,3) e DIRK(3,3) a formulação final para determinação dos pontos intermediários de quadratura :

-DIRK(2,3) : obtenção dos pontos intermediários de quadratura

.1º estágio : resolver a equação não-linear

$$Z(t_n) = z(t_{n+\tau_1 h}) - z(t_n) - h a_{1,1} f \left\{ t_{n+\tau_1 h}, z(t_{n+\tau_1 h}) \right\} \quad (9.60)$$

cuja solução será obtida iterativamente por

$$z(t_{n+\tau_1 h})^{(k+1)} = z(t_{n+\tau_1 h})^{(k)} + \Delta z(t_n)^{(k)} \quad (9.61)$$

com o valor do incremento sendo dado por

$$\Delta z(t_n)^{(k)} = - \left[0 - h a_{1,1} J(z_n)^{(k)} \right]^{-1} Z(t_n)^{(k)} \quad (9.62)$$

.2º estágio : a partir do valor obtido para $z(t_{n+\tau_1 h})$ resolver a equação não-linear

$$Z(t_{n,2}) = z(t_{n+\tau_2 h}) - z(t_n) - h \left[a_{2,1} f \left\{ t_{n+\tau_1 h}, z(t_{n+\tau_1 h}) \right\} - a_{2,2} f \left\{ t_{n+\tau_2 h}, z(t_{n+\tau_2 h}) \right\} \right] \quad (9.63)$$

de maneira análoga ao estágio anterior, porém com o incremento $\Delta z(t_n)^{(k)}$ dado por

$$\Delta z(t_n)^{(k)} = - \left[0 - h a_{2,2} J(z_n)^{(k)} \right]^{-1} Z(t_n)^{(k)} \quad (9.64)$$

-DIRK(3,3) : o primeiro e segundos estágios serão obtidos de

maneira semelhante aos anteriormente descritos, com a respectiva diferença nas ponderações $a_{i,j}$. Obtidos o primeiro e segundo estágios, o terceiro será calculado mediante a expressão

$$Z(t_{n,3}) = z(t_{n+\tau_2 h}) - z(t_n) - h \left[a_{2,1} f \left\{ t_{n+\tau_1 h}, z(t_{n+\tau_1 h}) \right\} + a_{2,2} f \left\{ t_{n+\tau_2 h}, z(t_{n+\tau_2 h}) \right\} + a_{2,3} f \left\{ t_{n+\tau_3 h}, z(t_{n+\tau_3 h}) \right\} \right] \quad (3.65)$$

com o incremento para atualização de $z(t_{n+\tau_3 h})^{(k)}$ sendo dado por

$$\Delta z(t_n)^{(k)} = - \left[I - h a_{3,3} J(z_n)^{(k)} \right]^{-1} z(t_{n,3})^{(k)} \quad (3.66)$$

É importante observar que as ponderações $a_{i,j}$ e $\tau_{i,j}$ serão diferentes para os dois métodos, com seus valores sendo dados em Alexander [Alexander,1977] e Cash [Cash,1979]. Obtidos os pontos intermediários de quadratura $z(t_{n+\tau_i h})$, o valor do novo vetor $z(t_{n+1})$, para os dois métodos, serão dados por

DIRK(2,3) : obtenção do novo vetor $z(t_{n+1})$

$$z(t_{n+1}) = z(t_n) + h \left[b_1 f \left\{ t_{n+\tau_1 h}, z(t_{n+\tau_1 h}) \right\} + b_2 f \left\{ t_{n+\tau_2 h}, z(t_{n+\tau_2 h}) \right\} \right] \quad (3.67)$$

DIRK(3,3) : obtenção do novo vetor $z(t_{n+1})$

$$z(t_{n+1}) = z(t_n) + h \left[b_1 f \left\{ t_{n+\tau_1 h}, z(t_{n+\tau_1 h}) \right\} + b_2 f \left\{ t_{n+\tau_2 h}, z(t_{n+\tau_2 h}) \right\} + b_3 f \left\{ t_{n+\tau_3 h}, z(t_{n+\tau_3 h}) \right\} \right] \quad (3.68)$$

3.5.2 - Ajuste de h para DIRK(3,3)

Veremos neste item a implementação do controle local de erro de truncamento para DIRK(3,3) como proposto por Cash [Cash,1979]. Para tal são avaliados dois vetores, $z(t_{n+1})$ e $z^*(t_{n+1})$, com o primeiro sendo dado pela equação (3.68), relativa à DIRK(3,3). Os vetores intermediários de $z^*(t_{n+1})$ serão avaliados a partir dos mesmos pontos intermediários do primeiro e segundos estágios de DIRK(3,3), obtidos a partir das equações (3.60) e (3.63), porém o novo vetor $z^*(t_{n+1})$ utiliza um método DIRK(2,2), A-estável, com as ponderações b_i^* dadas em Cash [Cash,1979]. O único esforço adicional é, portanto, o cálculo do vetor $z^*(t_{n+1})$ mediante uma fórmula simples.

O erro local será obtido por

$$|E(.)| = \|z(t_{n+1}) - z^*(t_{n+1})\|_2 \quad (3.69)$$

e sua implementação utilizou os seguintes critérios :

- Para o atual valor de h avaliar os novos vetores $z(t_{n+1})$ e $z^*(t_{n+1})$. Calcular $|E(.)|$ pela equação (3.69)
- Se $|E(.)| \geq TOL_{max}$, o erro máximo admissível, fazer $h = h/2$. Reavaliar $[\| - h a_{i,j} \mathcal{J}(z_n) \|]$. Reavaliar $z(t_{n+1})$ e prosseguir.
- Se $|E(.)| \leq TOL_{min}$, o limite inferior de erro, adotar $z(t_{n+1})$ calculado, fazer $h = 2 \times h$ e prosseguir.
- Se $TOL_{min} \leq |E(.)| \leq TOL_{max}$, aceitar o valor de $z(t_{n+1})$, manter o valor de h e prosseguir.

Como à cada troca de h o valor de $[\| - h a_{i,j} \mathcal{J}(z_n) \|]$ necessita ser reavaliado, mudanças constante devem ser evitadas sob risco de aumento do esforço computacional. Cash [Cash,1979], a partir de resultados empíricos, sugere adotar

$$TOL_{\min} = TOL_{\max} / (2^k + 2^{k+1}) \quad (3.70)$$

onde k é a ordem do método, sugestão esta utilizada em nossa implementação.

3.5 - Método de Liniger-Willoughby

Consideremos a seguinte fórmula geral dos métodos de estágio simples com derivadas segundas :

$$z(t_{n+1}) = z(t_n) + h \beta_0 \dot{z}(t_{n+1}) + h^2 \gamma_0 \ddot{z}(t_{n+1}) + h \beta_1 \dot{z}(t_n) + h^2 \gamma_1 \ddot{z}(t_n) \quad (3.71)$$

cuja raiz característica é

$$\mu = \frac{1 + \beta_1 h \lambda + \gamma_1 h^2 \lambda^2}{1 - \beta_0 h \lambda - \gamma_0 h^2 \lambda^2} \quad (3.72)$$

equação esta consistindo de uma aproximação de Padé para $\exp(h\lambda)$ [Calahan,1967]. A inclusão das derivadas segundas permite que se obtenha métodos lineares A - estáveis com múltiplos estágios e ordem maior que 2. Para que o método, adicionalmente, seja fortemente A - estável é necessário que as raízes principais $\mu_{i,j}(h\lambda_j) \longrightarrow \exp(h\lambda_j)$, quando $h\lambda_j \longrightarrow 0$ e que $\mu_{i,j}(h\lambda_j) \longrightarrow 0$, se $h\lambda_j \longrightarrow -\infty$. Estas idéias foram exploradas por Liniger [Liniger,1967] que procurou ajustar exponencialmente $\mu(h\lambda_j)$ à função $\exp(h\lambda_j)$ obtendo duas formas básicas da equação (3.72) com ordens 1 e 3, respectivamente

$$z(t_{n+1}) = z(t_n) + h(1 - \beta_1) \dot{z}(t_{n+1}) + \beta_1 \dot{z}(t_n) \quad (3.73)$$

$$z(t_{n+1}) = z(t_n) + h/2[(1 + \alpha)z'(t_{n+1}) + (1 - \alpha)z'(t_n)]$$

$$h^2/12 [(1 + 3\alpha)z''(t_{n+1}) + (1 - 3\alpha)z''(t_n)] \quad (3.74)$$

A equação (3.73) se revela especialmente atraente pois, apesar de ser um método de primeira ordem, ajusta a ponderação β_1 de maneira a obter resposta o mais próximo possível da solução analítica. Além disto trata-se de um método A-estável, de um único estágio, com pouco esforço computacional envolvido em sua avaliação. Sua implementação permitirá, adicionalmente, uma comparação com métodos DIRK de dois e três estágios.

3.5.1 - Método de Liniger-Willhoughby (LW) de 1.^o ordem

O principal aspecto a ser considerado na implementação da fórmula de Liniger-Willhoughby de primeira ordem consiste na regressão exponencial da ponderação β_1 da equação (3.73) [Seinfeld,1970] :

$$\beta_1(h\lambda) = -\|h\lambda\|^{-1} - \left\{ \exp(\|h\lambda\|) - 1 \right\}^{-1} \quad (3.75)$$

o que exige um conhecimento dos autovalores da coluna. A regressão pode envolver duas possibilidades :

- 1) Cálculo dos autovalores da matriz linearizada do sistema e determinação do fator β_1 "off-line" : Pode-se mostrar, facilmente, que os auto-valores do sistema dependem das condições operacionais da coluna as quais, em condições dinâmicas, podem variar significativamente em relação ao estado nominal fazendo com que, exatamente na situação de perturbação, a regressão exponencial esteja degradada. O cálculo dos autovalores dentro do programa envolveria um esforço computacional excessivo, que tiraria certamente toda a vantagem do método (Primeira ordem em 1 estágio).

2) Uso de fórmulas alternativas que, embora utilizem aproximação dos autovalores permitam um cálculo rápido "on-line" ajustando o valor de β_1 de acordo com as condições operacionais da coluna. Pode-se, nesta hipótese, utilizar o procedimento sugerido por Tyreus [Tyreus,1975b] para avaliação aproximada dos autovalores.

A segunda hipótese parece mais atraente, ainda mais se considerarmos que a mesma pode ser facilmente implementada. O problema, portanto, reside na determinação aproximada dos autovalores λ_i , $i=1(1)N$. Tyreus [Tyreus,1975b] observa que, apesar das variações de λ_i de uma coluna um valor típico de $\|\lambda_M\| = 0,5 \|\lambda_{\max}\|$ fornece uma indicação bastante satisfatória do valor médio dos autovalores. A questão agora consiste na determinação de λ_{\max} , o maior autovalor da coluna.

Conforme observado por Distefano [Distefano,1968], os autovalores máximos e mínimos da matriz Jacobiano da coluna podem ser inferidos a partir do teorema de Gershgorin [Durand,1963] :

Teorema de Gershgorin : " Seja $A = (a_{i,j}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ e $r_i = \sum_{j=1, j \neq i}^n \|a_{i,j}\|$, $i=1(1)n$, $j \neq i$. Então todos os autovalores λ_i de A se encontram na união dos discos definidos no plano complexo por $\|\lambda_i - a_{i,i}\| \leq r_i$, $i=1(1)n$. "

Aplicando este teorema ao Jacobiano da coluna [Apêndice 3] vê-se que os autovalores estarão limitados por

$$\|\lambda\|_{\max} \leq 2 \left(\frac{L_n + K_{i,n} V_n}{U_n} \right)_{\max} \quad (3.76)$$

para cada componente, em cada estágio. Mostra-se, por indução, que

$$\|\lambda\|_{\max} \geq \left(\frac{L_n + K_{i,n} V_n}{U_n} \right)_{\max} \quad (3.77)$$

para cada componente em cada estágio, ou seja, o valor absoluto de pelo menos um autovalor da matriz tridiagonal será maior ou igual ao valor absoluto do maior elemento da diagonal principal. Portanto a região de variação de $\|\lambda\|_{\max}$ será dada por

$$\left(\frac{L_n + K_{i,n} V_n}{U_n} \right)_{\max} \leq \|\lambda\|_{\max} \leq 2 \left(\frac{L_n + K_{i,n} V_n}{U_n} \right)_{\max} \quad (8.78)$$

Uma análise da expressão $\left(\frac{L_n + K_{i,n} V_n}{U_n} \right)$ mostra como mudanças nas condições operacionais da coluna podem alterar os autovalores do sistema, seu grau de rigidez e conseqüentemente a regressão de β_1 , caso se utilizem autovalores calculados "off-line" :

1) O fator de separação entre fases, K_i , varia com a concentração dos compostos, sendo que uma pequena concentração de um componente volátil resulta num alto valor de K_i e, conseqüentemente, da expressão $\left(\frac{L_n + K_{i,n} V_n}{U_n} \right)$.

2) Colunas operando com altas taxas de refluxo implicam altos valores de L_n e, conseqüentemente, altos valores de $\left(\frac{L_n + K_{i,n} V_n}{U_n} \right)$. Perturbações envolvendo as vazões líquidas (alteração de refluxo, vazão de alimentação) afetam portanto diretamente os autovalores.

3) Altas vazões de vapor na base implicam, similarmente, em altos valores de $\left(\frac{L_n + K_{i,n} V_n}{U_n} \right)$, com igual influência nos autovalores.

4) Finalmente há que se ressaltar a influência das retenções H_n neste mesmo fator, com baixos valores das retenções nos estágios conduzindo a altos valores do fator $\left(\frac{L_n + K_{i,n} V_n}{U_n} \right)$.

3.5.2 - Implementação do método LW

A implementação do método LW segue os mesmos procedimentos descritos para a implementação dos métodos DIRK, no tocante à solução iterativa de convergência de $z(t_{n+1})$, com a observação que agora não existem vetores intermediários $z(t_{n+\tau_i h})$; o novo ponto será avaliado diretamente. O procedimento adicional, não existente nos métodos DIRK, consiste na avaliação da ponderação β_1 "on-line". A implementação final do algoritmo utiliza o seguinte procedimento:

0) Inicialização:

1- Avaliação preliminar da matriz Jacobiana no início da simulação.

2- Avaliação do autovalor máximo λ_{\max} pela fórmula (3.79)

$$\|\lambda\|_{\max} = 2 \left(\frac{L_n + K_{i,n} V_n}{U_n} \right)_{\max} \quad (3.79)$$

e do autovalor médio $\|\lambda_M\| = 0,5 \|\lambda\|_{\max}$.

3- Cálculo da ponderação β_1 pela equação (3.80):

$$\beta_1 = -\|h\lambda_M\|^{-1} - \left\{ \exp(\|h\lambda_M\|) - 1 \right\}^{-1} \quad (3.80)$$

onde h é o incremento adotado na integração.

1) Algoritmo:

1) Resolver a equação não-linear:

$$Z(t_n) = z(t_{n+1}) - z(t_n) - h(1 - \beta_1) \dot{z}(t_{n+1}) - \beta_1 \dot{z}(t_n) \quad (3.81)$$

cuja solução será obtida iterativamente pela equação (3.82)

$$z(t_{n+1})^{(k+1)} = z(t_{n+1})^{(k)} + \Delta z(t_{n+1})^{(k)} \quad (3.82)$$

com o valor do incremento sendo dado pela equação (3.83)

$$\Delta z(t_{n+1})^{(k)} = - \left[I - h \beta_1 J(z_{n+1})^{(k)} \right]^{-1} z(t_n)^{(k)} \quad (3.83)$$

2) Caso seja necessário reavaliar o Jacobiano retornar ao estágio 0 refazendo os passos 1, 2 e 3. Caso contrário retornar ao passo 1.

3.6 - Simbologia

- \dot{z} = conjunto de equações diferenciais genérico
- λ_i = iésimo autovalor associado a um determinado processo
- J = operador Jacobiano de um processo linear ou linearizado
- A, B e T = matrizes constituintes do bloco de Butcher
- β_1 = ponderação do método de Liniger-Willhoughby
- Δ = incremento na solução das equações de quadratura
- L_n = vazão líquida no enésimo estágio
- V_n = vazão de vapor no enésimo estágio
- $K_{i,n}$ = coeficiente de equilíbrio entre fases, composto i
- U_n = retenção molar no enésimo estágio
- h = incremento de tempo nos métodos de integração numérica

CAPÍTULO 4 : CARACTERIZAÇÃO DO SISTEMA E ANÁLISE DO DESEMPENHO DOS MÉTODOS NUMÉRICOS

4.1 - Introdução

Nos capítulos anteriores foram definidas as equações aplicáveis à modelagem da coluna bem como a escolha e implementação de métodos A e S-estáveis apropriados à integração numérica das equações diferenciais relativas à dinâmica do processo. Será efetuado, neste capítulo, utilizando-se o ferramental desenvolvido anteriormente, um estudo dos algoritmos implementados, ou seja, sua capacidade de reproduzir o comportamento dinâmico da coluna mantendo os balanços e relações aplicáveis (massa, energia, soma e equilíbrio) garantindo assim suas características para aplicação dos algoritmos adaptativos de controle (Cap.5 e 6); serão ainda estudados neste capítulo os efeitos da adoção de diferentes formulações para o cálculo da retenção molar nos estágios e seus efeitos nos resultados obtidos. Será efetuado, finalmente, uma análise dos esforços computacionais relacionados com os diversos métodos de integração e suas implicações na precisão obtida.

4.2. - Considerações sobre a modelagem

Vimos, no capítulo 2, item 2.3.3 , as diversas possibilidades para consideração da retenção molar nos estágios, cada qual envolvendo diferentes considerações relativas ao seu equacionamento e conseqüente influência nos resultados. Uma das hipóteses possíveis consiste na consideração de \dot{U}_n , ou seja, considerar o caráter diferencial da enésima retenção molar, efetuar sua integração e, a partir da equação de Francis calcular as novas vazões hidráulicas. Outra possibilidade consiste na adoção de retenções volumétricas constantes, considerando-se apenas sua variação molar. A vantagem desta segunda hipótese reside na transformação de um conjunto de equações diferenciais em algébricas, com dimensão \mathbb{R}^{NT+2} , onde NT é o número de estágios do processo; esta hipótese, contudo, acarreta o risco de se degradar a dinâmica do sistema descaracterizando-o em suas complexidades.

Dada a impossibilidade de se comparar os resultados da simulação com os dados de uma coluna real, com as mesmas características adotadas para o modelo simulado, optou-se pelo seguinte procedimento :

- implementação da concepção diferencial das retenções, com a integração sendo efetuada mediante um método explícito de Runge-Kutta de quarta ordem e controle local de erro, com um incremento de integração reduzido, evitando os problemas de instabilidade numérica mencionados [Gomes,1988].
- implementação da concepção a volume constante, com a integração sendo efetuada através do método de Runge-Kutta Diagonalmente Implícito de terceira ordem em três estágios [DIRK (3,3)], com controle local de erro.
- Perturbar o processo e comparar os resultados obtidos para os dois métodos, tanto no tocante à dinâmica obtida quanto ao resultado final

Veremos, no item 4.3, que a precisão obtida com o método DIRK(3,3), para um tamanho conveniente do incremento e para os processos analisados, se equipara aos resultados obtidos com o método de RK explícito de quarta ordem, o que nos permite, para efeitos práticos, considerar as diferenças existentes nos resultados como provenientes fundamentalmente das diferentes concepções adotadas para as retenções nos estágios.

O processo foi então submetido à uma alteração na vazão de alimentação, perturbação esta que se reflete diretamente nas vazões líquidas no interior da coluna e, conseqüentemente, nas retenções nos estágios. Foram analisados o comportamento das colunas de alta e altíssima pureza, colunas estas onde as diferenças porventura existentes poderiam ter maiores efeitos sobre os resultados finais nas composições terminais.

Para o método de Runge-Kutta explícito utilizou-se um passo de 5×10^{-4} , valor este da ordem da metade do passo estável do processo (ver item 4.3) obtendo-se garantias de resultados estáveis; para o método DIRK(3,3) foi adotado um passo de 5×10^{-3} . As condições utilizadas, bem como os resultados obtidos, são mostradas nas Tabelas 4.1 e 4.2 para as colunas 2 e 3 já mencionadas; o tempo de simulação foi de 1,5 horas com uma perturbação em degrau de -10% na vazão de alimentação sendo introduzida em 0,2 horas. Todas as simulações foram efetuadas em um microcomputador Scopus, modelo 3600, com CPU 80286, coprocessador 80287 e frequência de trabalho de 8 MHz.

Os resultados finais mostram, para a coluna de alta pureza uma diferença de 0,00001 moles para o topo e nenhuma diferença para a base; para a coluna de altíssima pureza esta diferença foi ligeiramente maior, da ordem de 0,00008 moles para o topo e nula para a base. Estas diferenças mostram que as duas considerações sobre a retenção molar conduzem a resultados praticamente iguais, mesmo para a coluna de altíssima pureza.

Tabela 4.1 - Resultados Obtidos para Diferentes Concepções de Retenção Molar - Coluna de Alta Pureza

MÉTODO	PASSO	X _D FINAL	X _B FINAL
DIRK(3,3)	0,005	0,94737	0,000010
RK-4	0,0005	0,94736	0,000010

Tabela 4.2 - Resultados Obtidos para Diferentes Concepções de Retenção Molar - Coluna de Altíssima Pureza

MÉTODO	PASSO	X _D FINAL	X _B FINAL
DIRK(3,3)	0,005	0,989232	0,000020
RK-4	0,0005	0,989240	0,000020

A figura 4.1 mostra o comportamento da composição no topo e base para as duas colunas utilizando-se as duas concepções diversas para a retenção nos estágios para as três colunas analisadas. Pode-se observar que o comportamento das variáveis é praticamente o mesmo para os dois casos e as duas colunas, respectivamente, indicando que ambas as hipóteses para modelagem da retenção molar conduzem a resultados similares, com a vantagem da suposição volumétrica constante eliminar $NT + 2$ equações diferenciais do processo. Esta hipótese foi portanto utilizada em todas as simulações subsequentes. Veremos agora o desempenho dos diversos métodos de integração.

4.3 - Métodos de Integração : Esforço Computacional e Precisão

Os três métodos implícitos anteriormente analisados foram utilizados nas colunas 1, 2 e 3 : o método de Liniger-Willhoughby, de primeira ordem e A-estável (LW); o método de Runge-Kutta

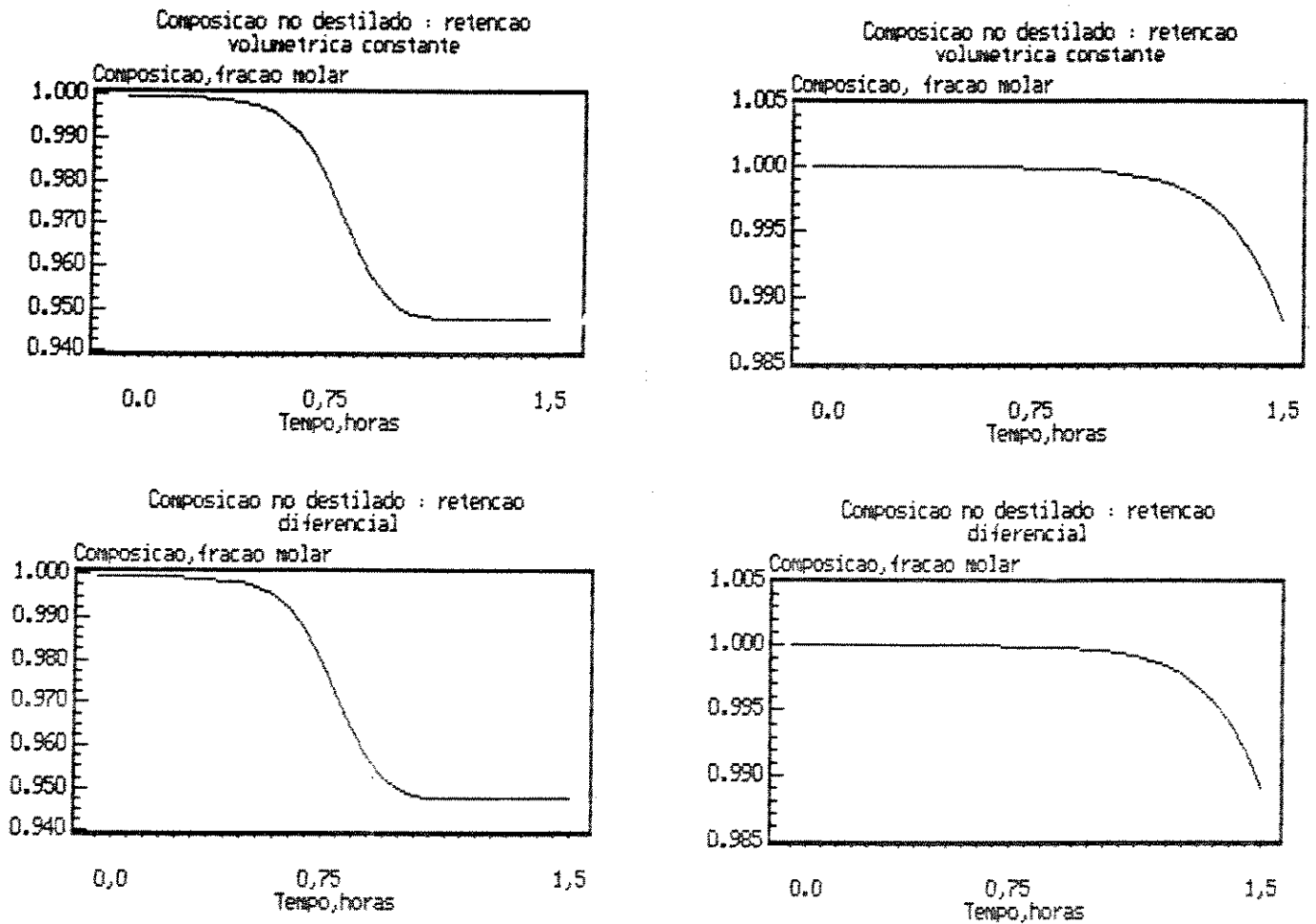


Figura 4.1 - Comportamento dinâmico do processo para diferentes suposições para a retenção (esquerda : alta pureza e direita altíssima pureza)

Diagonalmente Implícito, de terceira ordem em dois estágios e A-estável [DIRK(2,3)] e o método de Runge-Kutta Diagonalmente Implícito de terceira ordem em três estágios com controle local de erro e estabilidade S [DIRK(3,3)]. Utilizou-se adicionalmente, um método de Runge-Kutta explícito de quarta ordem com controle local

de erro (RK-4) para efeitos comparativos de precisão e esforço computacional envolvido [Gomes,1988].

4.3.1 - Precisão dos Métodos

Testou-se, inicialmente, o efeito do passo de integração na precisão dos resultados para o sistema em regime e a manutenção do balanço de massa. A tabela 4.4 mostra os resultados obtidos, no tocante à precisão das composições terminais, para o método RK-4 utilizando-se diferentes passos de integração bem como o esforço computacional envolvido na utilização deste método. No tocante à manutenção do balanço de massa foram observados os resultados constantes da tabela 4.5 para as colunas 1, 2 e 3 , para as mesmas condições de simulação dadas na tabela 4.4.

Uma observação preliminar dos resultados obtidos mostra que o método RK-4, embora possua uma precisão excelente para as necessidades do presente trabalho exige, contudo, para garantia de resultados estáveis, um incremento de integração extremamente reduzido, da ordem de 2 segundos (0,0007 horas), com a simulação de uma hora real sendo efetuada em um tempo médio da ordem de 20 minutos. Considerando-se que colunas de destilação possuem constantes de tempo elevadas, que podem ser da ordem de horas, é fácil verificar-se que a utilização deste método pode se constituir num entrave ao estudo do processo, caso seja necessário simular várias horas de seu comportamento dinâmico, o que já descarta imediatamente a possibilidade de sua utilização. Os erros existentes no balanço de massa, para a condição de regime, são também totalmente insignificantes, dado que as vazões totais envolvidas são da ordem de 10000,0 moles/hora. O maior erro verificado ocorreu para a coluna de altíssima pureza, sendo contudo da ordem de 3,0 moles, valor este que pode ser totalmente ignorado face à circulação de massa no interior da coluna, com vazões superiores a 24000,00 moles por hora.

Os mesmos procedimentos foram então efetuados para os métodos implícitos, com o processo em regime, obtendo-se os resultados mostrados nas Tabelas 4.8, 4.9 e 4.10 para os métodos LW, DIRK(2,3) e DIRK(3,3), respectivamente. As condições de aplicação dos métodos, no tocante às tolerâncias e procedimentos utilizados estão relacionadas na Tabela 4.7. As tolerâncias indicadas dizem respeito aos seguintes aspectos :

Tabela 4.4 - Desempenho Computacional para o Método RK-4
- Processo em regime -

TEMPO SIMUL. (HORAS)	TEMPO COMPUT. MINUTOS	PASSO	TOL. INTEGR.	XD INICIAL	XD FINAL	XB INICIAL	XB FINAL
----------------------------	-----------------------------	-------	-----------------	---------------	-------------	---------------	-------------

- COLUNA PURA EM REGIME :

1,0	15:38"	0,0006	0,001	0,9961	0,9961	0,2123	0,2123
1,0	11:14"	0,00075	0,001	0,9961	0,9961	0,2123	0,2123
1,0	---	0,0010	0,001	- O MÉTODO DESESTABILIZOU -			

- COLUNA DE ALTA PUREZA EM REGIME :

1,0	19:32"	0,0006	0,001	0,99938	0,99938	0,00024	0,00024
1,0	14:28"	0,00075	0,001	0,99938	0,99938	0,00024	0,00024
1,0	---	0,0010	0,001	- O MÉTODO DESESTABILIZOU -			

- COLUNA DE ALTISSIMA PUREZA EM REGIME :

1,0	21:49"	0,0006	0,001	0,99997	0,99997	0,00018	0,00018
1,0	16:36"	0,00075	0,001	0,99997	0,99997	0,00018	0,00018
1,0	---	0,0010	0,001	- O MÉTODO DESESTABILIZOU -			

-Newton-Raphson : tolerância adotada para convergência no cálculo das temperaturas em cada estágio da coluna, calculadas iterativamente pela equação de Raoult (equação 2.37)

Z(t) : tolerância adotada para convergência da equação

$$Z(t_n) = z(t_{n+\tau_i h}) - z(t_n) - h \sum_{i=1}^q a_{i,j} f\left\{t_{n+\tau_i h}, z(t_{n+\tau_i h})\right\}$$

Tabela 4.5 - Manutenção do Balanço de Massa - Método RK-4
- Processo em regime -

TEMPO SIMUL. (HORAS)	TEMPO COMPUT. MINUTOS	PASSO	DESTILADO+ BASE - ALIMENTAÇÃO (INICIAL)	DESTILADO+ BASE -ALIMENTAÇÃO (FINAL)
----------------------------	-----------------------------	-------	---	--

- COLUNA PURA :

1,0	15:38"	0,0006	0,0 moles	0,03 moles
1,0	11:14"	0,00075	0,0 moles	0,16 moles

- COLUNA DE ALTA PUREZA :

1,0	19:32	0,0006	0,0 moles	0,04 moles
1,0	14:28"	0,00075	0,0 moles	0,18 moles

- COLUNA DE ALTISSIMA PUREZA :

1,0	21:49"	0,0006	0,0 moles	2,00 moles
1,0	16:36"	0,00075	0,0 moles	2,70 moles

nos três estágios de DIRK(3,3), nos dois de DIRK(2,3) e no estágio único de LW.

-Erro máximo : se aplica somente ao método DIRK(3,3) e constitui o erro máximo aceitável para manutenção do passo de integração atualmente em uso (EC.) na equação 3.69)

-Iterações para reavaliar o Jacobiano : número máximo de iterações aceitável para convergência de $Z(t_n)$ sem que seja feita nova reavaliação do Jacobiano utilizado na equação de atualização do vetor $Z(t_n)$:

$$\Delta z(t_n)^{(k)} = - \frac{z(t)^{(k)}}{\frac{\partial}{\partial z(t_{n+\tau_i h})} \left\{ z(t_n)^{(k)} \right\}}$$

Relativamente ao aspecto de reavaliação do Jacobiano e seu efeito no desempenho computacional dos métodos ver a análise mais detalhada no item (4.3.2).

O primeiro aspecto a ser notado na aplicação dos métodos implícitos consiste na possibilidade de utilização de incrementos de integração bastante superiores aos utilizados no método explícito sem que o processo desestabilize. Esta possibilidade se reflete imediatamente nos ganhos computacionais onde os tempos são drasticamente reduzidos : de aproximadamente 20 minutos para o método RK-4 para cerca de 1 minuto nos três métodos implícitos, sem perda de precisão nos resultados. A vantagem da utilização do método DIRK(3,3), apesar de apresentar um estágio de cálculo adicional, fica claramente evidenciada nos resultados obtidos quando comparado com os demais para o caso em que o passo foi inicializado com um incremento de 0,0001 horas : devido à sua capacidade de controle local de erro o tempo computacional total foi da ordem de 1 minuto, enquanto para os demais chegou a 40 minutos.

Esta situação, embora mais acentuada em regime , permite também melhorias quando o processo for submetido a perturbações variadas, pois embora o método tenda a trabalhar com incrementos menores em regiões de perturbação, onde os erros de truncamento são mais acentuados, tenderá a aumentá-lo automaticamente à medida que o processo voltar à situação de regime.

Efetivou-se então um teste dos métodos no tocante à precisão e esforço computacional com o processo submetido a perturbações : a vazão de alimentação foi alterada de 10000,0 para 9800,0 mole/horas em 0.3 horas, com a dinâmica do processo sendo simulada por um período de 3,5 horas. Os resultados obtidos para os três métodos implícitos são mostrados nas Tabelas 4.11, 4.12

Tabela 4.7 - Aplicação dos métodos implícitos :
Tolerâncias e Procedimentos utilizados

TOLERANCIA	LW	DIRK(2,3)	DIRK(3,3)
- COLUNA PURA :			
. NEWTON - RAPHSON	0,00002	0,00002	0,00002
. SOLUÇÃO DE Z(T)	0,00001	0,00001	0,00001
. ERRO MAXIMO LOCAL	-	-	0,0001
. ITERACOES P/ REAVALIAR O JACOBIANO	4	4	4
- COLUNA DE ALTA PUREZA :			
. NEWTON - RAPHSON	0,000005	0,000005	0,000005
. SOLUÇÃO DE Z(T)	0,000005	0,000005	0,000005
. ERRO MAXIMO LOCAL	-	-	0,00001
. ITERAÇÕES P/ REAVALIAR O JACOBIANO	4	4	4
- COLUNA DE ALTISSIMA PUREZA :			
. NEWTON - RAPHSON	0,000002	0,000002	0,000002
. SOLUCAO DE Z(T)	0,0000005	0,0000005	0,0000005
. ERRO MAXIMO LOCAL	-	-	0,000001
. ITERACOES P/ REAVALIAR O JACOBIANO	4	4	4

manteve-se as mesmas condições descritas na Tabela 4.7.

Pode-se observar que, para o nível de perturbação introduzido, que não chega a alterar demasiado as condições nominais do processo, os três métodos apresentam resultados praticamente iguais, para os três valores do incremento, no tocante à precisão dos resultados. Os

Tabela 4.8 - Desempenho Computacional para o Método LW
- Processo em regime -

TEMPO SIMUL. (HORAS)	TEMPO COMPUT. MINUTOS	PASSO	XD INICIAL	XD FINAL	XB INICIAL	XB FINAL
----------------------------	-----------------------------	-------	---------------	-------------	---------------	-------------

- COLUNA PURA EM REGIME :

1,0	4:04"	0,0006	0,9961	0,9961	0,2123	(,2123
1,0	2:29"	0,001	0,9961	0,9961	0,2123	(,2123
1,0	0:30"	0,005	0,9961	0,9961	0,2123	(,2123

- COLUNA DE ALTA PUREZA EM REGIME :

1,0	5:08"	0,0006	0,99938	0,99938	0,00024	0,00024
1,0	3:05"	0,001	0,99938	0,99938	0,00024	0,00024
1,0	0:46"	0,005	0,99938	0,99938	0,00024	0,00024

- COLUNA DE ALTISSIMA PUREZA EM REGIME :

1,0	6:01"	0,0006	0,99997	0,99997	0,00018	0,00018
1,0	3:37"	0,001	0,99997	0,99997	0,00018	0,00018
1,0	0:54"	0,005	0,99997	0,99997	0,00018	0,00018

tempos computacionais são crescentes com a ordem do método devido à necessidade de cálculo dos estágios adicionais. Mesmo para a coluna de altíssima pureza o método de LW, de primeira ordem, não introduz erros de truncamento, para as precisões necessárias ao processo.

O processo foi então submetido à uma perturbação bastante significativa, da ordem de +15 % : a vazão de alimentação foi alterada para 11500,00 moles por hora, em malha aberta, com a dinâmica do processo sendo simulado durante um período de 3,0 horas. Foram utilizados tamanhos diferentes de passo para os métodos de LW

Tabela 4.9 - Desempenho Computacional para o Método DIRK(2,3)

- Processo em regime -

TEMPO SIMUL. (HORAS)	TEMPO COMPUT. MINUTOS	PASSO	XD INICIAL	XD FINAL	XB INICIAL	XB FINAL
----------------------------	-----------------------------	-------	---------------	-------------	---------------	-------------

- COLUNA PURA EM REGIME :

1,0	25:09"	0,0001	0,9961	0,9961	0,2123	0,2123
1,0	0:46"	0,005	0,9961	0,9961	0,2123	0,2123

- COLUNA DE ALTA PUREZA EM REGIME :

1,0	32:24"	0,0001	0,99938	0,99938	0,00024	0,00024
1,0	0:57"	0,005	0,99938	0,99938	0,00024	0,00024

- COLUNA DE ALTISSIMA PUREZA EM REGIME :

1,0	38:09"	0,0001	0,99997	0,99997	0,00018	0,00018
1,0	1:02"	0,005	0,99997	0,99997	0,00018	0,00018

e DIRK(3,3), comparando a precisão dos métodos de primeira e terceira ordem; os resultados obtidos são mostrados na Tabela 4.14 e 4.15. Os valores do incremento mostrados são os máximos para os quais os três sistemas não apresentaram erros de precisão. Pode-se observar, a partir da composição na base, que o método de LW apresenta resultados excelentes para as colunas 1 e 2, só começando a falhar para a terceira coluna, de alta precisão. Estes resultados obtidos, juntamente com os anteriores já mostrados, evidenciam a excelente performance deste método, que pode ser utilizado mesmo para colunas de alta pureza, para perturbações que não afastem o

Tabela 4.10 - Desempenho Computacional para o Método DIRK(3,3)
- Processo em regime -

TEMPO SIMUL. (HORAS)	TEMPO COMPUT. MINUTOS	PASSO	XD INICIAL	XD FINAL	XB INICIAL	XB FINAL
----------------------------	-----------------------------	-------	---------------	-------------	---------------	-------------

- COLUNA DE MEDIA PUREZA EM REGIME :

1,0	1:01"	0,0001	0,9961	0,9961	0,2123	0,2123
1,0	0:58"	0,005	0,9961	0,9961	0,2123	0,2123

- COLUNA DE ALTA PUREZA EM REGIME :

1,0	1:07"	0,0001	0,99938	0,99938	0,00024	0,00024
1,0	1:04"	0,005	0,99938	0,99938	0,00024	0,00024

- COLUNA DE ALTISSIMA PUREZA EM REGIME :

1,0	1:09"	0,0001	0,99997	0,99997	0,00018	0,00018
1,0	1:05"	0,005	0,99997	0,99997	0,00018	0,00018

processo demasiado de seu ponto nominal de operação.

4.3.2 - Jacobiano e Tolerancias : Influencia nos Resultados

Outros aspectos analisados serão mostrados a seguir : a influencia da tolerância adotada na convergencia da expressão $Z(.)$ e do número máximo de iterações permitidas antes de nova reavaliação do Jacobiano sobre o esforço computacional e a precisão obtida para os resultados finais. Esta análise foram efetuadas somente para a coluna de alta pureza, dado que as conclusões devem ser válidas para

Tabela 4.11 - Desempenho Computacional para o Método LW
- Processo Perturbado

TEMPO SIMUL. (HORAS)	TEMPO COMPUT. MINUTOS	PASSO	XD INICIAL	XD FINAL	XB INICIAL	XB FINAL
----------------------------	-----------------------------	-------	---------------	-------------	---------------	-------------

- COLUNA PURA :

3,5	12:53"	0,0010	0,99961	0,9851	0,2123	0,0019
3,5	5:58"	0,0025	0,99961	0,9851	0,2123	0,0019
3,5	3:16"	0,0050	0,99961	0,9851	0,2123	0,0019

- COLUNA DE ALTA PUREZA :

3,5	16:33"	0,0010	0,99938	0,98547	0,00024	0,00001
3,5	7:40"	0,0025	0,99938	0,98547	0,00024	0,00001
3,5	4:06"	0,0050	0,99938	0,98548	0,00024	0,00001

- COLUNA DE ALTISSIMA PUREZA :

3,5	20:06"	0,0010	0,99997	0,99946	0,00018	0,00000
3,5	9:17"	0,0025	0,99997	0,99947	0,00018	0,00000
3,5	5:01"	0,0050	0,99997	0,99947	0,00018	0,00000

as demais; os resultados constam das Tabelas 4.16 e 4.17.

O primeiro aspecto analisado é a influencia da tolerância em $Z(\cdot)$, mostrado na Tabela 4.16 : verifica-se que os ganhos computacionais advindo de um relaxamento desta tolerância não justificam o risco de se aumentar os erros cumulativos de simulação; para valores de 5×10^{-6} e 10^{-9} a diferença no esforço computacional foi de somente 8 segundos, em um total de quase quatro minutos, com os resultados porém, já indicando erros da ordem de

Tabela 4.12 - Desempenho Computacional para o Método DIRK(2,3)
- Processo Perturbado

TEMPO SIMUL. (HORAS)	TEMPO COMPUT. MINUTOS	PASSO	XD INICIAL	XD FINAL	XB INICIAL	XB FINAL
----------------------------	-----------------------------	-------	---------------	-------------	---------------	-------------

- COLUNA PURA :

3,5	16:02"	0,0010	0,9961	0,9851	0,2123	0,0019
3,5	6:50"	0,0025	0,9961	0,9851	0,2123	0,0019
3,5	3:35"	0,0050	0,9961	0,9851	0,2123	0,0019

- COLUNA DE ALTA PUREZA :

3,5	20:12"	0,0010	0,99938	0,98548	0,00024	0,00001
3,5	8:36"	0,0025	0,99938	0,98548	0,00024	0,00001
3,5	4:28"	0,0050	0,99938	0,98548	0,00024	0,00001

- COLUNA DE ALTISSIMA PUREZA :

3,5	25:57"	0,0010	0,99997	0,99969	0,00018	0,00000
3,5	10:40"	0,0025	0,99997	0,99969	0,00018	0,00000
3,5	5:28"	0,0050	0,99997	0,99969	0,00018	0,00000

0,0011 em fração molar, erro este considerável para uma coluna de alta pureza. Pode-se também observar que o abrandamento da tolerância praticamente não afetou o número de avaliações do Jacobiano, que variou de 356 para 367 durante todo o período de simulação.

Avaliou-se então a influência do número de iterações em $Z(\cdot)$ antes que o Jacobiano seja novamente reavaliado, mostrando resultados interessantes (Tabela 4.17). Verifica-se que o número total de reavaliações do Jacobiano é constante, independente das

Tabela 4.13 - Desempenho Computacional para o Método DIRK(3,3)
.- Processo Perturbado

TEMPO SIMUL. (HORAS)	TEMPO COMPUT. MINUTOS	PASSO	XD INICIAL	XD FINAL	XB INICIAL	XB FINAL
----------------------------	-----------------------------	-------	---------------	-------------	---------------	-------------

- COLUNA PURA :

3,5	6:51"	0,0010	0,9961	0,9852	0,2123	0,0019
3,5	6:38"	0,0025	0,9961	0,9852	0,2123	0,0019
3,5	6:13"	0,0050	0,9961	0,9852	0,2123	0,0019

- COLUNA DE ALTA PUREZA :

3,5	8:48"	0,0010	0,99938	0,98552	0,00024	0,00001
3,5	8:34"	0,0025	0,99938	0,98552	0,00024	0,00001
3,5	8:06"	0,0050	0,99938	0,98552	0,00024	0,00001

- COLUNA DE ALTISSIMA PUREZA :

3,5	9:28 "	0,0010	0,99997	0,99969	0,00018	0,00000
3,5	9:16"	0,0025	0,99997	0,99969	0,00018	0,00000
3,5	9:05"	0,0050	0,99997	0,99969	0,00018	0,00000

iterações permitidas com o mesmo valor, que foi estipulada até um máximo de 10. Ou seja, estando o processo perturbado, a convergência de $Z(\cdot)$ não ocorre enquanto o Jacobiano não for reavaliado, para cada iteração. Contudo, à medida que aumenta o número de iterações aumenta também o esforço computacional envolvido, que praticamente dobra, com o detalhe adicional que a precisão do resultado não se altera. O melhor procedimento a se adotar neste caso, contrariamente ao normalmente empregado na utilização dos métodos implícitos, é reavaliar o Jacobiano para cada iteração, procedimento este que se revela computacionalmente mais eficiente, apesar do maior número de cálculos a serem efetuados.

Tabela 4.14 - Método LW : + 15% na alimentação

TEMPO SIMUL. (HORAS)	TEMPO COMPUT. MINUTOS	PASSO	XD INICIAL	XD FINAL	XB INICIAL	XB FINAL
----------------------------	-----------------------------	-------	---------------	-------------	---------------	-------------

- COLUNA PURA :

1,5	1:19"	0,0050	0,9961	0,9965	0,2123	0,3443
1,5	0:42"	0,0100	0,9961	0,9965	0,2123	0,3443

- COLUNA DE ALTA PUREZA :

1,5	2:03"	0,0050	0,99938	0,99950	0,00024	0,33374
3,5	0:54"	0,0100	0,99938	0,99950	0,00024	0,33374

- COLUNA DE ALTISSIMA PUREZA :

1,5	2:12"	0,0050	0,99997	0,99997	0,00018	0,32878
1,5	9:17"	0,0100	0,99997	0,99997	0,00018	0,32879

Tabela 4.15 - Método DIRK(3,3) : + 15% na alimentação

TEMPO SIMUL. (HORAS)	TEMPO COMPUT. MINUTOS	PASSO	XD INICIAL	XD FINAL	XB INICIAL	XB FINAL
----------------------------	-----------------------------	-------	---------------	-------------	---------------	-------------

- COLUNA PURA :

1,5	1:59"	0,0050	0,9961	0,9965	0,2123	0,3443
1,5	1:03"	0,0100	0,9961	0,9965	0,2123	0,3443

- COLUNA DE ALTA PUREZA :

1,5	3:03"	0,0050	0,99938	0,99950	0,00024	0,33371
3,5	0:54"	0,0100	0,99938	0,99950	0,00024	0,33372

- COLUNA DE ALTISSIMA PUREZA :

1,5	3:34"	0,0050	0,99997	0,99998	0,00018	0,32495
1,5	1:54"	0,0100	0,99997	0,99998	0,00018	0,32489

Tabela 4.16- Influência da tolerância em $Z(t)$ no tempo computacional e precisão dos resultados - Coluna de alta pureza.

TEMPO (HORAS)	TEMPO DE SIMULACAO (MINUTOS)	TOLERANCIA Z(T) (x1000)	REAVALIACOES J(T)	X _D FINAL	X _B FINAL
1,0	3,46	1,000	356	0,97706	0,00009
1,0	3,46	0,750	357	0,97695	0,00009
1,0	3,47	0,500	368	0,97696	0,00009
1,0	3,50	0,250	365	0,97685	0,00009
1,0	3,51	0,100	365	0,97685	0,00009
1,0	3,52	0,075	365	0,97685	0,00009
1,0	3,54	0,050	367	0,97685	0,00009

Tabela 4.17 - Influencia do número de iterações para reavaliação do Jacobiano no esforço computacional - Coluna de alta pureza.

TEMPO (HORAS)	TEMPO DE SIMULACAO (MINUTOS)	NUMERO DE ITERACOES P/ REAVALIAR	REAVALIACOES J(T)	X _D FINAL	X _B FINAL
1,0	3,17	1	367	0,97685	0,00009
1,0	3,33	2	367	0,97685	0,00009
1,0	3,40	3	367	0,97685	0,00009
1,0	3,56	4	367	0,97685	0,00009
1,0	4,07	5	367	0,97685	0,00009
1,0	4,18	6	367	0,97685	0,00009
1,0	4,31	7	367	0,97685	0,00009
1,0	4,42	8	367	0,97685	0,00009
1,0	4,58	9	367	0,97685	0,00009
1,0	5,10	10	367	0,97685	0,00009

4.4 - Conclusões Relativas aos Métodos de Integração

Os resultados obtidos na implementação dos métodos de integração no tocante aos esforços computacionais envolvidos e precisão dos resultados permitem tirar algumas conclusões sobre sua aplicação à esta classe de colunas de destilação :

1) A vantagem de se utilizar os métodos implícitos é bastante evidente, a despeito de sua maior complexidade de implementação, mesmo quando comparados aos métodos explícitos com controle de erro, como o método de Runge-Kutta de quarta ordem. Para o caso específico das colunas de destilação, que apresentam matriz Jacobiana tridiagonal, é possível a utilização de algoritmos específicos no cálculo do incremento

$$\Delta z(t_n)^{(k)} = - \frac{z(t)^{(k)}}{\frac{\partial z(t_{n+\tau_i h})}{\partial z(t_n)^{(k)}}}$$

da solução iterativa das equações diferenciais não-lineares do processo sem necessidade de inversão matricial, mediante procedimentos recursivos. Estes procedimentos permitem o cálculo extremamente rápido de sistemas de dimensão elevada, com pouca utilização de memória.

2) No tocante à precisão dos resultados observa-se que, mesmo o método de primeira ordem de LW, para os valores do incremento até da ordem de 0,01 horas e perturbações que não afastem demasiado o processo de seu valor de regime, apresenta ótimos resultados, inclusive para as colunas de alta pureza, com tempos computacionais inferiores aos métodos DIRK, em virtude do estágio único. Há que se ressaltar, adicionalmente, que todos os métodos foram implementados com precisão simples, mesmo para a coluna de altíssima pureza. O método LW, dado sua maior facilidade de implementação, pode

perfeitamente ser utilizado em colunas de alta pureza, desde que sejam tomados alguns cuidados no tocante à sua implementação (valores máximos da ordem de 0,01 horas e perturbações próximo do valor nominal do processo, para as colunas analisadas).

3) As tolerâncias utilizadas para se avaliar a convergência das equações não-lineares podem ser bastante rígidas, garantindo precisão e confiabilidade dos resultados, sem acréscimo significativo no esforço computacional envolvido.

4) O melhor procedimento observado em relação ao Jacobiano foi de se efetuar sua reavaliação tão logo a convergência não ocorra na primeira iteração, pois a mesma só ocorrerá após esta reavaliação. Esta técnica se revela bem mais eficiente que tentar a convergência através de um número elevado de iterações, pois a mesma não ocorrerá.

5) O método DIRK(3,3), embora possua um estágio adicional para cálculo, com conseqüente aumento do esforço computacional, apresenta a vantagem do passo variável, procedimento este que permite que o mesmo, no final, acabe se revelando mais eficiente que os demais. Esta diferença é mais acentuada para situações de regime ou próximas ao mesmo (ver Tabela 4.8, 4.9, 4.10 e 4.13)

4.5 - Caracterização das Colunas de Alta Pureza

Definidas as equações aplicáveis à modelagem do processo bem como o método de integração apropriado efetuou-se um estudo de sua dinâmica verificando de que forma, e em que grau, as complexidades aparecem no processo, que foi submetido a diferentes perturbações, com magnitude e direção variáveis. O método de integração utilizado foi o DIRK(3,3), com as mesmas condições descritas na Tabela 4.7 para as três colunas já descritas. As perturbações introduzidas no processo foram as seguintes :

-Vazão do refluxo : alterações positivas e negativas com valores de $\pm 5,0\%$ e $\pm 10,0\%$.

-Energia fornecida ao refulvedor : alterações positivas e negativas de $\pm 2,5\%$ e $\pm 5,0\%$

-Concentração da alimentação : alterações positivas e negativas de $\pm 10,0\%$ e $\pm 20,0\%$.

O ganho do processo, definido como

$$G = \frac{\Delta y_i}{\Delta u_i}, \text{ onde } y_i \text{ e } u_i \text{ são a } i\text{-ésima saída e entrada}$$

normalizadas foi mensurado para as diversas perturbações introduzidas e para as três colunas; os resultados estão mostrados nas Tabelas 4.18, 4.19 e 4.20. Entre as concepções básicas de controle normalmente utilizadas [Nisenfeld,1981; Latour,1978] nas colunas de destilação quase todas utilizam como variável de controle a vazão do refluxo e/ou a energia fornecida ao refulvedor da coluna; pode-se assim verificar, por exemplo, a existência de uma malha de controle onde as complexidades do processo não sejam tão acentuadas. Devido às características da coluna, que apresenta pequena vazão na base , quando comparada com a do destilado, uma alteração de 10% no valor nominal de Q_B aumentaria demasiado a geração de vapor

Tabela 4.18 - Ganhos das colunas 1, 2 e 3 para perturbação na vazão do refluxo

TIPO DE PERTURB.	COLUNA 1		COLUNA 2		COLUNA 3	
	G. BASE	G. TOPO	G. BASE	G. TOPO	G. BASE	G. TOPO
+ 5 %	151,42	0,0359	18313,5	0,0073	29980,0	0,00026
- 5 %	19,047	0,7269	19,166	1,0482	18,888	1,2395
+ 10 %	131,30	0,0259	15406,6	0,0043	23878,8	0,00015
- 10 %	9,542	0,7649	9,583	0,9944	9,446	1,1995

Tabela 4.19 - Ganhos das colunas 1, 2 e 3 para perturbação na energia fornecida ao refeedor

TIPO DE PERTURB.	COLUNA 1		COLUNA 2		COLUNA 3	
	G. BASE	G. TOPO	G. BASE	G. TOPO	G. BASE	G. TOPO
+ 2,5 %	37,71	1,353	38,01	1,6266	39,44	1,89
- 2,5 %	293,33	0,0465	31133,5	0,0107	52738,2	0,0004
+ 5 %	19,046	1,3890	19,906	1,688	19,88	1,848
- 5 %	256,19	0,0359	27178,4	0,0074	39980,0	0,0003

ocasionando vazão líquida nula, para os valores de regime. Por este motivo as alterações no valor de Q_B foram de $\pm 2,5\%$ e $\pm 5,0\%$.

Tabela 4.20 - Sensibilidade da colunas 1, 2 e 3 para perturbações na concentração da alimentação

TIPO DE PERTURB.	COLUNA 1		COLUNA 2		COLUNA 3	
	G. BASE	G. TOPO	G. BASE	G. TOPO	G. BASE	G. TOPO
+ 10,0 %	128,09	0,0205	11481,7	0,0035	>15277,8	0,00005
- 10,0 %	9,428	0,4540	9,35	0,4591	9,50	<0,4498
+ 20,0 %	164,05	0,0163	14578,3	0,0026	19439,4	0,0001
- 20,0 %	4,76	0,4820	4,79	0,4722	9,50	0,4498

Considerando-se que as simulações visam proporcionar informações não só no tocante à dinâmica do processo mas também relativamente aos modelos reduzidos a serem utilizados para síntese dos algoritmos de controle uma análise dos resultados obtidos evidencia que :

- os ganhos das colunas apresentam enorme variação, especialmente para alterações positivas do refluxo ou negativas de energia (151,4 a 29980,0 para + 5% e 131,3 a 23878,8 para + 10% do refluxo); para as mesmas perturbações, porém em sentido oposto, a variação do ganho não é tão acentuada, podendo, quando comparada à primeira, ser considerada praticamente constante (19,04 a 18,8 para - 5% e 9,542 a 9,44 para - 10% do refluxo).

- os ganhos são variáveis , para uma mesma coluna, para o topo ou a base e para variações positivas ou negativas de mesma magnitude ou variações de mesmo sinal, porém com diferentes magnitudes; a mesma perturbação, de mesma magnitude e sinal, acarreta ganhos diferenciados para diferentes colunas .

- estas variações no ganho do processo ocorrem para alterações do refluxo (Tabela 4.18), alterações da energia fornecida ao refulvedor (Tabela 4.19) ou na ocorrência de perturbações (Tabela 4.20).

Analisando-se também as diferentes formas de resposta do processo para as diversas perturbações introduzidas (figuras 4.4 a 4.27) pode-se estabelecer, em caráter qualitativo, algumas conclusões relativas às colunas analisadas :

1) Ganho variável : os valores calculados para os ganhos do processo variam não só de uma coluna para outra , para uma mesma variação percentual na entrada do processo, mas inclusive para o mesmo processo e a mesma variação percentual, quando aplicada em sentido inverso. Tal situação configura um ambiente bastante adverso para o estabelecimento de uma política de controle adequada para esta classe de processo.

2) Atraso variável : o atraso do processo tende a ser crescente à medida que aumenta a pureza dos produtos obtidos. Esta variação é particularmente marcante quando se transita da região de alta para a de altíssima pureza.

3) Forma de resposta : uma análise qualitativa das diversas formas de resposta indica que o comportamento do processo possui as características de um sistema de primeira ordem ou segunda ordem super-amortecido, características estas dependentes do tipo e magnitude da perturbação introduzida. Este fato será importante para a escolha do modelo reduzido a ser utilizado para implementação dos controladores adaptativos, bem como ilustra os problemas que podem advir na síntese da lei de controle, que utiliza modelos reduzidos do processo.

4) Constantes de tempo : uma inspeção dos resultados mostra ainda que, para a mesma perturbação, porém de diferentes magnitudes, a forma de resposta do processo se altera, indicando, provavelmente, alteração das constantes de tempo associadas ao sistema. Em termos de um modelo reduzido discreto, associado aos algoritmos de controle adaptativo, esta variação acarretará, certamente, alteração nos parâmetros do processo, com consequências diretas sobre a lei de controle.

As páginas seguintes contém as figuras 4.4 a 4.27 com o comportamento das variáveis x_D e x_B , ou seja, as composições terminais do processo para perturbações na vazão do refluxo ($\pm 5\%$ e $\pm 10\%$), na energia fornecida ao refeedor ($\pm 2,5\%$ e $\pm 5\%$) e na concentração de alimentação ($\pm 10\%$ e $\pm 20\%$) para as tres colunas analisadas.

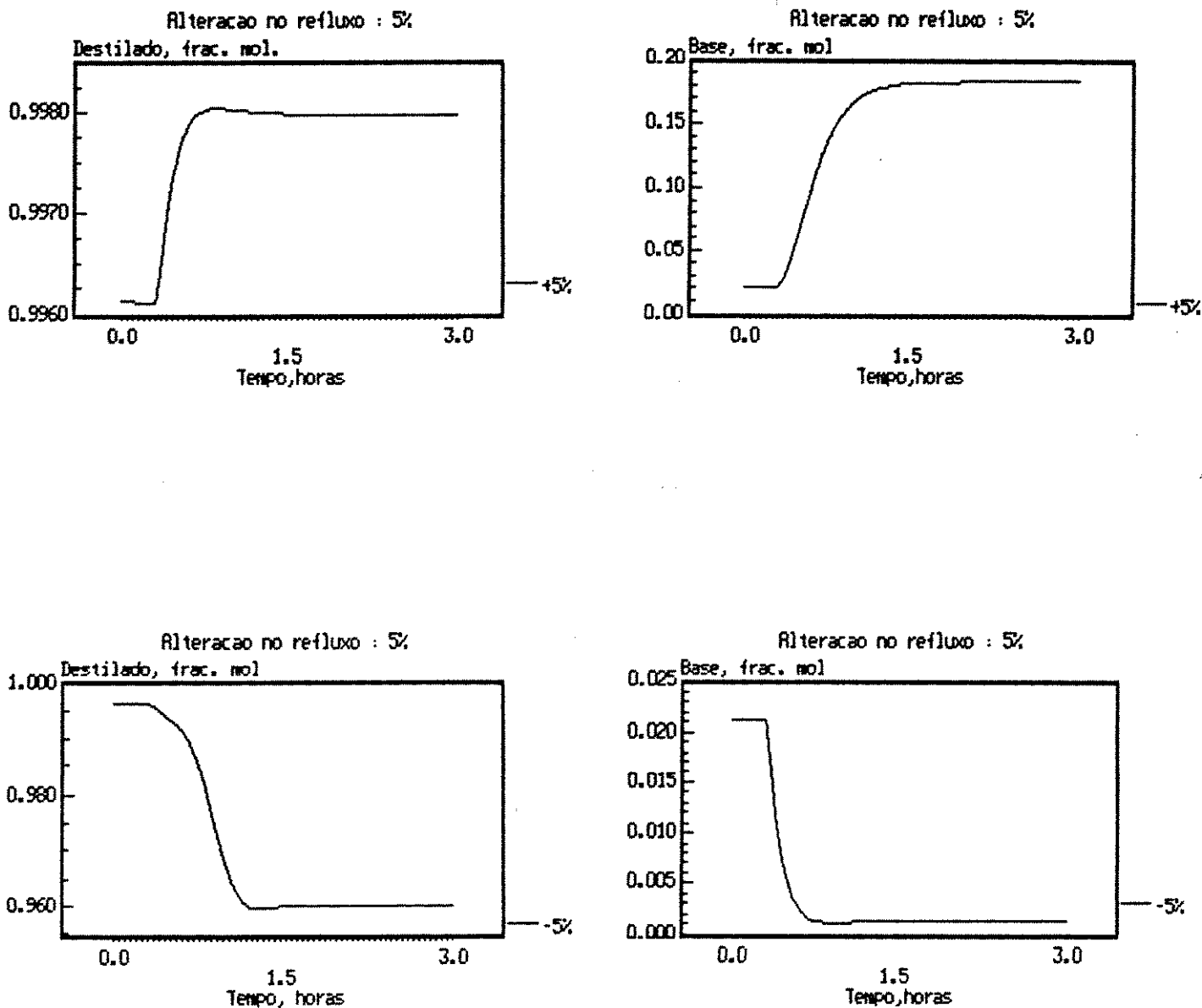


Figura 4.4 - Variação da composição do destilado e da base, em fração molar, para alteração de $\pm 5\%$ na vazão do refluxo para a coluna pura (coluna 1).

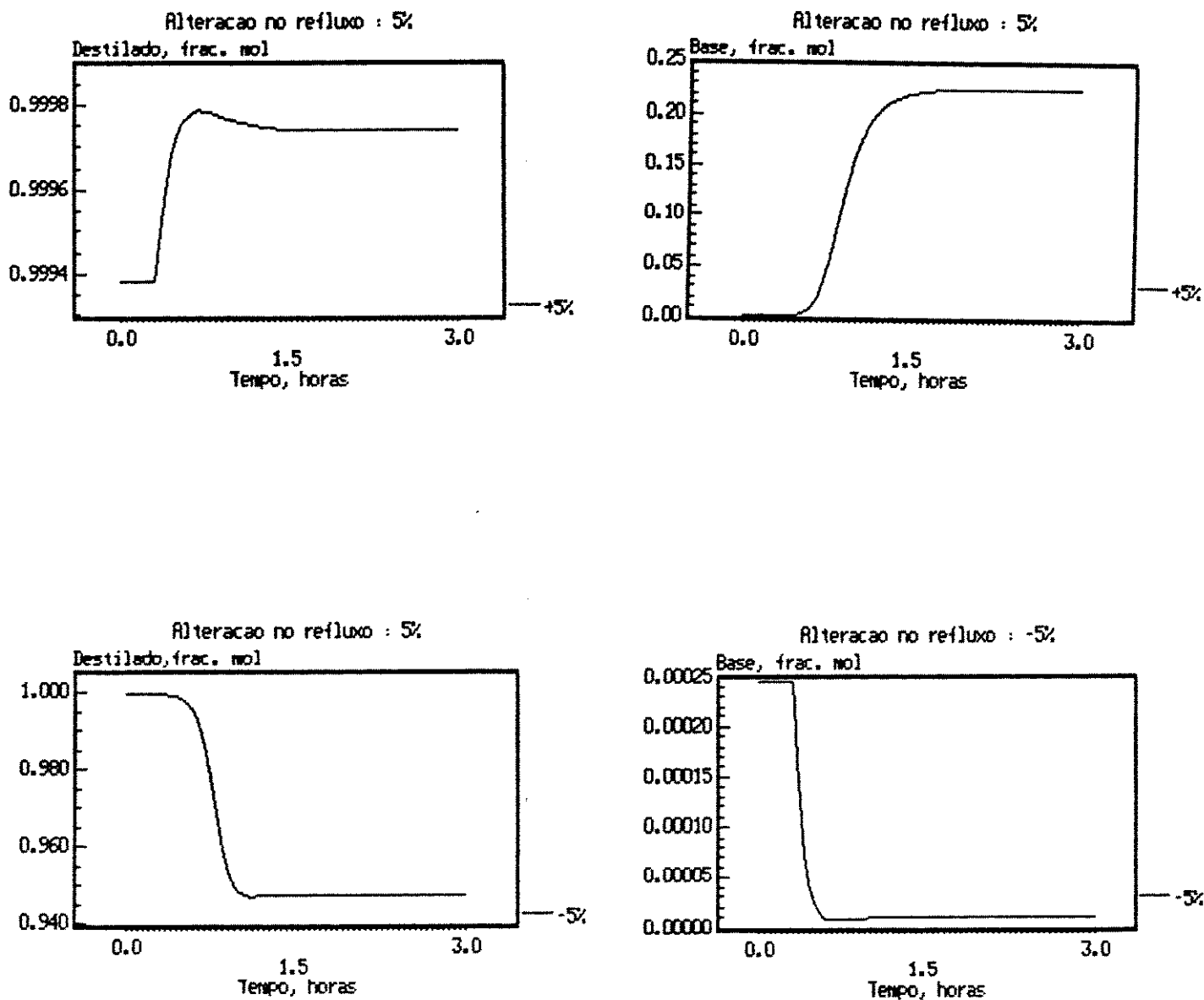


Figura 4.5 - Variação da composição do destilado e da base, em fração molar, para alteração de $\pm 5\%$ na vazão do refluxo para a coluna de alta pureza (coluna 2).

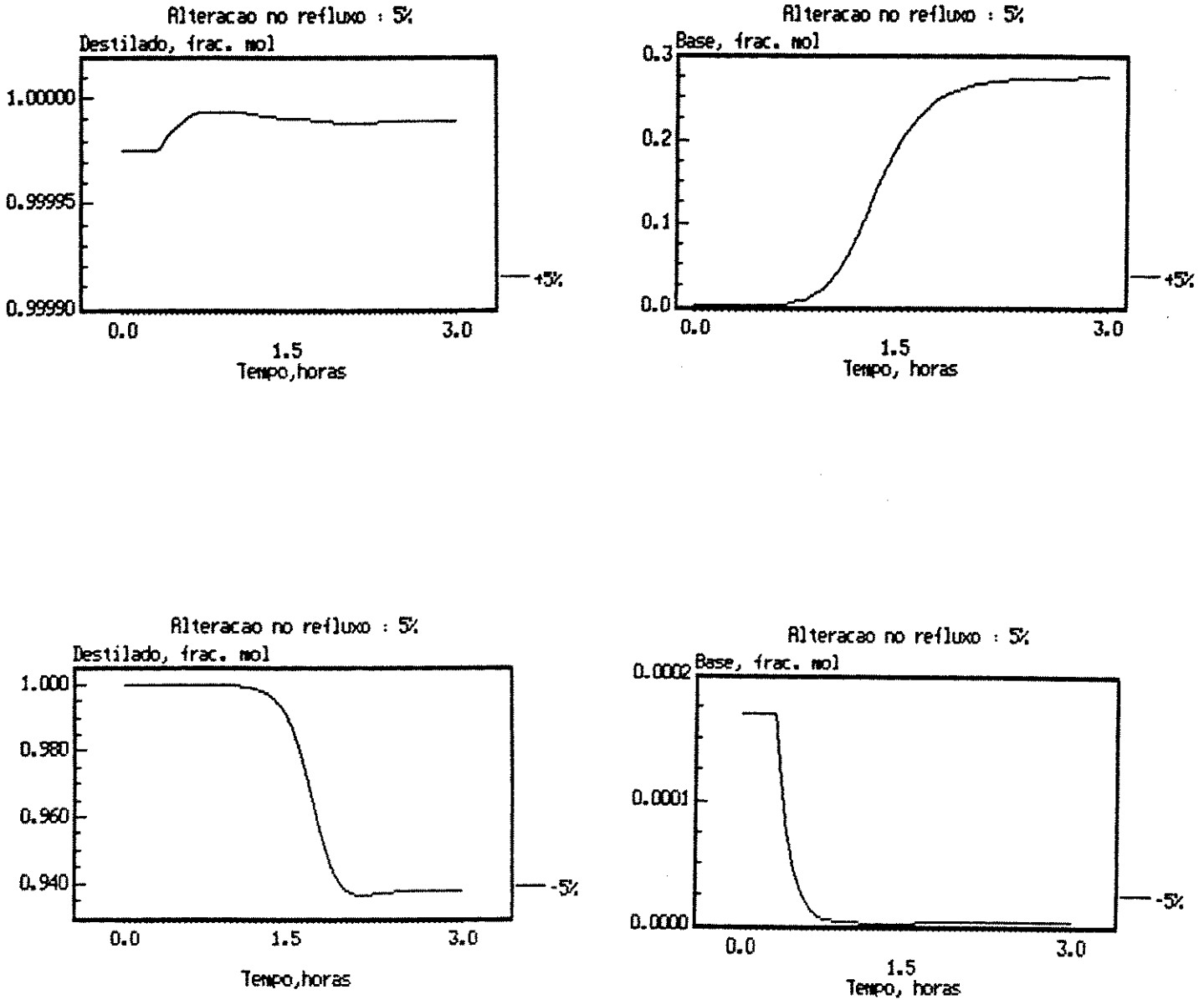


Figura 4.6 - Variação da composição do destilado e da base, em fração molar, para alteração de $\pm 5\%$ na vazão do refluxo para a coluna de altíssima pureza (coluna 3).

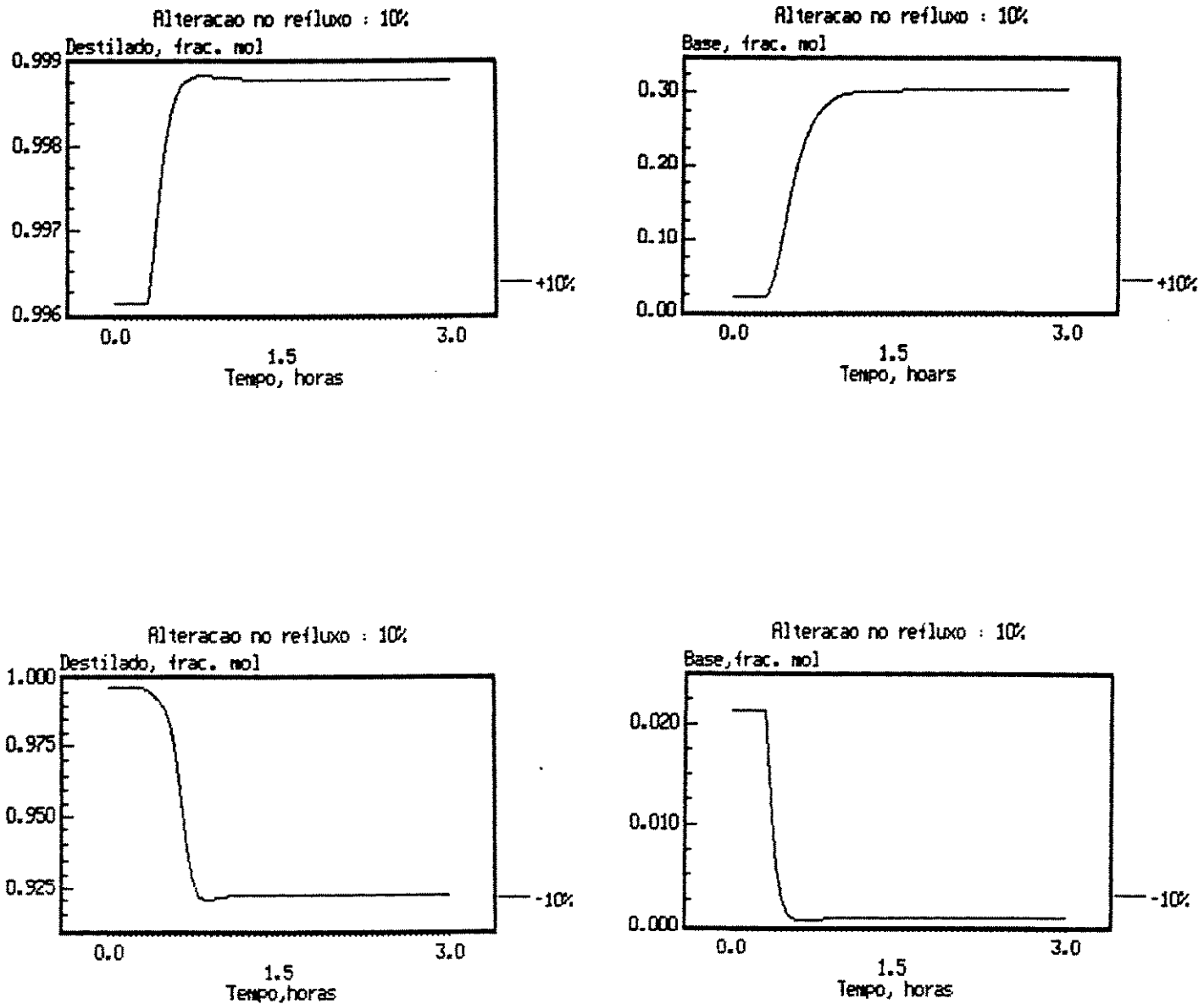


Figura 4.7 - Variação da composição do destilado e da base, em fração molar, para alteração de $\pm 10\%$ na vazão do refluxo para a coluna pura (coluna 1).

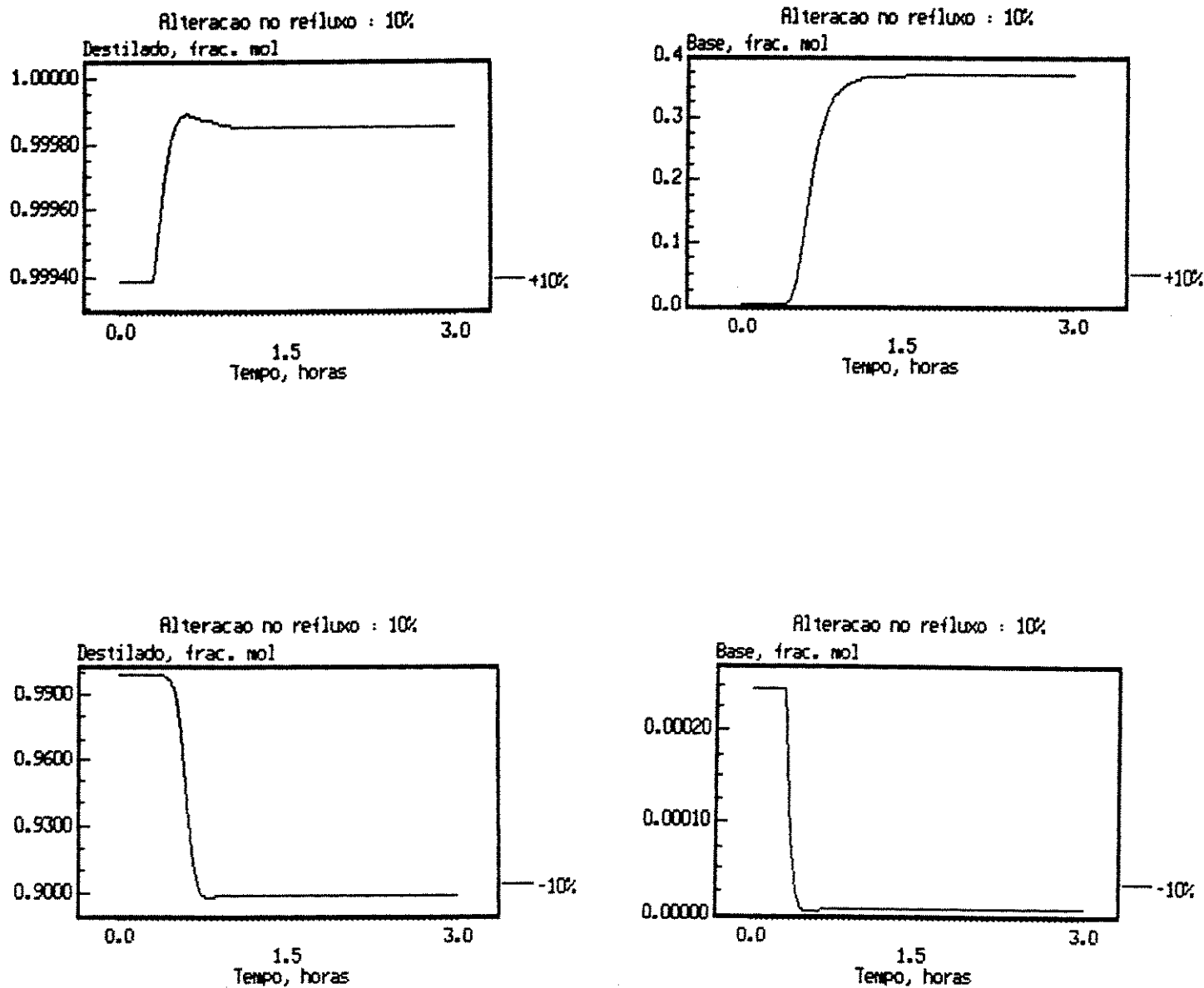


Figura 4.8 - Variação da composição do destilado e da base, em fração molar, para alteração de $\pm 10\%$ na vazão do refluxo para a coluna de alta pureza (coluna 2).

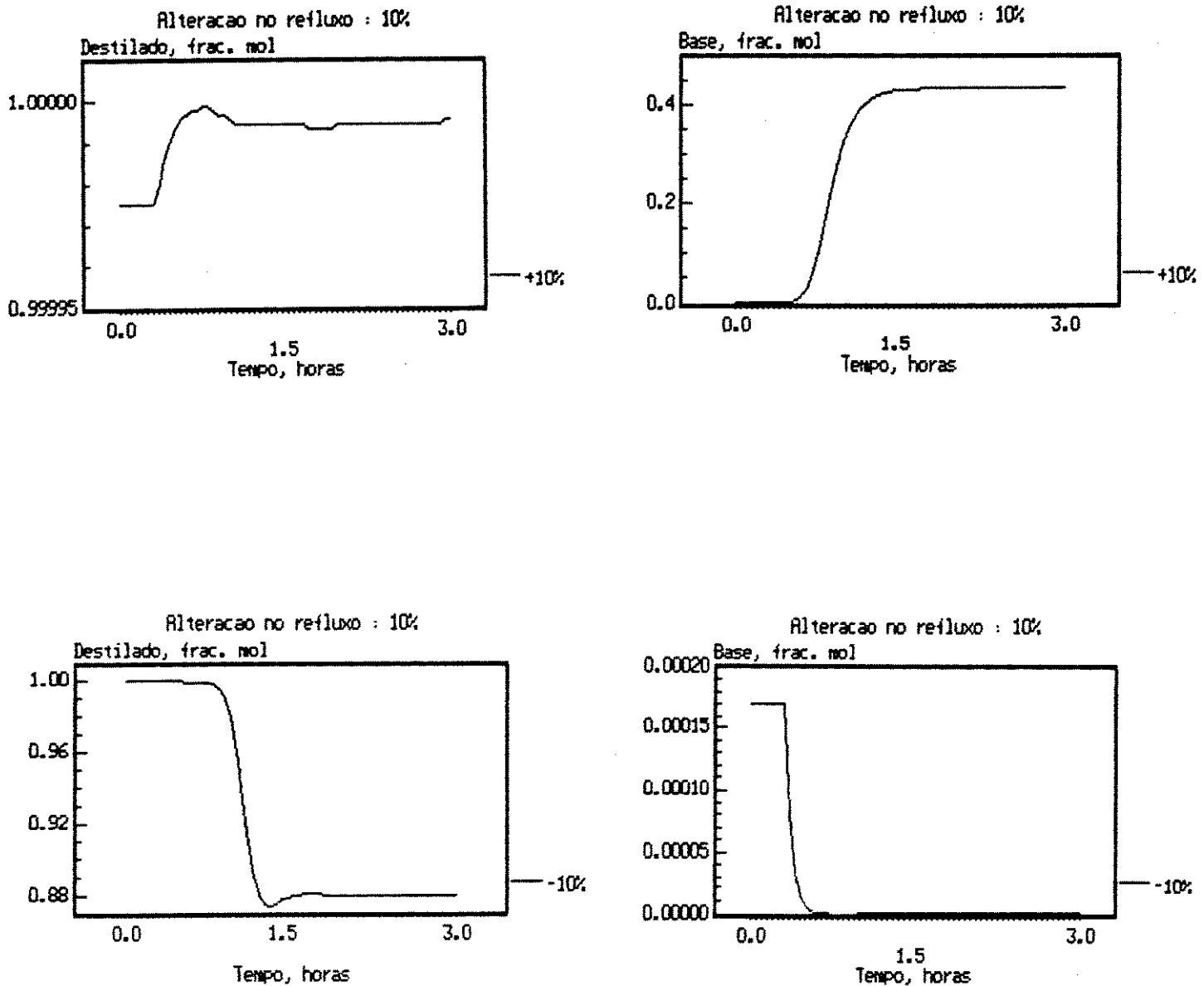


Figura 4.9 - Variação da composição do destilado e da base, em fração molar, para alteração de $\pm 10\%$ na vazão do refluxo para a coluna de altíssima pureza (coluna 3).

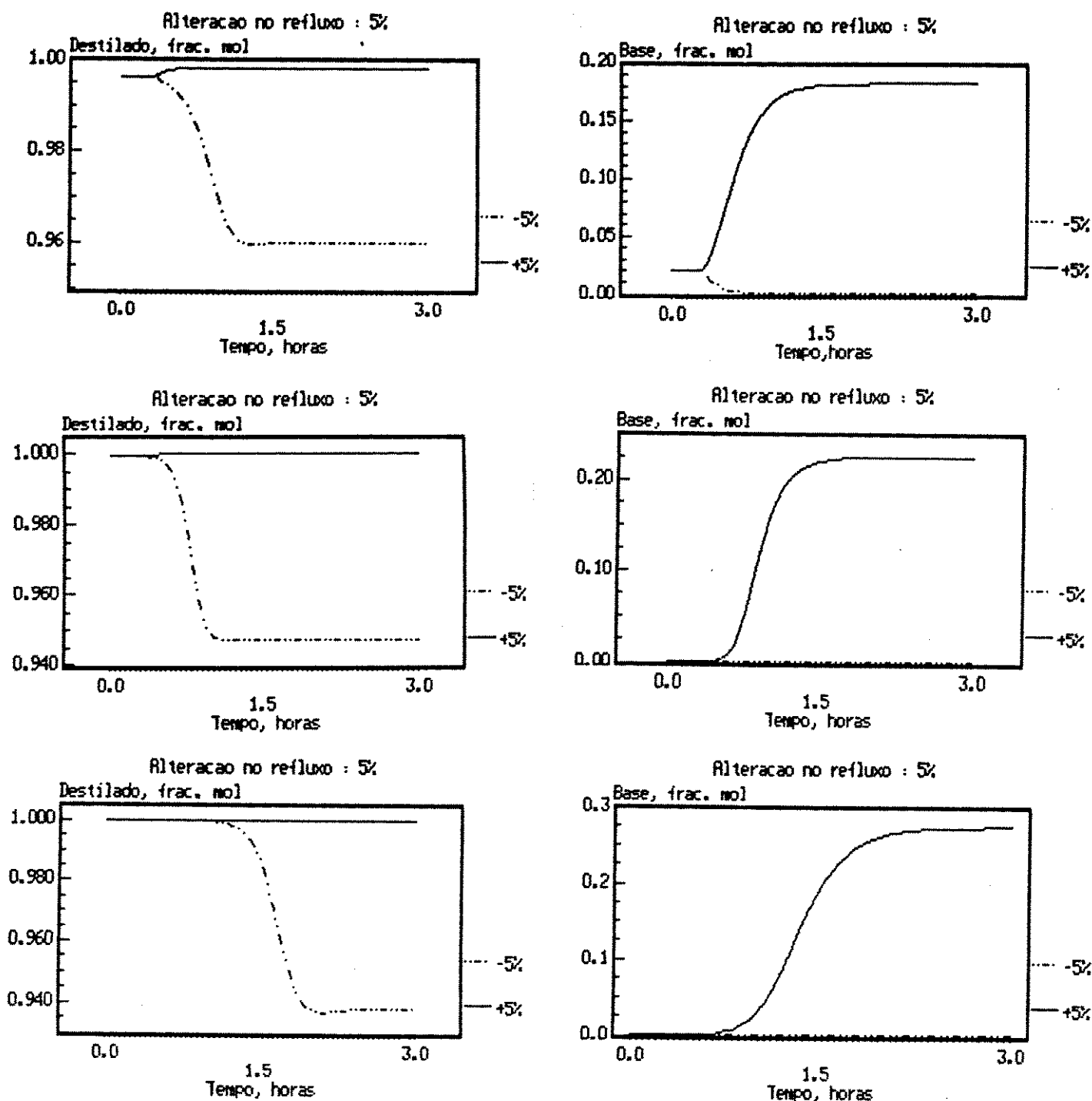


Figura 4.10 - Variação da composição do destilado e da base, em fração molar, para alteração de $\pm 5\%$ na vazão do refluxo para as colunas 1, 2 e 3 (Resultados comparativos).

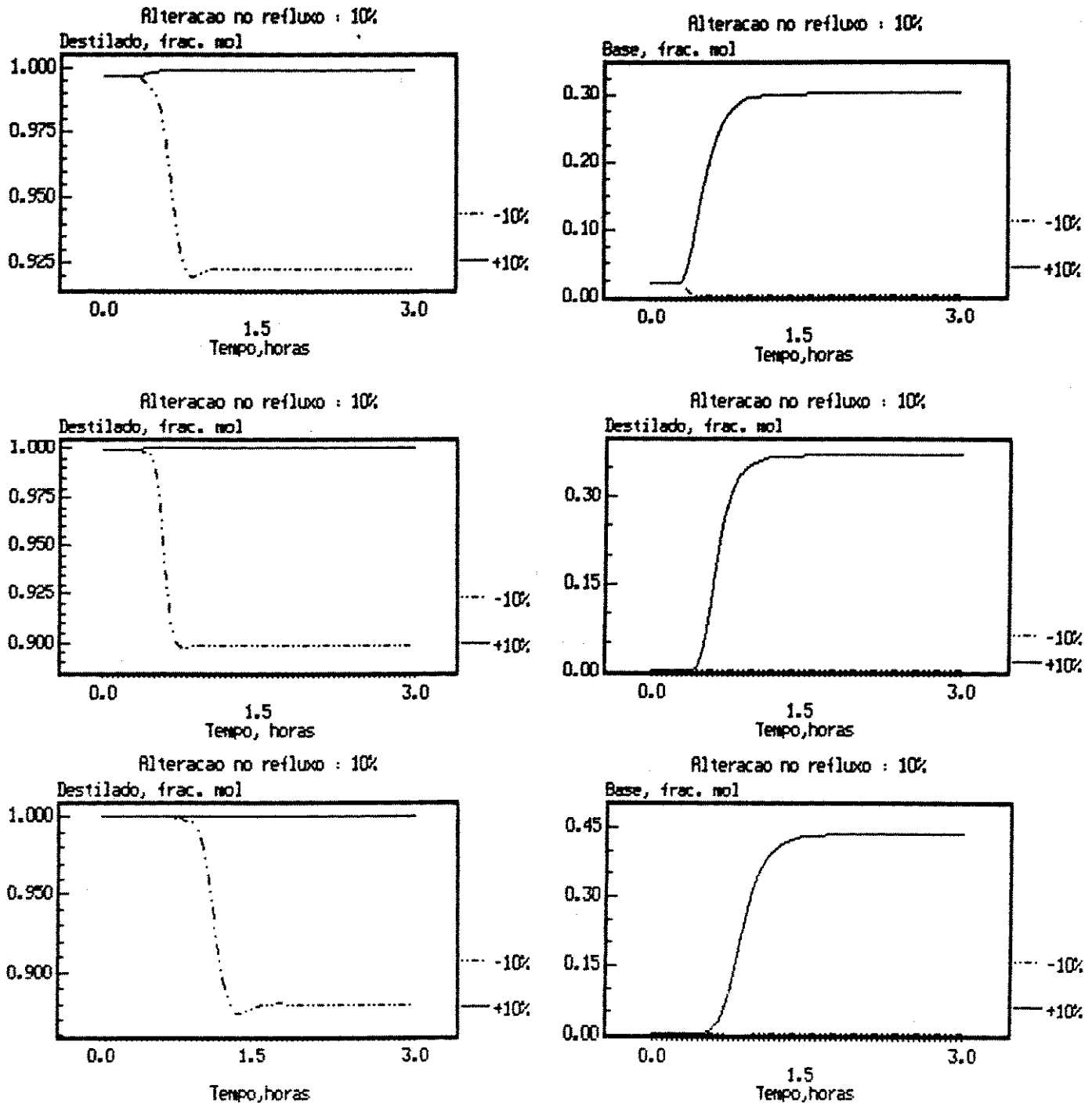


Figura 4.11 - Variação da composição do destilado e da base, em fração molar, para alteração de $\pm 10\%$ na vazão do refluxo para as colunas 1, 2 e 3 (Resultados comparativos).

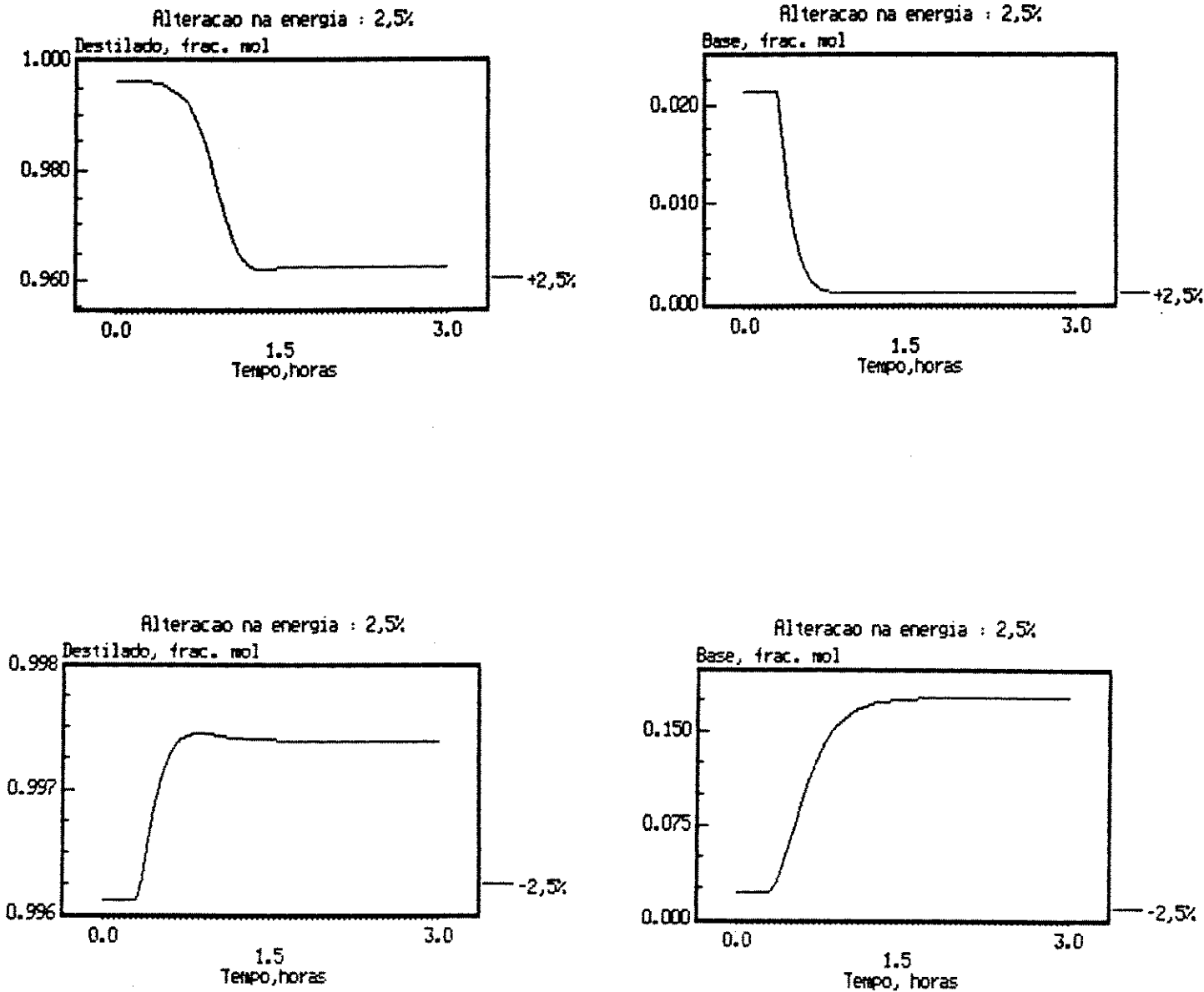


Figura 4.12 - Variação da composição do destilado e da base, em fração molar, para alteração de $\pm 2,5\%$ na energia fornecida ao refeedor para a coluna pura (coluna 1).

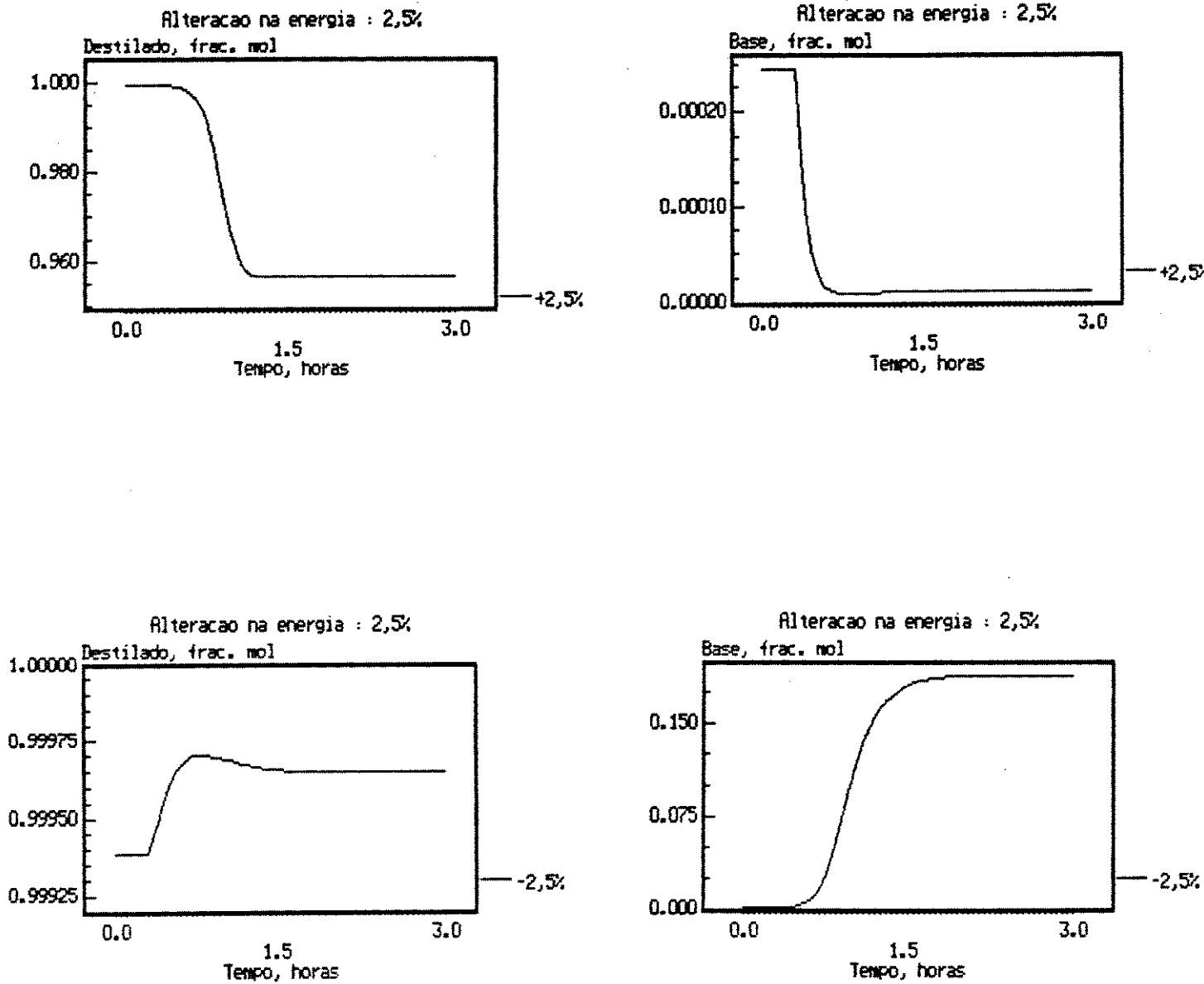


Figura 4.13 - Variação da composição do destilado e da base, em fração molar, para alteração de $\pm 2,5\%$ na energia fornecida ao re fervedor para a coluna de alta pureza (coluna 2).

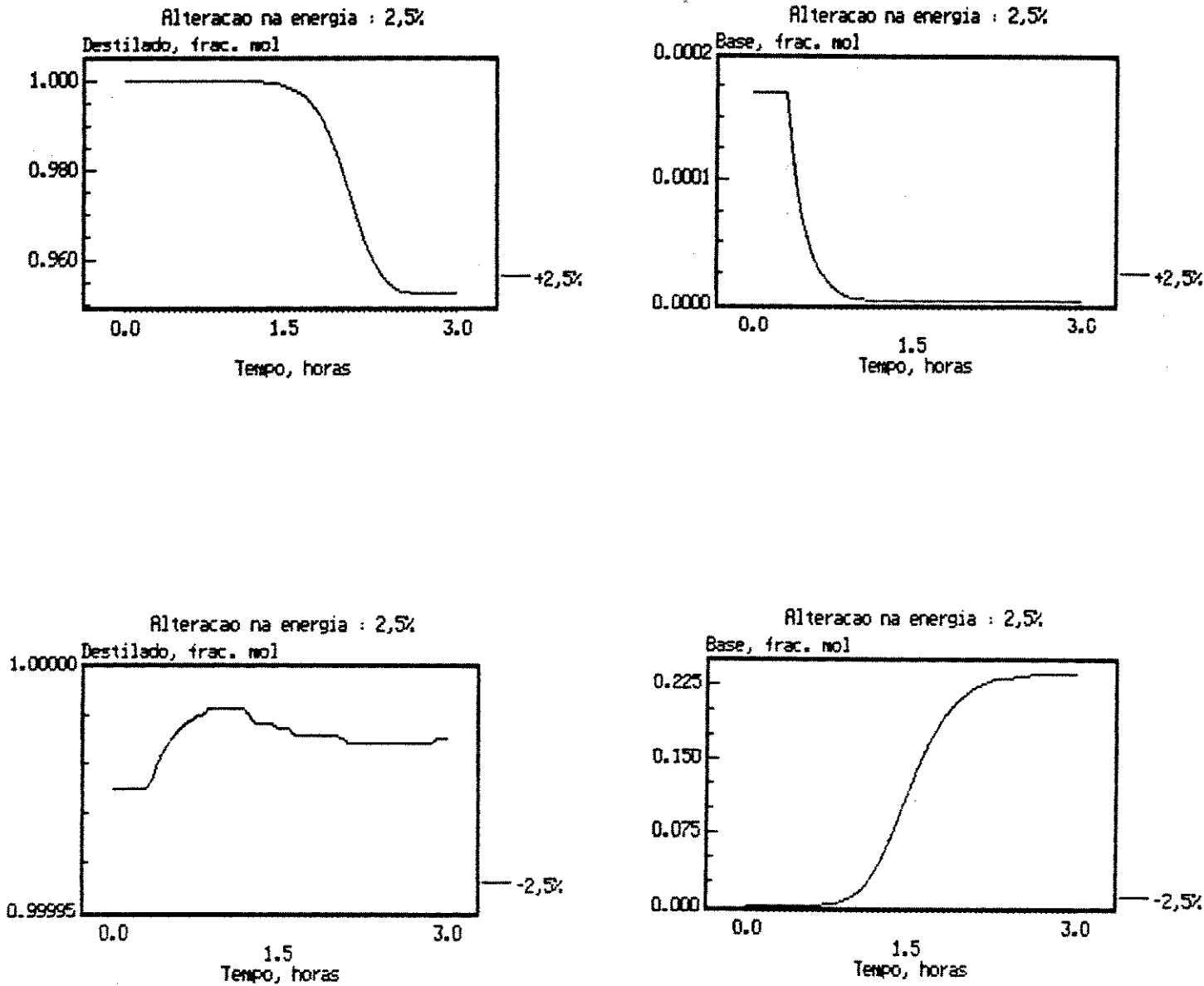


Figura 4.14 - Variação da composição do destilado e da base, em fração molar, para alteração de $\pm 2,5\%$ na energia fornecida ao reboiler para a coluna de altíssima pureza (coluna 3).

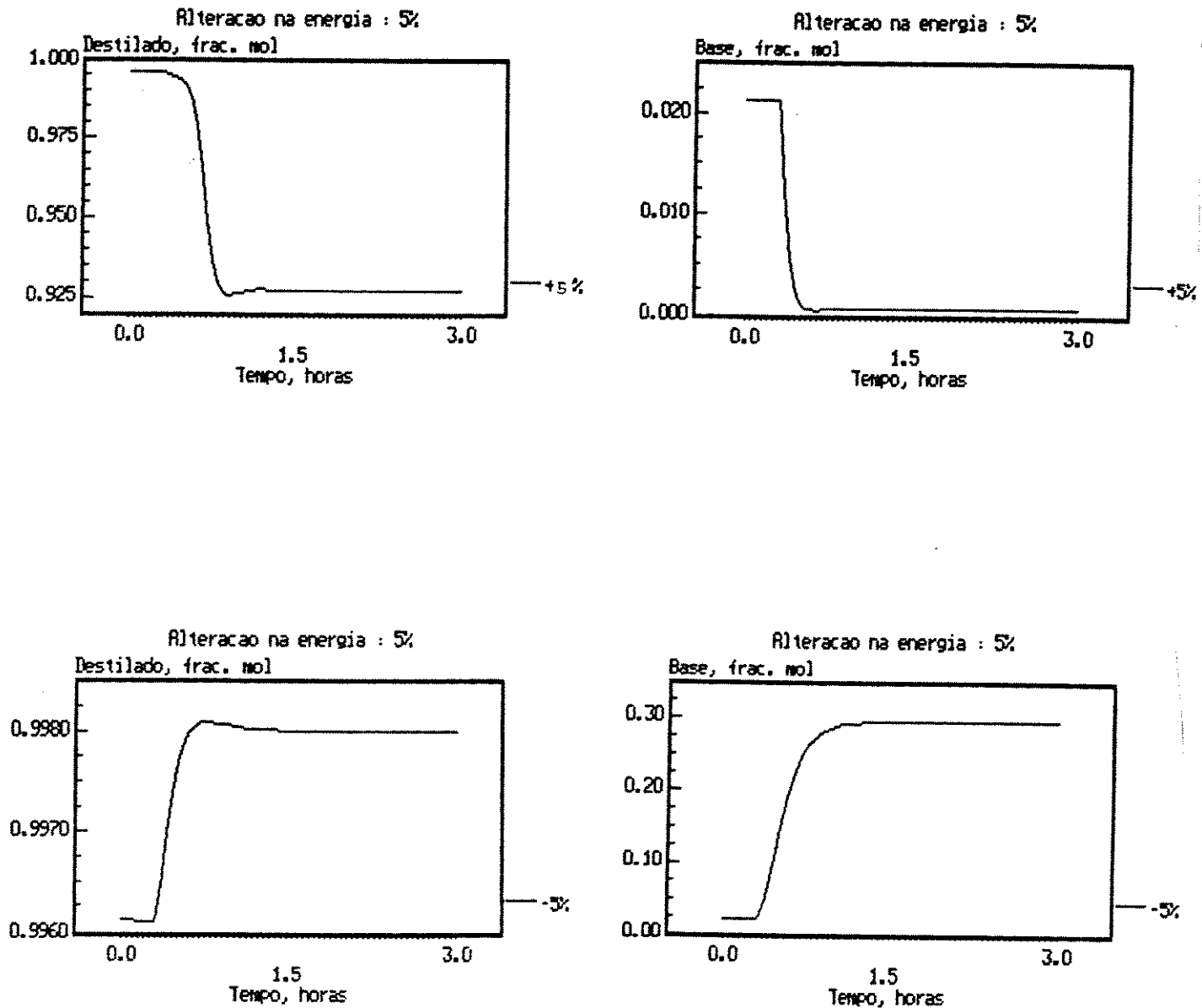


Figura 4.15 - Variação da composição do destilado e da base, em fração molar, para alteração de $\pm 5\%$ na energia fornecida ao refeedor para a coluna pura (coluna 1).

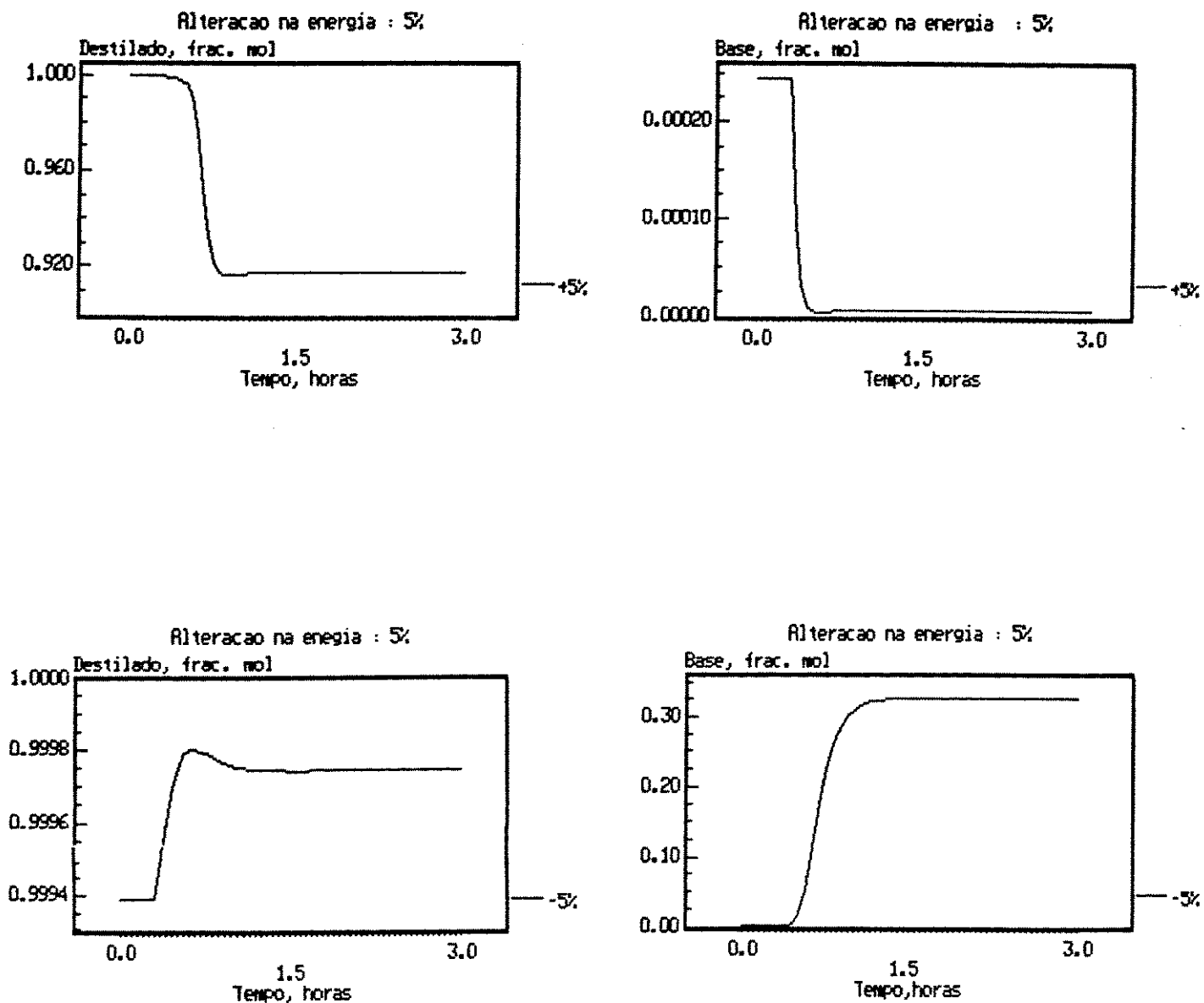


Figura 4.16 - Variação da composição do destilado e da base, em fração molar, para alteração de $\pm 5\%$ na energia fornecida ao refeedor para a coluna de alta pureza (coluna 2).

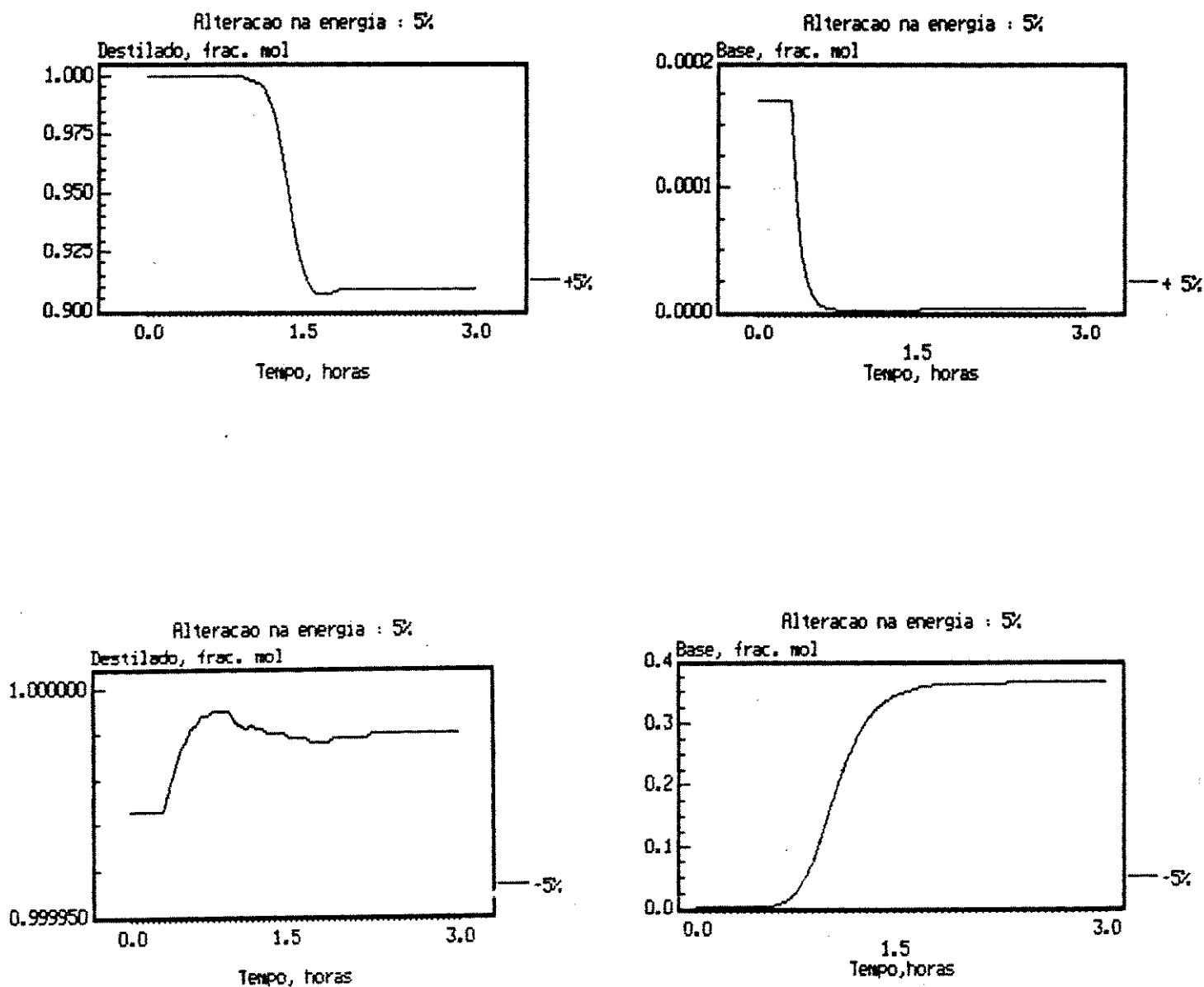


Figura 4.17 - Variação da composição do destilado e da base, em fração molar, para alteração de $\pm 5\%$ na energia fornecida ao refeedor para a coluna de altíssima pureza (coluna 3).

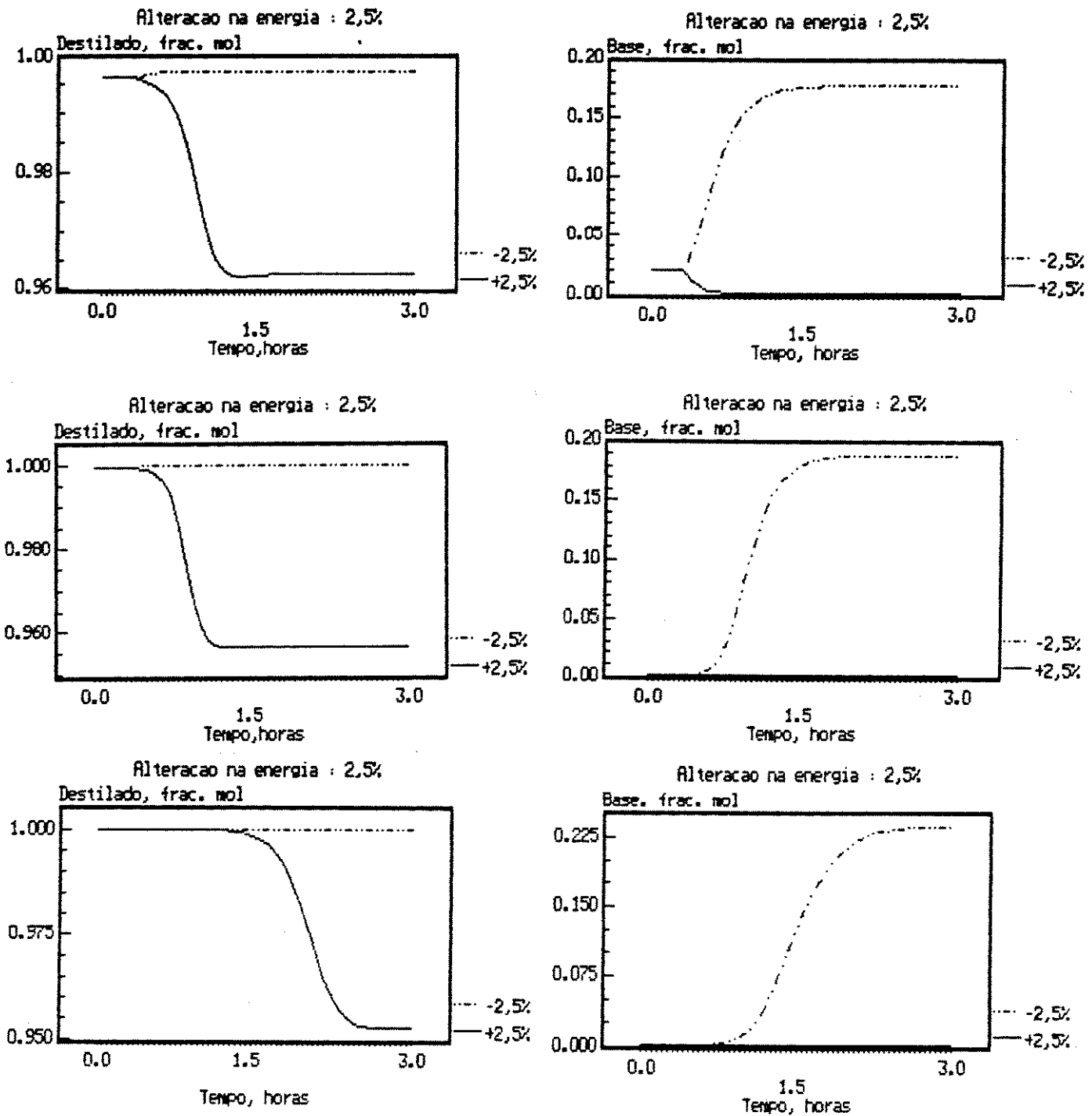


Figura 4.18 - Variação da composição do destilado e da base, em fração molar, para alteração de $\pm 2,5\%$ na energia fornecida ao refeedor para as colunas 1, 2 e 3 (Resultados comparativos).

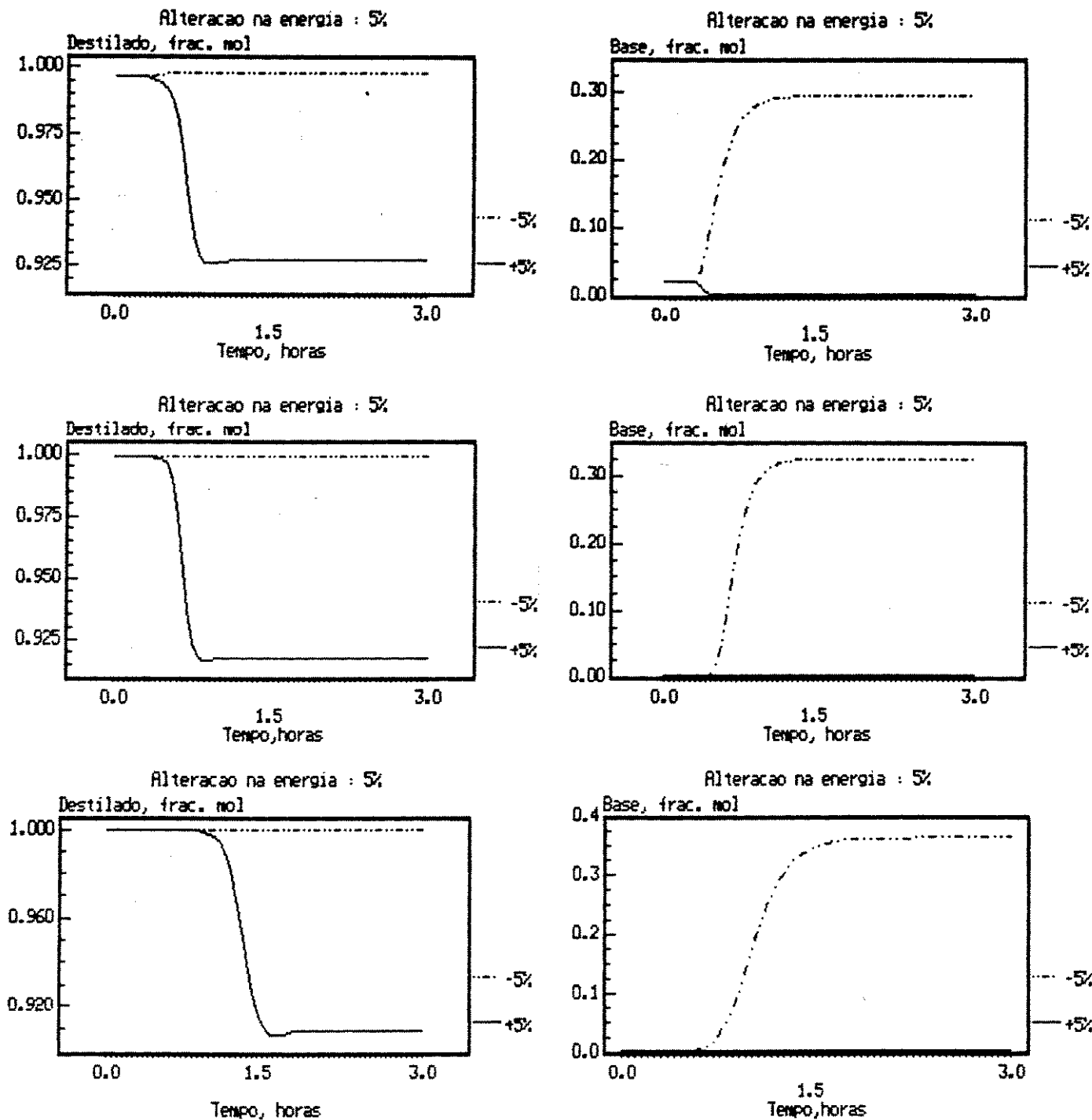


Figura 4.19 - Variação da composição do destilado e da base, em fração molar, para alteração de $\pm 5,0\%$ na energia fornecida ao refeedor para as colunas 1, 2 e 3 (Resultados comparativos).

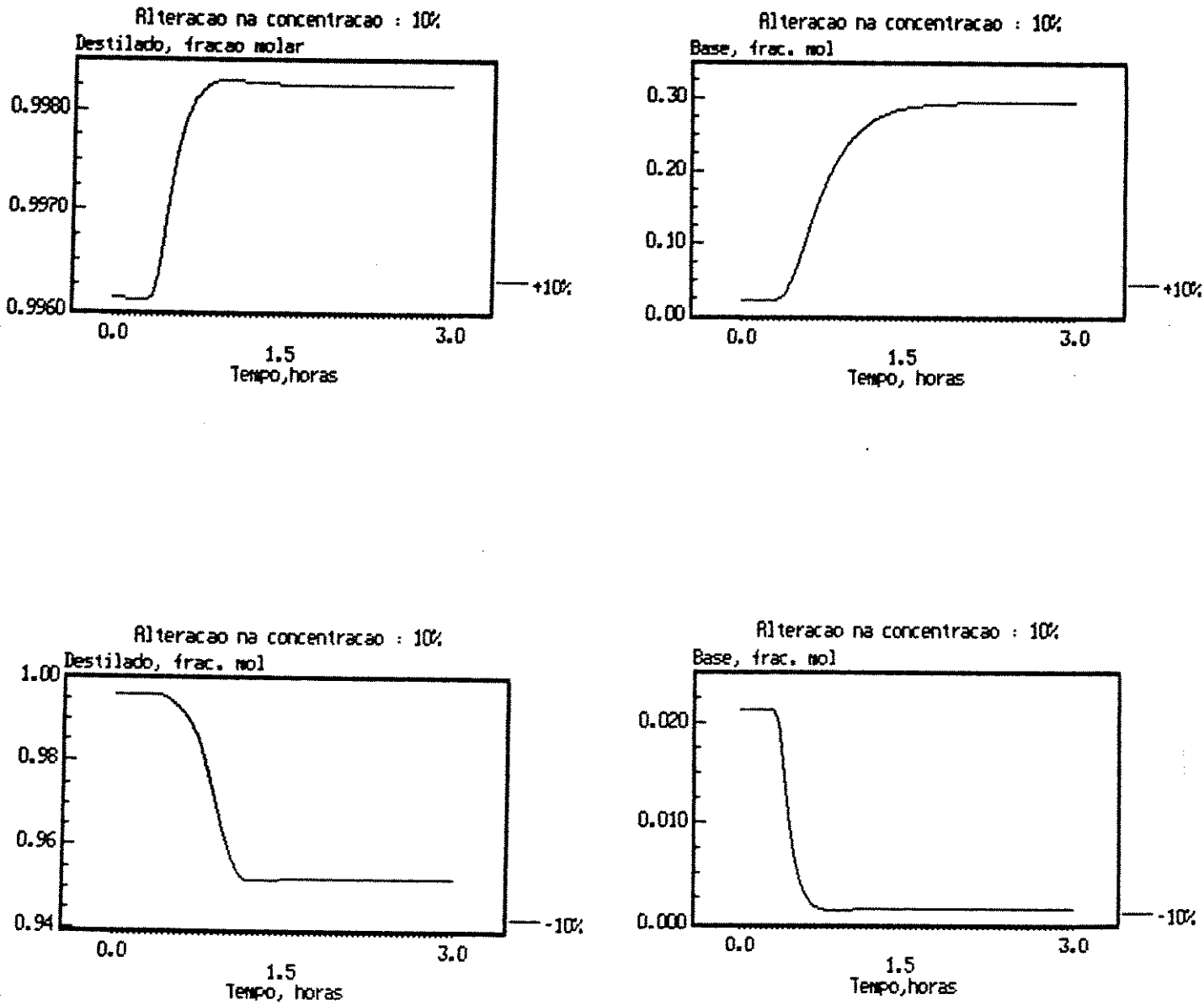


Figura 4.20 - Variação da composição do destilado e da base, em fração molar, para alteração de $\pm 10\%$ na concentração da alimentação para a coluna pura (coluna 1)

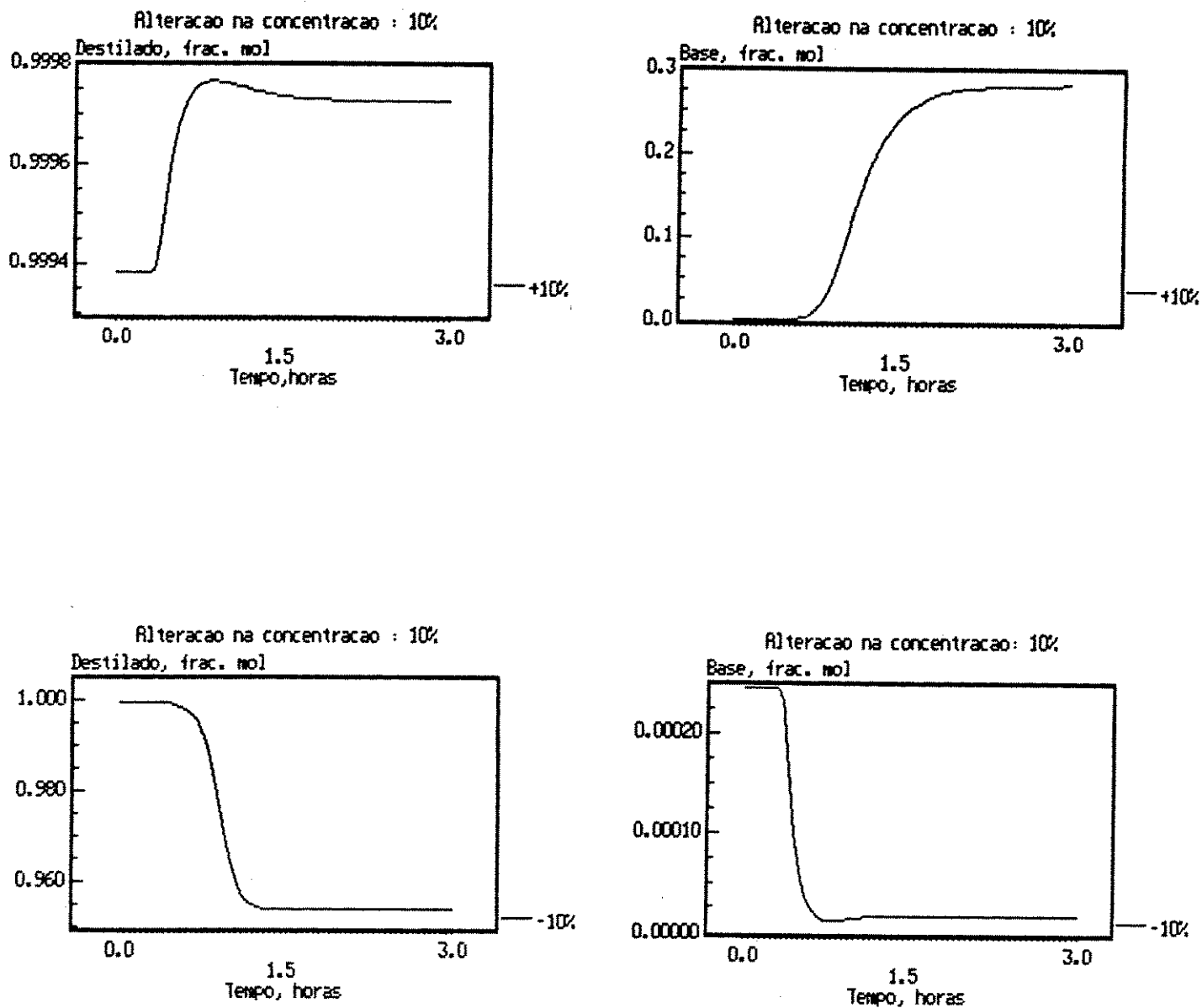


Figura 4.21 - Variação da composição do destilado e da base, em fração molar, para alteração de $\pm 10\%$ na concentração da alimentação para a coluna de alta pureza (coluna 2)

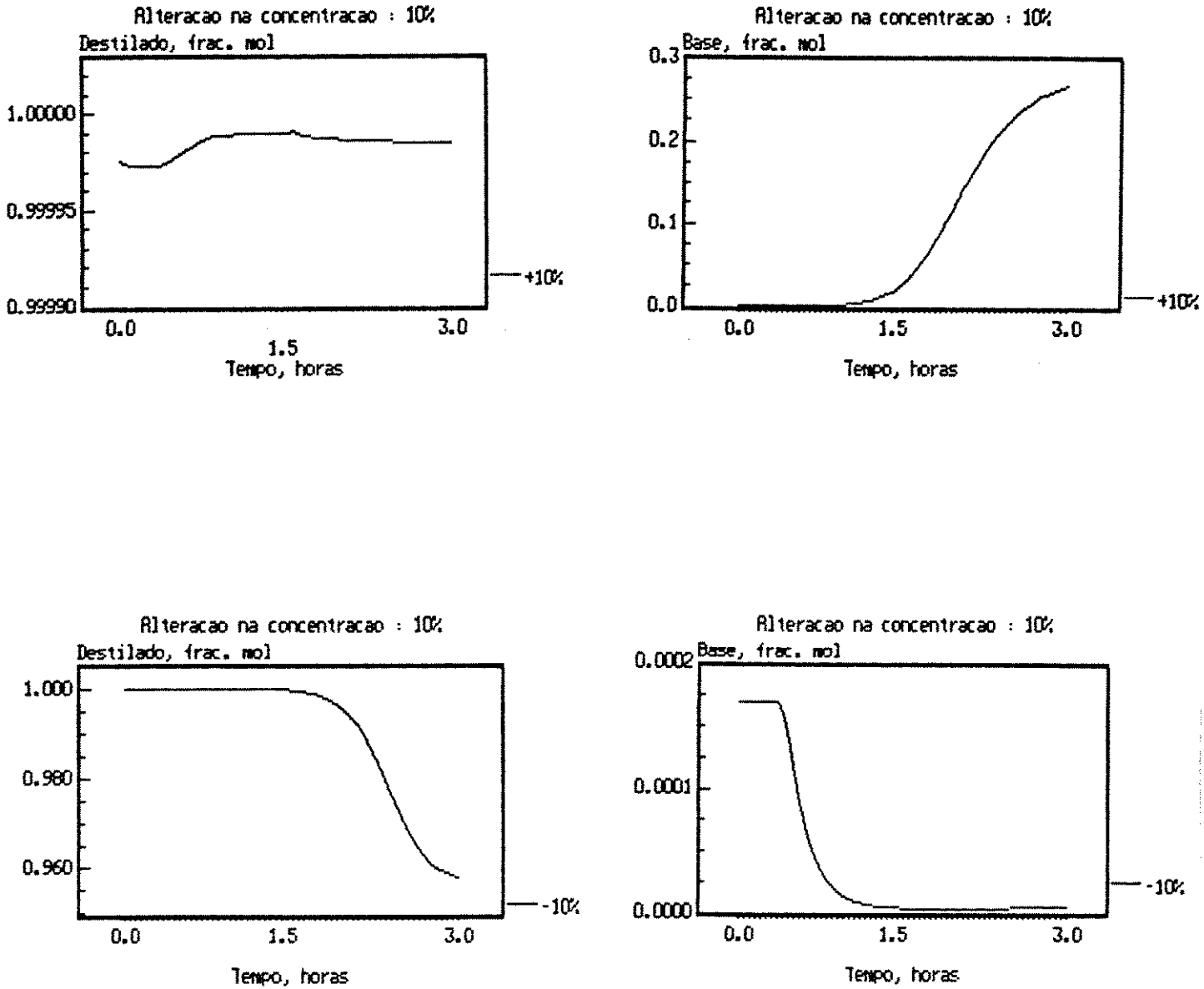


Figura 4.22 - Variação da composição do destilado e da base, em fração molar, para alteração de $\pm 10\%$ na concentração da alimentação para a coluna de altíssima pureza (coluna 3)

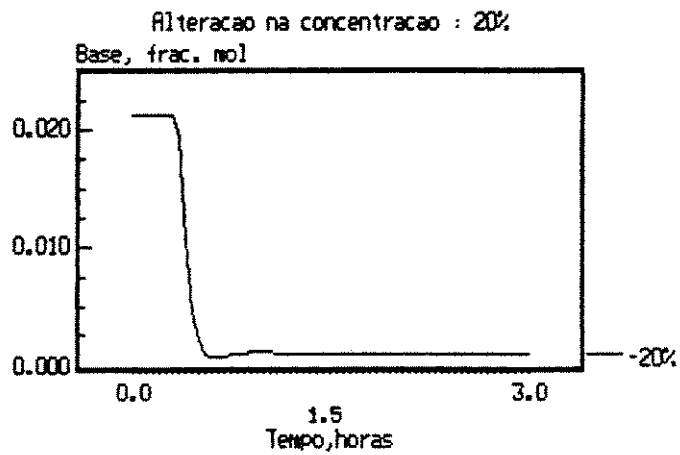
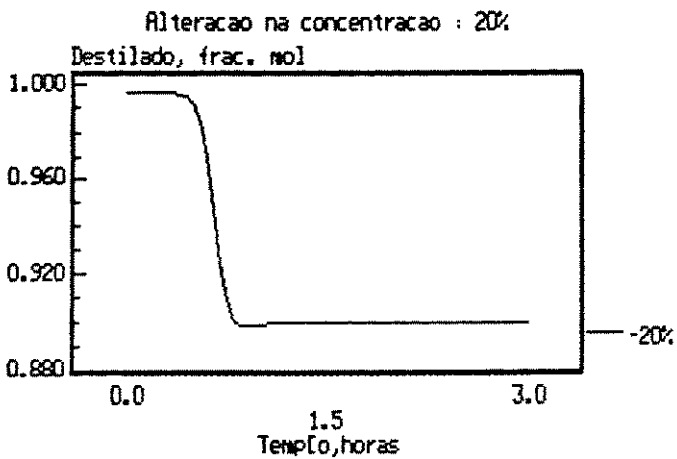
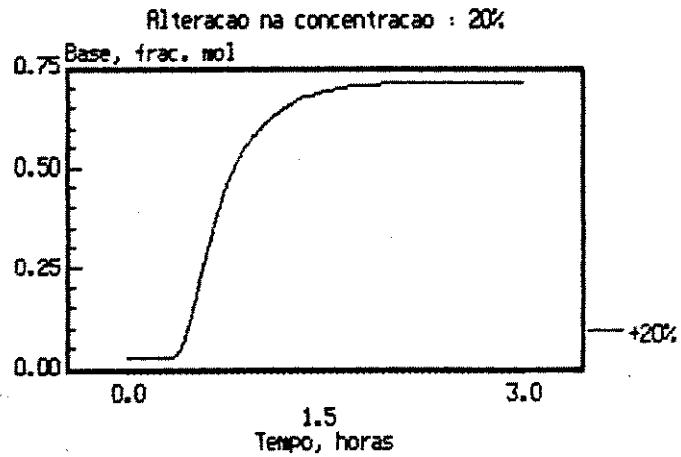
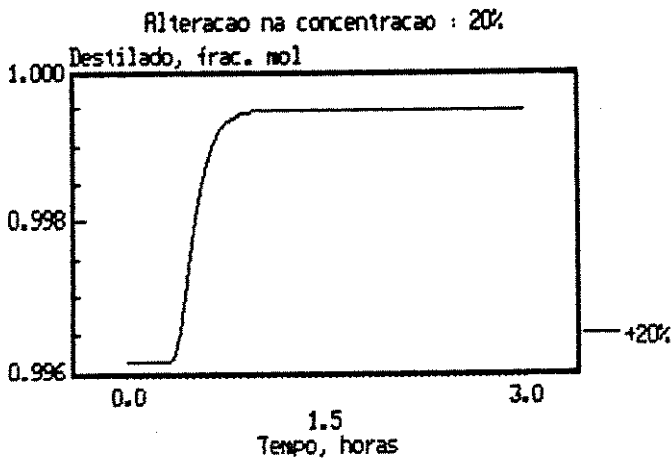


Figura 4.23 - Variação da composição do destilado e da base, em fração molar, para alteração de $\pm 20\%$ na concentração da alimentação para a coluna pura (coluna 1)

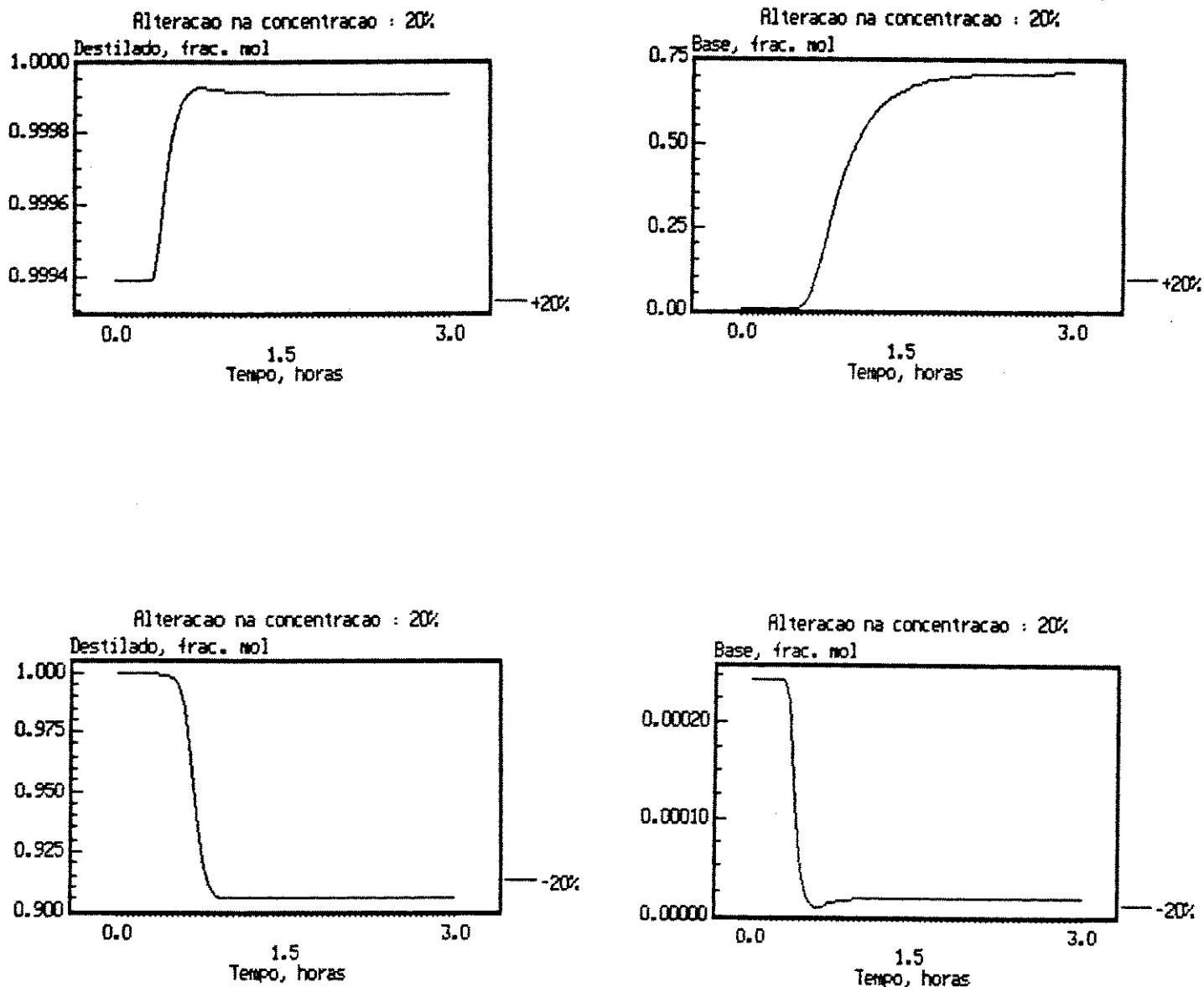


Figura 4.24 - Variação da composição do destilado e da base, em fração molar, para alteração de $\pm 20\%$ na concentração da alimentação para a coluna de alta pureza (coluna 2)

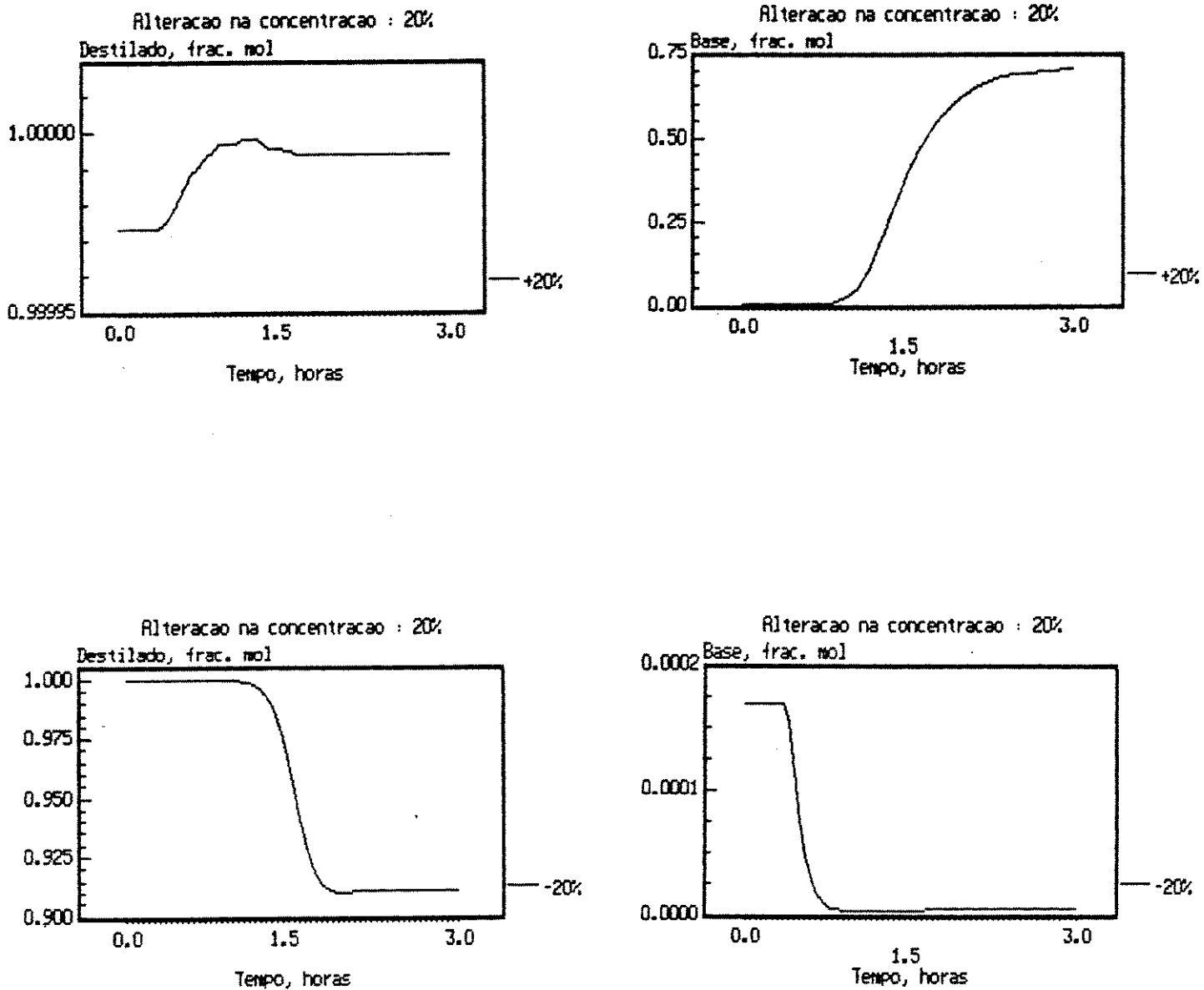


Figura 4.25 - Variação da composição do destilado e da base, em fração molar, para alteração de $\pm 20\%$ na concentração da alimentação para a coluna de altíssima pureza (coluna 3)

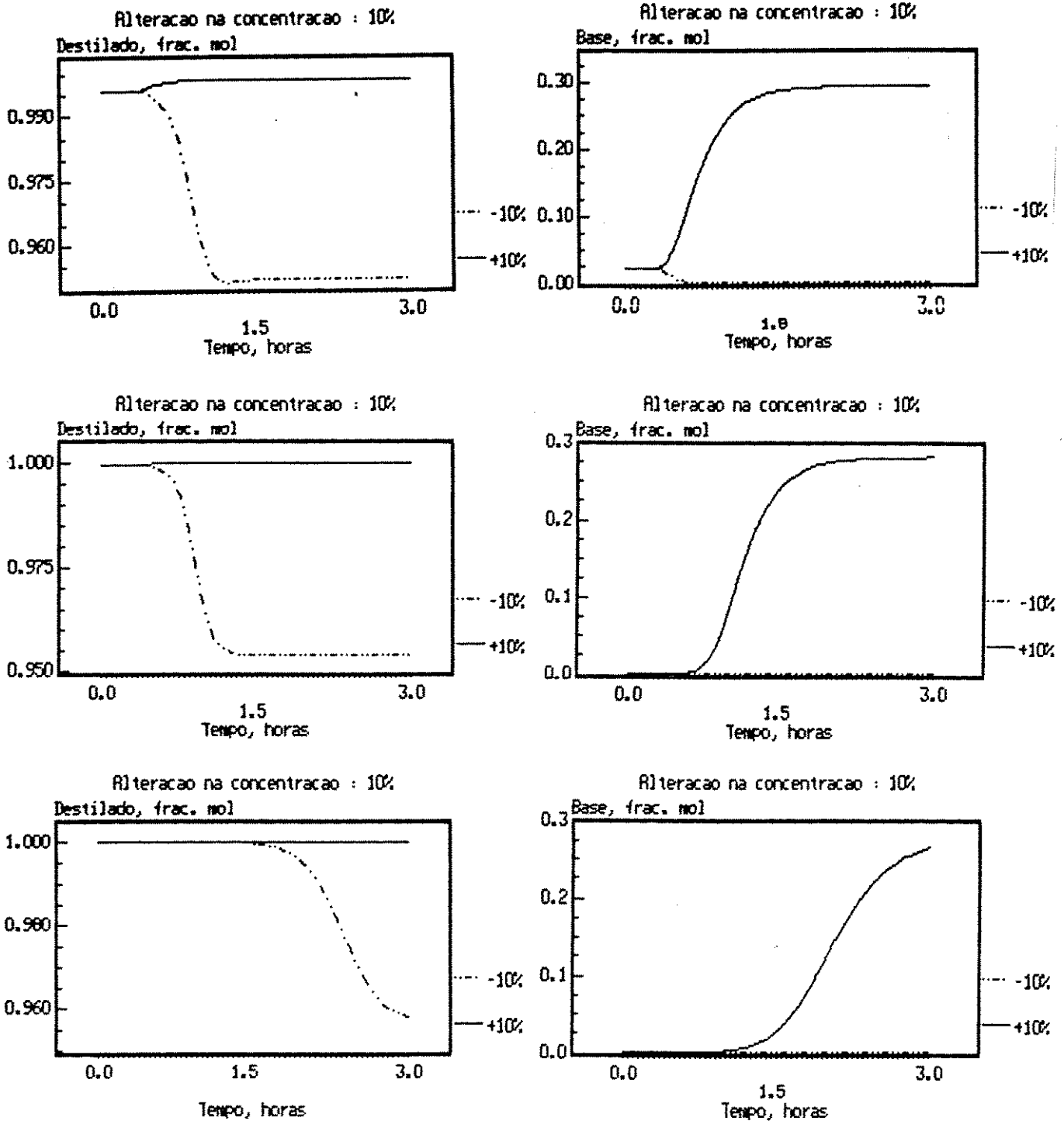


Figura 4.26 - Variação da composição do destilado e da base, em fração molar, para alteração de $\pm 10\%$ na concentração da alimentação para as colunas 1, 2 e 3 (Resultados comparativos)

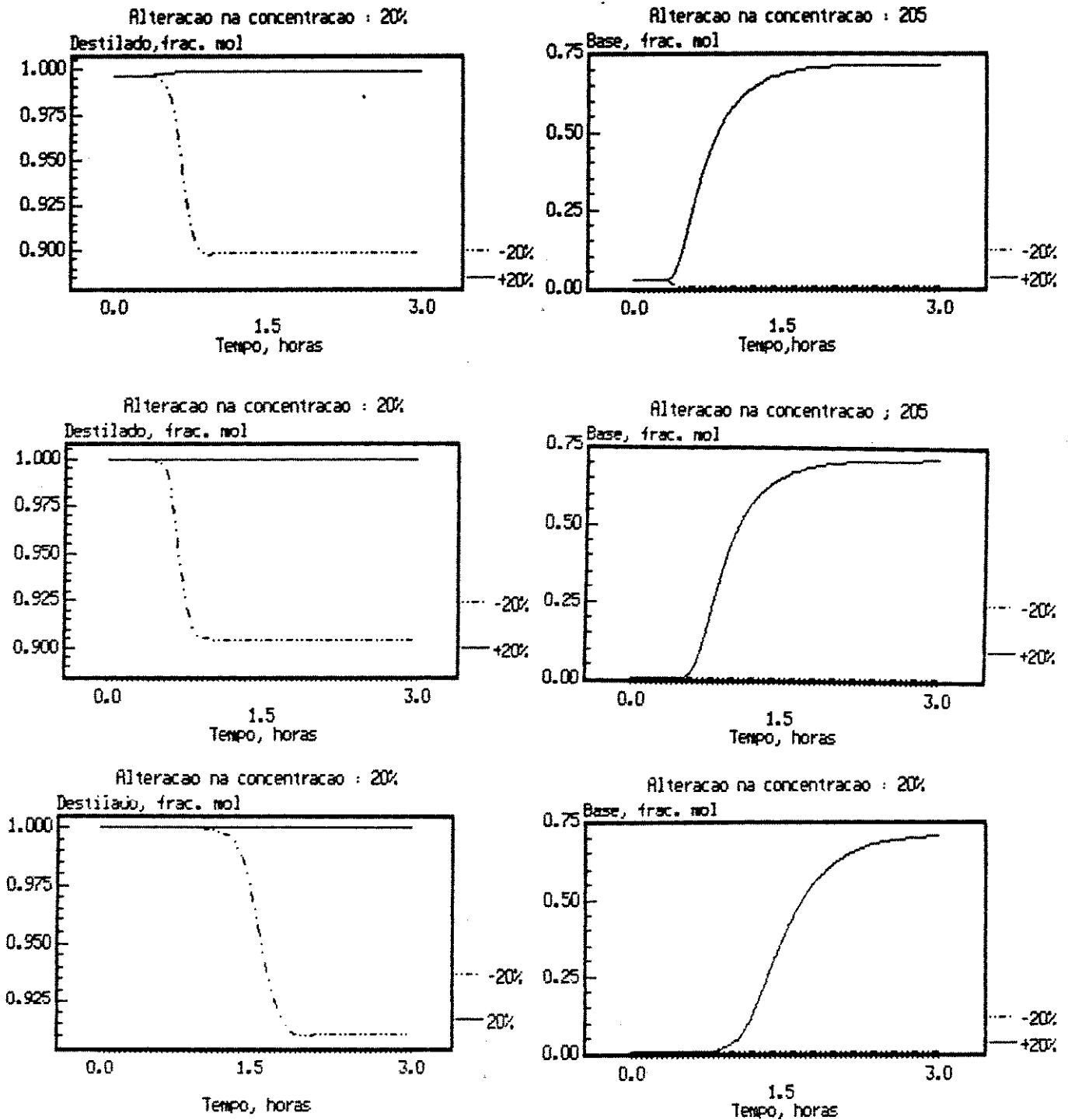


Figura 4.27 - Variação da composição do destilado e da base, em fração molar, para alteração de $\pm 20\%$ na concentração da alimentação para as colunas 1, 2 e 3 (Resultados comparativos)

CAPÍTULO 5 : CONTROLE ADAPTATIVO DAS COLUNAS DE DESTILAÇÃO

5.1. - Introdução

Como amplamente comentado ao longo deste trabalho o controle das composições terminais das colunas de destilação constitui um capítulo a parte dentro da área de controle de processos devido às inúmeras complexidades que apresenta, complexidades estas analisadas e mostradas parcialmente no capítulo 4. Mostrou-se também que estas dificuldades tendem a ser crescentes à medida que o estado operacional da coluna se desloca para regiões de alta pureza devido à variação não-linear das constantes de tempo, atrasos e ganhos do processo. Esta peculiar associação de características, conquanto possa representar uma desagradável situação para o engenheiro químico, fizeram com que as colunas de destilação se tornassem um dos ambientes prediletos para avaliação e análise de malhas e concepções diversas de controle, entre as quais se incluem as concepções adaptativas, com suas diversas variantes. Uma idéia da variedade de técnicas empregadas no controle deste processo pode ser ilustrada mediante alguns artigos : controle LQG [Hammarström,1982]; observador de estado de Luenberger associado a um controlador de

Riccati [Eckelmann,1980]; preditor analítico de Smith [Morris,1982]; DMC de Cuttler a parâmetros constantes [Gerogiou,1988]; concepção de Modelo interno de Morari [Skogestad,1987c]; controle de tempo ótimo [Kershenbaum,1981]; controle com enfoque geométrico [Ohno,1984]; controle clássico utilizando Diagrama Inverso de Nyquist [Tyréus,1979], técnicas de desacoplamento das variáveis [Luyben,1970] e outros mais.

O estabelecimento de um consenso sobre o significado do termo "controle adaptativo " não é uma tarefa fácil, pois mesmo autores do porte de Aström relutam em adotar uma definição formal sobre o tema [Aström, 1989]. Contudo, para efeitos de esclarecimento dentro deste trabalho, pode-se utilizar a definição sugerida por Seborg [Seborg,1986] : entende-se por sistema de controle adaptativo aquele com capacidade de ajustar automaticamente a sintonia do controlador visando compensar mudanças no processo a ser controlado ou nas condições ambientais adjacentes ao mesmo . Um diagrama de blocos desta concepção de controle utilizando o enfoque indireto é mostrada na figura 5.1 :

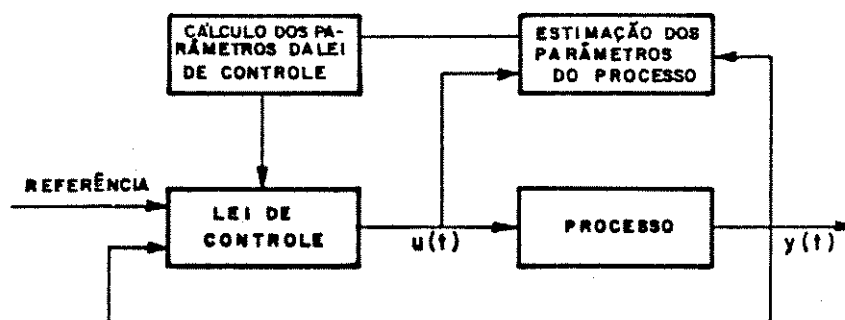


Figura 5.1 - Diagrama de blocos do algoritmo adaptativo (enfoque indireto)

Considerando-se os controladores adaptativos verifica-se que diversas técnicas podem ser utilizadas como critério de projeto dos mesmos, conduzindo assim à mesma situação anterior onde o consenso é a ausência de uma divisão formal aceita por todos. Åström [Åström,1989] utiliza a seguinte divisão : controladores adaptativos auto-oscilantes, controladores com escalonamento de ganho, controle por modelo de referencia e controladores auto-ajustáveis. Já Seborg [Seborg,1986] efetua a divisão nas seguintes categorias : i) Controladores adaptativos projetados segundo uma função de custo quadrática ; ii) métodos baseados na teoria de estabilidade; iii) Técnicas de alocação de polos e zeros ; iv) outras técnicas. Como exemplo do item (i) pode-se citar os reguladores e controladores auto-ajustáveis; para o item (ii) um exemplo bastante conhecido é o controlador por modelo de referência e para o item (iii) o controlador por alocação de polos de Vogel-Edgar.

Para o presente trabalho optou-se pela implementação dos controladores adaptativos auto-ajustáveis , segundo a definição de Åström, ou nos controladores adaptativos projetados segundo uma função quadrática (auto-ajustável linear ponderado, auto ajustável não-linear e preditivo generalizado) e segundo técnicas de alocação de polos-zeros (controlador adaptativo por alocação de polos e controlador adaptativo com tempo de estabilização finito e "dead-beat"). Estes controladores foram implementados na coluna de alta pureza anteriormente analisada , onde se manifestam as complexidades anteriormente assinaladas.

Para uma caracterização efetiva do trabalho desenvolvido neste capítulo traçaremos a seguir, ainda que de forma bastante breve, uma discussão da implementação de controladores adaptativos em colunas de destilação. Embora tenhamos consciência que a bibliografia a ser analisada não esgota totalmente o assunto, pois o acesso a alguns trabalhos constantes somente de Anais de Congressos ou de publicações não disponíveis no país não foi possível, temos contudo a certeza que todos os trabalhos significativos publicados sobre o

tema estão relacionados, afirmação esta baseada nos "surveys" e análises disponíveis sobre o tema existente na literatura . Procuraremos, de forma resumida, caracterizar os aspectos básicos relacionados com os trabalhos citados, sempre que tal for possível, ou seja, trabalhos sobre os quais temos informações disponíveis ; a partir de uma análise destas características procuramos estabelecer as condições de implementação dos controladores para o nosso trabalho.

5.2 - APLICAÇÃO DE CONTROLE ADAPTATIVO EM COLUNAS DE DESTILAÇÃO : UM BREVE HISTÓRICO

A primeira aplicação de um algoritmo adaptativo auto-ajustável a uma coluna de destilação registrada na literatura é devida a Sastry [Sastry,1977] que aplicou o regulador auto-ajustável de Åström e Wittenmark [Åström,1973] a uma unidade de destilação piloto da Universidade de Alberta, Canadá, utilizando tanto a implementação real como a simulação digital. A unidade piloto em questão, utilizada anterior e posteriormente em testes diversos de algoritmos de controle, tanto adaptativos como convencionais, consiste de uma coluna de destilação de nove estágios alimentada com uma mistura de Metanol-H₂O, com composições típicas no topo e base de 0,96 e 0,005 em fração molar de metanol, respectivamente. Nesta simulação foram utilizados modelos reduzidos lineares de segunda e terceira ordem , com o processo sendo submetido a variações de carga (aumento da vazão de alimentação em $\pm 10\%$). Os resultados foram comparados com os obtidos utilizando-se um controlador convencional tipo PI, sendo que as conclusões gerais indicaram uma performance superior do algoritmo adaptativo para rejeições positivas de carga enquanto o PI se comportou melhor para rejeições negativas. Este primeiro artigo, como era de se esperar, despertou a atenção da comunidade ligada ao assunto tendo sido objeto de uma interessante discussão na literatura no tocante à interpretação do comportamento dos parâmetros do regulador [Toivonen, 1979 a, b; Seborg,1979].

Pode-se assinalar , na mesma época, a aplicação de um regulador adaptativo efetuada por Morris [Morris, 1977] ao qual infelizmente não tivemos acesso. Outra aplicação da mesma época foi efetuada por Dahlqvist (1979, 1981) que implementou o regulador adaptativo de Åström [Åström, 1973], numa versão multivariável, a uma coluna de destilação binária de baixa pureza (Fração molar no destilado = 0,71 de etanol) alimentada por uma mistura de Etanol-H₂O, coluna esta existente no Dept. de Engenharia Química do Royal Institute of Technology, Suécia. Dahlqvist tentou reduzir as interações entre as malhas considerando a estrutura MIMO ("multiple input, multiple output") da coluna como duas estruturas SISO ("single input, single output") acopladas utilizando uma transformação de variáveis como sugerida e utilizada por alguns autores para projeto de controladores convencionais [Shinskey,1984; Nisenfeld,1973]. Nesta concepção a vazão do refluxo é acoplada à de vapor no topo da coluna através de um coeficiente antecipativo apropriado determinado em função da vazão de alimentação; utilizou , adicionalmente, na seção de retificação da coluna, o valor do refluxo interno como função dos valores de regime e da vazão real de vapor. Dahlqvist reporta bons resultados para o regulador para distúrbios de carga em degrau, fato interessante visto este algoritmo não ser projetado especificamente para lidar com tal tipo de distúrbio. Algumas conclusões sobre a parametrização, tempo de amostragem e atrasos do processo são efetuadas.

Na mesma época pode-se assinalar novamente trabalhos de Morris [Morris,1980, 1981], Lienson [Lieson, 1980] e Clough [Clough,1981] sobre os quais não foi possível obter maiores informações. No ano seguinte podem ser destacadas mais três contribuições ao assunto : Morris [Morris,1982], Mellati [Mellati, 1982] e Vogel [Vogel,1982] . O primeiro destes trabalhos constitui um estudo extensivo sobre a aplicação de um controlador adaptativo auto-ajustável MIMO na já citada coluna piloto da Universidade de Alberta, trabalho este que utilizou tanto a simulação digital da coluna como uma implementação real na mesma. Para superar o problema dos atrasos diversificados da

coluna Morris apresenta um algoritmo com diferentes taxas de amostragem para cada malha, bem como a introdução de um preditor analítico [Moore, 1970] para melhoria do desempenho do controlador.

O segundo trabalho citado [Mellati,1982] consiste de uma tese de Doutorado da Universidade de Nottingham onde o controlador auto-ajustável de Clarke [Clarke,1975, 1979] foi aplicado a uma coluna de destilação binária de baixa pureza (Fração molar do destilado = 0,91) alimentada com uma mistura de benzeno-tolueno . Mellati utilizou somente a simulação digital da coluna com um modelo de ordem completa, não tendo sido efetuada implementação real . Algumas modificações nos algoritmos de controle, tais como a utilização de um componente antecipativo na lei de controle e estimação utilizando Filtro de Kalman foram efetuadas.

O trabalho de Vogel [Vogel,1982,1988], também outra tese de doutoramento na Universidade do Texas at Austin , apresenta uma variante em relação aos anteriores pois foi utilizada a técnica de alocação de polos para sintonia dos controles. Neste trabalho a coluna foi simulada através de um modelo reduzido MIMO de primeira ordem, não tendo sido feitas aplicações ou simulações com modelos de ordem completa ou aplicação experimental. O modelo utilizado foi o mesmo desenvolvido por Wood [Wood,1973] para a já citada instalação piloto de metanol-H₂O da Universidade de Alberta.

Relativamente ao controle adaptativo utilizando a técnica de modelo de referência pode-se assinalar dois trabalhos na literatura : Wiemer [Wiemer,1983] e Martin-Sanchez [Martin-Sanchez,1984]. Este último trabalho, ao qual foi possível ter acesso, consiste na utilização de um modelo preditivo adaptativo, um bloco gerador de trajetória ("Driver Block ") e um mecanismo de adaptação : o bloco gerador de trajetória gera um valor desejado para saída do processo, o qual pertence a uma trajetória desejada para a saída; o modelo preditivo adaptativo é utilizado para gerar um sinal de controle que faz a saída prevista do processo igual a uma saída desejada gerada pelo bloco gerador de trajetória e o mecanismo de adaptação não só

ajusta o modelo do preditor adaptativo (para minimizar o erro de predição) como permite que o bloco gerador de trajetória recalcule a saída para otimizar a performance do sistema. O algoritmo descrito foi utilizado experimentalmente na coluna de Alberta com as características de composição no topo e base iguais a 0,96 e 0,01 em fração molar, respectivamente. Os resultados obtidos foram comparados com um controlador PI convencional indicando algumas melhorias relativas ao mesmo.

Esta breve sinopse da aplicação de controladores adaptativos auto-ajustáveis a colunas de destilação mostra que:

1) As aplicações relatadas na literatura se restringem a colunas de média e baixa pureza, não tendo sido analisado seu emprego em colunas de alta e altíssima pureza, situações que caracterizam processos bem mais complexos.

2) Esta classe de controladores apresentou, nos diversos trabalhos citados, um desempenho igual ou superior aos controladores convencionais, pelo menos nas colunas de média pureza, se revelando portanto altamente promissora para aplicação nas colunas de alta e altíssima pureza.

5.3 - Controlador Adaptativo Auto-Ajustável Não-Linear

5.3.1 - Introdução

A quase totalidade dos algoritmos adaptativos auto-ajustáveis se baseiam em modelos reduzidos lineares do processo ou sistema a ser controlado. A aplicação destes algoritmos a sistemas não-lineares se baseia na suposição que as não-linearidades podem ser aproximadas por modelos lineares não-estacionários, com parâmetros variantes, suposição esta que se revela válida para a grande maioria das aplicações, especialmente se os distúrbios não afastam demasiado o processo de seu ponto normal de operação ou se

as não linearidades não são demasiadamente exarcebadas.

Processos reais são geralmente não-lineares mas, apresentam , contudo, um importante aspecto : não só é geralmente possível conhecer suas não-linearidades como também é possível, em muitos casos, mensurá-las. Baseados neste fato foram projetados e implementados controladores adaptativos não-lineares que, a despeito de não possuírem aspectos de generalidade, característica esta talvez inexecutável para sistemas não-lineares, podem lidar com diversas classe de não-linearidades, especialmente os modelos não-lineares mais conhecidos.

O primeiro destes trabalhos está relacionado com o controlador adaptativo de Anbumani [Anbumani,1981] que trabalhou com modelos não-lineares do tipo Hammerstein; outro trabalho da mesma época foi efetuado por Svoronos [Svoronos,1981] que utilizou não-linearidades do tipo bilinear. Lachman [Lachman, 1982] trabalhou com modelos não-lineares do tipo Volterra e Hammerstein. Mais recentemente pode-se assinalar os trabalho de Dochain [Dochain,1984] que utilizou um algoritmo adaptativo para estimação e controle do crescimento de culturas de bactérias e de Burnham [Burnham,1987] que desenvolveu um algoritmo adaptativo para sistemas bilineares com a técnica de alocação de polos.

Todos estes trabalhos, como já observado, procuram resolver alguma não-linearidade inerente a algum sistema ou processo específico sofrendo, portanto, restrições para aplicações de uma forma generalizada. Um algoritmo adaptativo não-linear que, de certa forma procurou assumir um caráter mais geral foi proposto por Agarwall [Agarwall,1987a], inicialmente em formulação monovariável e, posteriormente, multivariável [Agarwal, 1987b]. Nestes algoritmos buscou-se expressar as não-linearidades mediante uma formulação mais genérica, de tal forma que os mesmos pudessem ser aplicados a processos ou sistemas com não-linearidades variadas. O desenvolvimento destas equações será efetuado em maiores detalhes no próximo item.

Para aplicação em nosso trabalho dois destes enfoques se revelaram potencialmente promissores : o algoritmo de Svoronos [Svoronos,1981] ou o de Burnham [Burnham,1987] e o de Agarwall [Agarwall, 1987a]. A potencialidade dos dois primeiros reside no fato do modelamento bilinear de colunas de destilação apresentar geralmente bons resultados , ainda que para colunas de baixa pureza [España,1978] dado que produtos de vazão com temperatura e concentração aparecem nas equações básicas dos balanços de uma coluna de destilação. Contudo, como mostrado por Agarwal [Agarwall, 1987a] o controlador de Svoronos perde sua vantagem sobre os controladores lineares quando aplicado em processos com atrasos, característica esta proeminente em colunas, especialmente as de alta pureza (ver cap.4) e, adicionalmente, o modelamento bilinear da coluna exigiria em si um trabalho bastante elaborado. Nossas atenções, portanto, se concentraram no trabalho de Agarwal [Agarwall,1987a] que, pelo caráter geral assumido para as não-linearidades, pode ser utilizado em modelagens diversas. Vejamos então o algoritmo de Agarwal, maiores detalhes podem ser encontrados nas referências citadas.

5.3.2 - Algoritmo Não-Linear

Consideremos inicialmente um sistema discreto não-linear com formulação geral dada por

$$A(z^{-1})y(t) = \sum_{i=1}^N b_i u^{r_i}(t-k) Y_i(t-1) + d + C(z^{-1})\xi(t) \quad (5.1)$$

com

$$Y_i(t-1) = g_i[y(t-1-m), m = 0, 1, \dots; u(t-k-j), j = 1, 2, \dots, N], i=1(1)N \quad (5.2)$$

onde t é o instante de amostragem, k o atraso do processo, $y(t)$ é a saída do processo no instante t , $u(t)$ é a variável de controle no instante t , $\xi(t)$ um ruído branco com média zero e variância σ^2 , d um distúrbio desconhecido e g_i são funções unívocas estacionárias

com parâmetros conhecidos, (z^{-1}) representa o operador deslocamento; b_i são parâmetros do sistema satisfazendo $\sum_{i=0}^N \|b_i\| \neq 0$ e A e C são polinômios dados por

$$A(z^{-1}) = 1 + a_1 z^{-1} + \dots + a_{NA} z^{-NA} \tag{5.3}$$

$$C(z^{-1}) = 1 + c_1 z^{-1} + \dots + c_{NC} z^{-NC} \tag{5.4}$$

com a suposição que as raízes de C situam-se no interior do círculo unitário e r_i inteiro positivo.

Consideremos agora a função custo quadrática

$$J = E \left\{ [P(z^{-1})y(t+k) - R(z^{-1})y_r(t)]^2 + [Q(z^{-1})u(t)]^2 / t \right\} \tag{5.5}$$

onde $E(\cdot)$ é o operador esperança matemática, y_r representa a referência do processo e $R(z^{-1})$, $Q(z^{-1})$ e $P(z^{-1})$ são polinômios de sintonia especificados pelo usuário. Agarwal [1987a] desenvolve dois algoritmos não-lineares cuja diferença reside em :

- 1) o primeiro deles supõe que as funções $y_i(t-1)$ e as medidas $y(t-j)$, $j = 1, 2, \dots, k-1$ na equação (5.1) são não correlacionadas,
- 2) o segundo trabalha com a suposição de correlação entre ambas.

Como geralmente a segunda hipótese acima é a que ocorre na prática - conforme veremos ao analisar o modelo reduzido utilizado para o nosso estudo - vamos nos concentrar no segundo algoritmo, que aliás foi desenvolvido por Agarwal seguindo o mesmo procedimento utilizado por Bayoumi [Bayoumi,1981] no desenvolvimento de seu regulador auto-ajustável.

Seja a equação diofantina

$$C(z^{-1})P(z^{-1}) = A(z^{-1}) + z^{-1}F(z^{-1}) \quad (5.7)$$

$$F(z^{-1}) = f_0 + f_1 z^{-1} + \dots + f_{NF} z^{-NF}, \quad NF = \max(N_A, N_C + N_P) - 1. \quad (5.8)$$

Substituindo o valor de $A(z^{-1})$ da equação (5.7) em (5.1) :

$$\left[C(z^{-1})P(z^{-1}) - z^{-1}F(z^{-1}) \right] y(t) = \sum_{i=1}^N b_i u^{r_i}(t-k) Y_i(t-1) + d + C(z^{-1})\xi(t) \quad (5.9)$$

$$C(z^{-1})P(z^{-1})y(t) = F(z^{-1})y(t-1) + \sum_{i=1}^N b_i u^{r_i}(t-k) Y_i(t-1) + d + C(z^{-1})\xi(t) \quad (5.10)$$

É necessário, para minimização da função custo dada por (5.5), o cálculo do preditor $P(z^{-1})y(t+k)$, que pode ser obtido por

$$P(z^{-1})y(t+k) = P(z^{-1})y^*(t+k/t) + \xi(t+k) \quad (5.11)$$

onde $y^*(t+k/t)$ representa o preditor ótimo para o instante $t+k$ a partir das informações disponíveis até o instante t . Efetua-se então um deslocamento à esquerda de k passos na equação (5.11) permitindo a utilização da equação (5.12) para cálculo do preditor :

$$P(z^{-1})y(t) = P(z^{-1})y^*(t/t-k) + \xi(t) \quad (5.12)$$

Substituindo (5.12) em (5.10) :

$$C(z^{-1}) \left[P(z^{-1})y^*(t/t-k) + \xi(t) \right] = F(z^{-1})y(t-1) + \sum_{i=1}^N b_i u^{r_i}(t-k) Y_i(t-1) + d + C(z^{-1})\xi(t) \quad (5.13)$$

Efetuando-se agora um deslocamento de k passos à direita na equação

(5.13) obtem-se

$$C(z^{-1})P(z^{-1})y^*(t+k/t) = F(z^{-1})\hat{y}(t+k-1) + \sum_{i=1}^N b_i u^{r_i}(t)\hat{Y}_i(t+k-1) + d \quad (5.14)$$

Surge então o problema de como avaliar os valores futuros da medida $y(t+k-1)$ e da função $Y_i(t+k-1)$. A solução consiste em se efetuar uma predição determinística através do modelo do processo (equação 5.1) para se obter os valores $\hat{y}(t+j)$ que serão então utilizados para determinação dos valores $\hat{Y}_i(t+j)$. Portanto da parte determinística de (5.1) obtém-se

$$A(z^{-1})y(t) = \sum_{i=1}^N b_i u^{r_i}(t-k) Y_i(t-1) + d \quad (5.15)$$

$$y(t) + z \left[A(z^{-1}) - 1 \right] y(t-1) = \sum_{i=1}^N b_i u^{r_i}(t-k) Y_i(t-1) + d \quad (5.16)$$

$$y(t) = z \left[1 - A(z^{-1}) \right] y(t-1) + \sum_{i=1}^N b_i u^{r_i}(t-k) Y_i(t-1) + d \quad (5.17)$$

Um preditor determinístico de j passos pode ser obtido recursivamente da equação (5.17) a partir do valor $j-1$ fornecendo

$$\tilde{y}(t+j) = z \left[1 - A(z^{-1}) \right] \tilde{y}(t+j-1) + \sum_{i=1}^N b_i u^{r_i}(t+j-k) \tilde{Y}_i(t+j-1) + d, j = 1(1)k-1 \quad (5.18)$$

Trata-se agora de minimizar a função custo em relação ao controle $u(t)$, ou seja, calcular $\partial J / \partial u(t) = 0$. Para tal substitui-se a expressão do preditor ótimo (equação 5.12) na função custo:

$$J = E \left\{ [P(z^{-1})y^*(t+k/t) + \xi(t+k) - R(z^{-1})y_r(t)]^2 + [Q'(z^{-1})u(t)]^2 \right\} \quad (5.19)$$

que, baseado na suposição de não-correlação para $\xi(t+k)$ fornece

$$J = [P(z^{-1})y^*(t+k/t) - R(z^{-1})y_r(t)]^2 + [Q'(z^{-1})u(t)]^2 + E\{\xi(t+k)^2\} \quad (5.20)$$

Avaliando agora $\partial J / \partial u(t) = 0$

$$\left\{ \frac{\partial [P(z^{-1})y^*(t+k/t)]}{\partial u(t)} \right\} \left\{ P(z^{-1})y^*(t+k/t) - R(z^{-1})y_r(t) \right\} + Q'(0)Q'(z^{-1})u(t) = 0 \quad (5.21)$$

É necessário agora avaliar a expressão $\frac{\partial [P(z^{-1})y^*(t+k/t)]}{\partial u(t)}$.

Utiliza-se então a equação (5.14) obtendo :

$$\frac{\partial [P(z^{-1})y^*(t+k/t)]}{\partial u(t)} = \sum_{\substack{i=1 \\ r_i \neq 0}}^N b_i r_i u^{r_i-1}(t) \hat{Y}_i(t+k-1) \quad (5.22)$$

Multiplicando-se agora (5.21) por $C(z^{-1})$ permite que se utilizem as equações (5.22) e (5.14) fornecendo

$$\left\{ \sum_{\substack{i=1 \\ r_i \neq 0}}^N b_i r_i u^{r_i-1}(t) \hat{Y}_i(t+k-1) \right\} \left\{ C(z^{-1}) \hat{y}(t+k-1) + \sum_{i=1}^N b_i u^{r_i}(t-k) \hat{Y}_i(t+k-1) + d - C(z^{-1})R(z^{-1})y_r(t) \right\} +$$

$$C(z^{-1})Q'(0)Q'(z^{-1})u(t) = 0 \quad (5.23)$$

A expressão acima pode conter termos em $u(t)$ com $r_i \neq 0$ e termos em $u(t)$ para os quais $r_i = 0$. Desmembrando-se estes termos obtém-se

$$\left\{ \sum_{\substack{i=1 \\ r_i \neq 0}}^N b_i r_i u^{r_i-1}(t) \hat{Y}_i(t+k-1) \right\} \left\{ F(z^{-1}) \hat{y}(t+k-1) + \sum_{\substack{i=1 \\ r_i=0}}^N b_i(t) \hat{Y}_i(t+k-1) + \sum_{\substack{i=1 \\ r_i \neq 0}}^N b_i u^{r_i}(t) \hat{Y}_i(t+k-1) + d - C(z^{-1})R(z^{-1})y_r(t) \right\} + C(z^{-1})Q'(0)Q'(z^{-1})u(t) = 0 \quad (5.24)$$

Para efeito de simplicidade seja

$$\sigma = F(z^{-1})\hat{y}(t+k-1) + \sum_{\substack{i=1 \\ r_i=0}}^N b_i(t)\hat{Y}_i(t+k-1) + d - C(z^{-1})R(z^{-1})y_r(t) \quad (5.25)$$

o que fornece a seguinte lei de controle

$$\left\{ \sum_{\substack{i=1 \\ r_i \neq 0}}^N b_i r_i u^{r_i-1}(t) \hat{Y}_i(t+k-1) \right\} \left\{ \sum_{\substack{i=1 \\ r_i \neq 0}}^N b_i u^{r_i}(t) \hat{Y}_i(t+k-1) + \sigma \right\} + C(z^{-1})Q'(0)Q'(z^{-1})u(t) = 0 \quad (5.26)$$

que constitui um polinômio em $u(t)$ de ordem $2(r_i) - 1$. O algoritmo apresentado utiliza portanto o enfoque indireto : é necessário conhecer ou estimar os parâmetros do processo dados pela equação (5.1) a partir dos quais calcula-se então o polinômio $F(z^{-1})$ através da identidade polinomial diofantina e o preditor mediante a equação (5.18) ; as raízes do polinômio (5.26) fornecerão a lei de controle desejado.

Uma versão mais simples do algoritmo acima pode ser encontrado para o caso em que o modelo (5.1) é linear em $u(t)$, talvez o caso mais comum na área de controle de processos. Portanto, para o caso em que $r_i \leq 1, i = 1(1)N$ obtemos

$$\left\{ \sum_{\substack{i=1 \\ r_i \neq 0}}^N b_i \hat{Y}_i(t+k-1) \right\} \left\{ \sum_{\substack{i=1 \\ r_i \neq 0}}^N b_i u(t) \hat{Y}_i(t+k-1) + \sigma \right\} + C(z^{-1})Q'(0)Q'(z^{-1})u(t) = 0 \tag{5.27}$$

Definindo , para efeitos de simplicidade, $\rho = \sum_{\substack{i=1 \\ r_i \neq 0}}^N b_i \tilde{Y}_i(t+k-1)$

obtem-se a lei de controle para o caso linear em $u(t)$

$$u(t) = \frac{-\rho}{\rho^2 + C(z^{-1})Q'(0)Q'(z^{-1})} \tag{5.28}$$

5.3.3 - Modelos Reduzidos Linear e Não-Linear

A primeira providencia para implementação dos controladores consiste no estabelecimento de modelos reduzidos adequados visto que o modelo completo, por suas características de não-linearidades e dimensão se revela totalmente inadequado a este fim. Vimos, anteriormente, quando da caracterização do sistema, no capítulo 4, que seu comportamento dinâmico sugere uma função de primeira ou segunda ordem como um modelo reduzido adequado.

Kim [Kim,1974], partindo dos autovalores λ_i das equações linearizadas de colunas de destilação com N estágios, verificou que as constantes de tempo do processo, quando N é suficientemente grande, tendem aos seguintes valores

$$-1/\lambda_1 \longrightarrow \frac{(N+1)^2}{\pi}, \quad \lambda_1 \lambda_2 \longrightarrow 1/4, \quad \sum_{j=1}^N \lambda_1 \lambda_j \longrightarrow \pi^2/6$$

com dois autovalores dominantes (λ_1 e λ_2), mostrando que o processo, em suas características básicas, pode ser aproximado pela função de transferência da forma

$$G_P(s) = \frac{\exp(-T_D s)}{(1 + T_1 s)(1 + T_2 s)}$$

com $T_1 = -1/\lambda_1$, $T_2 = -1/\lambda_2$ e $T_D = \sum_{j=3}^N (-1/\lambda_j)$, constantes estas obtidas, por exemplo, a partir do método dos momentos [Kim,1974].

A fórmula geral (5.1) apresentada por Agarwal [Agarwal,1987] para o Controlador auto-ajustável não-linear possui uma formulação bastante genérica no tocantes às não-linearidades do sistema a ser controlado, que pode apresentar formulações diversas. Para sua implementação podem ser utilizadas duas alternativas :

- 1) Estudo do comportamento dinâmico da coluna sob análise e estabelecimento de modelos reduzidos não-lineares adequados especificamente à mesma.
- 2) Aproveitamento de modelos reduzidos não-lineares já desenvolvidos e que possam ser adaptados à coluna em questão.

Optou-se pela segunda hipótese pelas seguintes razões :

- o estabelecimento de modelos reduzidos para colunas de destilação constitui assunto bastante específico e trabalhoso dentro da área de modelagem constituindo, por si só, tema de teses de mestrado, doutorado e diversos trabalhos [Wong,1985; Benallou,1986; Espana,1975; Stainthorp,1973 e outros mais]. Visto que a proposta do nosso trabalho é bem mais ampla,

envolvendo não só outros tipos de controladores, mas também outros itens tais como otimização do processo, a tentativa de estabelecer modelos reduzidos não-lineares específicos para a coluna em questão consumiria certamente parte substancial do tempo disponível comprometendo o trabalho em seu conjunto.

- A escolha de um modelo adequado, já desenvolvido mas que pudesse incorporar especificidades do sistema sob análise constituiria, até certo ponto, um modelo adequado aos nossos propósitos por incluir particularidades da coluna em questão.

Como serão implementados diversos controladores (lineares e não-lineares) optamos pela utilização de um modelo reduzido desenvolvido por Wong [Wong,1985] para a coluna de Alberta e utilizado por Agarwal [Agarwal,1988] para a mesma coluna. Embora esta coluna seja de baixa pureza, o modelo desenvolvido, como veremos a seguir, pode incorporar características não-lineares da coluna específica sob análise, o que permite que o mesmo seja adaptado ao nosso caso, sendo necessário para isto o levantamento de uma não-linearidade específica do processo. Adicionalmente, o modelo sugerido foi desenvolvido de maneira a permitir sua utilização em controladores lineares e/ou não-lineares, através de uma eliminação ou consideração dos termos apropriados .Wong [Wong, 1985] sugeriu o modelo reduzido no qual as não-linearidades aparecem na forma de um ganho escalonado

$$\tau(y)\dot{y}(t) = -y(t) + K(y)u(t-k') + d + \xi(t) \quad (5.29)$$

onde t denota o tempo contínuo, k' é o atraso conhecido do processo, d é um nível contínuo para uma entrada nula, ξ é um ruído branco, $u(t)$ é a variável de controle, y a composição do produto no topo da coluna (variável controlada), τ a constante de tempo do processo, que pode ou não ser função de y e $K(y)$ é o ganho não-linear do processo, função também de $y(t)$. Foi adotado este modelo com as seguintes alterações :

- dado a malha de controle utilizada em nossos trabalhos (recomendada para colunas de alta pureza) a variável controlada passa a ser a temperatura do estágio número 11 da coluna e não a composição no topo da mesma;

- equacionamento do ganho não-linear da coluna de alta pureza utilizada em nosso trabalho.

O modelo reduzido não-linear, bem como um modelo reduzido linear de segunda ordem, podem ser obtidos a partir de um modelo discreto com a formulação geral

$$y(t) = a_1 y(t-1) + a_2 y(t-2) + b_1 u(t-k) + b_2 K \{y(t-1)\} u(t-k) + b_3 u(t-k-1) + b_4 K \{y(t-1)\} u(t-k-1) + b_5 u(t-k-2) + e(t) \quad (5.30)$$

onde k é o atraso discreto expresso como o maior múltiplo do período de amostragem mais 1, que é menor ou igual ao atraso do processo k' , ou seja, $(k-1)T_s \leq k' < kT_s$ e a_i , b_i são parâmetros desconhecidos do modelo. Para os controladores lineares (Controlador auto-ajustável linear, Controlador auto-ajustável linear ponderado com alocação de polos, Controlador linear auto-ajustável com tempo de estabilização finito "deadbeat" e Controlador linear preditivo generalizado) o modelo linear será obtido fazendo-se os termos b_2 e b_4 obtendo-se

$$y(t) = a_1 y(t-1) + a_2 y(t-2) + b_1 u(t-k) + b_3 u(t-k-1) + b_5 u(t-k-2) + e(t) \quad (5.31)$$

enquanto o Controlador auto-ajustável não-linear será obtido fazendo-se a_2 e b_5 nulos

$$y(t) = a_1 y(t-1) + b_1 u(t-k) + b_2 K \{y(t-1)\} u(t-k) + b_3 u(t-k-1) + b_4 K \{y(t-1)\} u(t-k-1) + e(t) \quad (5.32)$$

Veremos inicialmente o controlador auto-ajustável não-linear :

como adaptar a fórmula do modelo reduzido às nossas condições e efetuar o levantamento dos termos não-lineares.

5.3.3.1 - Modelamento Não-linear

Para levantamento das não-linearidades da coluna foi necessário a implementação de um programa específico de cálculo do estado estacionário da coluna [Holland,1963], programa este também utilizado para cálculo das três colunas anteriormente analisadas. O programa foi alterado de maneira a permitir variações na energia fornecida à base da coluna, mantendo-se porém o refluxo constante, configurando desta maneira uma situação bastante parecida com a malha de controle V/F utilizada (ver capítulo 6).

Efetuuou-se então a variação da energia fornecida ao refulvedor mantendo-se as demais condições do processo inalteradas; para cada valor da energia calculou-se o estado estacionário da coluna (perfis de vazão, composição e temperatura) monitorando-se o valor da temperatura do estágio número 11, estágio este a ser utilizado como saída do processo; obteve-se desta maneira a curva mostrada na figura 5.1.

A implementação do modelo foi feita avaliando-se o valor $K(y)$ para a curva mostrada na figura 5.1. Assim , para um valor da medida

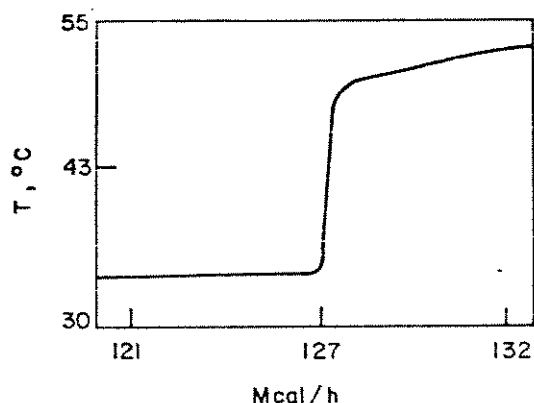


Figura 5.1 - Ganho Não-linear $K(y)$ para a coluna de alta pureza.

$y(t)$ amostrado o ganho correspondente é calculado pela relação $K(y)$
 $= \frac{y(t) - d}{u(t)}, \forall u(t) \neq 0.$

5.3.4 - Algoritmo Não-Linear : Implementação

O modelo reduzido não-linear a ser utilizado,

$$y(t) = a_1 y(t-1) + b_1 u(t-k) + b_2 K\{y(t-1)\} u(t-k) + b_3 u(t-k-1) + b_4 K\{y(t-1)\} u(t-k-1) + e(t) \quad (5.33)$$

quando comparado à formulação genérica do sistema não-linear

$$A(z^{-1})y(t) = \sum_{i=1}^N b_i u^{r_i}(t-k) Y_i(t-1) + d + C(z^{-1})\xi(t) \quad (5.34)$$

mostra a existência de dois termos associados a b_1 e b_2 para os quais existe o controle $u(t-k)$ e portanto $r_i, i = 1,2$, são unitários; similarmente os termos b_3 e b_4 estão relacionados aos valores $u(t-k-1)$ ocasionando $r_i = 0, i = 3,4$. Em termos da lei de controle linear em $u(t)$

$$u(t) = \frac{-\rho}{\rho^2 + C(z^{-1})Q'(0)Q'(z^{-1})} \quad (5.35)$$

teremos portanto $\rho = \sum_{\substack{i=1 \\ r_i \neq 0}}^N b_i \hat{Y}_i(t+k-1)$ expresso por

$$\rho = b_1 \hat{Y}_1(t+k-1) + b_2 \hat{Y}_2(t+k-1) \quad (5.36)$$

e a expressão

$$\sigma = F(z^{-1}) \hat{y}(t+k-1) + \sum_{i=1}^N b_i(t) \hat{Y}_i(t+k-1) +$$

$$r_i = 0$$

$$d - C(z^{-1})R(z^{-1})y_r(t) \quad (5.37)$$

que contém os termos para os quais $r_i = 0$ será expressa por

$$\sigma = F(z^{-1}) \hat{y}(t+k-1) + b_3 \hat{Y}_3(t+k-1) +$$

$$b_4 \hat{Y}_4(t+k-1) + d - R(z^{-1})y_r(t) \quad (5.38)$$

Por inspeção com a forma geral do processo verifica-se que

$$\hat{Y}_1(t+k-1) = 1 \quad (5.39)$$

$$\hat{Y}_2(t+k-1) = K\{\hat{y}(t-1)\} \quad (5.40)$$

$$\hat{Y}_3(t+k-1) = u(t+k-1) \quad (5.41)$$

$$\hat{Y}_4(t+k-1) = K\{\hat{y}(t-1)\} u(t+k-1) \quad (5.42)$$

O polinômio $F(z^{-1})$, obtido pela igualdade diofantina (5.7) necessitaria ser reavaliado a cada período de amostragem. Verificando-se contudo, que a ordem de $A(z^{-1})$ é 1 e como $n_F = n_A - 1$ [Åström, 1975] com $f_0 = a_1$ a substituição deste valor pode ser efetuada diretamente na expressão sem necessidade de avaliação de $F(z^{-1})$, fornecendo, para os termos da lei de controle,

$$\rho = b_1 + b_2 K\{\hat{y}(t-1)\} \quad (5.43)$$

$$\sigma = a_1 \hat{y}(t+k-1) + b_3 u(t+k-1) +$$

$$b_4 K \left\{ \hat{y}(t-1) \right\} u(t+k-1) + d - R(z^{-1}) y_r(t) \quad (5.44)$$

A implementação deste algoritmo foi efetuada mediante um modelo CARMA, necessitando portanto de técnicas para eliminação do erro de regime ("offset") quando o processo for submetido a perturbações de carga. Entre as várias técnicas disponíveis para este fim [Clarke,1983;Isermann,1983;Tuffs,1985] uma das mais utilizadas consiste na incorporação de um nível contínuo d no modelo do processo, a ser estimado juntamente com os parâmetros do processo. Este procedimento, embora bastante utilizado, pode acarretar problemas no estimador pela existência de um valor constante unitário no vetor regressor, sem excitação [Sripada,1987]. Outro procedimento clássico consiste na utilização de um integrador na lei de controle, procedimento este utilizado inicialmente na implementação do algoritmo não-linear para evitar o uso do fator unitário no vetor regressor.

A função custo com $P(z^{-1})$, $R(z^{-1})$ e $C(z^{-1})$ unitários e $Q(z^{-1})$ constante fica

$$J = E \left\{ [y(t+k) - y_r(t)]^2 + \lambda [u(t) - u(t-1)]^2 \right\} \quad (5.45)$$

com a lei de controle, para o caso linear em $u(t)$ sendo dada por

$$u(t) = \frac{\lambda u(t-1) - \sigma \rho}{\rho^2 + \lambda} \quad (5.46)$$

O algoritmo final para o controlador adaptativo auto-ajustável não-linear ficou implementado da seguinte forma :

- 1) Estime os parâmetros do modelo do processo utilizando o algoritmo dos mínimos quadrados recursivos com fatoração UD [Bierman,1977] através do cálculo do ganho não-linear e da equação do modelo :

1.1. Calcule, a partir de $y(t-1)$, $K\{y(t-1)\} = \frac{y(t-1)}{u(t-1)}$

1.2 Calcule os parâmetros do modelo a partir da equação

$$y(t) = \phi^T(t-1) \theta + e(t) ,$$

$$\phi^T(t-1) = [y(t-1) \ u(t-k) \ K\{y(t-1)\}u(t-k) \ u(t-k-1) \\ K\{y(t-1)\}u(t-k-1)]$$

$$\theta = [a_1 \ b_1 \ b_2 \ b_3 \ b_4]$$

2. Calcule as predições $\hat{y}(t+j)$, $j = 1, \dots, k-1$:

2.1. Calcule, a partir de $\hat{y}(t+j)$, $u(t+j-d) = K\{y(t+j-1)\} \hat{y}(t+j)$

2.2. Calcule as predições

$$\hat{y}(t+k) = a_1 \hat{y}(t+k-1) + b_1 u(t+k-d) + b_2 K\{\hat{y}(t+k-1)\}u(t+k-d) \\ + b_3 u(t+k-d-1) + b_4 K\{\hat{y}(t+k-1)\}u(t+k-d-1)$$

3. Calcule o valor do controle :

3.1. Calcule o valor do ganho não-linear $K\{y(t+d-1)\}$ a partir da predição $\hat{y}(t+d-1)$

3.2. Calcule

$$\rho = b_1 + b_2 K\{\hat{y}(t+d-1)\} \\ \sigma = a_1 \hat{y}(t+d-1) + b_3 u(t-1) + b_4 K\{\hat{y}(t+d-1)\}u(t-1) - y_r(t)$$

3.3. Calcule o controle $u(t)$

$$u(t) = \frac{\lambda u(t-1) - \sigma \rho}{\rho^2 + \lambda}$$

4) Aplique o controle $u(t)$ calculado no passo (3) e repita os passos (1) até (4) para cada instante de amostragem.

5.4 - Controlador Adaptativo Auto-Ajustável Linear com Integrador Implícito

Seja o processo linear discreto representado pelo modelo CARIMA ("Controlled Auto-Regresive Integrated Moving Average")

$$A(z^{-1})y(t) = B(z^{-1})u(t-k) + \frac{C(z^{-1})\xi(t)}{\Delta} \quad (5.47)$$

onde $y(t)$ e $u(t)$ representam a saída e entrada do processo no instante de amostragem t ; k o atraso do processo e $\xi(t)$ representando um ruído branco ou pulsos de amplitude aleatória ; $A(z^{-1})$, $C(z^{-1})$ polinômios como anteriormente definidos, $B(z^{-1})$ um polinômio em (z^{-1})

$$B(z^{-1}) = b_0 + b_1 z^{-1} + \dots + b_{NB} z^{-NB} \quad (5.49)$$

e o operador $\Delta = 1 - z^{-1}$. Manipulando-se algebricamente Δ na equação do modelo obtem-se

$$A(z^{-1})\Delta y(t) = B(z^{-1})\Delta u(t-k) + C(z^{-1})\xi(t) \quad (5.51)$$

com o valor da saída dado por

$$y(t) = \frac{B(z^{-1})\Delta u(t-k)}{A(z^{-1})\Delta} + \frac{C(z^{-1})\xi(t)}{A(z^{-1})\Delta} \quad (5.52)$$

Efetuada-se um deslocamento de k passos à direita obtém-se

$$y(t+k) = \frac{B(z^{-1})u(t)}{A(z^{-1})} + \frac{C(z^{-1})\xi(t+k)}{A(z^{-1})\Delta} \quad (5.52)$$

É necessário agora a introdução da identidade polinomial diofantina [Åström,1975] :

$$P(z^{-1}) C(z^{-1}) = E(z^{-1}) \Delta A(z^{-1}) + z^{-k} F(z^{-1}) , \quad (5.54)$$

$$F(z^{-1}) = 1 + f_1 z^{-1} + \dots + f_{NF} z^{-NF} \quad (5.55)$$

$$E(z^{-1}) = e_0 + e_1 z^{-1} + \dots + e_{k-1} z^{-k+1} \quad (5.56)$$

com as respectivas ordens para os polinômios : $N_F = (\max N_P + N_C - k, N_A)$ e $N_E = k - 1$. Aplicando a identidade polinomial acima à equação (5.53) :

$$y(t+k) = \frac{B(z^{-1})u(t)}{A(z^{-1})} + \xi(t+k) \left\{ \frac{E(z^{-1})}{P(z^{-1})} + z^{-k} \frac{F(z^{-1})}{P(z^{-1})A(z^{-1})\Delta} \right\} \quad (5.57)$$

$$P(z^{-1}) y(t+k) = \frac{P(z^{-1})B(z^{-1})u(t)}{A(z^{-1})} + \xi(t+k) E(z^{-1}) + \xi(t) \frac{F(z^{-1})}{A(z^{-1})\Delta} \quad (5.58)$$

É possível calcular o termo $\xi(t)$ na saída prevista $y(t+k)$. Para isto utiliza-se o valor de $\xi(t)$ explicitado pelo modelo do processo (equação 5.47) :

$$\xi(t) = \frac{A(z^{-1})\Delta y(t)}{C(z^{-1})} - \frac{B(z^{-1})\Delta u(t-k)}{C(z^{-1})} \quad (5.59)$$

que substituído na equação do preditor fornece

$$P(z^{-1})y(t+k) = \frac{P(z^{-1})B(z^{-1})u(t)}{A(z^{-1})} + \xi(t+k) E(z^{-1})$$

$$+ \frac{F(z^{-1})}{A(z^{-1})\Delta} \left\{ \frac{A(z^{-1})\Delta y(t)}{C(z^{-1})} - \frac{B(z^{-1})\Delta u(t-k)}{C(z^{-1})} \right\} \quad (5.60)$$

$$P(z^{-1}) y(t+k) = \frac{F(z^{-1}) y(t)}{C(z^{-1})} +$$

$$\frac{B(z^{-1})}{A(z^{-1})} \left\{ P(z^{-1})u(t) - u(t-k) - \frac{F(z^{-1}) y}{C(z^{-1})} \right\} + \xi(t+k) E(z^{-1}) \quad (5.61)$$

$$P(z^{-1})C(z^{-1}) y(t+k) = \frac{F(z^{-1}) y(t)}{C(z^{-1})} + \xi(t+k) F(z^{-1})C(z^{-1})$$

$$\frac{B(z^{-1})}{A(z^{-1})} \left\{ P(z^{-1})C(z^{-1}) - z^{-k} F(z^{-1}) \right\} u(t) \quad (5.62)$$

Da equação diofantina (5.54)

$$E(z^{-1})\Delta A(z^{-1}) = P(z^{-1})C(z^{-1}) - z^{-k}F(z^{-1}) \quad (5.63)$$

valor este que substituído na equação (5.62) do preditor fornece

$$P(z^{-1})C(z^{-1})y(t+k) = F(z^{-1})y(t) + B(z^{-1})E(z^{-1})\Delta u(t) + \xi(t+k) E(z^{-1})C(z^{-1}) \quad (5.64)$$

$$P(z^{-1})y(t+k) = \frac{F(z^{-1}) y(t)}{C(z^{-1})} + \frac{B(z^{-1})E(z^{-1})}{C(z^{-1})} \Delta u(t) + \xi(t+k) E(z^{-1}) \quad (5.65)$$

Seja agora o preditor

$$P(z^{-1})y^*(t+k/t) = \frac{F(z^{-1}) y(t)}{C(z^{-1})} + \frac{B(z^{-1})F(z^{-1})}{C(z^{-1})} \Delta u(t) \quad (5.66)$$

o que fornece a previsão real

$$P(z^{-1})y(t+k) = P(z^{-1})y^*(t+k/t) + \xi(t) E(z^{-1}) \quad (5.67)$$

Associa-se agora ao problema a função custo

$$J = E \left\{ [P(z^{-1})y^*(t+k) - R(z^{-1})y_r(t)]^2 + [Q'(z^{-1})\Delta u(t)]^2 \right\} \quad (5.68)$$

onde $P(z^{-1})$, $R(z^{-1})$, $Q'(z^{-1})$ e $E(\cdot)$ definidos como anteriormente. Substituindo-se o valor da previsão - que difere da ótima por um erro $\xi(t+k)E(z^{-1})$ - na função custo obtém-se

$$J = E \left\{ [P(z^{-1})\hat{y}(t+k/t) + \xi(t+k/t)E(z^{-1}) - R(z^{-1})y_r(t)]^2 + [Q'(z^{-1})\Delta u(t)]^2 \right\} \quad (5.69)$$

e considerando-se o ruído não-correlacionado

$$J = [P(z^{-1})\hat{y}(t+k/t) - R(z^{-1})y_r(t)]^2 + [Q'(z^{-1})\Delta u(t)]^2 + E \left\{ \xi(t+k/t)E(z^{-1}) \right\} \quad (5.70)$$

Aplicando-se a condição de otimalidade, ou seja, $\partial J / \partial \Delta u(t) = 0$ obtém-se

$$2 \left\{ \frac{F(z^{-1})y(t)}{C(z^{-1})} + \frac{B(z^{-1})E(z^{-1})}{C(z^{-1})} \Delta u(t) - R(z^{-1})y_r(t) \right\} b_0 e_0 + 2 Q'(z^{-1})\Delta u(t) q_0 = 0 \quad (5.71)$$

$$\frac{F(z^{-1})y(t)}{C(z^{-1})} - R(z^{-1})y_r(t) + \left\{ \frac{B(z^{-1})E(z^{-1})}{C(z^{-1})} + Q(z^{-1}) \right\} \Delta u(t) = 0 \quad (5.72)$$

onde

$$Q(z^{-1}) = \frac{Q(z^{-1})q_0}{b_0 e_0} \quad (5.73)$$

$$F(z^{-1})y(t) - C(z^{-1})R(z^{-1})y_r(t) + \left\{ B(z^{-1})E(z^{-1}) + C(z^{-1})Q(z^{-1}) \right\} \Delta u(t) = 0 \quad (5.74)$$

Definindo os polinômios

$$H(z^{-1}) = B(z^{-1})E(z^{-1}) + C(z^{-1})Q(z^{-1}) \quad (5.75)$$

$$L(z^{-1}) = -C(z^{-1})R(z^{-1}) \quad (5.76)$$

obtem-se a seguinte expressão

$$F(z^{-1})y(t) + H(z^{-1})\Delta u(t) + L(z^{-1})y_r(t) = 0 \quad (5.77)$$

que fornece a seguinte lei de controle

$$\Delta u(t) = \left\{ L(z^{-1})y_r(t) - F(z^{-1})y(t) \right\} / H(z^{-1}) \quad (5.78)$$

5.4.1 - Algoritmo linear : Aplicação à Coluna de Destilação

O modelo linear utilizado foi obtido a partir da equação (5.30)

$$y(t) = a_1 y(t-1) + a_2 y(t-2) + b_1 u(t-k) + b_2 u(t-k-1) + b_3 u(t-k-2) + e(t) \quad (5.79)$$

que para a formulação CARIMA pode ser reescrito como

$$y(t) = a_1^* y(t-1) + a_2^* y(t-2) + a_3^* y(t-3) + b_0 \Delta u(t-2) + b_1 \Delta u(t-3) + b_2 \Delta u(t-4) + e(t) \quad (5.80)$$

onde o polinômio $A^*(z^{-1}) = A(z^{-1})\Delta$ e $C(z^{-1}) = 1$. Neste caso teremos $n_A = 3$ e $n_B = 2$ fornecendo para a igualdade diofantina $n_F = 2$ e $n_E = 1$, com os valores de $F(z^{-1})$ e $E(z^{-1})$, da igualdade polinomial

$$P(z^{-1}) = A^*(z^{-1})E(z^{-1}) + z^{-2}F(z^{-1}) \quad (5.81)$$

$$E(z^{-1}) = 1 - a_1^* z^{-1}$$

$$F(z^{-1}) = (-a_2^* a_1^* + a_1^{*2}) z^{-2} + (a_3^* + a_2^* a_1^*) z^{-3} + a_3^* a_1^* z^{-4}$$

e os polinômios da lei de controle serão

$$L(z^{-1}) = -R(z^{-1})$$

$$H(z^{-1}) = (e_0 b_0 + q_0) + (b_1 - b_0 a_1^*) z^{-1} - (b_2 a_1^* + b_1 a_1^*) z^{-2} - b_2 a_1^* z^{-3}$$

fornecendo a seguinte expressão para a lei de controle :

$$\Delta u(t) = \alpha \left\{ -(a_2^* a_1^* + a_1^{*2}) y(t-2) - (a_3^* + a_2^* a_1^*) y(t-3) - a_3^* a_1^* y(t-4) - (b_1 - b_0 a_1^*) \Delta u(t-1) + (b_2 a_1^* + b_1 a_1^*) \Delta u(t-2) + b_2 a_1^* \Delta u(t-3) - R(z^{-1}) y_R(t) \right\} \quad (5.82)$$

onde $\alpha = 1/(e_0 b_0 + q_0)$.

A formulação final do algoritmo é a seguinte :

1. Calcule os parâmetros do modelo a partir da equação do processo utilizando o algoritmo dos mínimos quadrados recursivos fatorado segundo a técnica UD [Bierman,1977]:

$$y(t) = \phi^T(t-1) \theta + e(t) ,$$

$$\phi^T(t-1) = [-y(t-1) \ -y(t-2) \ -y(t-3) \ \Delta u(t-2) \ \Delta u(t-3) \ \Delta u(t-4)]$$

$$\theta = [a_1^* \ a_2^* \ a_3^* \ b_0 \ b_1 \ b_2]$$

2. Resolver a equação diofantina avaliando $F(z^{-1})$ e $E(z^{-1})$:

$$E(z^{-1}) = 1 - a_1^* z^{-1}$$

$$F(z^{-1}) = (-a_2^* a_1^* + a_1^{*2}) z^{-2} + (a_3^* + a_2^* a_1^*) z^{-3} + a_3^* a_1^* z^{-4}$$

3) Calcular os polinômios da lei de controle

$$L(z^{-1}) = - R(z^{-1})$$

$$H(z^{-1}) = (e_0 b_0 + q_0) + (b_1 - b_0 a_1^*) z^{-1} - (b_2 a_1^* + b_1 a_1^*) z^{-2} - b_2 a_1^* z^{-3}$$

4) Calcular o valor incremental do controle $\Delta u(t)$:

$$\Delta u(t) = \alpha \left\{ -(a_2^* a_1^* + a_1^{*2}) y(t-2) - (a_3^* + a_2^* a_1^*) y(t-3) - a_3^* a_1^* y(t-4) \right. \\ \left. - (b_1 - b_0 a_1^*) \Delta u(t-1) + (b_2 a_1^* + b_1 a_1^*) \Delta u(t-2) + \right. \\ \left. b_2 a_1^* \Delta u(t-3) - R(z^{-1}) y_R(t) \right\}$$

onde $\alpha = 1/(e_0 b_0 + q_0)$.

5) Aplicar o controle $u(t) = u(t-1) + \Delta u(t)$ e retornar ao passo 1.

5.5 - Controlador Adaptativo Auto-Ajustável Linear com Integrador Implícito e Alocação de Polos.

Seja o processo linear discreto (equação 5.47) descrito pelo modelo CARIMA

$$A(z^{-1})y(t) = B(z^{-1})u(t-k) + \frac{C(z^{-1})\xi(t)}{\Delta} \quad (5.47)$$

onde os polinômios $A(z^{-1})$, $B(z^{-1})$ e $C(z^{-1})$; os sinais $y(t)$, $u(t)$, $\xi(t)$ e o operador Δ tem o mesmo significado anteriormente descrito. Vimos que a lei de controle desenvolvida para o controlador adaptativo linear auto-ajustável (equação 5.78) é expressa como

$$\Delta u(t) = \left\{ L(z^{-1})y_r(t) - F(z^{-1})y(t) \right\} / H(z^{-1}) \quad (5.78)$$

com o polinômio $F(z^{-1})$ sendo dado pela equação diofantina (5.54) e os polinômios

$$H(z^{-1}) = B(z^{-1})E(z^{-1}) + C(z^{-1})Q(z^{-1})$$

$$L(z^{-1}) = -C(z^{-1})R(z^{-1})$$

como definidos nas equações (5.75) e (5.76). Calcula-se agora a saída do processo em malha fechada mediante substituição do valor do controle $\Delta u(t)$, dado pela equação (5.78), na equação do processo obtendo-se

$$A(z^{-1})\Delta y(t) = B(z^{-1}) \left\{ - \frac{F(z^{-1})}{H(z^{-1})} y(t-k) - \frac{L(z^{-1})}{H(z^{-1})} y_r(t-k) \right\} + C(z^{-1})\xi(t) \quad (5.83)$$

$$\left\{ AC(z^{-1})\Delta + \frac{BC(z^{-1})FC(z^{-1})}{HC(z^{-1})} z^{-k} \right\} y(t) =$$

$$- \frac{BC(z^{-1})LC(z^{-1})}{HC(z^{-1})} z^{-k} y_R(t) + C(z^{-1})\xi(t) \quad (5.84)$$

$$\left\{ AC(z^{-1})\Delta HC(z^{-1}) + BC(z^{-1})FC(z^{-1})z^{-k} \right\} y(t) =$$

$$- BC(z^{-1})LC(z^{-1})z^{-k} y_R(t) + HC(z^{-1})C(z^{-1})\xi(t) \quad (5.85)$$

Explicitando o valor do polinômio $HC(z^{-1})$ e $LC(z^{-1})$ na equação acima

$$\left\{ AC(z^{-1})\Delta \left[BC(z^{-1})FC(z^{-1}) + Q(z^{-1})C(z^{-1}) \right] + BC(z^{-1})FC(z^{-1})z^{-k} \right\} y(t) =$$

$$- BC(z^{-1})LC(z^{-1})z^{-k} y_R(t) + HC(z^{-1})C(z^{-1})\xi(t) \quad (5.86)$$

O valor de $FC(z^{-1})z^{-k}$ pode ser obtido a partir da equação diofantina (5.54)

$$\left\{ AC(z^{-1})\Delta \left[BC(z^{-1})FC(z^{-1}) + Q(z^{-1})C(z^{-1}) \right] + \right.$$

$$BC(z^{-1}) \left[PC(z^{-1})C(z^{-1}) - AC(z^{-1})E(z^{-1})\Delta \right] \left. \right\} y(t) =$$

$$- BC(z^{-1})LC(z^{-1})z^{-k} y_R(t) + HC(z^{-1})C(z^{-1})\xi(t) \quad (5.87)$$

$$\left\{ AC(z^{-1})\Delta BC(z^{-1})E(z^{-1}) + AC(z^{-1})\Delta \cdot Q(z^{-1})C(z^{-1}) + \right.$$

$$BC(z^{-1})PC(z^{-1})C(z^{-1}) - AC(z^{-1})\Delta BC(z^{-1})E(z^{-1}) \left. \right\} y(t) =$$

$$BC(z^{-1})C(z^{-1})R(z^{-1})z^{-k} y_R(t) + HC(z^{-1})C(z^{-1})\xi(t) \quad (5.88)$$

$$\left\{ A(z^{-1}) \Delta Q(z^{-1}) C(z^{-1}) + B(z^{-1}) P(z^{-1}) C(z^{-1}) \right\} y(t) = \\ B(z^{-1}) C(z^{-1}) R(z^{-1}) z^{-k} y_R(t) + H(z^{-1}) C(z^{-1}) \xi(t) \quad (5.89)$$

$$C(z^{-1}) \left\{ A(z^{-1}) \Delta Q(z^{-1}) + B(z^{-1}) P(z^{-1}) \right\} y(t) = \\ B(z^{-1}) C(z^{-1}) R(z^{-1}) z^{-k} y_R(t) + H(z^{-1}) C(z^{-1}) \xi(t) \quad (5.90)$$

A saída do processo em malha fechada será

$$y(t) = \frac{B(z^{-1}) C(z^{-1}) R(z^{-1})}{C(z^{-1}) \left\{ A(z^{-1}) \Delta Q(z^{-1}) + B(z^{-1}) P(z^{-1}) \right\}} y_r(t) z^{-k} + \\ \frac{H(z^{-1}) C(z^{-1})}{C(z^{-1}) \left\{ A(z^{-1}) \Delta Q(z^{-1}) + B(z^{-1}) P(z^{-1}) \right\}} \xi(t) \quad (5.91)$$

cuja expressão final será

$$y(t) = \frac{B(z^{-1}) R(z^{-1})}{A(z^{-1}) \Delta Q(z^{-1}) + B(z^{-1}) P(z^{-1})} y_r(t-k) + \\ \frac{H(z^{-1})}{A(z^{-1}) \Delta Q(z^{-1}) + B(z^{-1}) P(z^{-1})} \xi(t) \quad (5.92)$$

Para alocação dos polos em malha fechada do processo consideremos a identidade polinomial

$$A^*(z^{-1}) \Delta Q(z^{-1}) + B(z^{-1}) P(z^{-1}) = T^*(z^{-1}) \quad (5.93)$$

onde $T^*(z^{-1})$ é um polinômio em z^{-1} com ordem especificada pelo

usuário e cujas raízes se situam no interior do círculo unitário. A solução desta identidade permite o cálculo dos polinômios de sintonia da lei de controle $P(z^{-1})$ e $Q(z^{-1})$ forçando a que os polos do processo sejam os mesmos do polinômio $T^*(z^{-1})$. A equação de saída do processo em malha fechada permite ainda que se avalie $R(z^{-1})$, a cada iteração, forçando a eliminação do erro de regime do processo. Em regime a saída e a referência devem apresentar erro nulo obrigando a que

$$\frac{B(z^{-1})R(z^{-1})}{A(z^{-1})\Delta Q(z^{-1}) + B(z^{-1})P(z^{-1})} \Bigg|_{z=1} = 1 \quad (5.94)$$

permitindo que $\hat{R}(z^{-1})$ seja calculado à cada iteração para eliminação do erro de regime :

$$\hat{R}(z^{-1}) = P(1) \quad (5.95)$$

$$\text{onde } P(1) = \sum_{i=0}^{NP} p_i .$$

5.5.1 - Implementação do algoritmo à coluna

A implementação do algoritmo linear com alocação de polos foi efetuada utilizando-se o modelo linear de segunda ordem (equação 5.80) considerando-se $C(z^{-1}) = 1$:

$$y(t) = a_1^* y(t-1) + a_2^* y(t-2) + a_3^* y(t-3) + b_0 \Delta u(t-2) + b_1 \Delta u(t-3) + b_2 \Delta u(t-4) + e(t) \quad (5.80)$$

onde o polinômio $A^*(z^{-1}) = A(z^{-1})\Delta$. Neste caso teremos $n_A = 3$ e $n_B = 2$ fornecendo para a igualdade diofantina $n_F = 2$ e $n_E = 1$. Para que a equação (5.93) tenha solução é necessário que os polinômios $Q(z^{-1})$, $P(z^{-1})$ e $T(z^{-1})$ tenham ordens

$$n_Q = n_B - 1 = 2 - 1 = 1$$

$$n_P = n_A - 1 = 3 - 1 = 2$$

$$n_T \leq n_A + n_B - 1 = 3 + 2 - 1 \leq 4$$

o que fornece $Q(z^{-1}) = q_0 + q_1 z^{-1}$ e $P(z^{-1}) = p_0 + p_1 z^{-1} + p_2 z^{-2}$. A ordem do polinômio $T^*(z^{-1})$, além de satisfazer às relações acima descritas, deve também, e principalmente, expressar adequadamente a dinâmica desejada para o processo. Consideraremos para a presente implementação $T^*(z^{-1}) = 1 + t_1 z^{-1}$.

A alocação dos polos será efetuada através da identidade polinomial

$$(q_0 + q_1 z^{-1})(1 + a_1 z^{-1} + a_2 z^{-2} + a_3 z^{-3}) + (b_0 + b_1 z^{-1} + b_2 z^{-2})(p_0 + p_1 z^{-1} + p_2 z^{-2}) = 1 + t_1 z^{-1} \quad (5.96)$$

que em formulação matricial se expressa como $Mx = t$, com os valores da sintonia dos controles dados por $x = M^{-1}t$:

$$M = \begin{bmatrix} 1 & 0 & b_0 & 0 & 0 \\ a_1 & 1 & b_1 & b_0 & 0 \\ a_2 & a_1 & b_2 & b_1 & b_0 \\ a_3 & a_2 & 0 & b_2 & b_1 \\ 0 & a_3 & 0 & 0 & b_2 \end{bmatrix}$$

$$x = [q_0 \ q_1 \ p_0 \ p_1 \ p_2]^T, \quad t = [1 \ t_1 \ 0 \ 0 \ 0]^T$$

A solução da equação diofantina fornece os polinômios :

$$E(z^{-1}) = p_0 + (p_1 - a_1 p_0) z^{-1}$$

$$F(z^{-1}) = [p_2 - a_2 p_0 - a_1 (p_1 - a_1 p_0)] - [a_3 p_0 + a_2 (p_1 - a_1 p_0)] z^{-1} + [a_3 (p_1 - a_1 p_0)] z^{-2}$$

com os polinômios da lei de controle sendo

$$H(z^{-1}) = [p_0 b_0 + q_0] + [b_0(p_1 - a_1 p_0) + b_1 p_0 + q_1] z^{-1} + \\ [p_0 b_2 + b_1(p_1 - a_1 p_0)] z^{-2} - [b_2(p_1 - a_1 p_0)] z^{-3} \\ L(z^{-1}) = -R(z^{-1})$$

e a lei de controle

$$[p_2 - a_2 p_0 - a_1(p_1 - a_1 p_0)] y(t-2) + [-a_3 p_0 - a_2(p_1 - a_1 p_0)] y(t-3) \\ [-a_3(p_1 - a_1 p_0)] y(t-4) + [p_0 b_0 + q_0] \Delta u(t) + \\ [b_0(p_1 - a_1 p_0) + b_1 p_0 + q_1] \Delta u(t-1) + [p_0 b_2 + b_1(p_1 - a_1 p_0)] \Delta u(t-2) \\ [b_2(p_1 - a_1 p_0)] \Delta u(t-3)$$

5.5.2 - Algoritmo final do controlador adaptativo com alocação de polos

1) Estimar, usando o algoritmo recursivo dos mínimos quadrados fatorado segundo a técnica UD de Bierman [Bierman, 1977], os parâmetros do processo dados pela equação :

$$y(t) = \phi^T(t-1)\theta + e(t) \text{ onde}$$

$$\phi^T(t-1) = [y(t-1) \ y(t-2) \ y(t-3) \ u(t-2) \ u(t-3) \ u(t-4)] \\ \theta = [a_1 \ a_2 \ a_3 \ b_1 \ b_2 \ b_3]$$

2) Calcular os polinômios $P(z^{-1})$ e $Q(z^{-1})$ de sintonia da lei de controle pela alocação dos polos

$$\begin{bmatrix} q_0 \\ q_1 \\ p_0 \\ p_1 \\ p_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & b_0 & 0 & 0 \\ a_1 & 1 & b_1 & b_0 & 0 \\ a_2 & a_1 & b_2 & b_1 & b_0 \\ a_3 & a_2 & 0 & b_2 & b_1 \\ 0 & a_3 & 0 & 0 & b_2 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 1 \\ t_1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

3) Calcular o valor da ponderação da referencia de acordo

$$\hat{R}(z^{-1}) = P(1) = \sum_{i=0}^2 p_i$$

4) Resolver a equação diofantina

$$E(z^{-1}) = p_0 + (p_1 - a_1 p_0) z^{-1}$$

$$F(z^{-1}) = [p_2 - a_2 p_0 - a_1(p_1 - a_1 p_0)] - [a_3 p_0 + a_2(p_1 - a_1 p_0)] z^{-1} + [a_3(p_1 - a_1 p_0)] z^{-2}$$

5) Calcular os polinômios da lei de controle

$$H(z^{-1}) = [p_0 b_0 + q_0] + [b_0(p_1 - a_1 p_0) + b_1 p_0 + q_1] z^{-1} + [p_0 b_2 + b_1(p_1 - a_1 p_0)] z^{-2} - [b_2(p_1 - a_1 p_0)] z^{-3}$$

$$L(z^{-1}) = - R(z^{-1})$$

5) Calcular o valor incremental do controle

$$[p_2 - a_2 p_0 - a_1(p_1 - a_1 p_0)] y(t-2) + [-a_3 p_0 - a_2(p_1 - a_1 p_0)] y(t-3)$$

$$[- a_3(p_1 - a_1 p_0)] y(t-4) + [p_0 b_0 + q_0] \Delta u(t) +$$

$$[b_0(p_1 - a_1 p_0) + b_1 p_0 + q_1] \Delta u(t-1) + [p_0 b_2 + b_1(p_1 - a_1 p_0)] \Delta u(t-2)$$

$$[b_2(p_1 - a_1 p_0)] \Delta u(t-3)$$

- 6) Aplicar o controle $u(t) = \Delta u(t) + u(t-1)$ e repetir os passos 1 a 6 para cada intervalo de amostragem.

5.6 - Controle Preditivo Generalizado

5.6.1 - Introdução

Vimos, ao longo deste trabalho, que as colunas de destilação constituem uma classe de processos com características bastante complexas para a engenharia de controle, entre as quais podemos citar o problema das não-linearidades, atrasos variantes e dinâmicas diferenciadas. Processos reais, contudo, podem apresentar características adicionais como, por exemplo, instabilidade em malha aberta e fase não-mínima, características estas que, se consideradas conjuntamente, podem gerar um ambiente extremamente adverso.

De uma forma geral pode-se afirmar que as diversas concepções de controle adaptativo têm buscado alternativas que possibilitem o tratamento adequado destes problemas, porém o enfoque geral tem sido o tratamento de uma, ou no máximo, duas destas complexidades simultaneamente. A própria concepção dos controladores adaptativos permite, de uma forma aproximada, lidar com não-linearidades : neste caso estas são supostas serem adequadamente representadas por parâmetros lineares, porém não-estacionários, suposição esta que tem apresentado resultados satisfatórios. Este enfoque pode ganhar maior robustez se, de alguma forma, as não-linearidades são incluídas no modelo do processo (ver resultados obtidos no capítulo 6).

Outros problemas, como atrasos variáveis, podem ser satisfatoriamente superados supondo-se $B(z^{-1})$ na equação do modelo com ordem aumentada, porém tal suposição pode gerar problemas se são

utilizadas técnicas de alocação de polos ou se o controlador é do tipo auto-ajustável LQG [Clarke,1987a,b]. Outros procedimentos são ainda utilizados : Morris [Morris,1982] utiliza períodos de amostragem diversos para tratar o problema de atrasos diferenciados no processo.

Clarke [Clarke,1987a] coloca a questão sob o seguinte enfoque : os controladores de variância mínima generalizada com enfoque de projeto direto (implícitos) apresentam boa robustez no tocante à ordem suposta para o modelo, mas são extremamente sensíveis à variações no atraso da planta; já os controladores com enfoque de projeto indireto (explícitos) e alocação de polos são robustos no tocante a atrasos variáveis, mas não quanto a sobreparametrização do modelo.

O controlador preditivo generalizado ("GPC = Generalized Predictive Controller") [Clarke,1987a,b] constitui um algoritmo de "caráter geral" que, em sua formulação padrão, possibilita o tratamento de diversas complexidades de um sistema, sem necessidade de procedimentos específicos ou adicionais. Este algoritmo pode, portanto, ser utilizado em processos que apresentem, simultaneamente, características como fase não-mínima, instabilidade em malha aberta, atraso variável e sub ou sobreparametrização do modelo; assumindo-se, adicionalmente, o modelo CARIMA, os erros de regime são eliminados.

A evolução deste algoritmo constitui uma extensão natural das pesquisas realizadas a partir do controlador de variância mínima generalizada (Clarke,1975,1979); uma análise de sua evolução pode ser encontrada em Lambert [Lambert,1987] e Clarke [Clarke,1987c]. Os trabalhos com controladores de estágios múltiplos foi iniciado por Peterka e Åström [Peterka,1973] que propuseram um método baseado na minimização de uma função custo com diversos estágios (enfoque LQG). Lam [Lam,1980] estendeu o enfoque e Clarke [Clarke,1985] efetuou uma generalização da concepção LQG adicionando ao controlador características do controlador de variância mínima. A

extensão do horizonte extendido na predição, para o domínio polinomial, havia sido efetuada anteriormente por Richalet[Richalet,1978] com o IDCOM; Cutler[Cutler,1980] introduziu o conceito de horizonte limitado (a partir do qual os incrementos no controle são nulos).

A versão do controle preditivo proposta por Clarke [Clarke,1985,1987a,b] e implementada neste trabalho constitui uma síntese dos enfoques anteriores. A concepção básica do algoritmo preditivo pode ser apresentada nos seguintes passos:

- 1- uma sequência de referências $y_r(t+j)$ é calculada (se aplicável, ou seja, existe previsão de variação),
- 2- um modelo preditor é utilizado para gerar um conjunto de predições $\hat{y}(t+j/t)$, com os correspondente erros de predição $e(t+j) = y_r(t+j) - \hat{y}(t+j/t)$; para $j > k$ depende em parte dos futuros sinais de controle $u(t+i)$ a serem calculados;
- 3- uma função custo quadrática adequada dos futuros erros e controles é então minimizada, com a suposição de que após um horizonte adequado os incrementos no sinal de controle serão nulos, obtendo-se desta maneira uma sequência de ações de controle aplicáveis ao processo;
- 4- o primeiro elemento desta sequência é aplicado, repetindo-se esta sequência para o próximo período de amostragem.

A implementação do algoritmo preditivo depende de três variáveis denominadas respectivamente de N_1 , N_Y e N_U :

- N_1 : denominado horizonte inicial de predição; deve ser maior, ou no mínimo igual ao o atraso estipulado para o processo.
- N_Y : denominado horizonte final da predição; deve ser escolhido de maneira a abranger a parte mais

siginificativa da estabilização do processo em malha fechada.

-NU : denominado de horizonte do controle e sua escolha deve refletir a complexidade do processo sob controle; para $NU = 1$ o algoritmo tende ao de Variância Mínima.

Será apresentado a seguir o desenvolvimento do algoritmo básico do controlador preditivo; maiores informações podem ser obtidas na bibliografia citada.

5.6.2 - Algoritmo do Controle Preditivo

Seja o processo linear discreto

$$A(z^{-1})y(t) = B(z^{-1})u(t-1) + \frac{\xi(t)}{\Delta} \quad (5.97)$$

cuja simbologia tem o mesmo significado anteriormente descrito; o deslocamento no sinal de controle pode representar o atraso do processo ou o atraso unitário ocasionado pela amostragem. Manipulando algebricamente o operador Δ

$$A(z^{-1})\Delta y(t) = B(z^{-1})\Delta u(t-1) + \xi(t) \quad (5.98)$$

É necessário agora o cálculo de um preditor de j passos à frente do estágio atual. Este cálculo pode ser efetuado segundo três possibilidades distintas [Lambert,1987] :

a) utilização da equação diofantina

$$1 = E_j(z^{-1})A(z^{-1})\Delta + z^{-j}F_j(z^{-1}) \quad (5.99)$$

que, substituída na equação do modelo, fornece a previsão

$$\hat{y}(t+j/t) = F_j(z^{-1})y(t) + E_j(z^{-1})B(z^{-1})\Delta u(t+j-1) \quad (5.100)$$

previsão esta resolvida para cada estágio j dentro do horizonte de interesse.

b) solução recursiva da equação diofantina obtendo as previsões do horizonte mais longínquo a partir das predições associados ao horizonte mais próximo [Clarke,1987a,b].

c) iteração dinâmica do modelo da planta a partir do estado atual conhecido [De Keiser,1981], com deslocamento das predições previas do vetor de estado de tal forma que

$$\begin{aligned} \hat{y}(t+1/t) &= -a_1 y(t) - a_2 y(t-1) - \dots - a_{NA} y(t-NA+1) + B(z^{-1})\Delta u(t) \\ \hat{y}(t+2/t) &= -a_1 y(t+1/t) - a_2 y(t) - \dots - a_{NA} y(t-NA+2) + B(z^{-1})\Delta u(t+1) \\ \hat{y}(t+3/t) &= -a_1 y(t+2/t) - a_2 y(t+1/t) - \dots - a_{NA} y(t-NA+3) + B(z^{-1})\Delta u(t+2) \\ &\vdots \end{aligned}$$

Embora os três métodos acima forneçam os mesmos resultados o esforço computacional associado aos dois primeiros procedimentos é sensivelmente superior ao terceiro, com o agravante que tende a crescer com o aumento do horizonte j . Utilizaremos portanto o terceiro procedimento.

O valor da saída futura será suposto conter duas componentes:

- \hat{y}_f = representa as previsões das saídas futuras para o processo a partir do estado atual sem aplicação de novos incrementos para o controle; representa a resposta que o sistema teria a partir do estado atual se estivesse em malha aberta :

$$\begin{aligned} \hat{y}_f(t+1/t) &= -a_1 y(t) - \dots - a_{NA} y(t-NA+1) + b_1 \Delta u(t-1) + \dots + b_{NB} \Delta u(t-NB) \\ \hat{y}_f(t+2/t) &= -a_1 y(t+1/t) - \dots - a_{NA} y(t-NA+2) + b_2 \Delta u(t-1) + \dots \end{aligned}$$

$$+ b_{NB} \Delta u(t-NB+1)$$

⋮

ou, em forma compacta,

$$\hat{y}_f(t+k/t) = - \sum_{i=1}^{NA} \hat{y}_f(t+k-i/t) + \sum_{i=1}^{NB} b_i \Delta u(t+k-i-1) \tag{5.101}$$

- \hat{y}_d = representa as previsões da planta a partir do estado inicial porém com os valores incrementais de controle, ainda desconhecidos, aplicados ao processo

$$\begin{aligned} \hat{y}_d(t+1/t) &= b_0 \Delta u(t) \\ \hat{y}_d(t+2/t) &= -a_1 \hat{y}_d(t+1/t) + b_0 \Delta u(t+1) + b_1 \Delta u(t) \\ \hat{y}_d(t+3/t) &= -a_1 \hat{y}_d(t+2/t) - a_2 \hat{y}_d(t+1/t) + b_0 \Delta u(t+2) + b_1 \Delta u(t+1) \\ &\quad + b_2 \Delta u(t) \end{aligned}$$

A resposta do sistema será portanto

$$\hat{y}(t+j/t) = \hat{y}_f(t+j/t) + \hat{y}_d(t+j/t) \tag{5.102}$$

o que coloca a questão de como avaliar os valores dos incrementos futuros do controle a ser utilizados na expressão $\hat{y}_d(t+j/t)$. Este problema pode ser solucionado utilizando-se o teorema da convolução [Lambert,1987] tal que

$$\hat{y}_d(t+j/t) = \sum_{i=0}^{j-1} g_i \Delta u(t+j-i-1) \tag{5.103}$$

onde g_i são as ordenadas da resposta ao degrau unitário de $B(z^{-1})/A(z^{-1})$. Obtem-se assim o vetor incremental para as predições

$$\hat{y}(t+j/t) = \hat{y}_f(t+j/t) + G_1 \tilde{u} \tag{5.104}$$

onde a matriz G_1 , $G_1 \in \mathbb{R}^{NY \times NU}$ é triangular inferior

$$G_1 = \begin{bmatrix} g_0 & & \dots & & 0 \\ g_1 & g_0 & & \dots & 0 \\ g_2 & g_1 & g_0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ g_{NY-1} & & \dots & & g_{NY-NU} \end{bmatrix} \quad (5.106)$$

$$g_0 = b_0, \quad g_j = b_j - \sum_{i=1}^{\min(nA, k)} a_i g_{j-i}$$

e os demais vetores são

$$\hat{y} = [\hat{y}(t+1/t) \quad \hat{y}(t+2/t) \quad \dots \quad \hat{y}(t+NY/t)]^T, \quad \hat{y} \in \mathbb{R}^{NY \times 1} \quad (5.107)$$

$$\tilde{u} = [\Delta u(t) \quad \Delta u(t+1) \quad \dots \quad \Delta u(t+NU-1)]^T, \quad \tilde{u} \in \mathbb{R}^{NU \times 1} \quad (5.108)$$

Associa-se agora ao problema uma função custo incremental

$$J = \mathbb{E} \left\{ \sum_{j=1}^{NY} \left[\hat{y}(t+j/t) - y_r(t+j) \right]^2 + \sum_{j=0}^{NU} \lambda [\Delta u(t+j-1)]^2 / t \right\} \quad (5.109)$$

que, em formulação vetorial pode ser escrita como

$$J = \mathbb{E} \left\{ (\hat{y} - y_r)^T (\hat{y} - y_r) + \lambda \tilde{u}^T \tilde{u} \right\} \quad (5.110)$$

onde $y_r = [y_r(t+1) \quad y_r(t+2) \quad \dots \quad y_r(t+NY)]^T$. Substituindo-se os valores dos vetores da função custo e efetuando-se sua minimização em relação à $\Delta u(t)$, ou seja, $\partial J / \partial \Delta u(t) = 0$ obtem-se

$$J = \mathbb{E} \left\{ [\hat{y}_f(t+j/t) + G_1 \tilde{u} - y_r]^T [\hat{y}_f(t+j/t) + G_1 \tilde{u} - y_r] + \lambda \tilde{u}^T \tilde{u} \right\}$$

$$\partial J / \partial \Delta u(t) = 2 G_1^T G_1 \tilde{u} + 2 G_1^T (y_f - y_r) + 2 \lambda \tilde{u} = 0 \quad (5.111)$$

que fornece o vetor de controle incremental

$$\tilde{u} = \left[G_1^T G_1 + \lambda I \right]^{-1} G_1^T (y_f - y_r) \quad (5.112)$$

Observar que o primeiro elemento de \tilde{u} corresponde a $\Delta u(t)$ de forma que o controle a ser aplicado ao processo será

$$u(t) = u(t-1) + \Delta u(t) \quad (5.115)$$

5.6.3 - Implementação na coluna de destilação

O algoritmo foi implementado utilizando-se o mesmo modelo reduzido de segunda ordem já introduzido nas seções anteriores :

0) Especificar os valores dos horizontes de predição NY, controle NU e a ponderação λ do controle

1) Estimar os parâmetros do sistema (A,B) utilizando o algoritmo recursivo dos mínimos quadrados fatorado segundo a técnica UD:

$$\Delta y(t) = \theta^T(t) \phi(t-1) + e(t)$$

$$\theta^T = [a_1 \ a_2 \ b_1 \ b_2 \ b_3]$$

$$\phi(t-1) = [-\Delta y(t-1) \ -\Delta y(t-2) \ \Delta u(t-2) \ \Delta u(t-3) \ \Delta u(t-4)]$$

2) Construir a matriz G_1 definida pela equação (5.106)

$$G_1 = \begin{bmatrix} g_0 & \dots & 0 \\ g_1 & g_0 & \dots & 0 \\ g_2 & g_1 & g_0 & \dots & 0 \\ g_{NY-1} & \dots & g_{NY-NU} \end{bmatrix}$$

$$g_0 = b_0, \quad g_j = b_j - \sum_{i=1}^z a_i g_{j-i}$$

3) Calcular o vetor de predições

$$\hat{y}_f(t+k/t) = -\sum_{i=1}^{NA} \hat{y}_f(t+k-i/t) + \sum_{i=1}^{NB} b_i \Delta u(t+k-i-1)$$

para $j=1(1)NY$ com $\Delta u(t+i) = 0$ para $i \geq 0$

4) Calcular o valor do sinal de controle para o próximo estágio

$$u(t) = u(t-1) + g^T (\hat{y}_f - y_r)$$

onde g^T é a primeira linha de $\left[G_1^T G_1 + \lambda I \right]^{-1} G_1^T$

5) Aplicar o controle $u(t)$ e repetir os passos (1) a (4) para cada instante de amostragem.

5.7 - Controlador com Tempo de Estabilização Finito

O controlador adaptativo com tempo de estabilização finito, e comportamento deadbeat utiliza como critério de projeto o cancelamento dos polos do projeto (e não dos zeros), contrariamente ao procedimento convencional utilizado para o adaptativo auto-ajustável [Aström,1973] que cancela os zeros (e não os polos do processo). Este controlador apresenta como uma característica básica sua extrema simplicidade de implementação e sintonia : não existem ponderações aplicadas ao sinal de controle a serem ajustadas ou cálculo de previsões da saída do processo.

O algoritmo implementado foi o controlador de ordem normal proposto por Matko [Matko,1984], baseado em Isermann [Isermann,1981]. Considerando-se um modelo posicional para o processo

$$A(z^{-1})y(t) = B(z^{-1})u(t-k) + C \quad (5.116)$$

onde os diversos símbolos são definidos como anteriormente, com a ressalva que os sinais de entrada e saída do processo são agora posicionais; C representa a relação em regime entre $u(t)$ e $y(t)$ podendo ser calculada, por exemplo, a partir de [Isermann,1981]

$$C = A(1)y_0 - B(1)u_0 \quad (5.117)$$

Para cálculo da lei de controle calcula-se a equação em malha fechada do processo, para uma alteração em degrau na referência, efetuando-se a seguir o cancelamento dos polos [Isermann,1981; Matko,1984]; chega-se assim diretamente a

$$u(t) = \hat{B}^{-1}(1) \left\{ \hat{A}(z^{-1})[y_r(t) - y(t)] + \hat{B}(z^{-1})u(t-k) \right\} \quad (5.118)$$

que representa a lei de controle para o controlador.

Aplicado às condições da coluna o algoritmo final ficou com a seguinte configuração :

- 1) Estimar os parâmetros do sistema (A,B) utilizando o algoritmo recursivo dos mínimos quadrados fatorado segundo a técnica UD:

$$y(t) = \theta^T(t)\phi(t-1) + e(t)$$

$$\theta^T = [a_1 \ a_2 \ b_1 \ b_2 \ b_3]$$

$$\phi(t-1) = [-y(t-1) \ -y(t-2) \ u(t-2) \ u(t-3) \ u(t-4)]$$

- 2) Calcular a lei de controle

$$u(t) = \hat{B}^{-1}(1) \left\{ \psi + \zeta \right\},$$

onde $\hat{B}(1) = \sum_{i=0}^2 b_i$ e os termos

$$\psi = [y_r(t) - y(t)] + a_1[y_r(t-1) - y(t-1)] + a_2[y_r(t-2) - y(t-2)]$$

$$\zeta = b_1 u(t-2) + b_2 u(t-3) + b_3 u(t-4)$$

3) Aplicar a lei de controle $u(t)$ e repetir este procedimento para cada instante de amostragem.

5.8 - Simbologia

$A(z^{-1}), B(z^{-1})$ = polinômios associados ao modelo do processo

$T(z^{-1})$ = polinômio associado aos polos de malha fechada do processo.

$F(z^{-1}), G(z^{-1})$ = polinômios associados à equação diofantina

$P(z^{-1}), Q(z^{-1}), R(z^{-1})$ = polinômios de sintonia do controlador associado à função custo.

J = função custo associada ao algoritmo de controle

d = nível contínuo na equação (5.1)

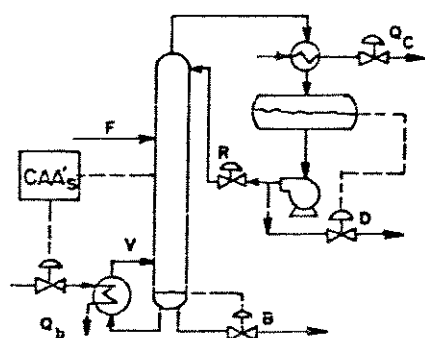
$K(y)$ = função não linear na equação do modelo reduzido não linear da coluna.

$Y_i(t-1)$ = função não-linear genérica associada à equação (5.1)

CAPÍTULO 6 : IMPLEMENTAÇÃO DOS ALGORITMOS ADAPTATIVOS

6.1 - INTRODUÇÃO

Este capítulo trata dos procedimentos de sintonia e dos resultados obtidos para os algoritmos de controle adaptativos auto-ajustáveis descritos no capítulo anterior quando aplicados à coluna de destilação de alta pureza. Como já descrito anteriormente os algoritmos foram implementados em versão monovariável que representava, de imediato, nosso maior interesse. A concepção de controle utilizada baseou-se numa estratégia adotando a clássica concepção V/F [McCune,1973]. Nesta concepção utiliza-se como variável de controle a energia fornecida ao refulvedor que age diretamente sobre a quantidade de vapor gerado na base da coluna; o problema do atraso acarretado pelas dimensões da coluna é minorado utilizando-se como variável controlada não a composição no destilado, mas a temperatura em um estágio intermediário que fornece informação sobre a composição do topo, se a pressão do sistema é constante (figura 6.1). Esta concepção de controle pode gerar erros de regime na composição do topo quando o processo sofrer alteração de carga em virtude do novo perfil térmico assumido pela coluna; tal dificuldade é sanada na prática super-dimensionando-se a coluna ou a vazão do refluxo [Tyreus,1976]; para o nosso caso utilizaremos a coluna como projetada, sem qualquer alteração.



F - alimentação, moles/h
 V - vazão de vapor, moles/h
 R - taxa de refluxo
 B - vazão na base, moles/h
 D - vazão no topo, moles/h
 Q_b - energia na base, Mcal/h
 Q_c - energia no destilado, Mcal/h

Figura 6.1 - Concepção de controle V/F.

A definição e escolha adequada de malhas de controle para colunas de destilação constitui um assunto bastante controverso [Nisenfeld,1981; Shinsky,1983; McAvoy,1981; Bojnowski,1976, Cheung,1982]. Nossa escolha desta concepção decorreu de algumas características da mesma :

1) tempo de resposta : os vapores se deslocam mais rapidamente que os líquidos no interior da coluna, diminuindo o atraso no tempo de resposta do processo, que seria consideravelmente maior no caso da utilização do refluxo como variável de controle.

2) experiência anterior : os trabalhos na área de coluna de alta-pureza citados utilizam preferencialmente esta concepção [Luyben,1970,1972,1973,1975; Georgakis,1988; Fuentes,1983]

3) condições operacionais da coluna : para colunas com a taxa de refluxo como a utilizada ($R/D \cong 1,5$) alguns autores recomendam a concepção utilizada [Shinsky,1981,1984].

6.2 - Estimação de parâmetros

A estimação de parâmetros para o estabelecimento das funções de transferência da coluna e conseqüentemente, a adequada lei de controle revelou-se, como era esperado, um procedimento árduo e laborioso. Os problemas relacionados com a identificação de parâmetros de funções de transferência associada a colunas de destilação constitui assunto bastante discutido e elaborado na literatura [Söderstrom,1973; Shelton,1968; Kershenbaum, 1981; Foulard, 1972; van Aarle, 1971; Hammarström,1982; Ohno,1984], fato este plenamente compreensível já que se tenta exprimir uma dinâmica extremamente complexa mediante relações lineares simplificadas. O estabelecimento destas funções, para o caso das colunas de destilação de alta pureza ganha destaque especial face ao agravamento das complexidades, como já discutido ao longo deste trabalho e assinalado por alguns autores [Fuentes,1983; Georgakis,1988]. Esta dificuldade levou autores como Luyben a propor metodologia específica para a determinação de funções de transferência adequadas a colunas de destilação de alta pureza [Luyben,1987] .

Muitas das dificuldades acima mencionadas referem-se à determinação dos parâmetros associados às funções de transferência estimados em caráter "off-line". Para o caso dos controladores adaptativos ,que utilizam a atualização do modelo do processo através de uma estimação "on-line" em resposta a perturbações no processo com conseqüente alteração dos parâmetros estas dificuldades são particularmente destacadas, mesmo para colunas de baixa e média pureza . Tais dificuldades, que certamente se exarcebam para colunas de alta pureza, talvez expliquem o fato de que todos os trabalhos ligados ao controle das mesmas utilizem modelos a parâmetros constantes, tratando as complexidades mediante transformações não-lineares [Mountiziaris,1988; Georgakis,1988] evitando assim o

problema de atualização do modelo "on-line" mediante estimação recursiva.

Os problemas relacionados com a estimação dos parâmetros do processo, bem como os procedimentos adotados para sua solução foram comuns a todos os controladores, razão pela qual serão tratadas de forma mais genérica. Os problemas específicos associados à cada algoritmo (como, p. ex., o nível contínuo do algoritmo não-linear) serão discutidos juntamente com os resultados obtidos para cada algoritmo. A estimação dos parâmetros, como já comentado no capítulo anterior, foi efetuada utilizando-se o algoritmo dos mínimos quadrados recursivo fatorado segundo a técnica UD de Biermann [Biermann,1978]. A primeira providência adotada consistiu em medir o atraso do processo para a malha considerada. Para tal, com o processo em malha aberta, introduziu-se uma perturbação na variável de controle, no caso a energia fornecida ao refervedor, que foi alterada de 127,223 Mcal/h para 128,00 Mcal/h, monitorando-se a temperatura no estágio número 11 da coluna (contado a partir da base), escolhido como saída do processo [Tolliver,1980; Shunta,1971]. O tempo decorrido entre a introdução da perturbação e o início da alteração da temperatura no estágio 11 foi de $\cong 1,5$ minutos. A constante de tempo do processo, que para uma coluna de destilação é geralmente adotada, para finalidades práticas, como [Mah,1962]

$$\tau = \left\{ \sum_{i=1}^{NT} U_i + U_R + U_B \right\} / R \quad (6.1)$$

onde U_i representa a retenção molar no i -ésimo estágio, U_R o volume no tanque do refluxo, U_B a retenção na base e R a vazão do refluxo foi $\cong 12$ minutos, com o período de amostragem tendo sido estabelecido em $1/10$ deste valor, 1,2 minutos. O valor de k nas equações discretas do modelo do processo foi avaliado pela relação [Agarwall,1988]

$$(k-1)T_s \leq d \leq k T_s \quad (6.2)$$

onde k é a atraso no modelo discreto, d' é o atraso do processo e T_s o período de amostragem. O valor de k que satisfaz a relação foi adotado igual a 2.

Para se obter uma estimativa inicial o vetor de parâmetros θ foi inicializado com valores nulos e a dinâmica do processo simulada durante três horas, duas das quais excitado através da introdução de um Sinal Pseudo-aleatório (" Pseudo Random Signal - PRS ") na vazão de alimentação com amplitude máxima igual a $\pm 5,0 \%$ de seu valor de regime, gerando um sinal suficientemente rico e que pudesse excitar o processo em todos os seus modos de frequência. Para estas estimativas iniciais a matriz de covariância P foi inicializada com um valor igual a $10^3 I$, onde I é a identidade. Ao final da simulação, verificou-se, contudo, que a convergência dos parâmetros não havia sido boa, fato este decorrente provavelmente dos seguintes aspectos :

1) a excitação com o sinal pseudo aleatório, embora bastante rica no tocante à amplitude de seus valores, gerava determinados valores de baixa amplitude, que não chegavam a excitar a coluna, processo este bastante estável e com larga constante de tempo.

2) em virtude do processo se encontrar em malha aberta, a volta ao estado de regime não ocorria dentro do período estipulado para a simulação, necessitando um tempo sensivelmente maior para este retorno.

Face à esta situação foram efetuados os seguintes procedimentos : o sinal de excitação foi alterado para Sinal Binário Pseudo-Aleatório ("Pseudo Random Binary Signal = PRBS ") com amplitudes de $\pm 5,0 \%$ do valor nominal de regime da vazão de alimentação; introduziu-se, adicionalmente, um PRBS na vazão do refluxo com amplitude igual a $\pm 5,0 \%$ de seu valor nominal e a opção

de se fechar a malha com um controlador PI em instante determinado pelo usuário. Esta opção de se utilizar um PI durante o período de comissionamento foi utilizada para a sintonia dos dois primeiros controladores implementados (Adaptativo Auto-Ajustável Linear e Não-Linear); para a sintonia dos algoritmos restantes a malha foi fechada diretamente com o controlador adaptativo utilizando dois saturadores (para os valores máximos e mínimos da lei de controle) até que os parâmetros alcançassem a convergência final e o processo se estabilizasse. Para todas estas simulações a matriz de covariância P foi inicializada com um valor igual a $10^3 I$. Conseguiu-se, desta maneira, um conjunto de parâmetros adequados para os diversos algoritmos.

Procurou-se então avaliar inicialmente a performance dos algoritmos mediante a introdução de perturbações no processo, na forma de alterações diversas de carga (variações positivas e negativas da vazão e concentração da alimentação) e da referência. Para estes casos os parâmetros foram inicializados com os valores preliminarmente obtidos na estimação; a matriz P foi reduzida para valores na faixa de $P_0 = 10 I$, visto que já se tinha uma estimativa preliminar dos parâmetros, com um fator de esquecimento igual a 0,99 no estimador. Os resultados preliminares mostraram os seguintes problemas :

-quando da introdução de perturbação no processo, que acarretava variação nos parâmetros do sistema, o traço de P decrescia rapidamente ocasionando nova convergência dos parâmetros, com a lei de controle passando por um período de oscilação que, por vezes, desestabilizava o processo.

-após esta nova convergência o estimador, com o traço de P próximo de zero, ficava inoperante ("asleep"), sendo incapaz de detectar novas perturbações no processo, com o controle não respondendo eficientemente ou desestabilizando o processo, dependendo da alteração introduzida no processo.

-a diminuição do fator de esquecimento do estimador melhorou o desempenho do controlador em alguns casos, mais especificamente quando as perturbações eram introduzidas à intervalos não muito distanciados, não deixando ocorrer o fenômeno de "blow-up"; se o processo se mantinha em regime por um período de tempo maior, devido ao baixo fator de esquecimento, o aumento excessivo do traço de P gerava os problemas de instabilidade acima mencionados.

Face à estes problemas optamos por outra técnica : monitorar o erro existente na estimação dos parâmetros , juntamente com o traço da matriz P do estimador. No caso de ocorrerem perturbações no processo, alterando seus parâmetros, não estando o estimador em condições de responder eficientemente à esta nova situação devido ao seu baixo traço, o erro na estimação tenderá a crescer. Neste caso a matriz P será reinicializada para valores altos (tipicamente, 10 a $20 P_0$). Esta técnica foi então implementada no estimador, com melhoria sensível no desempenho do controlador , evitando não só o problema de insensibilidade do estimador como também o fenômeno de "blow-up"; para estes casos utilizou-se um fator de esquecimento na faixa de 0,99.

Alguns problemas, contudo, continuaram a ocorrer : quando da reinicialização do estimador, o alto traço de P ocasionava oscilação dos parâmetros durante algumas iterações até que os mesmos convergissem para o novos valores; durante estas iterações , com os parâmetros oscilantes o comportamento do controlador ficava degradado, chegando, por vezes, a desestabilizar o processo. Esta situação exigiu a introdução de mais uma técnica auxiliar para o estimador : o estabelecimento de uma região de máxima variação aceitável para os parâmetros, região esta delimitada por um erro pré-estabelecido na estimação. Caso os parâmetros se mantivessem no interior desta região, mesmo quando da introdução de perturbações e reinicialização de P os mesmos seriam utilizados para cálculo da lei de controle; caso contrário os valores estimados seriam desprezados, adotando-se então os parâmetros contidos dentro da região

considerada.

Para delimitação desta região procedimentos diversos podem ser adotados : cálculo do ganho da função de transferência do modelo estimado verificando se os valores obtidos são realistas [Vogel,1982]; alocação dos polos do modelo estimado [Seborg,1986]; estabelecimento de horizontes variados de estimação [Coelho,1988]. Alguns destes procedimentos, contudo, poderiam ser problemáticos se implementados à coluna, como por exemplo, o cálculo do ganho do processo, que apresenta variações extremadas (ver capítulo 4). A implementação utilizada foi menos complexa : monitorar o erro na estimação, $e_y = y(t) - \hat{y}(t)$, a cada iteração; se e_y estiver abaixo de um valor pré-estabelecido, armazenar os parâmetros e atualizá-los na lei de controle; caso contrário desprezá-los e utilizar o último conjunto armazenado.

Em casos de perturbações de maior magnitude os parâmetros podem permanecer "congelados" durante várias iterações com a convergência ocorrendo em uma nova região diferente da anteriormente utilizada, com a troca para os novos valores ocasionando flutuações indesejáveis na lei de controle; para evitar este problema os parâmetros, bem como o valor de referência, foram atualizados através de um filtro de primeira ordem

$$\hat{\theta}_c(t) = \rho \theta_c(t-1) + (1,0 - \rho)\hat{\theta}(t)$$

onde $\hat{\theta}(t)$ é o vetor atual de parâmetros , $\hat{\theta}_c(t)$ os parâmetros utilizados na atualização da lei de controle e ρ o valor de corte do filtro. Este procedimento é particularmente relevante para variações nos valores da referência que são utilizados diretamente na lei de controle, podendo também ocasionar variações bruscas na mesma.

Este conjunto de procedimentos aplicados ao estimador garantiu, finalmente, o estabelecimento de uma lei de controle adequada, com capacidade de rejeição de carga e rastreamento de referência. Esta sequência ficou implementada no estimador da seguinte forma :

0) Fornecer o valor de P_0 , o erro máximo admissível na estimação (E_{max}), para reinicialização de P_0 , o erro máximo aceitável para utilização dos atuais parâmetros (E_{cong}), o multiplicador (m) de P_0 , a constante ρ do filtro e o traço mínimo T_{min} aceitável para $P(t)$.

1) Avaliar o erro na estimação $e_y = y(t) - \hat{y}(t)$ (calculado na estimação como multiplicador do ganho de Kalman)

2) Se $e_y \leq (E_{max})$, armazenar o vetor $\hat{\theta}(t)$ e prosseguir no passo 4; caso contrário continue.

3) Se $e_y \geq (E_{cong})$ fazer $\hat{\theta}(t) = \hat{\theta}_c(t)$ e avaliar o traço de $P(t)$:

3.1 - Se traço de $P(t) \leq T_{min}(t)$ reinicializar $P(t) = m P_0$

3.2 - Se traço de $P(t) \geq T_{min}(t)$ prosseguir no passo 4.

4) Filtrar os parâmetros e a referência pela equação

$$\hat{\theta}_c(t) = \rho \theta_c(t-1) + (1,0 - \rho) \hat{\theta}(t) ,$$

calcular o controle e retornar ao início.

6.3 - Algoritmos ; Implementação e Resultados

Estabelecidos estes procedimentos e sintonizados os diversos controladores a performance dos mesmos foi então avaliada para diferentes perturbações de carga e variações de referência . Diferentes situações e sintonias foram testadas; apresentaremos alguns dos resultados obtidos ; outros podem ser encontradas em Gomes [Gomes,1988a,b;1989a,b,c;1990a,b]. Serão apresentados os gráficos das variáveis controlada (temperatura no estágio número 11 da coluna) e de controle (energia fornecida ao refervedor da coluna)

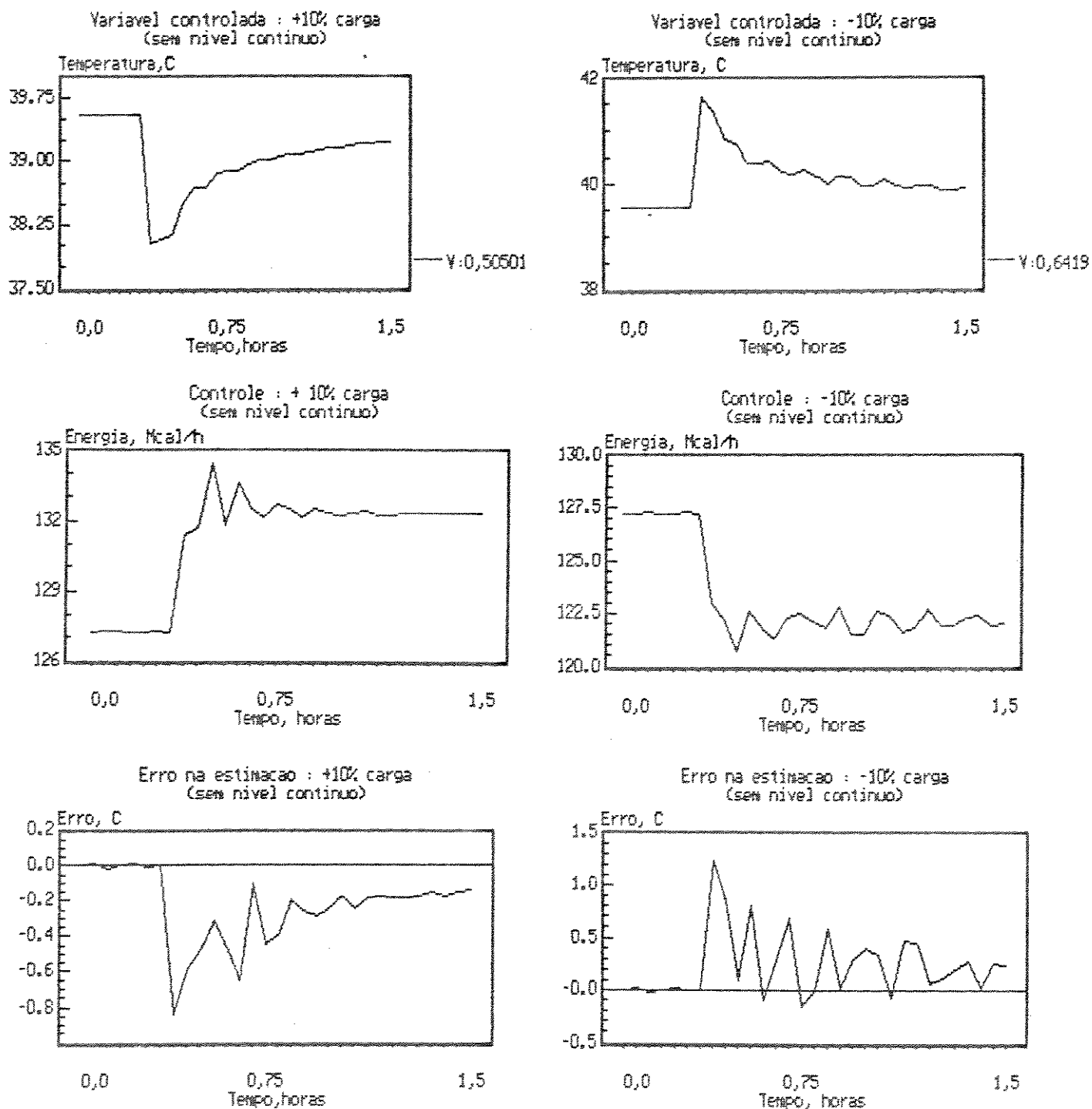


Figura 6.1 - Controlador não-linear sem estimação do nível continuo e com integrador na função custo.

bem como apresenta-se ainda o erro na estimação, que reflete de forma sucinta o comportamento dos parâmetros do processo. A tabela 6.1 mostra as diversas sintonias utilizadas para os diferentes algoritmos. Utilizou-se como critério de comparação da performance dos controladores a variância da saída do processo, mostrada no gráfico correspondente. As figuras contando os resultados dos controladores bem como a variação dos parâmetros são as de número 6.2 até 6.21.

O primeiro resultado (Figura 6.1) mostra a performance do controlador não-linear, implementado inicialmente sem o nível contínuo, porém com integrador na função custo, para variações de $\pm 10\%$ na vazão de alimentação (Perturbação 1). Esta implementação procurou evitar o aparecimento de problemas que podem ocorrer devido à utilização de um valor constante no vetor regressor do estimador [Sripada,1987]. Os gráficos, contudo, mostram a existência de um erro de regime seguindo-se à variação de carga, erro este não eliminado pelo integrador. Pode-se observar ainda os diferentes comportamento exibidos pelo processo, para uma perturbação de mesma magnitude, porém de sinal trocado.

O algoritmo foi então alterado com a introdução de um nível contínuo d na equação do processo, o controle novamente sintonizado e a mesma perturbação de $\pm 10\%$ na vazão de alimentação aplicada ao processo, com os resultados sendo mostrados na figura 6.2. A melhoria introduzida pelo nível contínuo pode ser claramente percebida, tanto para a eliminação do erro de regime como no comportamento da saída do processo, com sua variância caindo praticamente uma ordem de grandeza (0,5050 para 0,0709). A figura 6.3 mostra o comportamento do nível contínuo para as perturbações positivas e negativas de carga. Observa-se ainda que sua nova convergência não ocorre abruptamente, fato este decorrente do fato da melhor sintonia para o sistema estimador/controlador ser obtida para baixos valores de P_0 (ver Tabela 6.1), com sua reinicialização ocorrendo para valores da ordem de $10 P_0$.

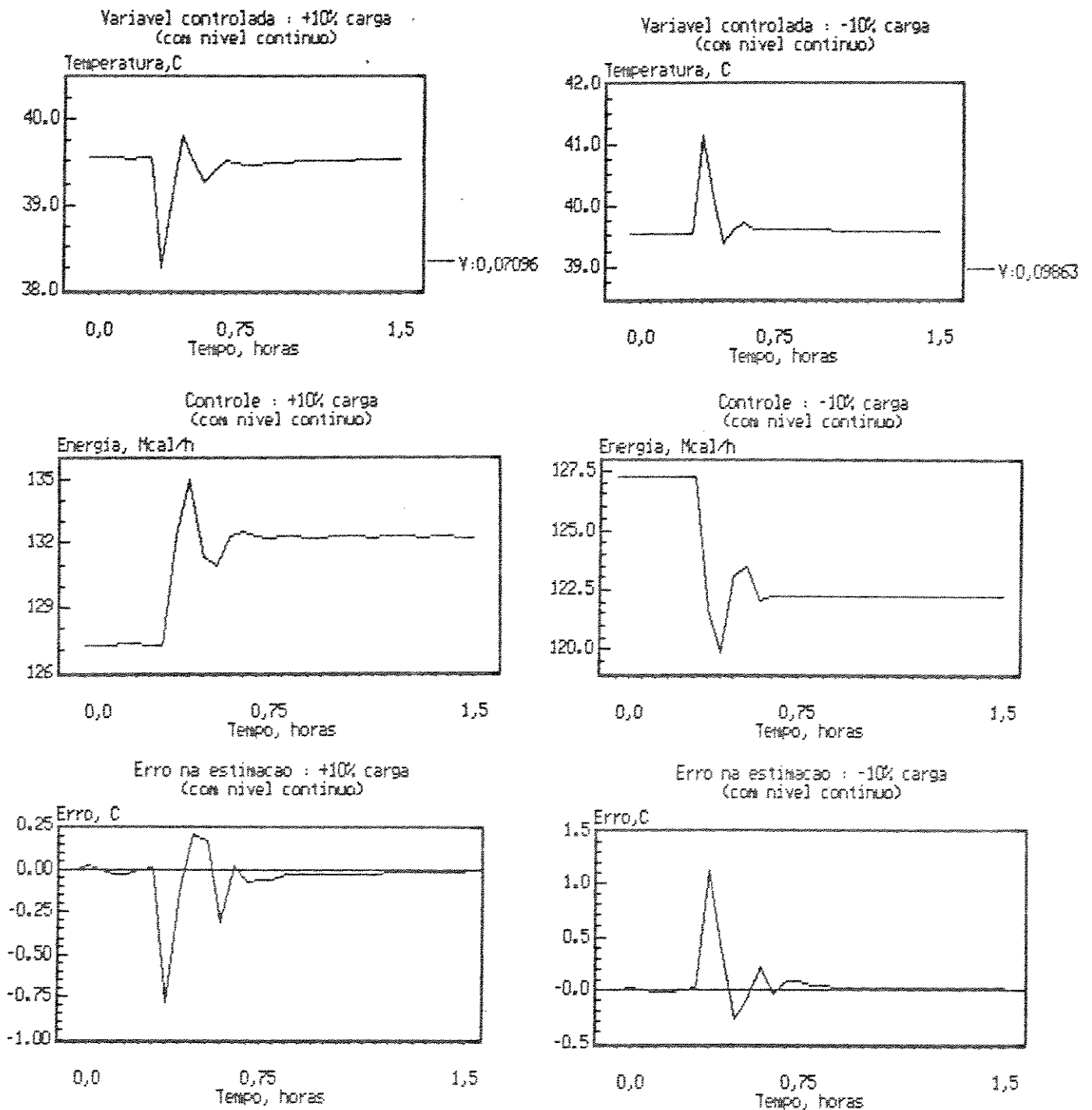


Figura 6.2 - Controlador não-linear com estimação do nível contínuo e com integrador na função custo.

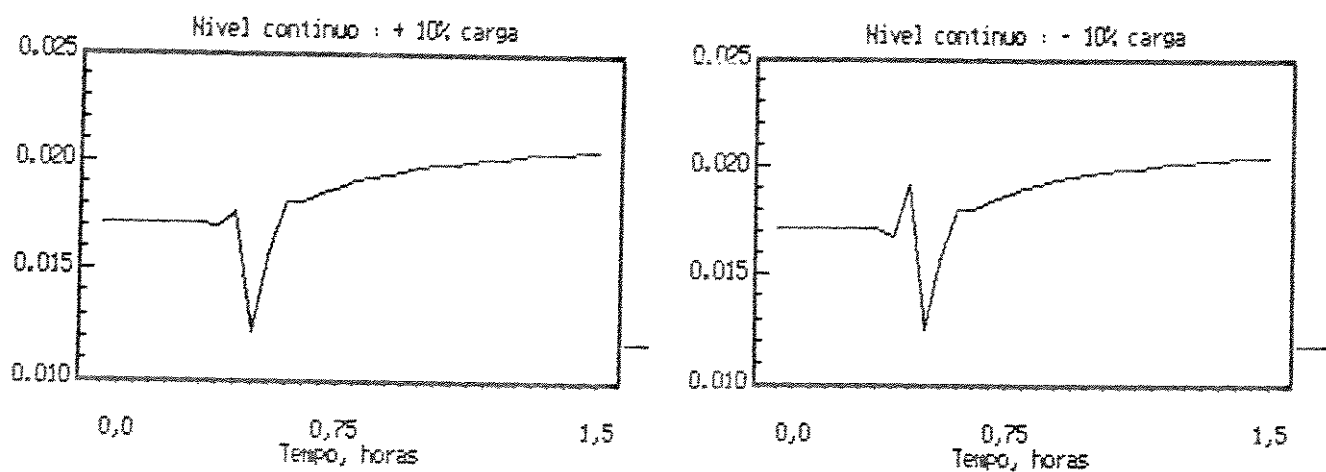


Figura 6.3 - Nível contínuo para perturbações de $\pm 10\%$ de carga.

Utilizou-se, para o caso específico do controlador não-linear, um procedimento adicional sugerido por Agarwal [Agarwal,1988] segundo a linha de "fator de esquecimento direcional" sugerida por alguns autores [Kulhavy,1984; Hägglund,1985] : na ocorrência de perturbações reinicializar somente o elemento da diagonal de $P(t)$ correspondente ao nível contínuo; embora seguindo esta idéia reinicializamos todos os elementos da diagonal de $P(t)$, porém com um valor mais elevado para o elemento correspondente ao nível contínuo ($P(t) = P_0 I$ e $10 P_0 I$, respectivamente).

As figuras 6.4 e 6.5 mostram o desempenho do algoritmo não-linear para variações de $\pm 10\%$ na concentração da alimentação (Perturbação 2) e da referência (Perturbação 3), respectivamente. Observa-se que a alteração na concentração representa uma perturbação mais suave que na vazão de alimentação, conforme já constatado no capítulo 4 (Tabelas 4.18 e 4.20). A situação mais adversa e que melhor exemplifica o caráter não-linear do processo, contudo, é representado pela mudança de referência : embora o

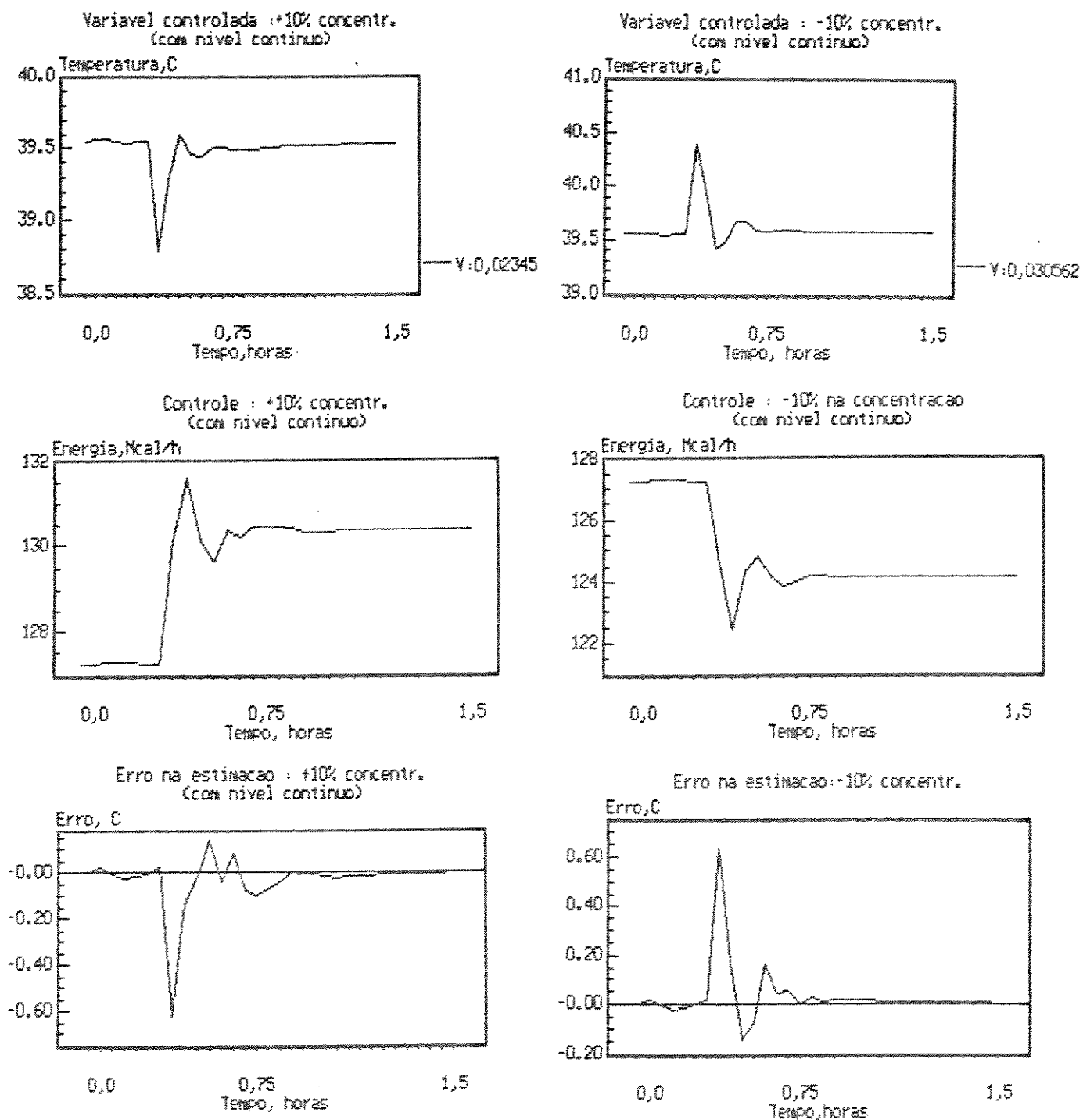


Figura 6.4 - Controlador não-linear com estimação do nível contínuo e com integrador na função custo (mudanças de $\pm 10\%$ na concentração da alimentação).

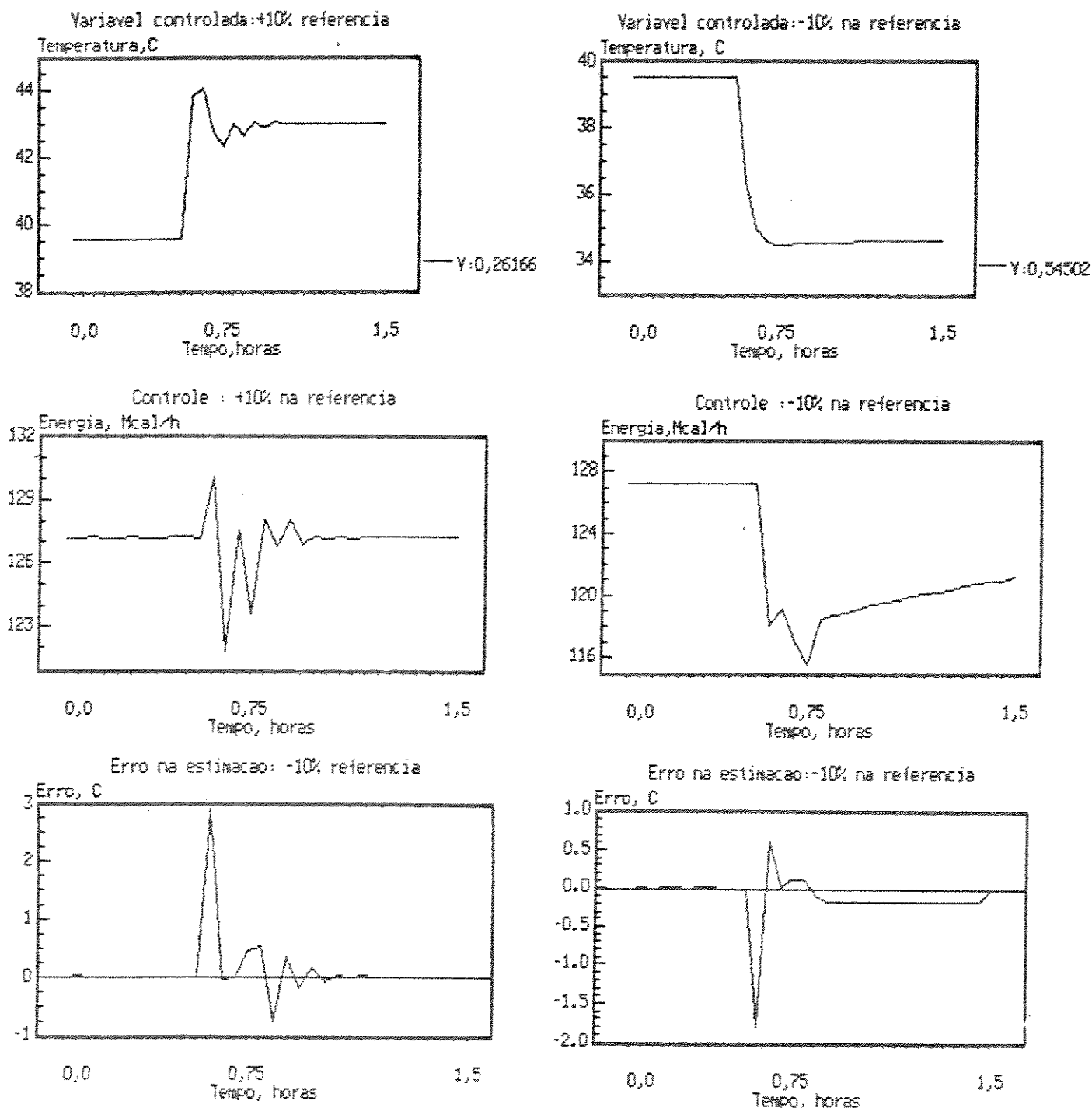


Figura 6.5 - Controlador não-linear com estimação do nível contínuo e com integrador na função custo (mudanças de $\pm 10\%$ na referência do processo).

controlador apresente boa performance para mudanças positivas, ainda que bastante oscilatória, apresenta um tempo de estabilização excessivamente longo para mudanças negativas; este fato representa uma característica do processo, como veremos para os demais controladores, não constituindo uma deficiência do algoritmo não-linear.

Testou-se ainda outra implementação para o algoritmo não-linear utilizando uma função de segunda ordem para $A(z^{-1})$ na equação do modelo reduzido do processo, com a performance destes dois algoritmos sendo comparadas à de um controlador PI discreto : os resultados, contudo, não indicaram melhorias significativas do modelo de segunda ordem em relação ao de primeira , com ambos contudo sendo superiores ao PI ; detalhes da implementação e resultados podem ser encontradas em Gomes [Gomes,1988a,b].

Os resultados do algoritmo linear serão apresentados a seguir. A figura 6.6 mostra a resposta do processo para a perturbação de $\pm 10\%$ na vazão de alimentação. O primeiro ponto a ser destacado é a ausência de erro de regime, consequência do modelo CARIMA utilizado para desenvolvimento do algoritmo; observa-se ainda maior erro na estimação, quando da introdução de perturbações, que o observado para o não-linear. As figuras 6.7 e 6.8 ilustram as perturbações 2 e 3 aplicadas ao processo : observa-se que, em geral, seu comportamento é bom, embora inferior ao não-linear (maiores oscilações e maior variância da saída, para todos os casos). A pior situação é representada pela variação negativa da referência, onde se pode observar um comportamento extremamente degradado.

Os resultados mostrados a seguir (Figuras 6.9, 6.10 e 6.11) são relativos ao controlador linear com alocação de polos para as mesmas perturbações referenciadas como 1, 2 e 3. O comportamento deste algoritmo é particularmente robusto : embora sua variância de saída seja geralmente superior à conseguida para o algoritmo não-linear, pode-se observar, contudo, que a lei de controle é mais

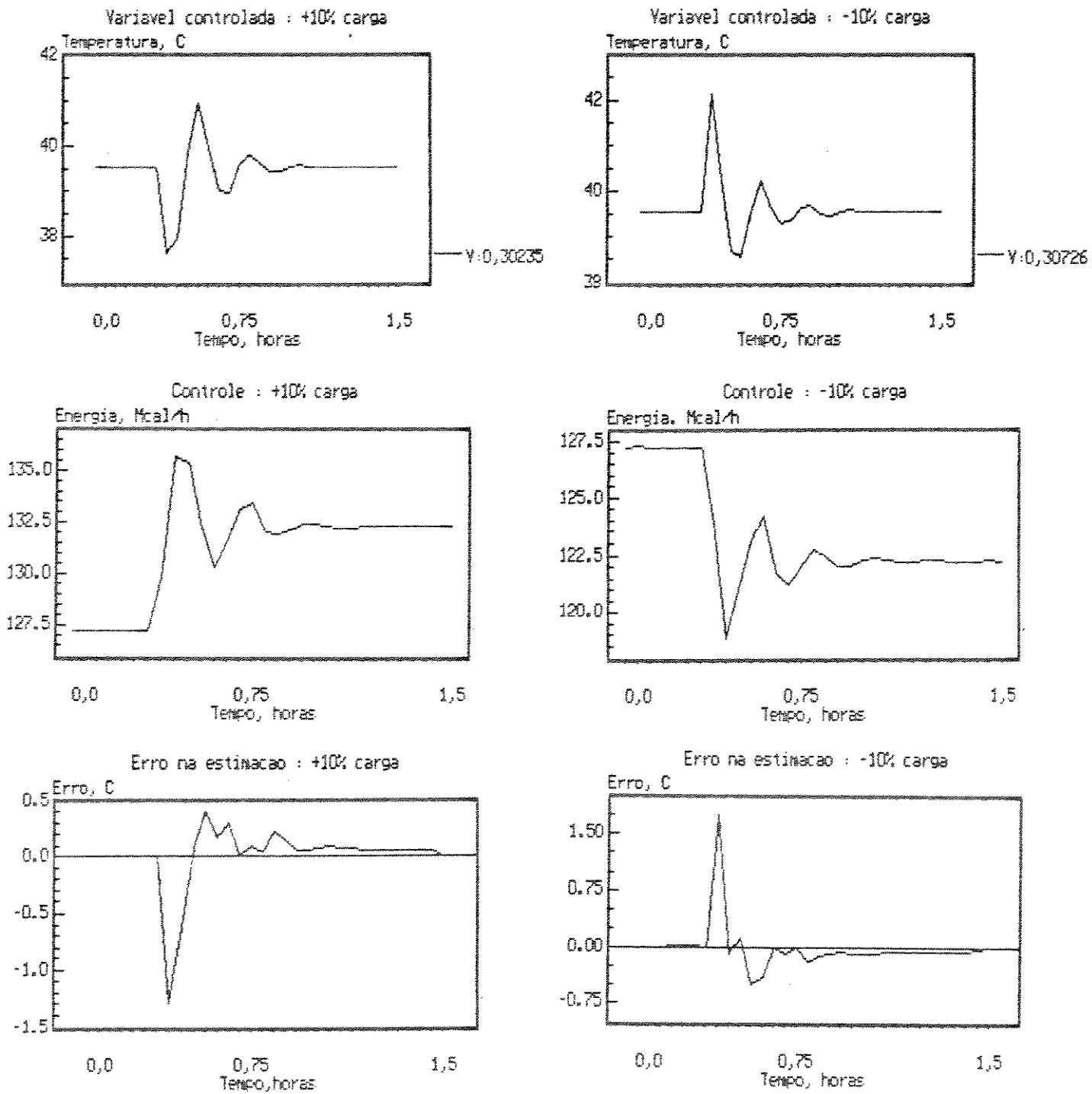


Figura 6.6 - Controlador linear (mudanças de $\pm 10\%$ na vazão de alimentação - Perturbação 1).

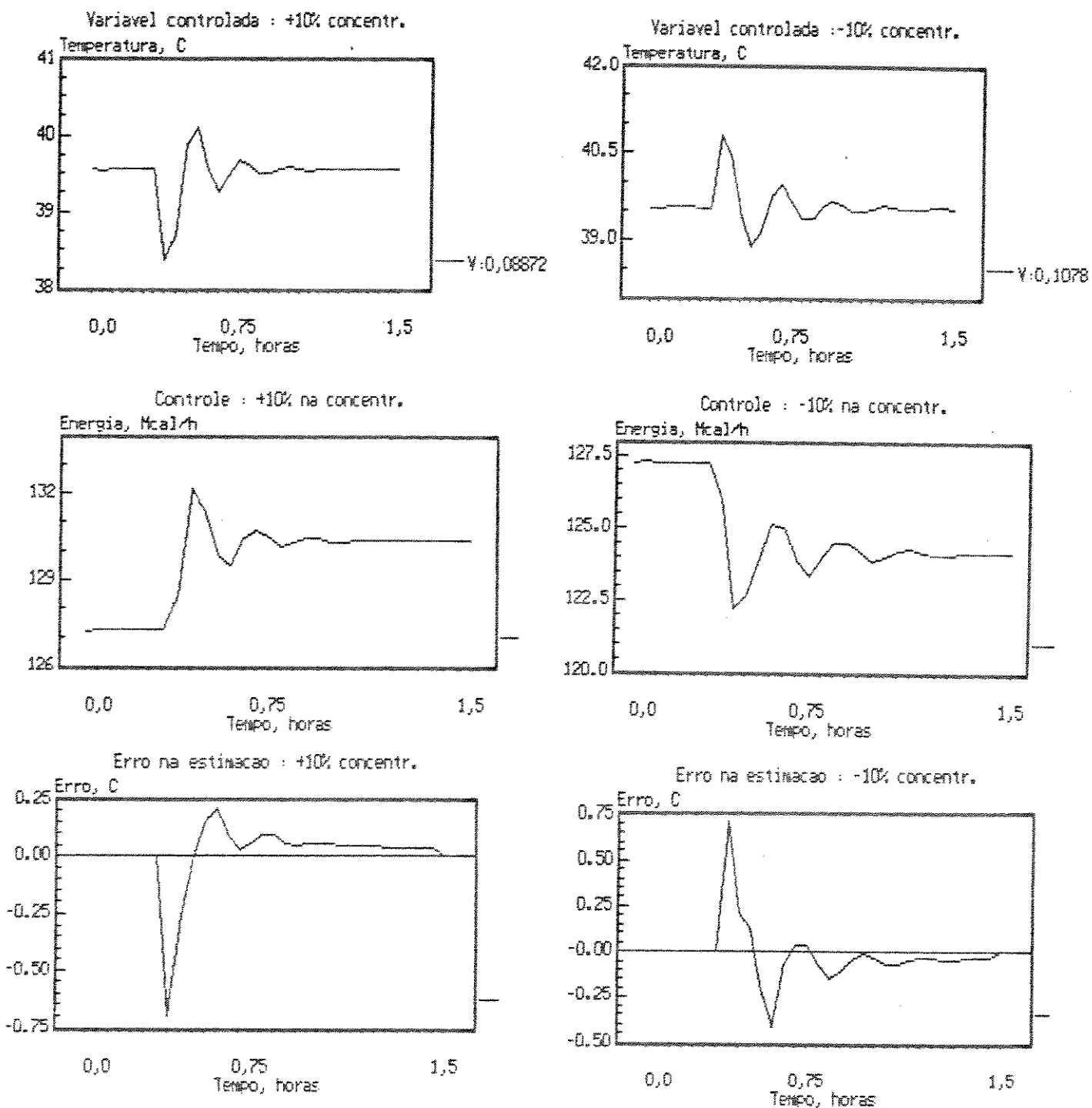


Figura 6.7 - Controlador linear (mudanças de $\pm 10\%$ na concentração da alimentação - Perturbação 2).

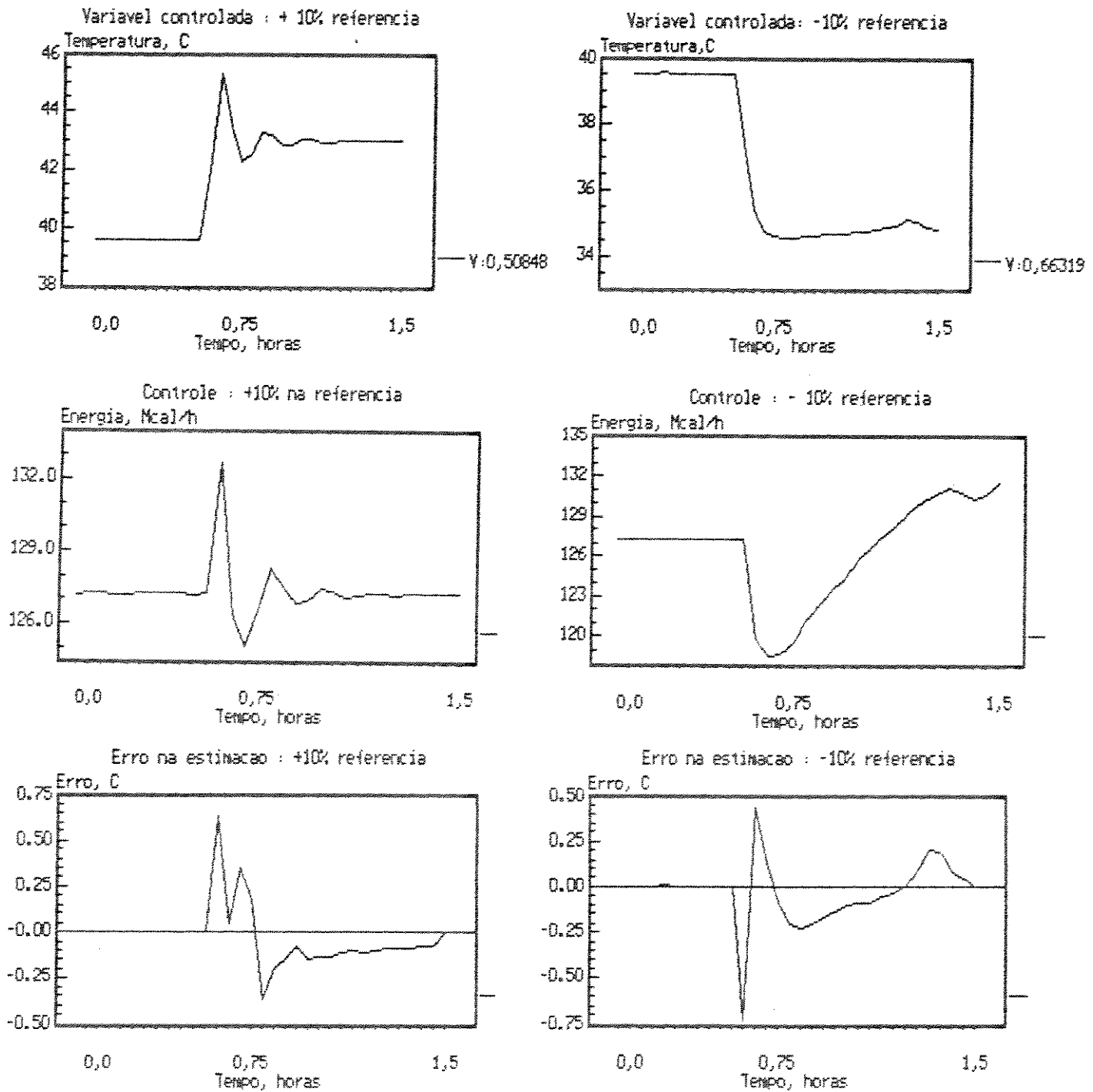


Figura 6.8 - Controlador linear (mudanças de $\pm 10\%$ na referência do processo - Perturbação 3).

suave e bastante definida, praticamente sem oscilações, comportamento este que se reflete de forma satisfatória na saída do processo. Para o pior caso considerado, representado pela alteração negativa de referência, o comportamento deste controlador é surpreendente, considerando-se a performance do algoritmo linear anteriormente mostrada : dentro do tempo estipulado de simulação (1,5 horas) o processo praticamente se estabilizou no novo valor de referência, sem comportamento oscilatório ou degradado.

A maior variância apresentada por este algoritmo pode ser explicada mediante inspeção dos gráficos : o comportamento de sua variável de saída é mais amortecido, consequência certamente da ordem aumentada dos polinômios $P(z^{-1})$ e $Q(z^{-1})$ na função custo, retornando ao valor de regime ou alcançando a nova referência "assintoticamente", com conseqüente aumento no valor da variância.

As figuras 6.12 a 6.17 mostram a performance do controlador preditivo para as mesmas perturbações 1, 2 e 3 utilizando um horizonte de 10 amostragens para a saída do processo (NY) e horizontes de 1 e 5 amostragens para o controle (NU). Vejamos inicialmente a situação $NU = 1$. O comportamento exibido pelo controlador preditivo, principalmente para as perturbações 1 e 2, não apresenta melhorias em relação aos anteriormente analisados, com uma variância de saída de maior valor, apesar de apresentar uma lei de controle sem oscilações ou alterações bruscas. No tocante à perturbação 3, principalmente a variação negativa de referência, sua performance é superior à apresentada pelos demais algoritmos analisados, apresentando menor variância e estabilizando o processo dentro do tempo estabelecido para a simulação. A performance do algoritmo, entretanto, se altera fundamentalmente quando o horizonte do controle é ampliado para $NU = 5$. Nesta situação ele se comporta como o mais eficaz e robusto de todos os controladores até agora analisados, com menor variância da saída e

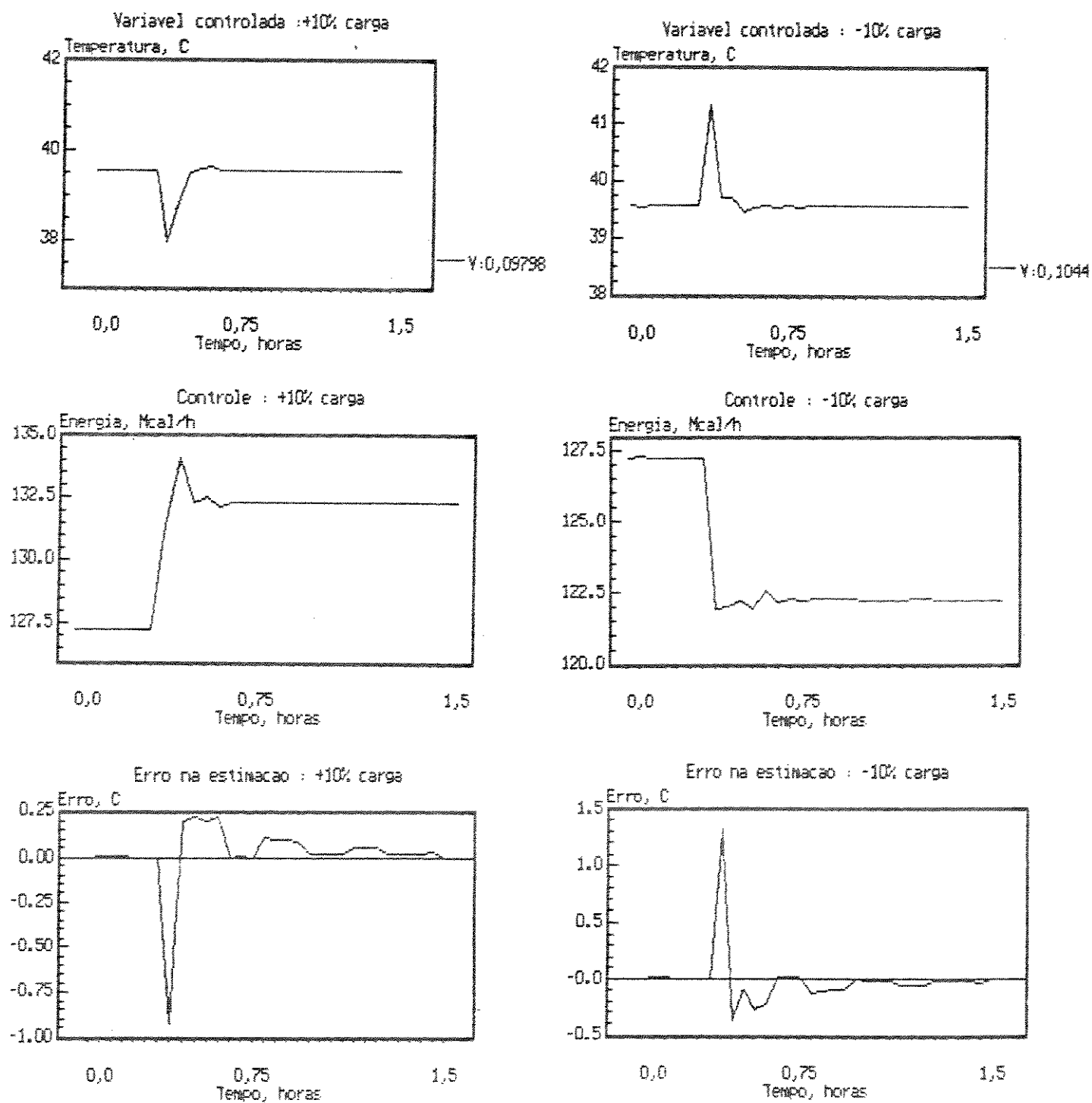


Figura 6.9 - Controlador linear com alocação de polos (mudanças de $\pm 10\%$ na vazão de alimentação - Perturbação 1).

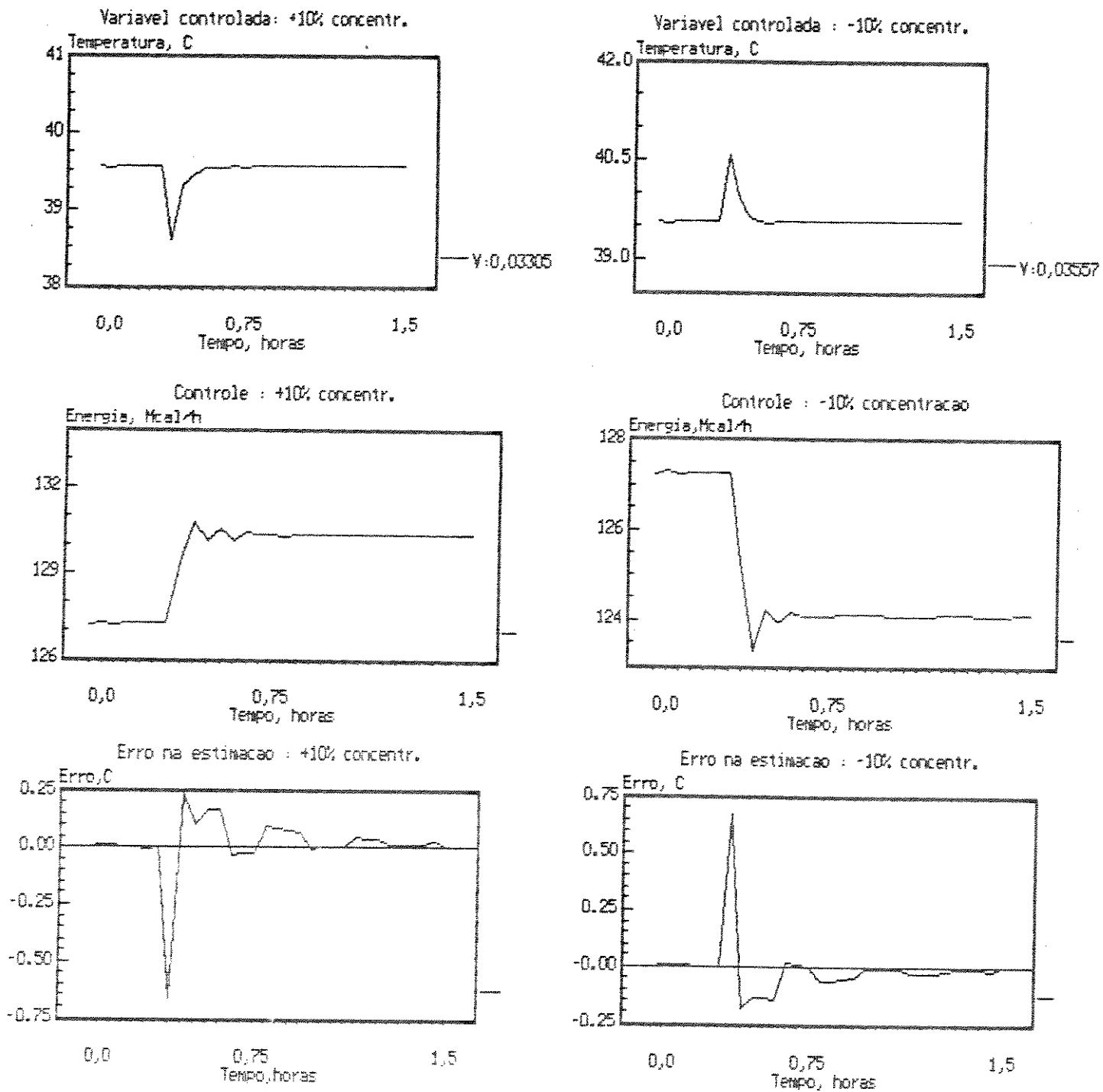


Figura 6.10 - Controlador linear com alocação de polos (mudanças de $\pm 10\%$ na concentração da alimentação - Perturbação z).

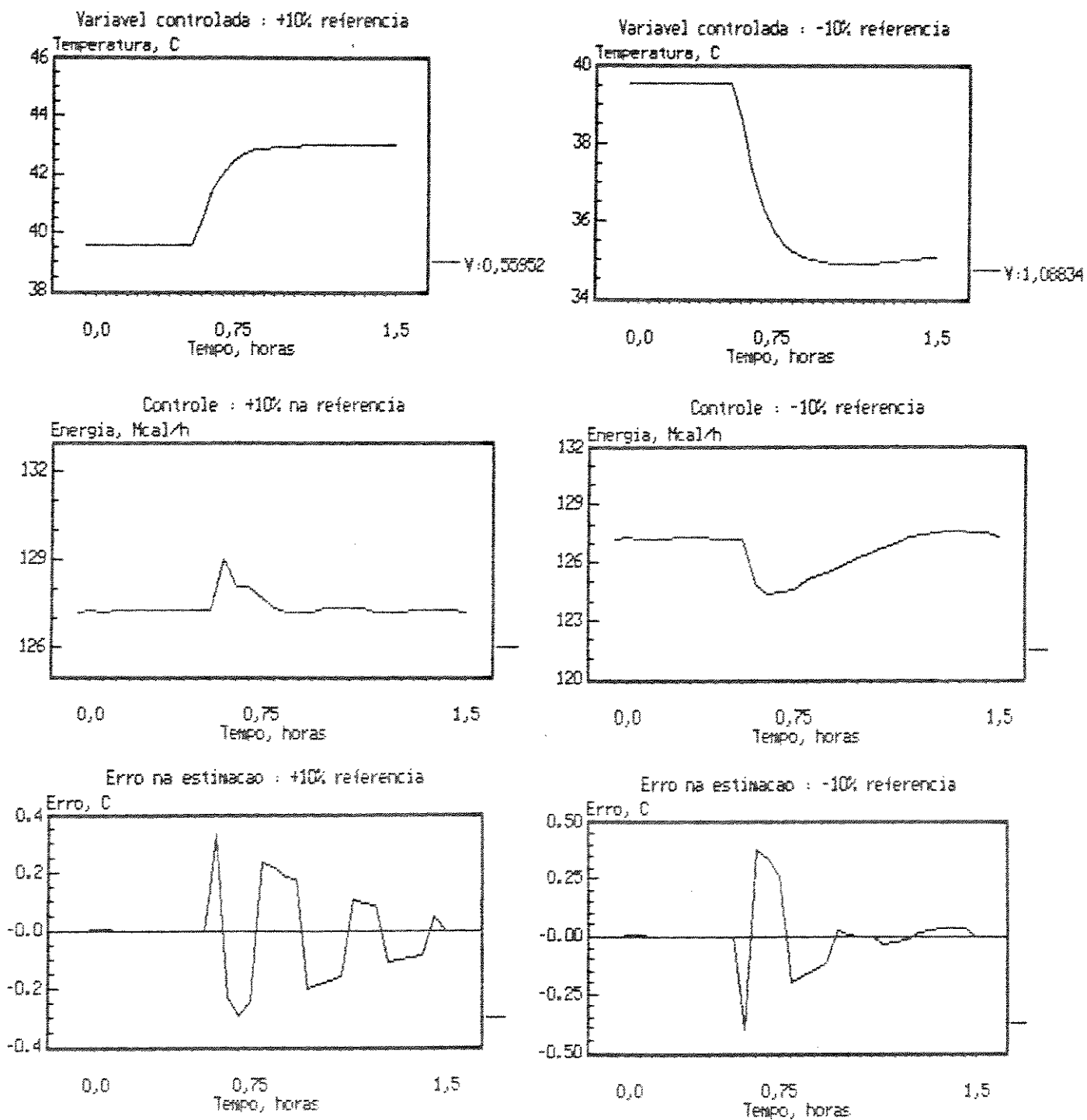


Figura 6.11 - Controlador linear com alocação de polos (mudanças de $\pm 10\%$ na referência do processo - Perturbação 3).

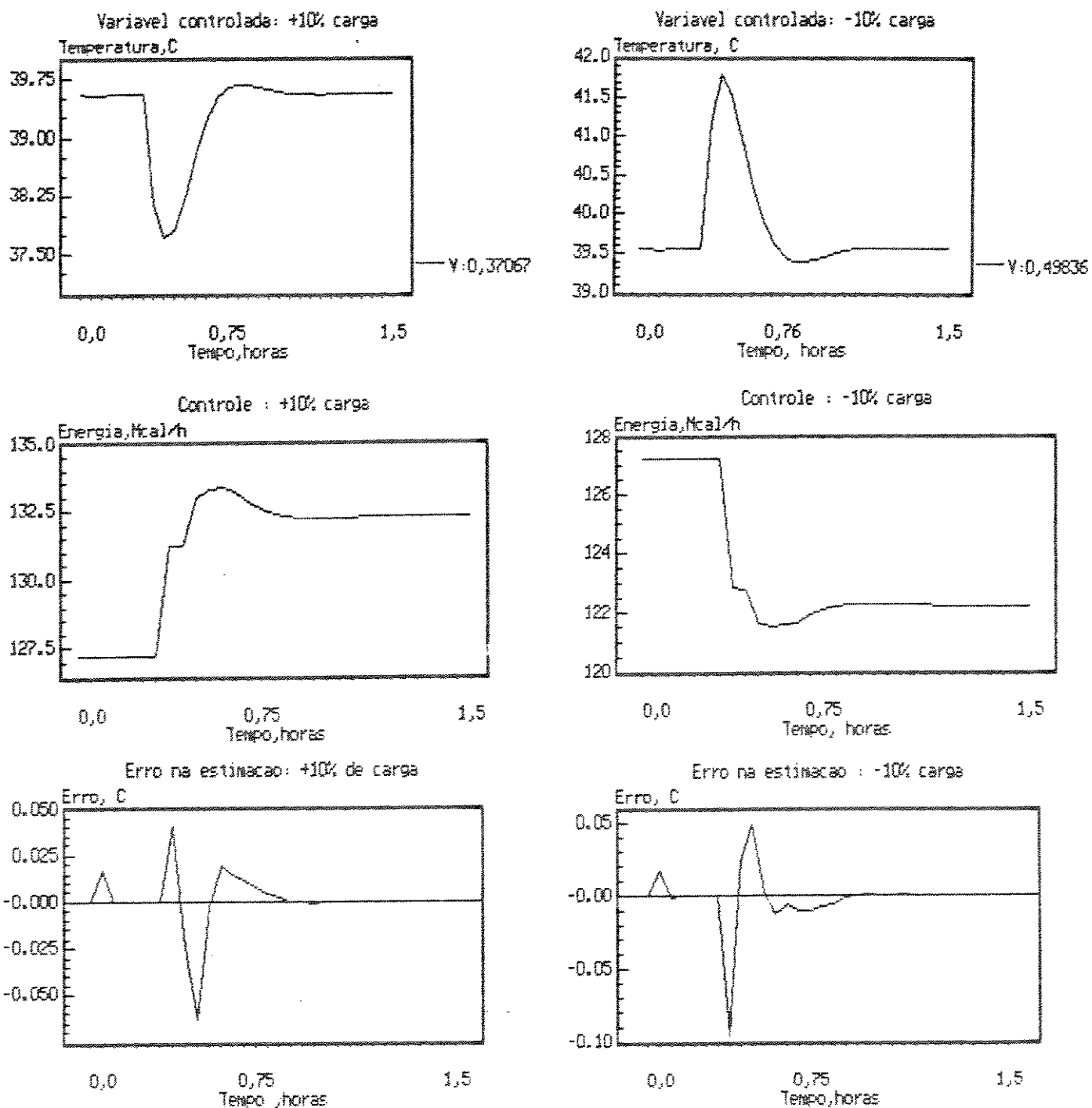


Figura 6.12 - Controlador preditivo com $NY = 10$ e $NU = 1$ (mudanças de $\pm 10\%$ na vazão de alimentação - Perturbação 1).

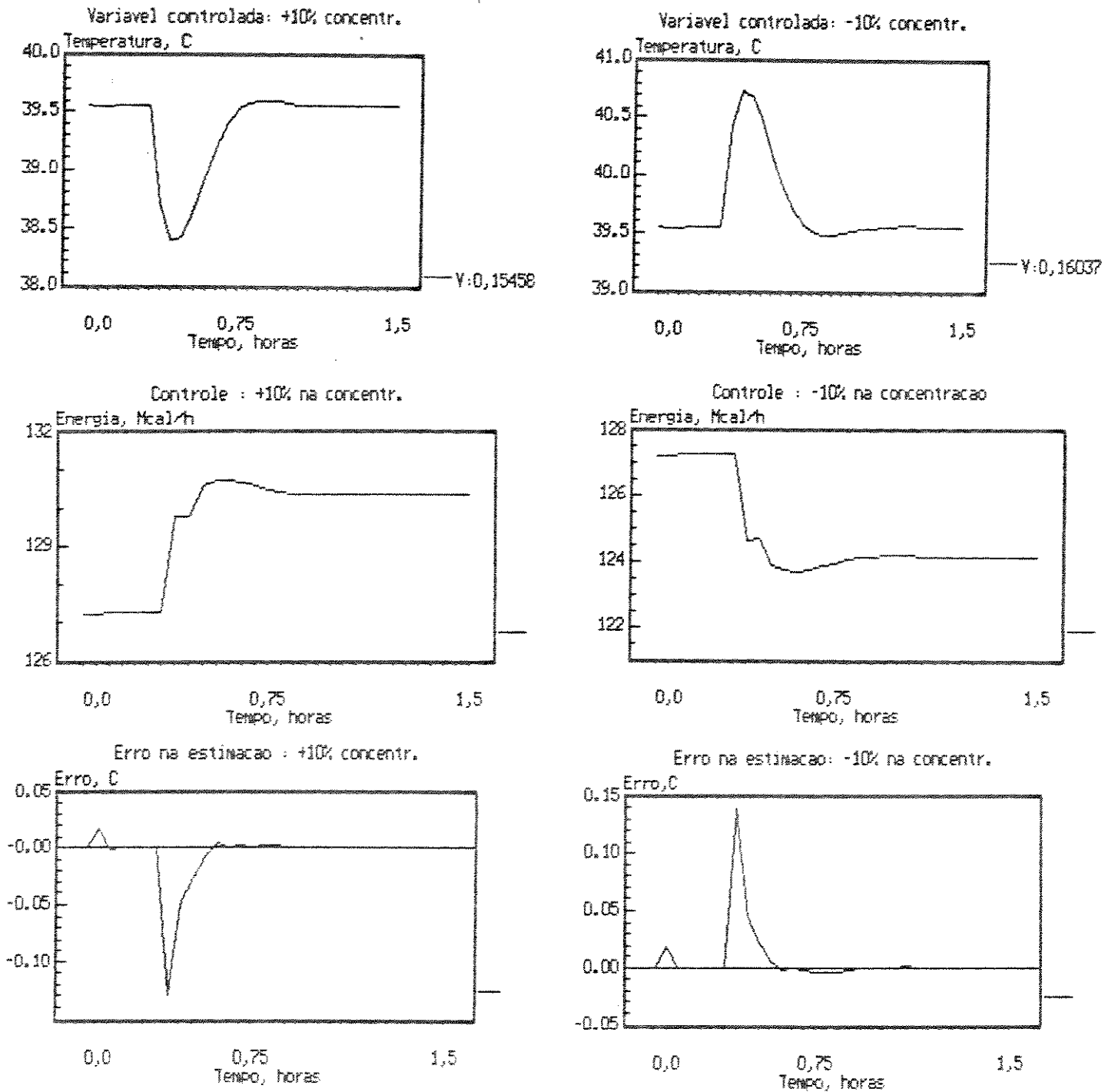


Figura 6.13 - Controlador preditivo com $N_Y = 10$ e $N_U = 1$ (mudanças de $\pm 10\%$ na concentração de alimentação -Perturbação 2)

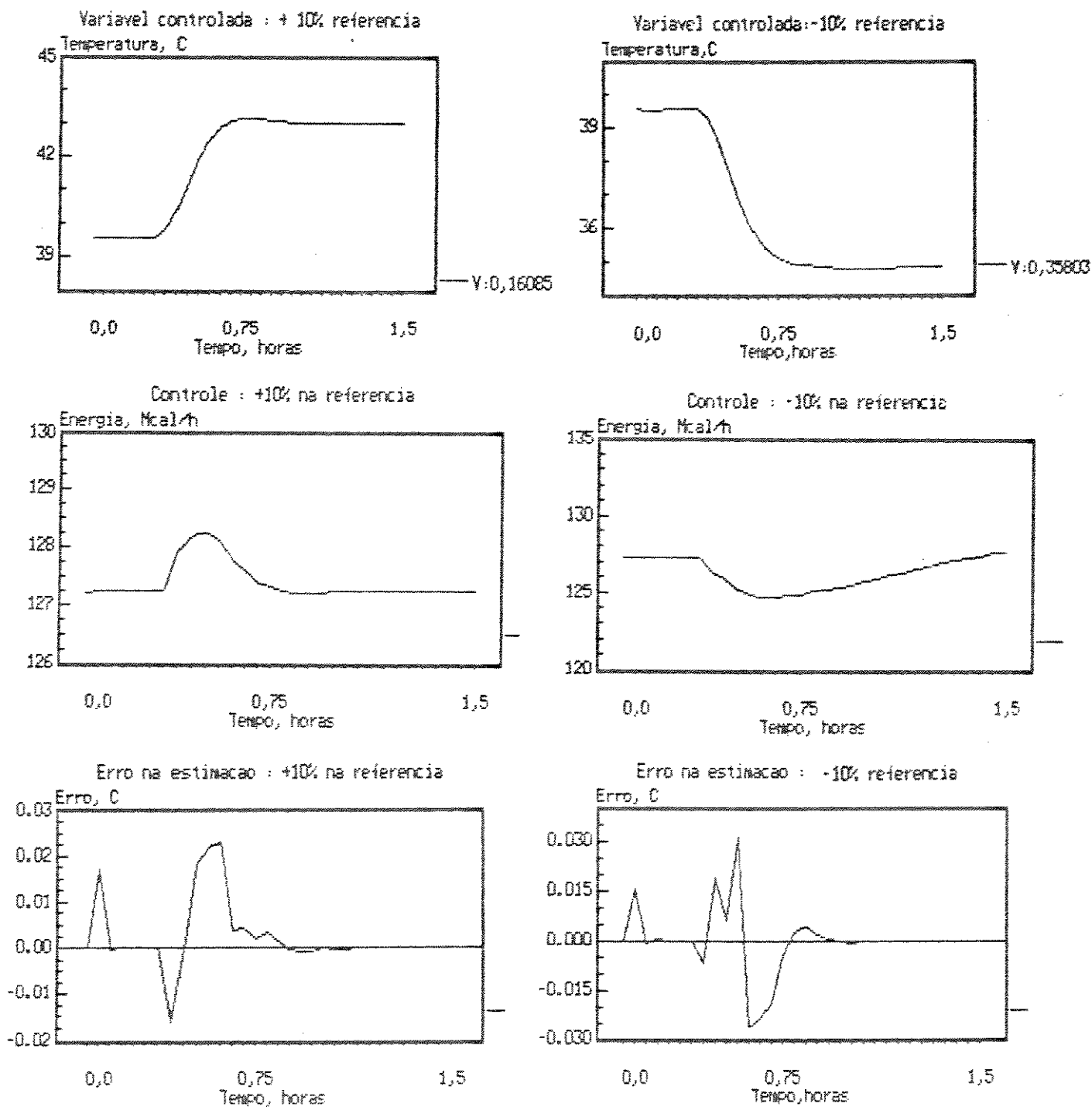


Figura 6.14 - Controlador preditivo com $NY = 10$ e $NU = 1$ (mudanças de $\pm 10\%$ na referência do processo - Perturbação 3)

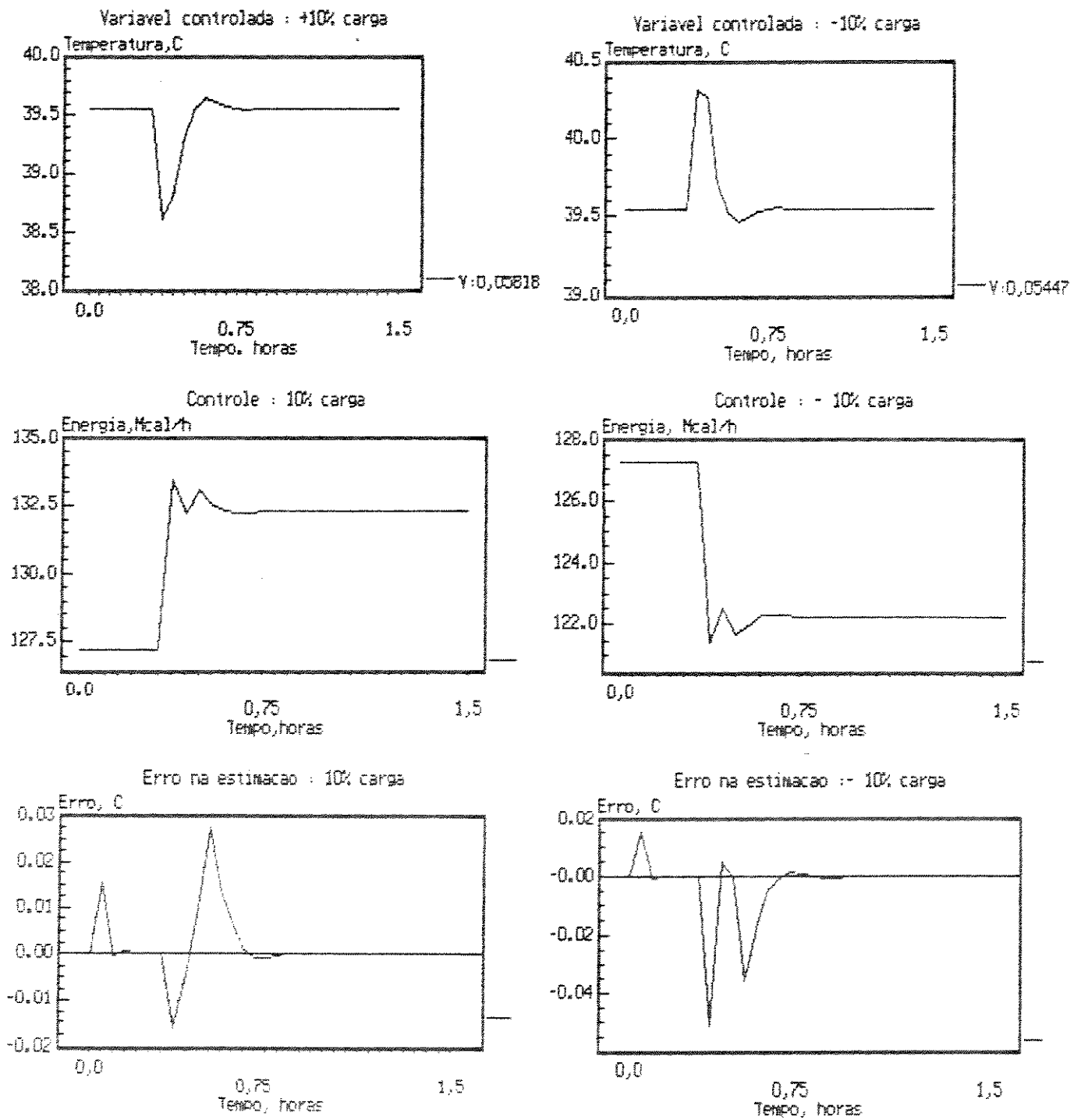


Figura 6.15 - Controlador preditivo com $N_Y = 10$ e $N_U = 5$ (mudanças de $\pm 10\%$ na vazão de alimentação - Perturbação 1)

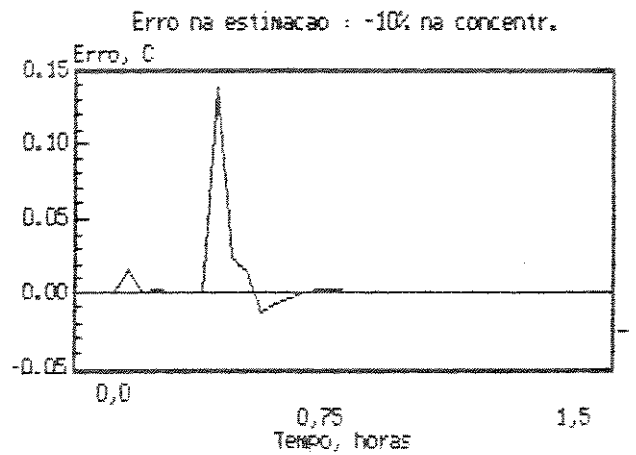
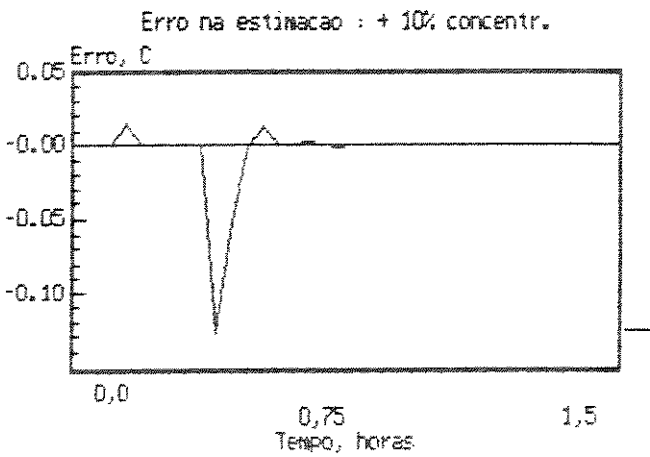
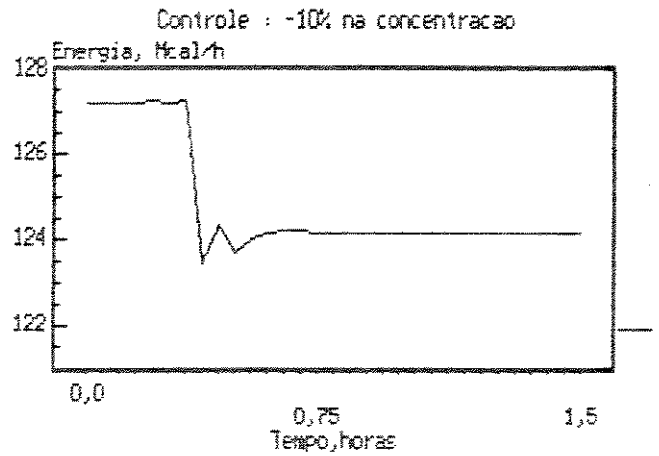
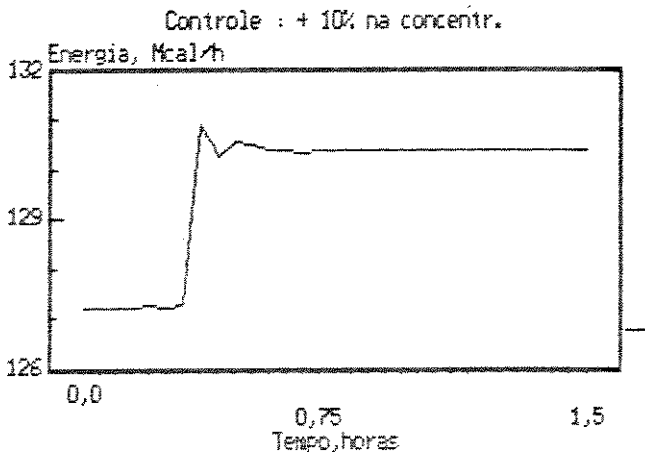
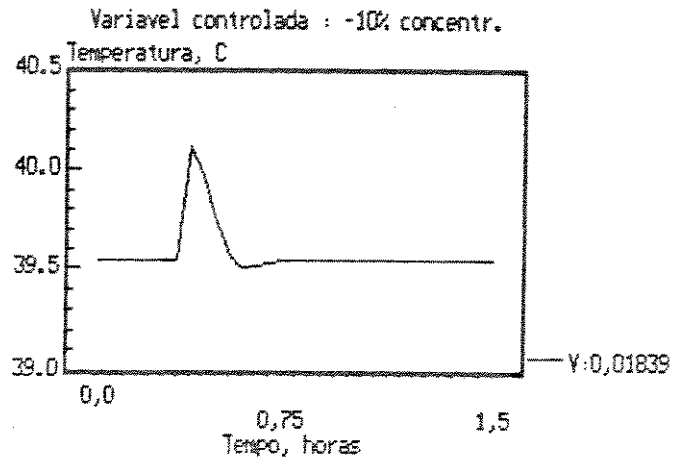
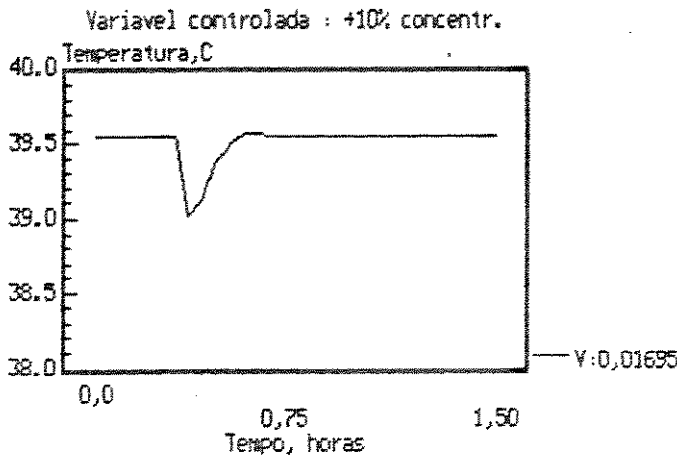


Figura 6.16 - Controlador preditivo com $N_Y = 10$ e $N_U = 5$ (mudanças de $\pm 10\%$ na concentração de alimentação -Perturbação 2)

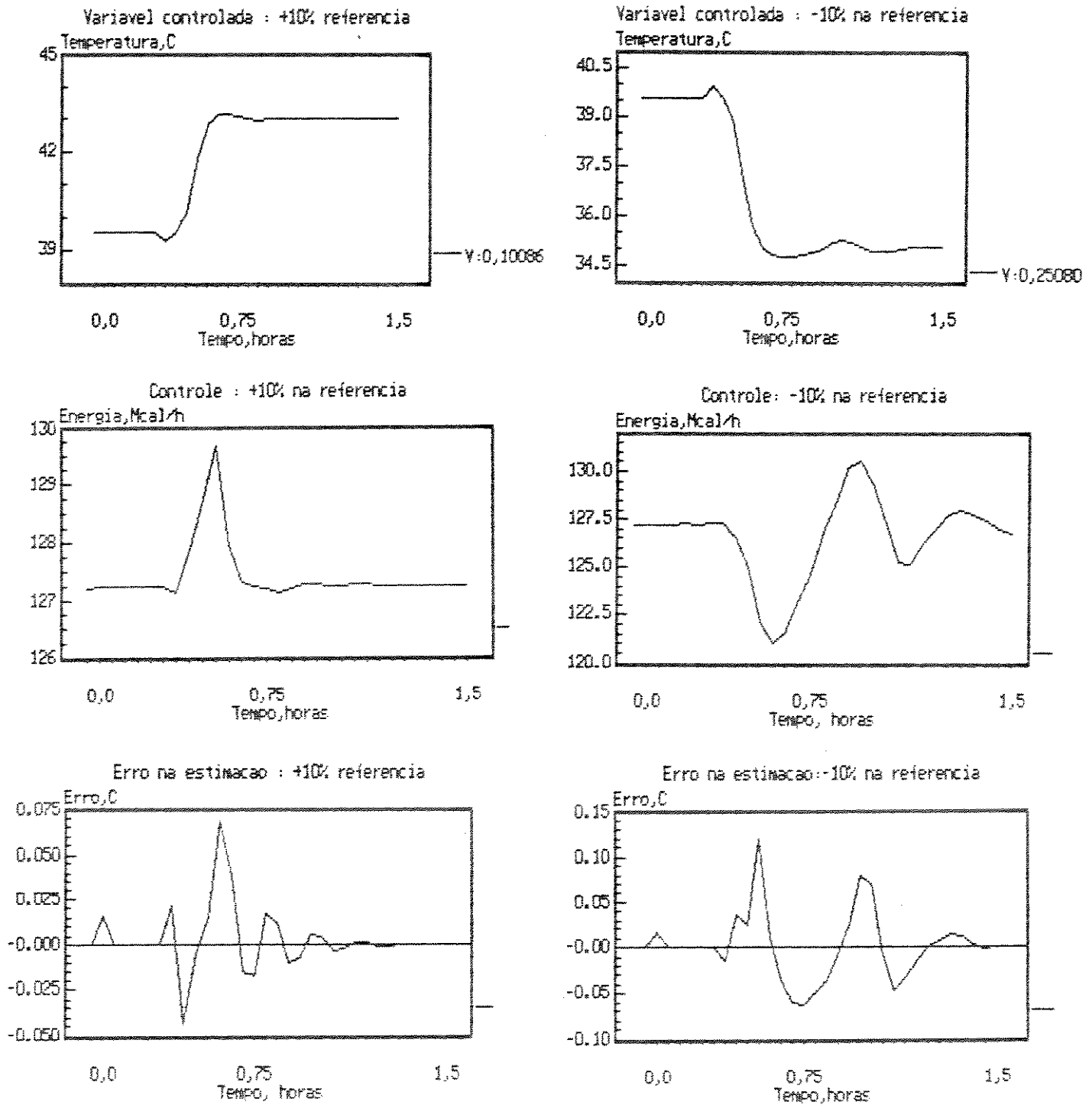


Figura 6.17 - Controlador preditivo com $N_Y = 10$ e $N_U = 5$ (mudanças de $\pm 10\%$ na referência do processo - Perturbação 3)

controle mais definido. O único ponto questionável poderia ser para a variação negativa de referência (Perturbação 3) onde o novo estado foi rapidamente alcançado, com o menor valor para a variância até agora obtido, porém com comportamento oscilatório para a variável de controle.

Vejamos, finalmente, o controlador com tempo de estabilização finito, cujos resultados são mostrados nas figuras 6.18, 6.19 e 6.20. Observamos, na sua implementação e avaliação, que este algoritmo apresenta algumas características bem particulares :

- é o algoritmo de mais fácil implementação (lei de controle bastante simples) e sintonia (não apresenta ponderações na lei de controle).
- sua sintonia é efetuada somente através da frequência de corte do filtro utilizado nos parâmetros, referência e lei de controle e da variação do período de amostragem.
- de todos os algoritmos é o que se mostrou mais sensível a variação dos parâmetros, exigindo a menor matriz de covariância P_0 , fator este que ocasionou uma lenta convergência dos novos parâmetros após a introdução de perturbações (ver figuras 6.18 a 6.20).

Apesar destas particularidades este algoritmo apresentou uma performance geral boa, dado a sua extrema simplicidade de implementação e sintonia.

6.3 - Conclusões

Os resultados obtidos para as diversas concepções de controle adaptativo implementadas mostram que, de uma forma geral, sua

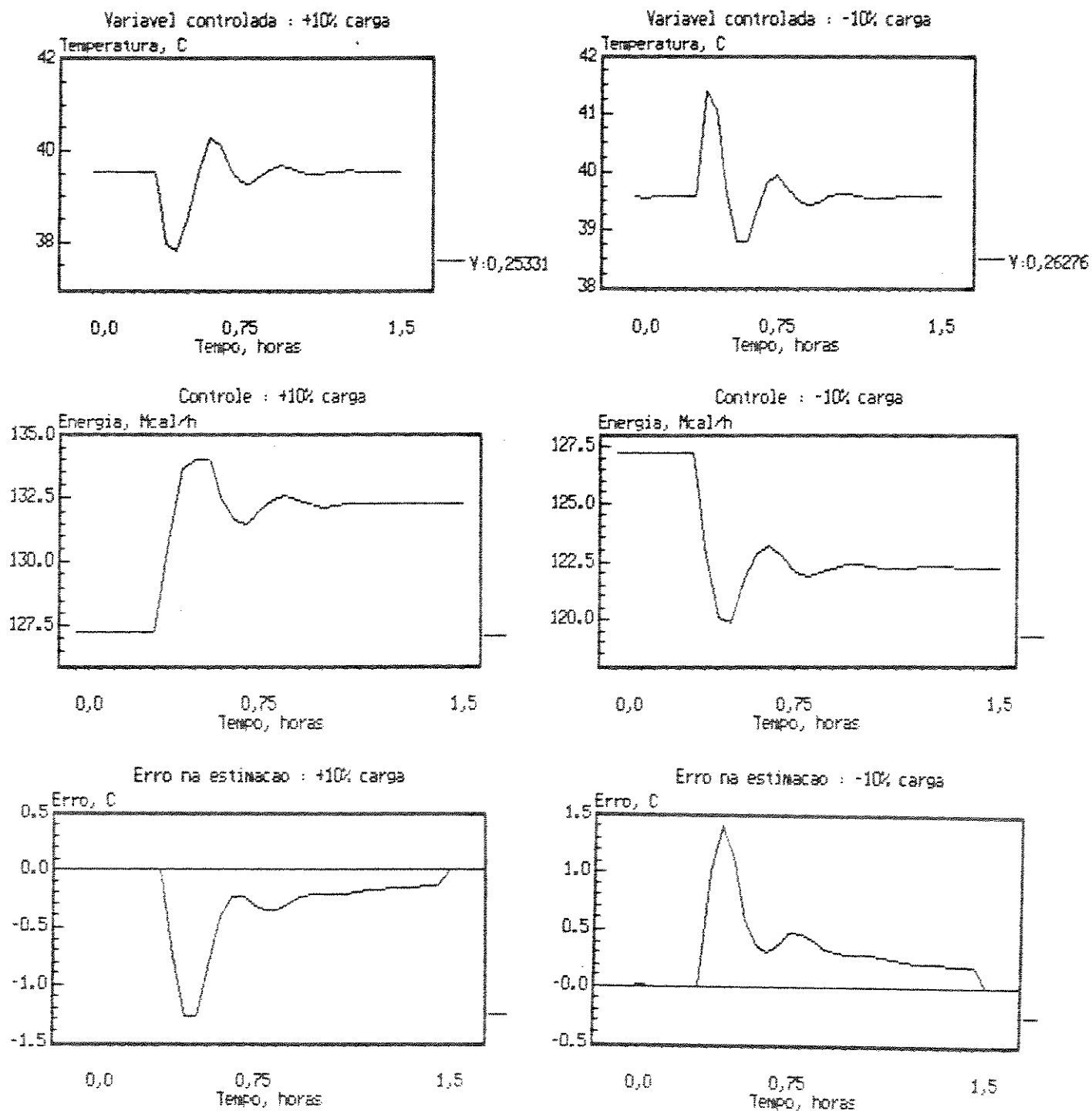


Figura 6.18 - Controlador com tempo de estabilização finito (mudanças de $\pm 10\%$ na vazão de alimentação - Perturbação 1)

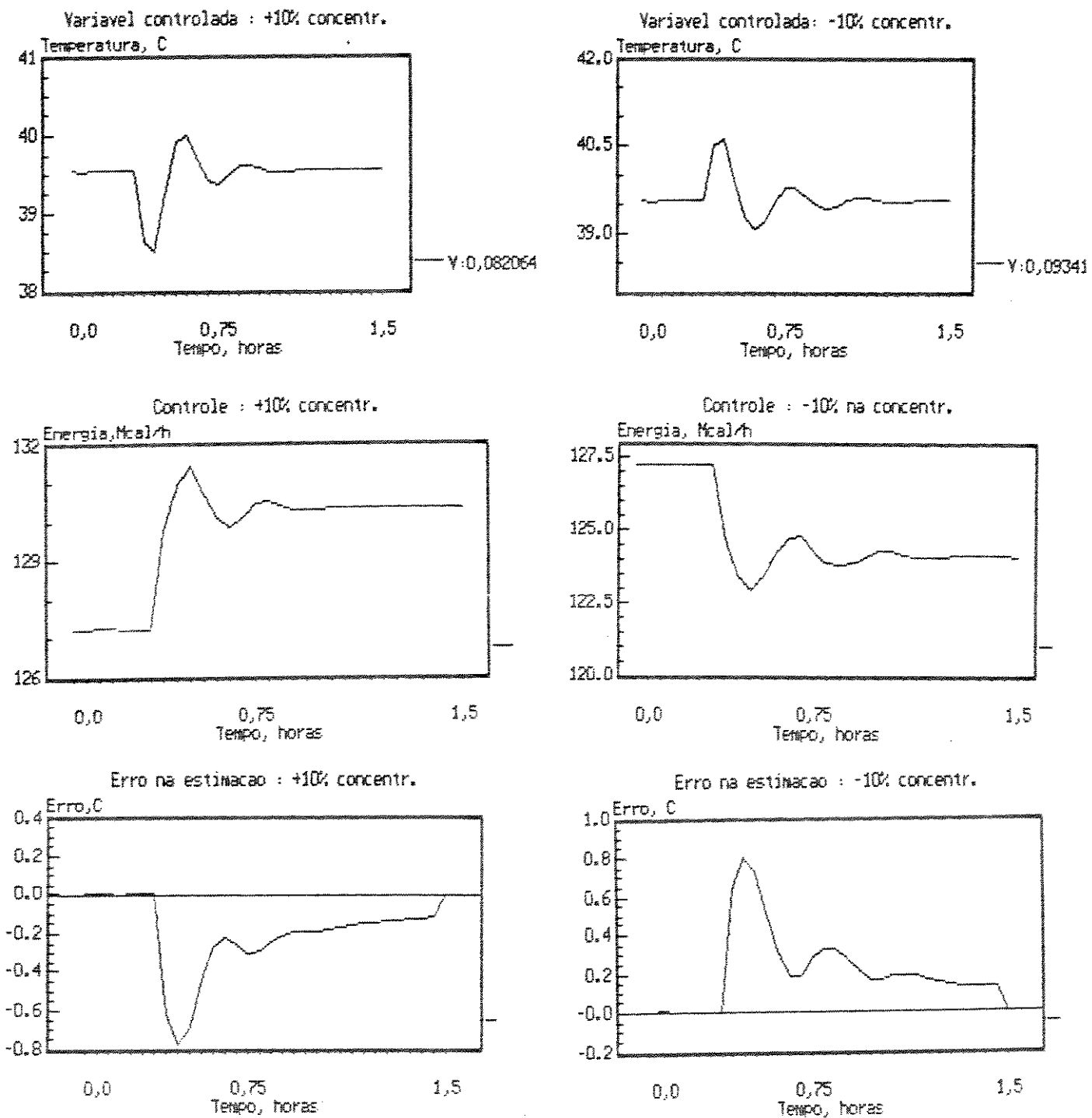


Figura 6.19 - Controlador com tempo de estabilização finito (mudanças de $\pm 10\%$ na concentração da alimentação - Perturbação 2)

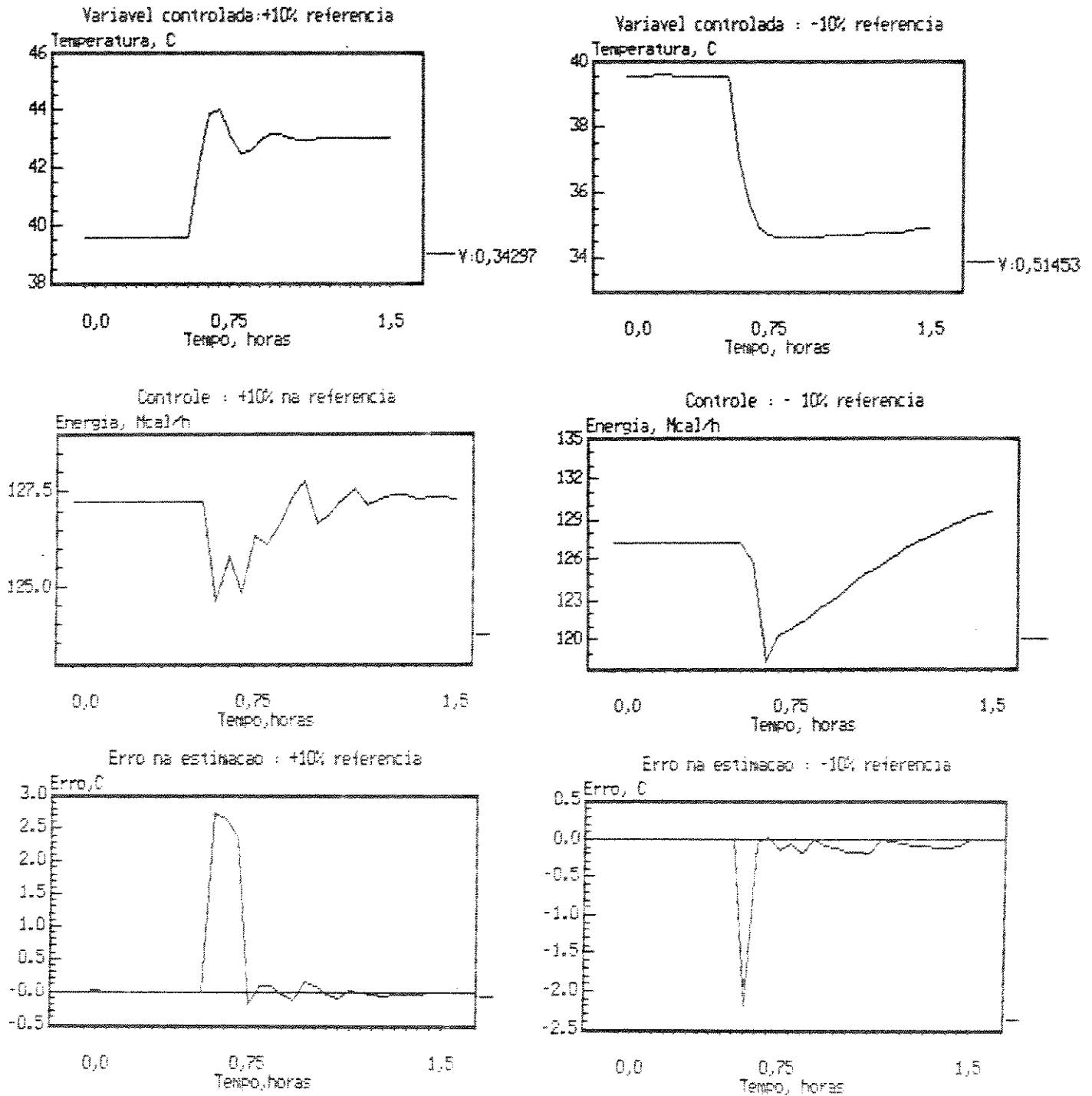


Figura 6.20 - Controlador com tempo de estabilização finito (mudanças de $\pm 10\%$ na concentração na referência do processo - Perturbação 2)

performance satisfaz plenamente às necessidades de controle para esta classe de processos. De todos os algoritmos analisados o que se revelou mais robusto e estável foi o controle preditivo, para um horizonte ampliado do controle (no presente caso, verificou-se que um valor de $NU = 5$ satisfaz plenamente, sem implicar em esforço computacional excessivo envolvido na inversão da equação matricial associada ao controle).

Quanto ao algoritmo linear pudemos constatar que sua performance pode ser sensivelmente modificada através da técnica de alocação dos polos do processo que , para a coluna estudada, pode ser efetuada eficazmente mediante a utilização de uma função de primeira ordem, conforme verificamos no capítulo 4. O controlador com alocação de polos se revela, depois do preditivo, como um dos algoritmo de melhor desempenho, dentre todos os analisados, com uma performance comparável ao controlador não-linear. Cabe aqui ainda a observação de que a complexidade de sua implementação é menor que a necessária ao não-linear, onde as características da coluna específica necessitam ser conhecidas.

O controlador não-linear, como podia se prever, apresentou performance excelente, visto conter em sua formulação informações relativas às não-linearidades da coluna, no caso seu ganho não-linear , que constatamos apresentar variações extremas (capítulo 4). Sua implementação, como assinalado, é a mais complexa de todos os controladores por necessitar de uma avaliação quantitativa do ganho da coluna em diferentes pontos de operação, informação esta nem sempre imediatamente disponível , mas os resultados podem ser compensadores.

Um dos aspectos mais problemáticos envolvidos na implementação dos controladores, aspecto este comum a todos os algoritmos, se relaciona com a estimação dos parâmetros do processo. Esta dificuldade de identificar parâmetros apropriados para as colunas de destilação de alta-pureza já foi assinalada por alguns autores

Tabela 6.1 - Sintonia dos Controladores

a) Dados do Estimador

VARIÁVEL	CNL	CL	CLAP	PREDITIVO	CTEF
P_o	I	0,1 I	0,1 I	I	0,05I
ρ_{par}	0,25	0,30	0,10	0,10	0,35
ρ_{contr}	0,10	0,10	0,10	0,10	0,25
E_{cong}	0,10	0,10	0,10	0,10	0,40
E_{max}	0,05	0,05	0,05	0,05	0,05
T_{min}	3 I	0,3 I	0,3 I	3 I	0,1 I
$m P(t)$	I	5 I	5 I	5 I	I
λ	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99

b) Sintonia dos Controladores

VARIÁVEL	CNL	CL	CLAP	PREDITIVO	CTEF
$P(z^{-1})$	0,10	0,25	**	0,30	-
$Q(z^{-1})$	1,0	1,0	**	-	-
$R(z^{-1})$	1,0	1,0	**	-	-

** = calculados "on-line"

[Georgakis,1988; Luyben,1987] e foi efetivamente constatado na implementação dos diversos algoritmos, obrigando ao emprego de uma série de técnicas auxiliares (monitoração do traço de $P(t)$, reinicialização de $P(t)$, "congelamento" de parâmetros, filtragem, fator de esquecimento (λ) para garantia de uma estimação robusta e confiável.

Diversos outros casos foram estudados alterando a forma de

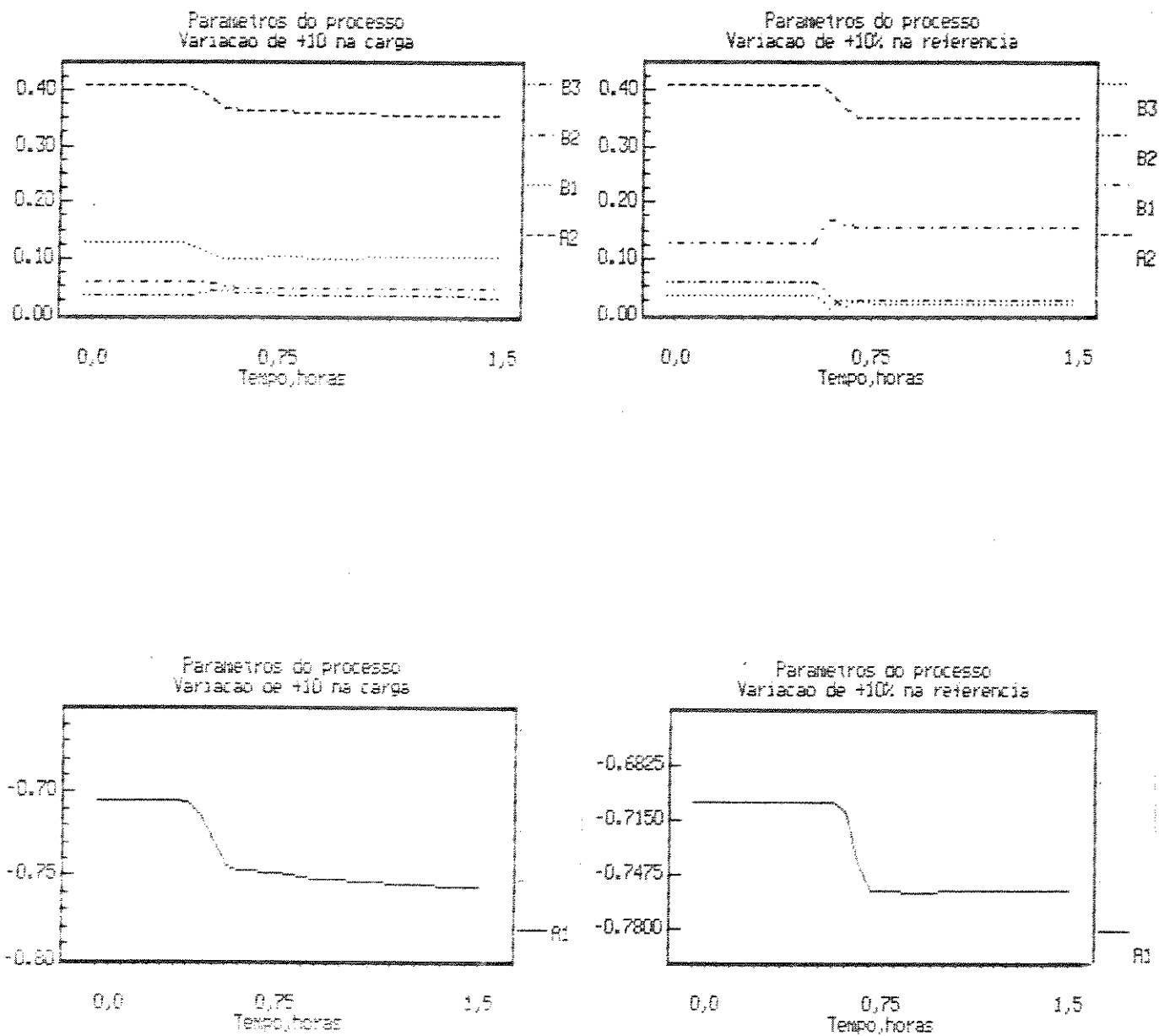


Figura 6.21 - Parâmetros do processo para variação de carga (esquerda) e de referência (direita).

perturbações no processo, variação dos polinômios de sintonia do controlador. Os resultados obtidos [Gomes,1988a,b;1989a,b,c; 1990a,b] nestas diversas situações não diferiram qualitativamente dos mostrados neste trabalho, razão pela qual não estão reproduzidos aqui.

6.4 - Simbologia

P_0 = valor inicial da matriz de covariância do estimador

$P(t)$ = valor real da matriz de covariância no estimador

$P(z^{-1})$ = polinômio de ponderação do (saida)

$Q(z^{-1})$ = polinômio de ponderação (controle)

$R(z^{-1})$ = polinômio de ponderação (referência)

ρ_{par} = frequência de corte do filtro dos parâmetros e
referência

ρ_{contr} = frequência de corte para o sinal de controle

E_{max} = erro máximo para o qual a matriz $P(t)$ é reinicializada

E_{cong} = erro máximo para o qual o controlador começa a utilizar
parâmetros "congelados"

λ = fator de esquecimento do estimador

CAPÍTULO 7 : OTIMIZAÇÃO OPERACIONAL

7.1 - Introdução

A função primordial de uma coluna de destilação, como amplamente analisado ao longo deste trabalho, é separar entre si dois ou mais compostos até um nível de pureza ditado pelas especificações do processo. Estas especificações podem incidir sobre o produto retirado no topo da coluna, na base ou então sobre ambos.

Para o caso específico do processo analisado neste trabalho, vimos, no capítulo 1, que a realimentação dos efluentes do reator constitui uma imperiosa necessidade econômica para a obtenção de rentabilidade adequada [Gomes, 1985, 1986a, b]. Os efluentes provenientes do reator de deposição são constituídos de uma mistura variada de clorosilanos; uma seleção preliminar separa as frações mais leves e pesadas destes clorosilanos, restando, para a realimentação, uma mistura constituída fundamentalmente de SiHCl_3 - SiCl_4 (Figura 1.1).

A decisão relativa à forma de aproveitamento destes dois compostos é função das diversas alternativas tecnológicas disponíveis para seu processamento, o que gera valores diferenciados para os mesmos, dependentes, certamente, de suas composições terminais. Uma política operacional adequada ao processo deverá ser estabelecida levando-se em conta estes valores diferenciados, além dos respectivos custos associados (aquecimento, refrigeração, rejeitos).

A pureza final dos compostos de uma coluna de destilação, vista sob o enfoque da Engenharia de Controle, é função basicamente dos dois balanços aplicáveis : balanço de massa e balanço energético [Shinskey,1984]. Sua manipulação, através das variáveis independentes existentes no processo permite não só alterar a composição dos produtos obtidos, mas também possibilita a busca de um estado operacional que, analisado sob determinados critérios possa ser considerado ótimo. Um estado ótimo é aquele que, em última análise, permita maximizar os lucros obtidos no processo e pode ser expresso, p. ex., sob a forma de minimização de uma função que forneça as perdas/custos existentes ou maximização de uma função que expresse o retorno monetário obtido pelo processo. Para o sistema objeto de nosso estudo a variação das composições no topo e na base da coluna, para duas situações distintas são mostradas na figura 7.1 : para o primeiro caso manteve-se a taxa de refluxo constante manipulando-se a relação D/F da coluna, ou seja, a relação entre a vazão do destilado e a de alimentação; para o segundo manteve-se a relação D/F constante manipulando-se porém a vazão de refluxo. Estas situações ilustram a possibilidade de se manipular adequadamente as variáveis de controle visando obter uma distribuição ótima de impurezas entre o topo e base da coluna.

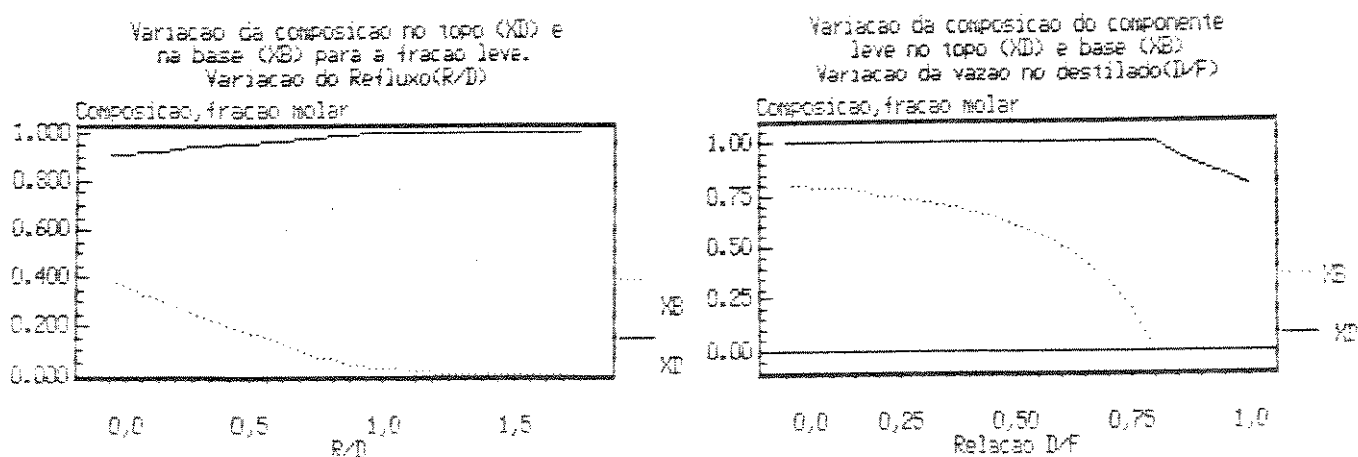


Figura 7.1 - Resultado da variaçao de R/D e D/F nas composicoes

O objeto deste capítulo diz respeito à otimização da operação de uma coluna de destilação, quer quando considerada do ponto de vista de um processo unitário, quer quando considerada como uma sub-unidade constituinte de um processo mais amplo. Analizaremos assim a possibilidade de, através de uma adequada manipulação das variáveis independentes do processo, alcançar um estado de operação que maximize seus ganhos. Para isto procurou-se, inicialmente, estabelecer a função objetivo adequada, definir então as condições que possibilitam a aplicação de uma política de otimização e finalmente a implementação de um algoritmo apropriado à solução do problema.

7.2 - Escolha da Função Objetivo

A primeira providência necessária à implantação de uma política de otimização é determinar a função objetivo aplicável à situação em questão. Uma função objetivo expressa um determinado critério que se busca otimizar, seja no sentido de maximização ou minimização e que se encontra sujeito, geralmente, a determinadas restrições de projeto, operacionais e de mercado. Entre os diversos critérios que podem balizar o estabelecimento de uma função objetivo existem dois bastantes utilizados : a minimização dos custos e/ou perdas e a maximização dos ganhos [Shinskey,1984; Latour,1981].

Para o caso específico do processo em questão as duas situações acima citadas podem ser representadas pelas seguintes funções objetivo:

1 - Minimização dos custos e/ou perdas

Uma função objetivo que minimize as perdas/custo decorrentes da operação de uma coluna adiabática pode ser expressa por

$$F\Phi = \left\{ \frac{D}{F} \right\} \sum_i x_P(i) \Delta_{VP}(i) + \left\{ \frac{B}{F} \right\} \sum_j x_B(j) \Delta_{VL}(j) + \left\{ \frac{H_D}{F} \right\} (c_1 + c_2)(R + D) \quad (7.1)$$

onde

$F\Phi$ = função que expressa os custos/perdas do processo por unidade de alimentação, \$/tonelada.

$x_P(i)$ = fração do componente pesado i com valor económico presente no topo da coluna.

$\Delta_{VP}(i)$ = custo diferencial do i -ésimo componente pesado entre base e topo, \$/tonelada.

$x_B(j)$ = fração do componente leve j com valor económico presente na base da coluna.

$\Delta_{VL}(j)$ = custo diferencial do j -ésimo componente leve entre topo e base, \$/tonelada.

H_D = calor de vaporização do destilado, Mcal/tonelada.

c_1 = custo do aquecimento, \$/Mcal.

c_2 = custo da refrigeração, \$/Mcal.

Esta função objetivo expressa as perdas existentes na base e no topo da coluna mais o custo energético necessário à geração dos produtos finais associados ao estado operacional em questão. É bom lembrar que os balanços de massa e energia de uma coluna são sempre expressos na forma D/F e V/F , ou seja, a relação entre a vazão do destilado e a de vapor relativamente à alimentação, sendo portanto de grande conveniência a expressão da função objetivo por unidade de alimentação. Além disto, a expressão da função objetivo por unidade de alimentação a torna independente de alterações nesta variável, alterações estas que podem advir de mudanças ditadas por questões de mercado ou necessidades operacionais impostas pelo restante da planta onde a coluna se localiza.

2. - Maximização dos ganhos

Uma função objetivo para esta situação pode ser expressa por

$$F\Phi = \sum_i P(i)v(i) - \sum_j F(j)v_F(j) - \sum_n Q(n)c(n) \quad (7.2)$$

$F\Phi$ = função objetivo expressando agora o ganho total do processo, \$/dia.

$P(i)$ = i -ésimo produto com valor econômico fornecido pelo processo, toneladas/dia.

$v(i)$ = valor econômico associado ao i -ésimo produto gerado pelo processo, \$/ tonelada.

$F(j)$ = j -ésimo componente alimentado ao processo, toneladas/dia.

$v_F(j)$ = custo associado ao j -ésimo componente da alimentação, \$/tonelada.

$Q(n)$ = n -ésimo fluxo energético entregue ou retirado do processo, Mcal/dia.

$c(n)$ = custo associado ao n -ésimo fluxo energético, \$/Mcal.

Esta função fornece a diferença entre os ganhos advindos da operação da coluna e os custos necessários à sua obtenção, expressando os ganhos líquidos do processo diretamente.

É necessário então definir qual a função que melhor se ajusta às características do processo. A forma mais genérica assumida pela função de maximização faz com que a mesma seja mais indicada para otimização de sub-unidades abrangendo equipamentos diversos (uma ou mais colunas, reatores, compressores, etc.) operando interligados, visto utilizar os fluxos totais (energia e massa) do processo. A função de minimização, por sua vez, se revela mais adequada à otimização de uma unidade isolada pois é expressa explicitamente em função das variáveis de uma coluna, bem como dos balanços

aplicáveis. Além disto, uma análise da opção de controle mais apropriada (regulação ou otimização), conforme mostrado a seguir, fica facilitada pelo uso da função de minimização. Utilizaremos, portanto, neste trabalho, como função objetivo a equação (3.1).

O estabelecimento da função objetivo possibilita, através da análise de seus termos, definir as condições que decidirão sobre a política de controle mais adequada a cada caso : regulação ou otimização [Latour,1978]. Uma coluna de destilação é um processo complexo e uma análise de caráter geral pode se revelar bastante problemática. Contudo, em primeira aproximação o problema pode ser visualizado pela análise dos valores diferenciais constantes da função objetivo, conforme mostra a Tabela 7.1 :

Tabela 7.1 - Análise da Função Objetivo

VALOR DOS PRODUTOS	POLITICA OTIMA PARA O PROCESSO
- CASO NUMERO 1:	
$\sum_L \Delta_{VP}(i) < 0$	maximizar D, maximizar $\sum_i x_P(i)$
$\sum_J \Delta_{VL}(j) > 0$	minimizar B, minimizar $\sum_j x_B(j)$
- CASO NUMERO 2:	
$\sum_L \Delta_{VP}(i) > 0$	minimizar D, minimizar $\sum_i x_P(i)$
$\sum_J \Delta_{VL}(j) < 0$	maximizar B, maximizar $\sum_j x_B(j)$
- CASO NUMERO 3:	
$\sum_L \Delta_{VP}(i) > 0$	
$\sum_J \Delta_{VL}(j) > 0$	Nada se pode afirmar a priori.

No primeiro caso a fração pesada total é mais valiosa no topo que na base e a melhor política a adotar é uma malha regulatória que maximize o conteúdo de impurezas pesadas no destilado, respeitando as especificações aplicáveis ao produto. No segundo caso a situação se inverte e a fração leve total é mais valiosa na base que no topo, sendo então recomendado uma política regulatória que a maximize na base até o nível permitido pelas especificações. Situações como estas descritas recomendam, geralmente, uma maximização do fator de recuperação da coluna, mas uma decisão definitiva sobre a melhor opção deverá levar em conta as condições operacionais reais (especificações aplicáveis aos produtos gerados e penalidades pela sua violação, p.ex.). Exemplos destes casos podem ser encontrados, entre outros, em Latour [Latour,1978], Martin [Martin,1981] e Shinsky [Shinsky,1984]. É evidente, nestes dois casos analisados, que os valores de R , Q_R e Q_C deverão ser os mínimos necessários para efetuar a separação dos compostos conforme especificações à que devem satisfazer. O caso número 3 se revela o mais interessante, pois a fração leve é mais valiosa no topo e a fração pesada mais valiosa na base, respeitadas as tolerâncias existentes para os produtos. Neste caso os termos diferenciais correspondentes são positivos e nada se pode afirmar, a priori, sob o ponto de mínimo da função. É necessário a adoção de uma política de otimização para determinação do ponto ótimo de operação. Há de se ressaltar, contudo, que para uma coluna com múltiplos componentes a avaliação correta dos diversos valores diferenciais pode ser problemática, ainda mais se considerarmos que os produtos por ela gerados normalmente vão alimentar outros processos. Uma política de otimização, portanto, pode ser mais eficientemente implementada em coluna separando misturas constituídas de dois ou três componentes que apresentem interesse econômico.

7.3 - Equacionamento do Problema

A otimização de um processo real, ao buscar um ponto que minimize ou maximize a função objetivo escolhida envolve necessariamente a satisfação das restrições que incidem sobre o mesmo e que são, geralmente, de três tipos : operacionais, de projeto e de mercado. O primeiro conjunto é geralmente de igualdades enquanto os dois últimos envolvem desigualdades. Estes três conjuntos, para o caso de uma coluna de destilação, são apresentados a seguir.

7.3.1 - Restrições operacionais

São aquelas que expressam o interrelacionamento entre as diversas variáveis existentes no processo. No presente caso podem ser expressas por um balanço de massa, um balanço energético e relações de soma e equilíbrio [Holand, 1963]. Os símbolos utilizados estão no final do capítulo. Esta relações são expressas matematicamente pelas equações (7.3) abaixo :

$$y_{j,i} = K_{j,i} x_{j,i} \quad , \quad \forall (1 \leq i \leq c) , (0 \leq j \leq N+1)$$

$$\sum_{i=1}^c x_{j,i} = 1 \quad , \quad \sum_{i=1}^c y_{j,i} = 1 \quad , \quad \forall (0 \leq j \leq N+1)$$

$$V_{j+1} y_{j+1,i} = L_j x_{j,i} + D x_{D,i} \quad , \quad \forall (1 \leq i \leq c) , (0 \leq j \leq N+1)$$

$$V_F y_{F,i} + V_f y_{f,i} = L_{f-1} x_{f-1,i} + D x_{D,i} \quad , \quad \forall (1 \leq i \leq c)$$

$$V_{j+1} y_{j+1,i} = L_j x_{j,i} - B x_{B,i} \quad , \quad \forall (1 \leq i \leq c) , (f \leq j \leq N)$$

$$F X_i = D x_{D,i} + B x_{B,i} \quad , \quad \forall (1 \leq i \leq c)$$

$$V_{j+1} H_{j+1} = L_j h_j + D H_D + Q_c \quad , \quad \forall (0 \leq j \leq f-2)$$

$$V_F H_F + V_f h_f = L_{f-1} h_{f-1} + D H_D + Q_c$$

$$V_{j+1} H_{j+1} = L_j h_j - B h_B + Q_r, \quad \forall (f \leq j \leq N)$$

$$FH = B h_B + D H_D + Q_c - Q_r$$

Esta relações expressam a condição de equilíbrio estacionário do processo e formam um conjunto de restrições de igualdade. É importante ressaltar que o coeficiente de distribuição entre fases, $K_{j,i}$ é uma função altamente não-linear (ver a discussão sobre este coeficiente no capítulo 2 relativo à modelagem do processo) o que significa, por si só, a existência de não-linearidades nas restrições (equação 2.39)

7.3.2 - Restrições de Projeto

São aquelas que definem os valores máximos e mínimos permitidos para os fluxos de massa e energia existentes no processo. São sempre restrições de desigualdades que limitam, superior e inferiormente, os valores das variáveis Q_R , Q_C , R , D , B e F . Matematicamente tais restrições se expressam

$$\begin{aligned} Q_{RMIN} &\leq Q_R \leq Q_{RMAX} \\ Q_{CMIN} &\leq Q_C \leq Q_{CMAX} \\ D_{MIN} &\leq D \leq D_{MAX} \\ R_{MIN} &\leq R \leq R_{MAX} \\ B_{MIN} &\leq B \leq B_{MAX} \\ F_{MIN} &\leq F \leq F_{MAX} \\ P_{MIN} &\leq P \leq P_{MAX} \end{aligned}$$

Existem neste conjunto duas variáveis que podem ser ignoradas como restrições de desigualdade : B e F . A vazão na base, B , esta sempre determinada através do balanço de massa total da coluna e portanto está implícita nas restrições de igualdade do problema. A vazão de alimentação, F , geralmente procede de outro processo e pode ser suposta uma variável fora de controle do operador.

7.3.3 - Restrições de mercado

São as restrições impostas pelo mercado aos produtos finais obtidos pela coluna, ou seja, os teores máximos e mínimos de impurezas permitidos para os produtos obtidos. São também restrições de desigualdade restritas que se expressam por

$$x_{Bmin,i} \leq x_{B,i} \leq x_{Bmax,i} \quad (7.4)$$

$$x_{Dmin,i} \leq x_{D,i} \leq x_{Dmax,i} \quad (7.5)$$

Definida a função objetivo bem como as restrições às quais ela se sujeita, o problema, em sua formulação final, pode ser descrito pela seguinte expressão (problema P1):

Minimizar

$$FO = \left\{ \frac{D}{F} \right\} \sum_i x_P(i) \Delta_{VP}(i) + \left\{ \frac{B}{F} \right\} \sum_j x_B(j) \Delta_{VL}(j) + \left\{ \frac{H_D}{F} \right\} (c_1 + c_2)(R + D) \quad (7.6)$$

s. a.

$$g_1(z) = 0 \quad (7.7)$$

$$g_2(z) \leq 0 \quad (7.8)$$

$$g_3(z) \leq 0 \quad (7.9)$$

onde

$g_1(z) = 0$ representa o conjunto de restrições de igualdade, ou seja, o conjunto de restrições operacionais.

$g_2(z) \leq 0$ representa o conjunto de restrições de projeto.

$g_3(z) \leq 0$ representa o conjunto de restrições de mercado.

7.4 - Técnica de solução

O problema acima apresenta algumas especificidades que devem ser analisadas para definição da estratégia correta de solução do mesmo :

. embora altamente estruturado, o problema é de elevada dimensão, com o número de variáveis nas restrições sendo da ordem de várias centenas.

. existe um problema adicional de não linearidade nas restrições através do coeficiente de separação entre fases, fato este que funciona como um elemento de aumento de complexidade em sua solução.

. a maior parte das variáveis só aparece de forma implícita na função objetivo, aumentando ainda mais sua complexidade e inviabilizando o cálculo de seu gradiente.

Estes fatores enumerados não recomendam as técnicas de solução nas quais se utilize como direção de caminhada o gradiente da função objetivo, quer diretamente ou projetado nas restrições [Bazarraa,1979,Luenberger,1984]. Um método alternativo, contudo, pode ser implementado se atentarmos para o fato de que o conjunto de restrições operacionais deve permanecer sempre ativo, garantindo a condição de equilíbrio estacionário do processo e que, além disto, as variáveis deste conjunto guardam entre si relações específicas bem definidas. Pode-se, portanto, reescrever o problema P1 na forma

Minimizar

$$F\Phi = \left\{ \frac{D}{F} \right\} \sum_i x_P(i) \Delta_{VP}(i) + \left\{ \frac{R}{F} \right\} \sum_j x_B(j) \Delta_{VL}(j) + \left\{ \frac{H_D}{F} \right\} (c_1 + c_2)(R + D) \quad (7.10)$$

s. a.

$$g_2(z) \leq 0 \quad (7.11)$$

$$g_3(z) \leq 0 \quad (7.12)$$

uma vez que se garanta sempre que as restrições de igualdade estarão sempre satisfeitas para todos os pontos do problema, ou seja, $g_1(z) = 0$ para todos os pontos que satisfaçam $g_2(z) \leq 0$ e $g_3(z) \leq 0$ e que, adicionalmente, pertençam ao conjunto de soluções factíveis do problema. Pode-se, desta maneira, desmembrar o problema original P1 em dois sub-problemas consistindo de :

. minimização da função objetivo sujeita às restrições de desigualdade impostas pelas condições de projeto e de mercado

. satisfação do conjunto de restrições ativas representadas pelas condições operacionais do processo, para todos os pontos que satisfaçam as restrições de desigualdades.

A estrutura básica do algoritmo implementado segue as seguintes etapas : as variáveis sujeitas às restrições de desigualdades são divididas em dois sub-conjuntos, $z_i, \forall i \in M$, onde M é o conjunto dos índices das variáveis independentes e $z_j, \forall j \in N$, onde N é o conjunto de índices das variáveis dependentes do processo. Para a k -ésima iteração, as variáveis z_i são atualizadas segundo um algoritmo específico (ver item 4.1) e, a seguir, para cada ponto factível do problema, as variáveis dependentes z_j são calculadas mediante satisfação das restrições de igualdade (item 4.2). Como a geometria da coluna, o tipo de condensador e a alimentação são especificados, existem no problema $(N + 2)(2c + 3) + 3$ variáveis para um total de $(N + 2)(2c + 3)$ equações, o que fornece 3 graus de liberdade ao sistema. Foram escolhidas, portanto, como variáveis independentes o refluxo R , a vazão do destilado D e a pressão da coluna P .

7.4.1 - Atualização das variáveis sujeitas às restrições de desigualdades

Sua atualização será efetuada segundo as etapas do método de Hookes & Jeeves [Bazarra,1979] para otimização irrestrita, adaptado às especificidades do presente problema. Seja $z_i^{(k)}$ o valor da variável z_i na k -ésima iteração :

1) Definido o critério de parada e um ponto inicial $z^{(k)}$ determina-se um conjunto de direções de caminhada $d_i, \forall i \in \mathbb{M}$ tal que $\mathbb{C} = \mathbb{I}$, onde \mathbb{C} é a matriz cujas linhas são os vetores direção e \mathbb{I} é a identidade. Seja $w_i = z_i^{(k)}, \forall i \in \mathbb{M}$.

2) Encontrar um tamanho de passo ótimo U_i^* que resolve o sub-problema

$$\text{Minimizar } \mathbb{F}\mathbb{D} (w_i^{(k)} + U_i^* d_i \lambda_i), \forall i \in \mathbb{M} \quad (7.12)$$

s. a

$$U_i^* \in \mathbb{R}^1, w_i \in \mathbb{S} \quad (7.13)$$

onde \mathbb{S} é o conjunto factível e λ_i é dado por $\lambda_i = \frac{r_i}{\|r_i\|_2}$, com r_i representando o multiplicador de Lagrange associado à i -ésima restrição do vetor de controle no ponto considerado [Westerberg,1979;Gill,1979].

3) Faça $z_i^{(k+1)} = w$. Avalie a função objetivo. Caso o critério de parada seja satisfeito, o problema convergiu. Caso contrário, prossiga.

4) Defina um novo vetor de direções d , tal que $d = z^{(k+1)} - z^{(k)}$. Encontre um novo U^* que resolve

$$\text{Minimizar } F\theta (z^{(k+1)} + U^* d) \quad (7.14)$$

s.a

$$U^* \in \mathbb{R}^1, z^{(k+1)} \in S \quad (7.15)$$

5) Faça $w = z^{(k+1)} + U^* d$ e retorne ao passo 2.

A determinação de U^* foi efetuada utilizando-se a sequência de Fibonacci [Bazaraa,1979] e o algoritmo específico para atualização das variáveis dependentes. Para garantir que $z^{(k)} \in S$ utilizou-se a técnica de penalização das variáveis associadas às restrições violadas.

7.4.2 - Satisfação das restrições de igualdades

A técnica de solução utilizada consistiu em um processo iterativo no qual a temperatura (variável implícita do problema) é utilizada como variável independente (método Thiele-Geddes), assegurando-se a convergência através do método θ [Holand,1963]:

- 1) Inicializar o algoritmo com os perfis de temperatura e vazões T_j , L_j e V_j , $\forall j = 0, \dots, N + 1$ (obtidos a partir das condições operacionais da coluna e/ou um balanço de massa suscinto) e para os valores das variáveis independentes atualizadas.
- 2) Calcular as vazões parciais para cada componente i , expressos por $\theta_{j,i} = V_j y_{j,i}$ e $l_{j,i} = L_j x_{j,i}$. Calcule $x_{j,i}$.
- 3) Utilizando as vazões parciais, encontre $\theta > 0$ que satisfaz $G(\theta) = 0$, onde $G(\theta)$ expressa o balanço de massa no topo da

coluna. Atualize, usando θ como fator de ponderação, as frações molares $x_{j,i}$, $i = 1, \dots, c$ e $j = 0, N+1$.

4) Use $x_{j,i}$ para cálculo da base de separação $K_{j,b}$ dada por

$$K_{j,b} = \frac{1}{\sum_{i=1}^c \alpha_{j,i} x_{j,i}} \quad (7.16)$$

onde $\alpha_{j,i}$ é a volatilidade relativa do componente i no estágio j calculada para a iteração k . Utilizando $K_{j,b}$ calcule o novo gradiente de temperatura T_j e, mediante os balanços energéticos e de massa, as novas vazões V_j e L_j . Se não convergiu, volte ao passo 2.

Quando o algoritmo converge obtém-se as variáveis dependentes do problema P1 que satisfazem as restrições de igualdade para os valores atualizados das variáveis independentes. A escolha deste método decorreu do fato do mesmo ser, computacionalmente, um dos mais eficientes e rápidos algoritmos para solução das relações estacionárias de uma coluna, com a garantia adicional de convergência. A solução das equações matriciais no passo 2 envolve a utilização do algoritmo de Thomas [Holland,1963] que na presente implementação foi modificado pelo algoritmo melhorado de Boston [Boston,1972] para aumentar a robustez numérica.

7.5 - Resultados Obtidos

O algoritmo foi utilizado para otimização da coluna em estudo. As especificações adotadas foram de 2,5% e 3% máximo de impurezas para o topo e base da coluna. Os valores monetários utilizados foram de 60,0 \$/Mcal para o custo combinado de aquecimento e refrigeração, 100,0 \$/mol para a fração leve e 80,0 \$/mol para a fração pesada, valores estes máximos, caindo proporcionalmente ao conteúdo de impurezas [Gomes,1985], onde \$ representa um valor monetário

genérico. A coluna foi colocada em operação num ponto de baixa taxa de refluxo e aplicou-se o algoritmo ao problema, com os resultados sendo mostrados na tabela 7.2 :

Tabela 7.2 - Avaliação do Ótimo - Primeiro Caso

ESTADO	R/D	D/F	X _D	(1-X) _B	FO(\$/MOL)
INICIAL	1,025	0,8000	99,35	97,34	0,8720
FINAL	1,210	0,8007	99,73	99,19	0,7054

O novo estado obtido aumentou a taxa de refluxo, a taxa de recuperação com o consumo energético variando de 100,73 para 109,96 Mcal/h no refeedor e de 100,20 para 109,36 Mcal/h no condensador. O novo estado, embora com maior consumo energético, propiciou melhor distribuição de impurezas entre o topo e base da coluna, com um decréscimo na função objetivo de 0,1667 \$/mol de alimentação, que significa um ganho adicional diário da ordem de 40000,0 \$, equivalentes a 667 Mcal.

Partiu-se então de um ponto com maior consumo energético com modificação na taxa de refluxo, aumentando conseqüentemente a pureza final dos produtos obtidos, com os demais valores inalterados. Os novos valores obtidos estão na Tabela 7.3 :

Tabela 7.3 - Avaliação do Ótimo - Caso 2

ESTADO	R/D	D/F	X _D	(1-X) _B	FO(\$/MOL)
INICIAL	2,000	0,8000	99,97	99,87	0,8912
FINAL	1,206	0,8008	99,72	99,21	0,7051

O processo convergiu para o mesmo ponto ótimo obtido anteriormente, a menos das tolerâncias. Os ganhos obtidos são superiores aos obtidos no caso anterior e mostram que, para esta coluna, a componente devida ao custo energético não permite a

política de refluxo máximo. Estudou-se então a influência de perturbações no ponto ótimo, ilustrado através de modificações no custo energético e na fração de alimentação, alteradas para 80,00 \$/Mcal e 0,65, respectivamente :

Tabela 7.4 - Avaliação do Ótimo - Caso 3

ESTADO	R/D	D/F	X _D	(1-X) _B	FO(\$/MOL)
INICIAL	1,2105	0,8007	99,73	99,19	0,9243
FINAL	1,1703	0,8011	99,67	99,67	0,9201

O algoritmo responde eficientemente a pequenas variações, ainda que o novo ótimo seja bem próximo ao anterior.

7.6 - Extensão do Algoritmo

Embora o algoritmo tenha funcionado perfeitamente utilizando-se a manipulação dos dois balanços aplicáveis à coluna o mesmo foi estendido visando a incorporação de duas variáveis de controle adicionais ao problema : a pressão do sistema e uma distribuição de energia entre a alimentação e base da coluna. Esta estratégia foi também utilizada por Maarleveld [Maarleveld,1970] que implementou interessante concepção de controle dinâmico ótimo que opera sempre nas restrições do processo. Analisemos sucintamente a influência de cada uma destas variáveis :

- Pressão do sistema - geralmente a tendência das colunas de destilação é operarem na mínima pressão possível. Esta situação decorre do fato que, a baixas pressões, a separação entre os compostos fica facilitada em virtude do aumento da volatilidade relativa, requerendo menores vazões de vapor. A diminuição da pressão, contudo, aumenta, geralmente, o calor de vaporização dos compostos redundando numa maior necessidade de energia para geração da mesma quantidade de vapor. Estes dois efeitos tendem a se contrabalançar, com o estabelecimento da melhor situação dependendo

de fatores como condições operacionais da coluna, custo da energia, propriedade dos compostos, etc.

2 - Distribuição de energia entre base e alimentação : a energia fornecida ao refervedor é utilizada no processo de forma mais eficiente uma vez que os vapores gerados atravessam todos os estágios da coluna, melhorando a separação, ao passo que a energia fornecida à alimentação aumenta as vazões dos vapores somente na seção de retificação. Se existe realimentação energética de baixo custo, sua alocação no processo não é uma questão definida a priori : é necessário levar em conta as especificações aplicáveis aos produtos obtidos, custo da refrigeração, da geração de vapor, ou seja, o custo total que determinará seu melhor reaproveitamento.

Esta opção foi então implementada no programa. Para tal a função objetivo foi reformulada visando incorporar as diferenças de temperatura ao longo da coluna decorrentes da variação de pressão e sua influencia nos parâmetros do processo :

Minimizar

$$F\Phi = \left\{ \frac{D}{F} \right\} \sum_i x_P(i) \Delta_{VP}(i) + \left\{ \frac{B}{F} \right\} \sum_j x_B(j) \Delta_{VL}(j) + \left\{ \frac{H_B}{F} \right\} c_1 V_B + \left\{ \frac{H_D}{F} \right\} c_2 (R + D) \quad (7.17)$$

s. a.

$$g_2(z) \leq 0 \quad (7.18)$$

$$g_3(z) \leq 0 \quad (7.19)$$

onde V_B representa a vazão de vapor na base, H_B e H_D o calor de vaporização na base e topo, respectivamente; foi suposta uma distribuição de pressão linear ao longo da coluna e um percentual da energia no valor de 1 Mcal/h fornecida à alimentação tendo sido obtido o seguinte resultado :

Tabela 7.5 - Otimização com Algoritmo Estendido

<u>ESTADO INICIAL</u>			
REFLUXO (M/h)	DESTILADO (M/h)	PRESSÃO (ATM)	ENERGIA NA ALIM. (Mcal/h)
12500,00	8050,00	1,0	1,0
Q_B (Mcal/h)	Q_C (Mcal/h)	X_D (FRAÇÃO MOLAR)	X_B (FRAÇÃO MOLAR)
128.658	126.90	0,9780	0,9999
FUNÇÃO OBJETIVO(\$/MOL) : 0,9416			
<u>ESTADO FINAL</u>			
REFLUXO (M/h)	DESTILADO (M/h)	PRESSÃO (ATM)	ENERGIA NA ALIM. (Mcal/h)
7992,00	8046,98	1,45	0,20
Q_B (Mcal/h)	Q_C (Mcal/h)	X_D (FRAÇÃO MOLAR)	X_B (FRAÇÃO MOLAR)
96,664	95,989	0,9908	0,9993
FUNÇÃO OBJETIVO(\$/MOL) : 0,4365			

Verifica-se que o aumento da pressão influenciou positivamente a função objetivo pela diminuição do calor de vaporização decorrente do aumento de temperatura; a distribuição de energia, contudo, tendeu a favorecer a base da coluna visto que o componente no topo é mais valioso. Há de se observar a diminuição da energia consumida no processo mostrando que, para este processo específico a variação do calor de vaporização é muito acentuada acarretando mudanças significativa nos resultados finais.

7.7 - Conclusões Finais

Através dos diversos casos estudados e dos resultados obtidos foi possível tirar diversas conclusões relativas não só quanto ao desempenho do algoritmo como também ao comportamento da coluna analisada :

- 1) o algoritmo montado se revelou perfeitamente adequado às finalidades propostas. Sua resposta satisfaz plenamente, tanto para grandes como pequenas alterações no processo. No tocante à convergência o método das coordenadas cíclicas apresenta um problema de avanço lento à medida que se aproxima do ótimo razão pela qual torna-se necessário efetuar uma política de compromisso entre tolerância, tamanho do passo e velocidade de convergência. Após devidamente ajustado, contudo, converge em 4 ou 5 iterações com um tempo médio de 7 minutos num PC-XT, considerando-se os tres graus de liberdade mencionados. Se uma ou duas das variáveis estiverem fixas este tempo é reduzido de praticamente uma ordem de grandeza.
- 2) Como analisado anteriormente (item 2), em determinadas situações é preferível regular que otimizar. E mesmo quando a política recomendada é a otimização, determinadas colunas apresentam resposta mais satisfatórias que outras, entre as quais se incluem aquelas com alta taxa de refluxo, baixa volatilidade relativa, fração leve de alimentação não próxima de 0,50 % e alto custo diferencial dos produtos [Martin,1981]. O algoritmo confirma que, quando estas condições não são preenchidas, os ganhos advindos da otimização nem sempre são significativos. Isto fica evidente no caso estudado onde o comportamento da função objetivo sugere curvas de nível bastante espaçadas e os ganhos conseguidos devido a perturbações perto do ótimo não são tão expressivos.

- 3) O exemplo escolhido inicialmente se revela extremamente interessante, pois mostra que um ótimo pode se localizar numa região totalmente oposta ao que aparenta à primeira vista. O estado inicial de operação da coluna parecia, em análise preliminar, se situar nas imediações de um ótimo, pois o consumo energético foi reduzido ao mínimo, o destilado, composto mais nobre e que representa 80% da produção, teve seu valor incrementado mediante aumento da pureza e manteve-se o produto da base dentro das especificações evitando-se o aparecimento de qualquer rejeito na produção. Verifica-se, contudo, que este estado se caracteriza por um elevado índice de perdas, a função objetivo tem um alto valor e o mesmo se situa bastante distante do ótimo encontrado.
- 4) a extensão do algoritmo envolvendo a pressão dos sistema e uma realimentação energética entre a alimentação e a base da coluna indica que os custos operacionais da coluna podem ser adicionalmente minimizados. Para o caso específico analisado verificou-se que o aumento da pressão e da energia na base atuam positivamente na função objetivo.
- 5) embora ao longo deste capítulo se tenha utilizado a expressão "ponto ótimo" é importante ressaltar que seria mais adequado a utilização " sub-ótimo", visto que técnicas de garantia de globalidade do ótimo que, para esta classe de métodos sem gradiente ,são geralmente heurísticas [Amorim,1989] não foram utilizadas.

7.8 - Notação utilizada

- B = vazão total na base , moles/h
- c = número total de componentes (compostos a serem destilados) do sistema
- D = vazão total do destilado, moles/h
- F = vazão total de alimentação, moles/h
- h_j = entalpia total avaliada à temperatura, pressão e composição do líquido deixando o estágio j , cal/mol
- H_j = entalpia total avaliada à temperatura, pressão e composição do vapor deixando o estágio j , cal/mol
- H = entalpia por mole de alimentação, independente do estado, cal/mol
- H_D = entalpia total do destilado, independente do estado, cal/mol
- $K_{j,i}$ = coeficiente de distribuição entre fases, avaliado à temperatura e pressão do líquido deixando o estágio j
- L_j = vazão total do líquido deixando o estágio j , moles/h
- N = número total de estágios da coluna
- P = pressão, atm.
- Q_c = energia retirada do condensador, cal/h
- Q_R = energia fornecida ao refeedor, cal/h
- R = vazão total do refluxo, moles/h
- V_j = vazão total de vapor deixando o estágio j , moles/h
- $x_{j,i}$ = fração molar do componente i no líquido deixando o estágio j
- $x_{B,i}$ = fração molar do componente i na base
- X_i = fração molar total do componente i na alimentação, independente do estado
- $X_{D,i}$ = fração molar total do componente i no destilado, independente do estado
- $y_{j,i}$ = fração molar do componente i no vapor deixando o estágio j

Índices e subscritos

- i - número do componente, $1 \leq i \leq c$
- j = número do estágio; $j = 0$ para o acumulador; $j = f$ para o estágio de alimentação e $j = N + 1$ para o refeedor
- F = variáveis associadas com uma alimentação parcialmente vaporizada.

CAPÍTULO 8 - CONCLUSÕES FINAIS

Ao final deste trabalho é mister efetuar-se uma análise crítica de seus diversos momentos, no tocante aos pontos que consideramos positivos bem como, e principalmente, as deficiências que pudemos constatar ao seu final. De um ponto de vista global consideramos que os objetivos propostos foram plenamente atingidos, quais sejam : efetuar a modelagem e definir métodos de integração numérica adequados à simulação dinâmica de um processo extremamente complexo, gerando um modelo que fosse, ao mesmo tempo, robusto, preciso e computacionalmente eficiente permitindo efetuar um estudo comparativo da performance de diversos controladores adaptativos auto-ajustáveis para esta classe de processos; desenvolver e implementar algoritmos de otimização não-linear visando a execução de estudos no tocante à realimentação em estado ótimo, ou como mais apropriado, sub-ótimo, do processo.

Diversas conclusões e comentários foram sendo efetuados ao longo dos capítulos concomitantemente à obtenção dos resultados e, portanto, para evitar repetições desnecessárias enfatizaremos alguns aspectos de caráter mais geral :

1) Modelagem e Métodos Numéricos

As propriedades físicas dos compostos presentes na destilação, bem como os diversos critérios utilizados para projeto das colunas tornam arriscado estabelecer conclusões de caráter geral para esta classe de processo. Verificamos, contudo, que determinadas considerações simplificadoras utilizadas, mesmo em se tratando de colunas de alta pureza, não afetam a precisão e forma da resposta do processo. Dentre estas simplificações as mais importantes são aquelas relacionadas com retenção volumétrica constante, que permitem eliminar um conjunto de equações diferenciais de ordem $N+2$, onde N é o número de estágios da coluna e um conjunto de cálculos adicionais, sem que a resposta do processo se torne menos precisa ou sua dinâmica se torne degradada, quando comparada à versão diferencial desta retenção.

Outras suposições adotadas, como a expressão da pressão de vapor pela equação de Antoine, coeficiente de atividade pelas equações de van Laar, lei de Raoult se revelaram também adequadas : para as diversas situações a que o processo foi submetido o balanço de massa do sistema se manteve e, mais importante, todas as complexidades esperadas (atrasos, não-linearidades, dinâmicas diferenciadas, ganho variável) se manifestaram na dinâmica da coluna.

O emprego dos métodos numéricos implícitos de integração mostrou a extrema pertinência de sua utilização, ainda que com implementação bem mais complexa e elaborada. A formulação característica do Bloco de Butcher para os métodos DIRK, aliada ao aspecto tridiagonal do Jacobiano das colunas de destilação, possibilita reduzido uso de memória e baixo esforço computacional, com garantia de estabilidade sem perda de precisão. Mesmo implementados em precisão simples os métodos de terceira ordem não apresentaram erros de truncamento quando comparados ao método de Runge-Kutta de quarta ordem explícito e o método de Liniger-Willhoughby, de primeira ordem, se revelou adequado para

trabalho na região de alta pureza, com a adoção de alguns cuidados adicionais.

A caracterização das colunas revelou um ambiente extremamente adequado à engenharia de controle, com a manifestação simultânea das mais complexas características inerentes a um processo, como atrasos, constantes de tempo diversas, ganho não-linear e outras mais. No tocante ao modelamento reduzido, as características das colunas indicaram um modelo de primeira ou segunda ordem, hipótese esta posteriormente verificada quando da implementação dos algoritmos adaptativos de controle, confirmando experiências anteriores de outros pesquisadores.

2) Algoritmos adaptativos de controle

A primeira, e talvez mais importante, dificuldade no tocante à implementação destes algoritmos foi apresentada pela estimação adequada dos parâmetros do processo, tarefa esta que exigiu tempo e esforço razoável até que se conseguisse uma série de procedimentos adicionais ao estimador recursivo dos mínimos quadrados que garantisse uma estimação robusta e confiável. Para isto foi necessário o emprego de fator de esquecimento não-unitário, monitoração do erro na estimação para reinicialização da matriz de covariância, "congelamento" de parâmetros e filtragem.

Dentre os diversos algoritmos adaptativos analisados o Controlador Preditivo Generalizado se revelou o mais robusto, quer na capacidade de rejeição de carga, quer no rastreamento de referências. Adicionalmente, sua capacidade de operar com horizontes delimitados de acordo com a sintonia utilizada pelo usuário permite sua adequação a processo com variados graus de complexidade.

O algoritmo não-linear apresentou também excelente performance, mas sua implementação é mais elaborada, exigindo o conhecimento das não-linearidades do processo, além de um modelo reduzido não-linear adequado. Sua versatilidade, contudo, reside no fato de poder ser

utilizado para não-linearidades variadas, desde que devidamente equacionadas, dado o caráter mais genérico de sua formulação.

O desempenho do controlador adaptativo linear, em sua versão normal, ficou um pouco aquém dos anteriores, mas foi sensivelmente melhorada através da alocação dos polos do processo, considerado como de primeira ordem. Com a introdução desta técnica seu comportamento se aproximou ao do não-linear, com a observação que apresenta implementação mais simples.

O controlador com tempo de estabilização finito é, de todos, o de mais simples implementação e sintonia, com um desempenho surpreendente, visto sua extrema simplicidade; apresenta, contudo, grande sensibilidade à variação dos parâmetros necessitando matriz de covariância mais reduzida. Verifica-se, adicionalmente, que a oscilação na variável controlada não é totalmente eliminada, fato este decorrente provavelmente do comportamento dos parâmetros quando da introdução de perturbações no processo.

Todos os controladores adaptativos testados, com pequenas variações, apresentam desempenho excelente para o controle desta classe de processos. A utilização do modelo CARIMA permite, adicionalmente, a eliminação de erros de regime sem necessidade de estimação do nível contínuo ou de integrador explícito na função custo.

3) Otimização Operacional

A otimização operacional se revela uma questão um pouco menos conclusiva visto que, para tal fim, seria necessário a utilização de dados reais de custo operacional do processo e de mercado, dados estes não disponíveis e que foram utilizados apenas de forma aproximada. Mesmo assim pode-se verificar que o processo apresenta algumas características peculiares, como notado no capítulo 7, e que a disponibilidade de dados reais do processo pode

permitir economia significativa em suas condições operacionais. O algoritmo implementado se revelou plenamente adequado às finalidades propostas, com convergência rápida e fácil implementação.

As sugestões para trabalhos futuros são várias, dado que a infraestrutura representada pelo modelo de ordem completa, com métodos de integração robustos e computacionalmente eficientes, se encontra disponível facilitando sobremaneira os trabalhos. A primeira e óbvia sugestão consiste na extensão dos algoritmos implementados para a situação multivariável, onde os problemas de controle são ainda mais complexos [Mountiziaris,1988; Georgakis, 1988] devido à interação entre as malhas de controle. Esta extensão, inclusive, já está sendo efetuada como parte de outra tese de doutoramento, utilizando a infraestrutura disponível do modelo [Coelho,1989].

Outra sugestão adicional consiste na implementação de algoritmos de estimação robustos [Fikirin,1989; Giri,1989; Moore, 1989] para enfrentar os problemas associados a esta etapa. Embora o desempenho conseguido tenha satisfeito plenamente, é evidente que este ponto é crucial no desempenho final dos controladores e não pode ser desprezado.

As complexidades existentes no controle desta classe de processos mostram que um controle efetivo, robusto e confiável, especialmente para a extensão multivariável passa preferencialmente por um sistema especialista de supervisão que possa gerenciar uma identificação confiável e robusta do processo (mediante a utilização de estimadores apropriados com as respectivas técnicas auxiliares), a escolha de algoritmos de controle adequados (dentre as diversas concepções adaptativas e mesmo convencionais) e a malha de controle adequada face à evolução da dinâmica do processo decorrente do tipo de perturbação introduzida.

No tocante à otimização o sistema estudado se revela altamente promissor, com múltiplas opções de trabalho. Uma primeira sugestão

seria o acoplamento de duas ou mais colunas operando interligadas, com realimentação entre elas e posteriormente a introdução do reator nesta malha. Há de se ressaltar que, relativamente à esta área de otimização de processos não conseguimos localizar referências de trabalhos no país, parecendo tratar-se de assunto pouco explorado.

A infraestrutura montada para análise dos algoritmos adaptativos possibilita, mediante a introdução de algumas poucas alterações, a obtenção de um ambiente extremamente adequado para aplicações variadas na área de controle mono- e multivariável, tanto clássico como adaptativo, para aplicações acadêmicas e industriais envolvendo processos com dinâmica lenta.

No tocante à otimização o algoritmo implementado mostra as potencialidades existentes para sua aplicação, principalmente para ambientes industriais que operem com esta classe de processos. Estados operacionais ótimos, com baixo custo da função objetivo podem se localizar em regiões completamente distante daquelas indicada pelo senso comum (ver Capítulo 7) conduzindo à situações de desperdício energético e de material. A utilização de um algoritmo como o implementado pode não só indicar estados ótimos como ainda, dado seu baixo tempo de processamento, operar "on-line" otimizando o processo para alterações em seu ambiente.

APÊNDICE NÚMERO 1

Neste apêndice apresenta-se o valor das propriedades físicas dos compostos utilizados na simulação das colunas, bem como o desenvolvimento e estabelecimento de algumas das correlações utilizadas ao longo do trabalho no tocante a estas propriedades.

1) Propriedades físicas

Para escolha das propriedades físicas do sistema SIHCl_3 - SICl_4

1.1 - Capacidade calorífica para a fase líquida :

$$\text{SIHCl}_3 - C_p = 0,200 \text{ cal/g. } ^\circ\text{C}$$

$$\text{-SICl}_4 - C_p = 0,188 \text{ cal/g. } ^\circ\text{C}$$

1.2 - Capacidade calorífica para a fase vapor :

$$\text{SIHCl}_3 - C_v = 0,136 \text{ cal/g. } ^\circ\text{C}$$

$$\text{-SICl}_4 - C_p = 0,128 \text{ cal/g. } ^\circ\text{C}$$

Os valores da capacidade calorífica, tanto para a fase líquida quanto vapor, são praticamente constantes para a região de trabalho considerada para a coluna.

2) Calor de vaporização :

Os valores do calor de vaporização, para ambas as fases, apresentam uma variação linear com a temperatura expressa por

2.1 - SiHCl_3

$$\Delta H = 50,0 - 0,14 t \text{ , } t \text{ em } ^\circ\text{C e } \Delta H \text{ em cal/g.}$$

2.2 - SiCl_4

$$\Delta H = 48,13 - 0,102 t \text{ , } t \text{ em } ^\circ\text{C e } \Delta H \text{ em cal/g.}$$

3) Densidade

3.1 - Densidade do líquido

A densidade dos compostos, na fase líquida, para a faixa de temperatura utilizada, apresenta variação linear expressa por :

3.1 - SiHCl_3

$$\rho_1 = -0,002t + 1,377 \text{ , } t \text{ em } ^\circ\text{C e } \rho \text{ em g/cm}^3$$

3.2 - SiCl_4

$$\rho_2 = -0,002t + 1,52 \text{ , } t \text{ em } ^\circ\text{C e } \rho \text{ em g/cm}^3.$$

3.2 - Densidade em fase vapor

Para o cálculo da densidade em fase vapor utilizaremos a equação dos gases

$$PV = \eta RT,$$

com $R = 82,057 \text{ cm}^3 \cdot \text{atm} / ^\circ\text{K} \cdot \text{mol}$.

3.1 - SiHCl_3

Para uma pressão de 1,0 atm teremos

$$1,0 \times V = 1,0 \times 82,057 \times 304,95, \text{ e logo } V = 25023,3 \text{ cm}^3.$$

Para um mol a densidade será

$$d_v = \frac{135,43}{25023,3}, \text{ e } d_v = 0,00541 \text{ g/cm}^3$$

3.2 - SiCl_4

Para uma pressão de 1,0 atm teremos

$$1,0 \times V = 1,0 \times 82,057 \times 330,55 \text{ e logo } V = 27123,0 \text{ cm}^3.$$

Para um mol a densidade será

$$d_v = \frac{169,9}{27123,0}, \text{ e } d_v = 0,00626 \text{ g/cm}^3$$

4) Coeficientes da equação de Antoine

Estes coeficientes foram obtidos a partir de uma regressão exponencial partindo-se dos diversos dados coletados sobre a pressão de vapor para diferentes pontos

4.1 - SiHCl_3

$$\ln \hat{P}_1^{\circ} = 10,686 - \frac{3241,681}{T - 1,524}, \text{ T em graus absolutos e } \hat{P}_1^{\circ} = \text{atm.}$$

4.2 - SiCl_4

$$\ln \frac{P_2}{P_2^0} = 6,646 - \frac{1452,201}{T - 111,922} \quad , \quad T \text{ em graus absolutos e } P_2^0 = \text{atm.}$$

5) Coeficientes de atividade γ :

Os coeficientes de atividade são utilizados para compensar desvios existentes no afastamento do comportamento não-ideal nas relações de equilíbrio de uma mistura multicomponente. Existem diversos procedimentos para cálculo e compensação destes desvios, cada qual envolvendo determinadas considerações e propriedades dos compostos. Para aplicação neste trabalho optou-se pela utilização das relações de van Laar [Van Winckle,1963] que , para uma mistura binária são dadas por

$$T(\ln \gamma_1) = \frac{B}{\left[1 + A \left(x_1/x_2\right)\right]^2} \quad , \quad T(\ln \gamma_2) = \frac{A B}{\left[A + \left(x_2/x_1\right)\right]^2}$$

onde :

T = temperatura do estágio, °K

x_1 = fração molar líquida do componente 1 na mistura

x_2 = fração molar líquida do componente 2 na mistura

Os coeficientes A e B podem ser obtidas a partir dos dados relacionados com o ponto crítico do sistema :

$$A = \frac{b_1}{b_2}, \quad B = \frac{b_1}{R} \left\{ \frac{a_1^{0,5}}{b_1} - \frac{a_2^{0,5}}{b_2} \right\}^2$$

com os valores de a_i e b_i sendo dados por

$$b_i = \frac{R T_{c_i}}{8 P_{c_i}} \quad [l. \text{mol}^{-1}], \quad a_i = \frac{27(R T_{c_i})^2}{64 P_{c_i}} \quad [l^2. \text{atm. mol}^{-2}]$$

R = constante dos gases, igual a $0,082$, $l. \text{atm. mol}^{-1} T^{-1}$

T_{c_i} = temperatura crítica do composto i , $^{\circ} K$

P_{c_i} = pressão crítica do composto i , atm

Para os compostos considerados, o SiHCl_3 e o SiCl_4 , tem-se os seguintes valores para o ponto crítico :

COMPOSTO	PRESSÃO (ATM.)	TEMPERATURA ($^{\circ}K$)
SiHCl_3	40,6	479,15
SiCl_4	37,1	506,95

Os valores dos parâmetros a_i e b_i serão dados por

$$b_1 = \frac{0,082 \times 479,15}{8 \times 40,6} = 0,12096 \quad l. \text{mol}^{-1}$$

$$a_1 = \frac{27 (0,082 \times 479,15)^2}{64 \times 40,6} = 16,0408 \quad l^2. \text{atm. mol}^{-2}$$

$$b_2 = \frac{0,082 \times 506,95}{8 \times 37,1} = 0,14006 \text{ l. mol}^{-1}$$

$$a_1 = \frac{27 (0,082 \times 506,95)^2}{64 \times 37,1} = 19,6502 \text{ l}^2 \text{ atm. mol}^{-2}$$

Os parâmetros da equação de atividade serão

$$A = \frac{0,120}{0,140} = 0,8571$$

$$B = \frac{0,120}{0,082} - \left\{ \frac{16,044^{0,5}}{0,120} - \frac{19,65^{0,5}}{0,140} \right\}^2 = 4,309508$$

resultando para os coeficientes de atividade

$$\text{Tln}\gamma_1 = \frac{4,309508}{\left\{ 1 + 0,8571 \left(x_1/x_2 \right) \right\}^2}, \quad \text{Tln}\gamma_2 = \frac{30,6936}{\left\{ 0,8571 + \left(x_2/x_1 \right) \right\}^2}$$

APENDICE 2 - CÁLCULO DOS INTERNOS DA COLUNA

1) Dados introdutórios

A coluna considerada é do tipo placa perfurada, com vertedouro. Os dados iniciais de projeto são dados na Tabela 1 a seguir e as propriedades dos compostos constam do Apêndice 1. a sequência de cálculo segue os procedimentos indicados por Van Winckle [Van Winckle,1967] onde uma explicação mais detalhada dos símbolos e equações utilizadas pode ser encontrada. A coluna calculada será a de alta-pureza, cujos dados de regime constam do Apêndice 3; a sequência de cálculo para as outras duas colunas utilizadas neste trabalho segue procedimento idêntico sendo desnecessário sua apresentação.

Serão calculados simultaneamente dois estágios, um no topo e outro na base da coluna, respondendo assim pelos dois pontos com maior valor diferencial de temperatura e pressão. Os valores encontrados para a base serão considerados válidos para a seção de separação ; os do topo para a seção de retificação. As fórmula e páginas referidas são relativas à referência citada [Van Winckle,1967]

O projeto dos internos de uma coluna de destilação constitui procedimento bastante específico ; sua apresentação neste Apêndice se justifica pelas informações que adiciona ao Capítulo 2 e também

pela ilustração dos diversos procedimentos empíricos, aproximações e correlações heurísticas relativas à modelagem do processo.

Tabela 1 - Dados iniciais de projeto da coluna

DADOS DE PROJETO	TOPO	BASE
. PRESSAO, PSIA	20,0	30,0
. TEMPERATURA, °F	89,06	135,62
. TENSAO SUPERF. σ , DYNA/CM	16,00	18,00
. DENS. LIQUIDO, LB/Pes ³	81,95	87,70
. DENS. VAPOR, LB/Pes ³	0,39	0,39
. REFLUXO INTERNO, L/V	0,625	1,11
. VAPOR MAXIMO, LB/H	7166,95	7765,60
. LIQUIDO MAXIMO, LB/H	4778,00	8514,00
. VAPOR MAXIMO (QV), Pes ³ /S	5,89	5,52
. LIQUIDO MAXIMO, Pes ³ /S	0,0162	0,0269
. LIQUIDO MAXIMO (QL), GPM	7,271	12,073
. ESPACAMENTO ENTRE OS ESTAGIOS, Pes	1,00	1,00

2. Diâmetro da coluna

Baseado na condição de 80% máximo de alagamento ("flooding"), sem respingadouro ("splash baffle"). A área ativa da coluna será igual a $A_A = A_N = A - A_D$, para as duas seções da coluna.

2.1. Cálculo do fator de capacidade P_F

$$\begin{array}{ccc}
 \text{-Topo} & & \text{-Base} \\
 P_F = \frac{L}{V} \left\{ \frac{\rho_V}{\rho_L} \right\}^{0,5} = & & P_F = \frac{L}{V} \left\{ \frac{\rho_V}{\rho_L} \right\}^{0,5} =
 \end{array}$$

$$P_F = 0,625 \left\{ \frac{0,33}{81,95} \right\}^{0,5} =$$

$$P_F = 1,113 \left\{ \frac{0,390}{87,70} \right\}^{0,5} =$$

$$P_F = 0,0396$$

$$P = 0,0742$$

Levando-se estes valores na figura 13.21, pag. 512 [Van Winckle, 1967], juntamente com o espaçamento entre os pratos obtém-se o valor de P_c :

$$P_c = 0,280$$

$$P_c = 0,260$$

Efetuando-se agora a correção do fator de capacidade pela equação 13.25 da p. 256 :

$$(P_c)_{corr} = P_c \left\{ \frac{\sigma}{20,0} \right\}^{0,2}$$

$$(P_c)_{corr} = P_c \left\{ \frac{\sigma}{20,0} \right\}^{0,2}$$

$$(P_c)_{corr} = 0,280 \left\{ \frac{16,0}{20,0} \right\}^{0,2}$$

$$(P_c)_{corr} = 0,260 \left\{ \frac{18,0}{20,0} \right\}^{0,2}$$

$$(P_c)_{corr} = 0,268$$

$$(P_c)_{corr} = 0,255$$

É necessário calcular-se a velocidade do vapor em pés/s :

$$U_{VN} = P_c \left\{ \frac{\rho_L - \rho_V}{\rho_V} \right\}^{0,5}$$

$$U_{VN} = P_c \left\{ \frac{\rho_L - \rho_V}{\rho_V} \right\}^{0,5}$$

$$U_{VN} = 0,268 \left\{ \frac{81,95 - 0,33}{0,33} \right\}^{0,5}$$

$$U_{VN} = 0,268 \left\{ \frac{87,70 - 0,39}{\rho_V} \right\}^{0,5}$$

$$U_{VN} = 4,21 \text{ pés/s}$$

$$U_{VN} = 3,815 \text{ pés/s}$$

Para uma condição de 80% de alagamento a área A_N será

$$A_N = \frac{Q_v}{U_{VN}(0,8)}$$

$$A_N = \frac{Q_v}{U_{VN}(0,8)}$$

$$A_N = \frac{5,890}{(4,21)(0,8)}$$

$$A_N = \frac{5,518}{(3,815)(0,8)}$$

$$A_N = 1,75 \text{ pés}^2$$

$$A_N = 1,81 \text{ pés}^2$$

Vamos considerar a área do vertedouro igual à 1/10 do valor da área livre para a passagem do vapor, A_N . Portanto, $A_D = 0,1 A_N$. A área total será

$$A = (1,75/0,9) = 1,944 \text{ pés}^2$$

$$A = (1,81/0,9) = 2,01 \text{ pés}^2$$

O valor do diâmetro da coluna, para as duas seções consideradas :

$$A = \frac{\pi D^2}{4}$$

$$A = \frac{\pi D^2}{4}$$

$$D = \left\{ \frac{4 \times 1,944}{\pi} \right\}^2$$

$$D = \left\{ \frac{4 \times 2,010}{\pi} \right\}^2$$

$$D = 1,573 \text{ pés}$$

$$D = 1,600 \text{ pés}$$

Dada a pequena diferença existente nos dois diâmetros calculados vamos adotar um valor único igual a 1,600 pés para toda a coluna. É necessário então verificar se, para o diâmetro escolhido, o percentual de alagamento da coluna não ultrapassa o valor máximo adotado de 80%, para a pior condição de operação :

$$A_N = \frac{Q_v}{U_{VN} P_F}$$

$$A_N = \frac{Q_v}{U_{VN} P_F}$$

$$P_F = \frac{Q_V}{U_{VN} A_N} = \frac{5,89}{4,6 \times 1,81}$$

$$P_F = 70,1 \%$$

$$P_F = \frac{Q_V}{U_{VN} A_N} = \frac{5,52}{3,82 \times 1,809}$$

$$P_F = 80,0 \%$$

A coluna está operando em região segura. A nova área é $A = 2,011 \text{ pés}^2$. A área ativa será $A_A = A - A_D$ fornecendo $A_A = 1,8099$. No tocante à escolha de sua geometria interna o mais recomendado para a faixa de vazão escolhida é do tipo "cross-flow". Para este tipo o valor recomendado para a espessura do prato (Tabela 14.8, p. 585) é de #12 gage, correspondendo a $t_p = 0,0825 \text{ pol.}$ O diâmetro do furo assumido será de $d_h = 1/8 \text{ pol.}$, ou seja, $d_h = 0,125 \text{ pol.}$ Pela Tabela 14.2, p. 572 vê-se que o valor percentual da área perfurada da coluna é da ordem de 6%, correspondendo a $0,1206 \text{ pés}^2$.

Calcula-se agora o valor de P , a distância entre o centro das perfurações, em polegadas. Utilizando-se a tabela 14.9, p. 586, para o valor percentual da área perfurada da coluna, obtém-se a relação $p/d_h = 3$, correspondendo a um diâmetro de um pé. Conforme recomendado na mesma Tabela, multiplica-se p por D^2 , obtendo um valor de 7,68, supondo-se uma distribuição triangular. Sendo $P = p \times d_h$

$$P = 0,96 \text{ pol.}$$

A altura do vertedouro, h_v , será selecionada igual a uma polegada. A área do escoadouro ("downcomer") será considerada como sendo da ordem de 1/10 da área total da coluna. Para esta relação verifica-se, pela Tabela 14.10, p. 589, $l_v/D = 0,7267$ e portanto o comprimento do vertedouro é igual

$$l_v = 0,7267 (D_{col}) = 0,7267 (1,600) = 1,163 \text{ pés}$$

$$l_v = 13,93 \text{ polegadas}$$

3. Calculo do arraste da coluna

Calculou-se, no início, que $P_F = 0,0396$ e $0,0742$ para o topo e a base da coluna, respectivamente. Para estes valores utiliza-se a figura 13.26, p. 538 que fornece

$$\psi_T = 0,05$$

$$\psi_B = 0,04$$

valores estes bastante inferiores a 10%, que é o valor máximo recomendado para projeto. No tocante ao arraste, portanto, a coluna está operando em região segura.

4) Queda de Pressão

A fórmula de Francis é dada por

$$h_{ov} = 0,48 F_v \left\{ \frac{Q_L}{l_v} \right\}^{0,666}$$

O valor de F_v será fornecido pela fig. 13.7 , p. 508 com o valor de $\frac{Q_L}{(l_v)^{2,5}}$. Portanto

$$\frac{Q_L}{(l_v)^{2,5}} = \frac{7,271}{(1,163)^{2,5}} =$$

$$\frac{Q_L}{(l_v)^{2,5}} = \frac{12,073}{(1,163)^{2,5}} =$$

$$\frac{Q_L}{(l_v)^{2,5}} = 4,98$$

$$\frac{Q_L}{(l_v)^{2,5}} = 8,276$$

Para $l_v / D = 0,727$ obtém-se, pela figura 13.7 p. 508

$$F_v = 1,04$$

$$F_v = 1,06$$

Calcula-se então a altura do líquido sobre o vertedouro pela fórmula de Francis :

$$h_{ov} = 0,48(1,04) \left\{ \frac{7,271}{13,93} \right\}^{0,666} \quad h_{ov} = 0,48(1,06) \left\{ \frac{12,073}{13,93} \right\}^{0,666}$$

$$h_{ov} = 0,3253 \text{ polegadas}$$

$$h_{ov} = 0,462 \text{ polegadas}$$

A altura do vertedouro, nos dois casos, é igual a 1 polegada. É necessário calcular agora a perda na coluna d'água necessária à superação da tensão superficial do líquido e evitar o borbulhamento. Pela equação 13.22, p. 521

$$h_{\sigma} = \frac{0,04 \sigma}{\rho_L d_h}$$

$$h_{\sigma} = \frac{0,04 \sigma}{\rho_L d_h}$$

$$h_{\sigma} = \frac{0,04 \times 0,16}{81,95 \times 0,125}$$

$$h_{\sigma} = \frac{0,04 \times 0,18}{87,70 \times 0,125}$$

$$h_{\sigma} = 0,062$$

$$h_{\sigma} = 0,065$$

Calcula-se agora h_o , a queda de pressão correspondente à passagem de vapor através das perfurações. Pela equação 13.16, p. 519 este fator será dado por

$$h_o = 0,186 \frac{\rho_v}{\rho_L} \left\{ \frac{U_h}{C_o} \right\}^2$$

É portanto necessário avaliar C_o e U_h . A avaliação de C_o pode

ser feita a partir da figura 13.18, p. 521 usando a relação entre a área perfurada do estágio e a área ativa . Como esta relação é igual a 0,6 obtem-se na figura $C_o \cong 0,73$, para uma relação entre a espessura do prato e o diâmetro da perfuração = $0,0825/0,125 = 0,66$. O valor de U_h pode ser encontrado a partir das equações existentes na página 523:

$$U_h = \frac{Q_v}{(A_T - A_D) \times 0,60}$$

$$U_h = \frac{5,89}{(1,809) \times 0,60}$$

$$U_h = 54,28 \text{ pés/s}$$

$$U_h = \frac{5,518}{(1,809) \times 0,60}$$

$$U_h = 50,85 \text{ pés/s}$$

Tem-se , portanto que

$$h_o = 0,186 \frac{0,33}{81,95} \left\{ \frac{54,28}{0,73} \right\}^2$$

$$h_o = 4,13 \text{ polegadas}$$

$$h_o = 0,186 \frac{0,39}{87,70} \left\{ \frac{50,85}{0,73} \right\}^2$$

$$h_o = 3,97 \text{ polegadas}$$

Calcula-se agora o fator de aeração β . Para isto é preciso calcular a expressão $F_{VA} = U_{VA} (\rho_v)^{0,5}$, onde U_{VA} é a velocidade do vapor

$$F_{VA} = \frac{5,89}{1,085} \left\{ 0,33 \right\}^{0,5}$$

$$F_{VA} = 3,10$$

$$F_{VA} = \frac{5,52}{1,085} \left\{ 0,39 \right\}^{0,5}$$

$$F_{VA} = 3,18$$

Levando estes valores na figura 13.16 verifica-se que são muito elevados. Portanto a abertura escolhida, 6%, está muito pequena e conseqüentemente a velocidade do vapor está muito elevada. Vamos aumentar a abertura para 10% , o que fornece uma área perfurada de 0,181 pés². Este valor vai alterar o espaçamento entre os furos, a ser visto posteriormente. Com isto o valor de U_h vai ser alterado para

$$U_h = \frac{5,89}{(1,809) \times 0,10}$$

$$U_h = 32,54 \text{ pés/s}$$

$$U_h = \frac{5,518}{(1,809) \times 0,10}$$

$$U_h = 30,50 \text{ pés/s}$$

Recalculando-se h_o

$$h_o = 0,186 \frac{0,33}{81,95} \left\{ \frac{32,54}{0,73} \right\}^2$$

$$h_o = 1,48 \text{ polegadas}$$

$$h_o = 0,186 \frac{0,39}{87,70} \left\{ \frac{30,50}{0,73} \right\}^2$$

$$h_o = 1,44 \text{ polegadas}$$

Com isto o valor de F_{VA} será

$$F_{VA} = \frac{32,54}{1,085} \left\{ 0,33 \right\}^{0,5}$$

$$F_{VA} = 1,86$$

$$F_{VA} = \frac{30,50}{1,085} \left\{ 0,39 \right\}^{0,5}$$

$$F_{VA} = 1,90$$

Levando-se estes valores na figura 3.16 , obtem-se os valores de β

$$\beta = 0,6$$

$$\beta = 0,6$$

A queda de pressão total na coluna será dada por

$$\Delta_{HT} = \beta (h_v + h_{ov}) + h_o + h_\sigma$$

$$\Delta_{HT} = \beta (h_v + h_{ov}) + h_o + h_\sigma$$

$$\Delta_{HT} = 0,6(1,0 + 0,323) + 1,48 + 0,062$$

$$\Delta_{HT} = 0,6(1,0 + 0,462) + 1,44 + 0,065$$

$$\Delta_{HT} = 2,33 \text{ polegadas}$$

$$\Delta_{HT} = 2,33 \text{ polegadas}$$

4. Cheque do "weep point "

Na figura 13.22, para

$$h_v + h_{ov} = 1,323$$

$$h_v + h_{ov} = 1,462$$

obtem-se

$$h_o + h_\sigma = 0,40$$

$$h_o + h_\sigma = 0,45$$

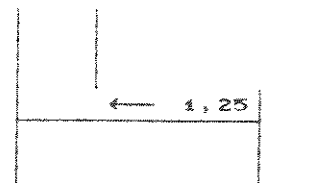
valores estes bastante inferiores aos encontrados para o projeto da coluna que foram respectivamente, $h_o + h_\sigma = 1,542$ e $h_o + h_\sigma = 1,505$. Portanto ambas as seções estão abaixo do limite e operarão com segurança.

5. Líquido retido no escoadouro

O líquido retido no escoadouro será dado por

$$H_D = [\Delta_{HT} + h_v + h_{ov} + h_d + \Delta/2] \times 1/\phi$$

Seja a altura de escoamento sob o escoadouro igual a 1,25 polegadas. A área sob o escoadouro será então dada por



$$A_{AP} = \frac{1,25 \times 13,93}{144} \quad \text{com } A_{AP} = 0,098 \text{ pés}^2$$

A perda hidráulica no escoadouro será dada por

$$h_d = 0,03 \left\{ \frac{Q_L}{100 A_d} \right\}^2 \quad h_d = 0,03 \left\{ \frac{Q_L}{100 A_d} \right\}^2$$

$$h_d = 0,03 \left\{ \frac{7,271}{100 \times 0,098} \right\}^2 \quad h_d = 0,03 \left\{ \frac{12,073}{100 \times 0,098} \right\}^2$$

$$h_D = 0,0165 \text{ polegadas}$$

$$h_D = 0,0455$$

$$H_D = 6,3 \text{ polegadas, para}$$

$$H_D = 6,6 \text{ polegadas, para}$$

$$\phi = 1/2$$

$$\phi = 1/2$$

A altura de borbulhamento, para as duas seções da coluna, é inferior ao espaçamento adotado entre os estágios indicando que a coluna está operando em bases seguras

6. Tempo de residência do líquido no escoadouro

O limite mínimo recomendado, para a coluna considerada, é da ordem de 3 s. O tempo de residência será dado por

$$T_R = \frac{A_d \times H_D}{Q_L}, \quad H_D \text{ em pés.} \quad T_R = \frac{A_d \times H_D}{Q_L}, \quad H_D \text{ em pés.}$$

$$T_R = \frac{0,2011 \times 0,525}{0,0162}$$

$$T_R = \frac{0,2011 \times 0,55}{0,0269}$$

$$T_R = 6,5 \text{ segundos}$$

$$T_R = 4,11 \text{ segundos}$$

O valor obtido está acima do limite mínimo recomendado e portanto a coluna satisfaz plenamente.

1.- Avaliação do Jacobiano da Coluna de Destilação

O jacobiano da coluna será calculado a partir das equações dinâmicas dos balanços da coluna (capítulo 2) com a consideração que as vazões são constantes em relação às composições. Esta formulação é muitas vezes referida como " Matriz dos Coeficientes" pois embora se assemelhe bastante ao Jacobiano da coluna é, na realidade, uma aproximação do mesmo.

Lembrando que as frações em fase vapor podem ser expressas, para um estágio genérico e um composto i por $y_{n,i} = K_{n,i} x_{n,i}$ obtem-se :

1) Base da coluna :

$$\frac{\partial f_1}{\partial x_B} = (-L_1 / U_B) - (V_B / U_B) \{ K_{B,i} - 1 \}$$

$$\frac{\partial f_1}{\partial x_1} = (-L_1 / U_B) \quad \frac{\partial f_1}{\partial x_j} = 0, \quad \forall j \geq 2$$

2) Estágio genérico até o estágio de alimentação :

$$\frac{\partial f_j}{\partial x_{j-1}} = (V_{j-1} / U_j) K_{j-1,i}$$

$$\frac{\partial f_j}{\partial x_j} = - (V_{j-1} / U_j) - (L_{j+1} / U_j) - (V_j / U_j) \{ K_{j,i} - 1 \}$$

$$\frac{\partial f_j}{\partial x_{j+1}} = (L_{j+1} / U_j)$$

3) Estágio de alimentação :

$$\frac{\partial f_j}{\partial x_{j-1}} = (V_{j-1} / U_j) K_{j-1,i}$$

$$\frac{\partial f_j}{\partial x_j} = - (V_{j-1} / U_j) - (L_{j+1} / U_j) - (V_j / U_j) \{ K_{j,i} - 1 \} - (F_l / U_j)$$

$$\frac{\partial f_j}{\partial x_{j+1}} = (L_{j+1} / U_j)$$

4) Estágio acima da alimentação :

$$\frac{\partial f_j}{\partial x_{j-1}} = (V_{j-1} / U_j) K_{j-1,i}$$

$$\frac{\partial f_j}{\partial x_j} = - (V_{j-1} / U_j) - (L_{j+1} / U_j) - (V_j / U_j) \{ K_{j,i} - 1 \} - F_v$$

$$\frac{\partial f_j}{\partial x_{j+1}} = (L_{j+1} / U_j)$$

5) Topo da coluna :

$$\frac{\partial f_j}{\partial x_{j-1}} = (V_{j-1} / U_j) K_{j-1,i}$$

$$\frac{\partial f_j}{\partial x_j} = - (V_{j-1} / U_j) - (R / U_j) - (V_j / U_j) \{ K_{j,i} - 1 \}$$

$$\frac{\partial f_j}{\partial x_{j+1}} = (R / U_j)$$

2. Dados de regime das três colunas (1, 2 e 3).

DADOS	COLUNA 1	COLUNA 2	COLUNA 3
. ESTÁGIOS	21	27	32
. ALIMENTAÇÃO	12	13	17
. REFLUXO (M/h)	9000,0	12500,0	16000,0
. DESTILADO (M/h)	8000,0	8000,0	8000,0
. BASE (M/h)	2000,0	2000,0	2000,0
. ALIMENT. (M/h)	10000,0	10000,0	10000,0
. Q_B (Mcal/h)	105,58	127,188	148,72
. Q_C (Mcal/h)	104,89	126,60	148,08
. DIAMETRO (cm)	48,77	48,77	64,00
. COMP. VERT. (cm)	35,38	35,38	46,51
. ALTURA VERT. (cm)	2,54	2,54	3,81
. TIPO	PLACA PERF.	PLACA PERF.	PLACA PERF.
. EFICIÊNCIA	1,0	1,0	1,0
. PRESSÃO (atm)	1,0	1,0	1,0
. ESP. ESTAGIOS (cm)	30,0	30,0	45,0

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Aarle, L. G. M. , "Variations of Process Parameters : A Pilot Study of Adaptive Control", p. 265, IFAC Symp. Sis. Ident., 1961
- Agarwal, M. and D. E. Seborg, " Self-tuning Controllers for Nonlinear Systems", Automatica , vol. 23, p. 214 (1987a).
- Agarwal, M. and D. E. Seborg, " A Multivariable Nonlinear Self-tuning Controller ", AIChE J., vol. 33, p. 1379, (1987b).
- Agarwal, M. and D. E. Seborg, " Nonlinear Self-tuning Control of a Pilot-Scale Distillation Column ", Proc. of 8th IFAC S.I.S.P.E. , China, 1988.
- Aiken R. C. and L. Lapidus, "An Effective Numerical Integration Method for Typical Stiff Systems", AIChE J., vol. 20, p. 368, 1974.
- Alexander, R, "Diagonally Implicit RK Methods for Stiff ODEs", SIAM J. Numer. Analysis., Vol. 14, p. 1006, 1977.
- Amorim, S. G; J. P. Barthelemy and C. C. Ribeiro, " Clustering and Clique Partitioning : Simulated Annealing and Tabu Search Approaches", Nota Interna, PUC-RJ, 1989.
- Anbumani, K.; L. M. Patnaik and I. G. Sarma, " Self-tuning minimum variance control of nonlinear systems of the Hammerstein model", IEEE Trans. Aut. Control, AC - 26, p. 959 (1981).
- Arkun, Y. and G. Stephanopoulos, " Studies in the Syntesis of Control Structures for Chemical Processes", AIChE. J., Vol. 27, n. 5, p. 779, 1981.
- Åström. K. J., "Computer Control of a Paper Machine - An Application of Linear Stochastic Control Theory ", IBM Journal, p. 389, July 1967.
- Åström. K. J., " Introduction to Stochastic Control Theory ", Academic Press, 1970.
- Åström. K. J. and B. Wittenmark, "On Self-tuning Regulators",

- Automatica, vol 9, 185 (1973).
- Åström, K. J. and B. Wittenmark, "Adaptive Control", Addison-Wesley, New-York, 1989.
- Axelsson, O., "A Class of A-Stable Methods", Nordisk Tidskr. Informationsbehandling (BIT), v.9, p. 185, 1969.
- Bárceñas-Urbe, L and J. A. Gallegos, "Adaptive Multivariable Control Applied to a Binary Distillation Column", IFAC Adap. Syst. Control and Signal Process., San Francisco, USA, 1983.
- Bayoumi, M. M.; K. Y. Wong and M. A. El-Bagoury, "A Self-Tuning Regulator for Multivariable Systems", Automatica, vol. 17, p. 575, 1981
- Bazaraa, M and C. M. Shetty, Nonlinear Programming - Theory and Algorithms, John Wiley, 1979.
- Bennalou, and D. E. Seborg, "A Compartmental Model for Distillation Column", AIChE J., 1986.
- Beaverstock, M. C. and P. Harriott, "Experimental Closed-Loop Control of a Distillation Column", Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop., vol. 12, n. 4, 1973.
- Bickart, T. A., "An Efficient Solution Process for Implicit Runge-Kutta Methods", SIAM J. Numer. Anal., vol. 14, n. 6, p. 1022, 1977.
- Binder, Z. and Calvillo, L., "Dynamic Control of a Pilot Distillation Column by Digital Computer", p. 287
- Bojnowski, J.J ; R. M. Groghan and R. M. Hoffman, "Direct and Indirect Material Balance Control", Chemical Engineering Progress, p. 54, September, 1976.
- Borison, U., "Self-Tuning Regulator for a Class of Multivariable Systems", Automatica, vol 15, p. 209, 1979
- Borisson, U and B. Wittenmark, "An Industrial Application of a Self-Tuning Regulator", p. 76
- Borreson, R. W., C. L. Yaws; G. Hsu and R. Lutwack, "Physical and Thermodynamic Properties of Silane", Solid State Technology, Vol. 21, n. 1, p. 43, 1978.
- Boston, J. F. and S. L. Sullivan, "An Improved Algorithm for Solving the Mass Balance Equations in Multistage Separation Processes", The Canadian Journal of Chemical Engineering, Vol. 50, n.5,

- 1972.
- Boyd, D.M., "Fractionation Column Control", *Chemical Engineering Progress*, Vol. 71, n.6, 1975.
- Buckley, P. S., "Distillation Column Design Using Multivariable Control - Part I : Process and control design", *Instrumentation Technology*, p. 115, September, 1978.
- Buckley, P. S. and D. Rollins, "Inverse Response in a Distillation Column, *Chemical Engineering Progress*, p. 83, June, 1975.
- Burnham, K. J.; D. J. G. James and D. N. Shields, " Self-tuning Control of Bilinear Systems, *Optimal Control Applications & Methods*, vol 8, p. 147, 1987.
- Butcher, J. C., "Implicit Runge-Kutta Processes", *Math. Comp.*, vol. 18, p. 50, 1964.
- Butcher, J. C., "Integration Processes Based on Radau Quadrature Formulas", *Math. Comp.*, vol. 18, P. 50, 1964.
- Calahan, D. A., " Stability Analysis of Numerical Integration", *Proc. IEEE*, Vol. 55, p. 2016, 1967.
- Cash. J. R., " Diagonally Implicit RK Formulae with Error Estimates", *J. Inst. Math. Applic.*, Vol. 24, p. 293, 1979.
- Cheng, D. K. , "Analysis of Linear Systems", Addison-Wesley, USA, 1972.
- Cheung, T. F. and Marlin, T. E., " Using Dynamic Simulation to Evaluate Distillation Tower Regulatory Control Schemes", *Summer Computer Simulation Conference*, p. 462, USA, 1982.
- Chien, I.; D. A. Mellichamp and D. E. Seborg, " Multivariable Self-Tuning Control Strategy for Distillation Columns", *Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop.*, vol. 25, n. 3, 1986.
- Choe, T.P, Ph. D. Thesis, Lehigh University, 1985.
- Choe, Y., and W. L. Luyben, " Rigorous Dynamic Models of Distillation Columns, *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 26, p. 2158, 1987.
- Clarke, D. W., Hodgson, A. J. and Tuffs, P. S., " The Offset Problem and K-Incremental Predictor in Self-Tuning Control", *Proc. IEEE*, Vol. 130, Pt. D, n. 5, p. 217, 1983.
- Clarke, D. W., C. Mohatdi and P. S Tuffs, " Generalized Predictive Control - Part I. The Basic Algorithms, *Automatica*, vol 23, n.

- 2, p. 137, 1987.
- Clarke, D. W., C. Mohatdi and P. S Tuffs, " Generalized Predictive Control - Part II. Extensions and Interpretations", *Automatica*, vol 23, n. 2, p. 149, 1987.
- Clogh, D. E. and J. D. Lovece, " A multivariable Self-tuning Regulator Applied to a Distillation Column ", *Proc. 1981 Joint Auto. Control Conf.*, Charlottesville, VA (1981).
- Coelho, A. A. R.; W. C. Amaral and G. Favier, " A Multivariable Generalized Minimum Variance Controller with Zero-Steady State Error ", *26th A.A.C.C.C, Illinois*, 1988.
- Coelho, A. A. R. e L. Arruda, "Implementação de um Controlador Auto-Ajustável com Detecção de Ruptura do Modelo", *3º Congresso Nacional de Automação Industrial*, S. Paulo, 198.
- Cutler, C. R. and Ramaker, B. L., " Dynamic Matrix Control - A Computer Control Algorithm, *American Control Conference*, 1980.
- Dahhou, B.; H. Youlal; A. Hmamed and A. Majdoul, "Identification and Control of A Distillation Column ", *9th World Congress of IFAC*, vol 3, p.122, Budapest, 1984.
- Dahlquist, G. G., "A Special Stability Problem for Linear Multistep Methods" , *Nordisk Tidskr. Informationsbehandling (BIT)*, v.3, p. 27, 1963.
- Dalqvist, S. A., " Control of the Top and Bottom Product Compositions in a Pilot Distillation Column", *3rd. Int. Symp. Distillation, I. Chem. Symp. Ser.*, n. 56, 1979.
- Dalqvist, S. A., " Control of a Distillation Column Using Self-tuning Regulators", *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, vol. 59, 118 (1981).
- Davidson, J. F., " The Transient Behaviour of Plate Distillation Columns", *Trans. Instn. Chem. Engrs*, vol. 34, p. 44, 1956.
- De Lorenzo, F.; G. Guardabassi; A. Locatelli and S. Rinaldi, " On The Assymmetric Behaviour of Distillation Systems", *Chemical Engineering Science*, vol. 27, p. 1211, 1972.
- Distefano, G. P., "Mathematical Modeling and Numerical Integration of Multicomponent Batch Distillation Equations", *AICHE J.*, vol. 14, p. 191, 1968.
- Dochain, D. and G. Bastin, " Adaptive identification and control

- algorithms for nonlinear bacterial growth systems", *Automatica*, vol. 20, p. 621 (1984).
- Drews, M. A., W. L. Schenck, J. D. Smith, J. Walker and C. L. Yaws, "Physical Properties of Semiconductor Industry Chlorosilanes", *Solid State Technology*, Vol. 16, n. 1, 1973.
- Economopoulos, A. E., "A fast Computer Method for Distillation Calculations", *Chemical Engineering*, April, p. 91, 1978.
- Eckelmann, W. , "Erfahrungen mit einem Zustandbeobachter für die Regelung von Destillationskolonnen", *Regelungstechnische Praxis*, Heft 4, b. 120, 1980.
- Ehle, B., "High Order A-Stable Methods for the Numerical Solution of Systems of D.E.s", *Nordisk Tidskr. Informationsbehandling (BIT)*, v.8, p. 276, 1968.
- Espana. M. and Landau, D., "Reduced Order Bilinear Models for Distillation Columns", *Automatica*, vol 14, p. 345 (1978).
- Fauth, G. F. and Shinsky, F. G. , "Advanced Control of Distillation Columns, *Chemical Engineering Progress*, Vol 71, n. 6, 1975.
- Finco, M. V.; W. L. Luyben and R. E. Polleck, "Control of Distillation Columns with Low Relative Volatilities", *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 28, n. 1, p. 75, 1989.
- Fkirin, M. A., "Choice of Models for On-line Identification of MIMO Stochastic Systems", *Int. J. Systems Sci*, vol. 20, n. 4, p. 609, 1989.
- Foss, B. A., "Composition Control of Binary Distillation Columns Using Multivariable Optimal Control", *Modeling, Identification and Control*, vol. 4, n. 4, p. 195, 1983.
- Foulard, C. and G. Bornard, " Identification and System Parameter Estimation of Distillation Processes. A Case Study ", p. 167
- Fuentes, C. and W. L. Luyben, " Control of High-Purity Distillation Columns", *Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev.*, Vol. 22, p. 361, 1983.
- Gani, R.; C. A. Ruiz and I. T. Cameron, " A Generalized Model for Distillation Columns", *Computers and Chemical Engineering*, Vol. 10, n. 3, p. 181, 1986.
- Gallier, P. W. and McCune, L. C. , " Simple Internal Reflux Control ", *Chemical Engineering Progress*, Vol 70, n. 9, 1974.

- Georgiou, A.; C. Georgakis and W. L. Luyben, " Nonlinear Dynamic Matrix Control for High-Purity Distillation Columns", *AIChE J.*, vol. 34, n. 8, p. 1287, 1988.
- Gerasimov, Y. A., *Physical Chemistry*, Vol. 1, Editorial MIR, USSR, 19704.
- Gill, P. F. and Murray, W., "The Computation of Lagrange-Multiplier Estimates for Constrained Minimization", *Mathematical Programming*, Vol. 17, p. 32, 1970.
- Gilles, E. D and B. Retzbach, "Reduced Models and Control of Distillation Columns with Sharp Temperature Profiles", *IEEE Transactions on Automatic Control*, vol. AC-28, n. 5, p. 628, May 1983.
- Gomes, F. J. e Yamakami, A., " Considerações sobre a Modelagem de um Processo Não-linear para as Finalidades de Controle: O Caso de uma Coluna de Destilação", *Nota Interna Unicamp 011/88*, Unicamp, 1988.
- Gomes, F. J. e Yamakami, A., " Análise do Desempenho de Malhas de Controle para Colunas Ultra-Puras Mediante Simulação Digital", *3º Congresso Nacional de Automação Industrial*, Setembro, S. Paulo, 1988.
- Gomes, F. J. e Yamakami, A., " Otimização em Estado Estacionário de um Processo Não-linear : O Caso de uma Coluna de Destilação", *7º Congresso Brasileiro de Automática*, S. José dos Campos, Setembro, 1988.
- Gomes, F. J. e Yamakami, A., " Otimização em Estado Estacionário de um Processo Não-linear : O Caso de uma Coluna de Destilação", *Revista SRA : Controle e Automação* , Vol 2., n. 2, 1988.
- Gomes, F. J., " Pesquisas para Obtenção de Silício Grau Eletrônico", *Encontro de Química dos Sólidos e Síntese de Materiais Inorgânicos*, Academia Brasileira de Ciências, Rio de Janeiro, 1984.
- Gomes, F. J.; Coelho, A. A. R ; Amaral, W. C. and Yamakami, A., " Performance of a Linear Weighted and a Nonlinear Self-Tuning Controller Applied to a Distillation Column", *8th International Conference on Control Systems and Computer Science*, Bucharest, Romenia, May, 1989.

- Gomes, F. J.; Coelho, A. A. R.; Amaral, W. C. and Yamakami, A., "Adaptive Control of a Nonlinear Process : Comparison of Self-Tuning and Predictive Algorithms", IFAC Workshop on Evaluation of Adaptive Control Strategies in Industrial Applications, Tbilisi, USSR, October, 1989.
- Gomes, F. J.; Coelho, A. A. R.; Amaral, W. C. and Yamakami, A., "Comparison of Self-Tuning and Predictive Control Algorithms Applied To a Nonlinear Process", 28th IEEE Conference on Decision and Control, December, USA, 1989.
- Gomes, F. J.; Coelho, A. A. R.; Amaral, W. C. and Yamakami, A., "Controladores Auto-Ajustáveis Linear e Não-Linear Aplicados à um Processo Não-Linear : Algoritmos e Resultados", Revista SBA : Controle e Automação, 1990 (Em impressão).
- Gomes, F. J.; Coelho, A. A. R.; Amaral, W. C. and Yamakami, A., "Application of Multivariable Self-Tuning and Predictive Controller to an Ill-Conditioned Process : A Case Study", 11th World Congress International Federation of Automatic Control, Aug., Tallinn, 1990 (Aprovado).
- Gomes, F. J., " Montagem de uma Unidade Piloto para Produção de Silício Policristalino de Grau Eletrônico", Relatório Técnico Final - Projeto PETC, Cetec, Belo Horizonte, 1985.
- Gomes, F. J., " Estudo de Viabilidade para Implantação de uma Unidade Industrial de Silício-Poli de Grau Eletrônico", Relatório Técnico Final - Projeto PQSP, Cetec, Belo Horizonte, 1986.
- Gomes, F. J. e A. E. Marques, " Considerações sobre a Produção Industrial de Silício-Poli", 2º Encontro sobre Materiais na Industria Eletrônica e de Telecomunicações, Campinas, 1986.
- Hammarström, L. G.; K. V. Waller and K. C. Fagervik, "On Modeling Accuracy for Multivariable Distillation Control", Chem. Eng. Commun., vol. 19, p. 77, 1982.
- Howard, G. M., " Unsteady State Behaviour of Multicomponent Distillation Columns", AIChE J., Vol.16, n.6, p. 1022, 1970.
- Heckmann, M., "Das stochastische Modell für die destillative Fraktionierung - ein Beitrag zur Miniplant-Technik", Chem. Techn., 35, Heft 8, August 1983.

- Holland, C. D., *Multicomponent Distillation*, McGraw-Hill, New York, 1963.
- Hu, Y. C. and W. F. Ramirez, "Application of Modern Control Theory to Distillation Columns", *AIChE. Journal*, vol. 18, n.3, p. 479, 1972.
- Huckaba, C. E., F. P. May and F. R. Franke, "An Analysis of Transient Conditions in Continuous Distillation Operations", *Chemical Engineering Progress Symposium Series*, vol 59. n. 46, p. 39, 1963.
- Huffman, J. R. and H. C. Urey, "Fractional Isotopes Separation", *Ind. Eng. Chem.*, Vol. 29, p. 531, 1937.
- Hughart, C. L. and W. Kominek, "Designing Distillation Units for Controlability", *Instrumentation Technology*, p. 71, May, 1977.
- Isermann, R., "Practical Aspects of Process Identification ", *Automatica*, vol. 16, p. 575, 1980.
- Isermann, R. , *Digital Control Systems*, Springer-Verlag, 1981.
- Jinshou, Y.; Q. Haifeng and C. Guoli, " Simple Self-Tuning Control of Binary Distillation Columns", 10th World IFAC Congress, vol. 8, p.432, German, 1987.
- Karam, K. Z.; K. Warwick and M. Farsi, " An Implicit Pole-Assignment Self-tuning Regulator", *Optimal Control Applications & Methods*, vol 7, p. 127, 1986.
- Kershenbaum, L. S. and T.R. Fortescue, "Implementation of On-line Control in Chemical Process Plants", *Automatica*, vol. 17, n.6, p. 777, 1981.
- Kim, C. and J. C. Friedley, "Approximate Dynamic Modeling of Large Staged Systems", *Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop.*, vol. 13, n. 2, p. 177, 1974.
- Kister, H. Z., "Graphically Find Theoretical Trays and Mimimum Reflux for Complex Binary Distillation ", *Chemical Engineering*, vol. 21, p.97, 1985.
- Kline, E. P., "Technical Task Force Approach to Energy Conservation", *Chemical Engineering Progress*, Vol. 70, n. 2, 1974.
- Koivo, H. N., J. T. Tanttú and J. Penttinen, "Experimental Comparison of Self-tuning Controller Methods in Mulivariable

- Case, 8th IFAC, World Congress, Kyoto, Japan, 1981.
- Kurz, H.; R. Isermann and R. Schumann, "Experimental Comparison and Application of Various Parameter-Adaptive Control Algorithms", *Automatica*, vol. 16, p. 117, 1980.
- Lagar, G.; J. Paloschi and J. A. Romagnoli, "Numerical Studies in Solving Dynamic Distillation Problems", *Comput. chem. Engng.*, vol. 11, n. 4, p. 383, 1987.
- Lam, K. P., "Implicit and Explicit Self-Tuning Controllers", D. Phil. Thesis, Oxford University, 1980.
- Lamb, D. E.; R. L. Pigford and D. W. T. Rippin, "Dynamic Characteristics and Analogue Simulation of Distillation Columns", *Chemical Engineering Progress Symposium Series*, vol. 57, n. 36, p. 132, 1961.
- Lambert, M., "Adaptive Control of Flexible Systems", D. Phil. Thesis, Oxford University, 1987.
- Lachman, K. H., "Parameter-adaptive control of a class of nonlinear processes. 6th IFAC Symp. Ident. Syst. Param. Est., Arlington, p. 372, 1982.
- Latour, P.R., "Objectives and Strategies for Composition Control of Distillation Columns", *Instrumentation Technology*, July, p. 67, 1978.
- Lee, W. and V. W. Weekman, "Advanced Control Practice in The Chemical Process Industry : A View from Industry, *AIChE. Journal*, Vol 22, n. 1, p. 27, 1976.
- Liniger, W. and Willoughby, R. A. "Efficient Numerical Integration of Stiff Systems of ODEs", *IBM Research Report RL-1970*, 1970.
- Loud, G. D. and R. Wagonner, "The Effects of Interstage Backmixing on The Design of a Multicomponent Distillation Column", *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, Vol. 17, N. 2, 1978.
- Luenberger, *Linear and Nonlinear Programming*", Addison-Wesley, 1984.
- Lucia, A. and A. Kumar, "Distillation Optimization", *Comp. Chem. Engng.*, Vol. 12, n. 12, p. 1263, 1988.
- Luyben, W. L., "Distillation Decoupling", *AIChE. Journal*, vol. 16, n.2, p. 198, 1970.
- Luyben W. L., "Process Simulation, Modeling and Control for Chemical Engineers, McGraw-Hill, 1973.

- Luyben, W. L., "Steady-State Energy Conservation Aspects of Distillation Column Control System Design", *Ind. Eng. Chem. Fundamen.*, vol 14, n. 4, 1975.
- Luyben, W. L., "Control of Distillation Columns with Sharp Temperature Profiles", *AIChE. Journal*, Vol 17, n. 3, p 713, 1971
- Luyben, W. L., "Profile Position Control of Distillation Columns with Sharp Temperature Profiles", *AIChE. Journal*, Vol 18, n. 1, p 238, 1972.
- Luyben, W. L., "Derivation of Transfer Functions for Highly Nonlinear Distillation Columns", *I & E. C. Res.*, Vol. 26, p. 2490, 1987.
- Mah, R. S. H.; S. Michaelson and R. W. H. Sargent, "Dynamic Behaviour of Multi-Component Multi-Stages Systems. Numerical Methods for the Solution", *Chemical Engineering Science*, vol. 17, p. 619, 1962.
- Marshal, W. R. and R. L. Pigford, "The Application of Differential Equations to Chemical Engineering Problems", University of Delaware, Newark, 1947.
- Maarleveld, A. and J. Rijnsdorp, "Constraint Control on Distillation Columns", *Automatica*, Vol 6, p. 51, 1970.
- Martin, G. D.; P. R. Latour and L. A. Richard, "Closed-Loop Optimization of Distillation Energy", *CEP*, September, 1981.
- Martin-Sanchez, J. M. and S. L. Shah, "Multivariable Adaptive Predictive Control of a Binary Distillation Column", *Automatica*, vol. 20, p. 607, 1984.
- Matko, D. and R. Schumann, "Self-Tuning deadbeat Controllers", *Int. J. Control*, Vol. 40, n. 2, 1984.
- McAvoy, T. J. and K. Weischedel, "A Dynamic Comparison of Material Balance versus Conventional Control of Distillation Columns", *8th IFAC World Congress*, p. 2773, Japan, 1981.
- McCune, L. and P.W. Gallier, "Digital Simulation : A Tool for the Analysis and Design of Distillation Controls", *ISA Transactions*, Vol. 12, n. 3, p. 193, 1973
- McAvoy, T. J. and Y. H. Wang, "Survey of Recent Distillation Control Results", *ISA Transactions*, vol. 25, n. 1, p. 5, 1986.
- McDermott, P. E. and Mellichamp, D. A., "An Auto-Pole-Placement

- Self-tuning Controller", *Int. J. Control*, vol. 40, n. 6, p. 1131, 1984.
- McCracken, D. D. e W. S. Dorn , *Calculo Numérico com Estudos de Caso em Fortran IV*, Editora Campus, S. Paulo, 1981.
- Mellati, A. , Ph . D. Thesis, Nottingham University, 1982.
- Meyer, C. B. G.; Wood, R. K. and D. E. Seborg, "Experimental Evaluation of Analytical and Smith Predictors for Distillation Column Control", *AIChE. Journal*, vol. 25, n.1, p. 24, 1979.
- Miller, D. G.," Estimating Vapor Pressures-A Comparison of Equations", *Industrial and Engineering Chemistry*, Vol. 53, n. 3, p. 46, 1964.
- Moore, F. C.; C. L. Smith and P. W. Murril. " Improved Algorithm for Direct Digital Control, *Instruments and Control Systems*, p. 70, January , 1970.
- Morris, A. J.; T. F. Fenton and Y. Nazer, " Application of Self-tuning Regulator to the Control of Chemical Process", *Proc. 5th IFAC/IFIP Int. Conf. Digital Computer Appl. Process Cont.*, The Hague, Netherlands ,1977.
- Morris, A. J.; T. F. Fenton and Y. Nazer, " Experimental Evaluation of Self-tuning Controllers Applied to Pilot Plant Units ", *Proc. 6th IFAC/IFIP Int. Conf. Digital Computer Appl. Process Cont.*, Düsseldorf, 1980.
- Morris, A. J.; Y. Nazer and R. K. Wood " Multivariate Self-tuning Process Control ", *Optimal Control Applications & Methods*, vol. 3, 363, 1982.
- Morris, C. G. and W. Y. Svrcek, "Dynamic Simulation of Multicomponent Distillation",*The Canadian Journal of Chemical Engineering*, vol. 59, p. 382, 1981.
- Mountziaris, T. J. and A. Georgiou, "Design of Robust Noninteracting Controllers for High-Purity Binary Distillation Columns", *Ind. Eng. Chem. Res*, vol. 27, p. 1450, 1988.
- Najim, K.; H. Youlal ; E. Irving and M. Najim , " Linear Quadratic Self-Tuning Control of a Liquid-Liquid Extraction Column", *Optimal Control Applications & Methods*, vol. 9, p. 273, 1988.
- Nisenfeld, A. E. and R. K. Miyasaki, "Applications of Feedforward Control to Distillation Columns", *Automatica*, vol. 9, p. 319,

1973.

- Nisenfeld, E. A. and R. C. Seeman, "Distillation Columns, ISA Monograph Series, 1983.
- Nørsett, S. P., "A Criterion for $A(\omega)$ -Stability of Linear Multistep Methods", Nordisk Tidskr. Informationsbehandling (BIT), v.9, p. 259, 1969.
- Ogunnaike, A. B. and W. H. Ray, "Multivariable Controller Design for Linear Systems Having Multiple Time Delays, AIChE. Journal, vol. 25, n. 6, p. 1043, 1979.
- Osborne, A. , "The Calculation of Unsteady State Multicomponent Distillation Using Partial Differential Equations", AIChE. J., Vol. 17, n. 3, p. 696, 1971.
- Paloschi, J. R. and J. D. Perkins, "The Updating of LU Factors in Quasi-Newton Methods, Computers & Chemical Engineering, Vol. 10, n. 3, p. 241, 1986.
- Peterka, V. and K. J. Aström, "Control of Multivariable Systems with Unknown but Constant Parameters", IFAC Symp. Ident. Syst. Parameter Est., 1973.
- Petzold, L., "Automatic Selection of Methods for Solving Stiff and Nonstiff Systems of Ordinary Differential Equations", SIAM J. Sci. Stat. Comput., vol. 4, n. 1, p.136, 1983.
- Pigford, R. L.; J. B. Tepe and C. J. Garrahan, Ind. Eng. Chem., Vol. 43, p. 2592, 1951.
- Pike, D. H. and M. E. Thomas, "Optimal Control of a Continuous Distillation Column", Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop., vol. 13, n. 2, 1974.
- Pinto, J. C.; A. Bolzan e E. L. Lima, "Controle Adaptativo para Coluna de Destilação", 7º Seminário de Instrumentação - IBP, Rio de Janeiro, 1986.
- Prothero, A. and A. Robinson, "On the Stability and Accuracy of One-Step Methods for Solving Stiff Systems of Ordinary Differential Equations", Mathematics of Computation, vol. 28, n. 125, 1974.
- Rademaker, O.; J. E. Rijnsdorp and A. Maarleveld, Dynamics and Control of Continuous Distillation Units, Elsevier Scientific, Amsterdam, 1975.

- Readshaw, D. and J. Boyd, "Supervisory Computer Control of a Methanol Refining Column Using a Digital Control System With a New type of Instrument/Computer Interface", p. 345
- Richalet, J.; A. Rault; J. L. Tesud and J. Pappon, " Model Predictive Heuristic Control : Applications to Industrial Processes", *Automatica*, vol 14, n. 5, p. 413, 1978.
- Rosenbrock, H. H., "Distinctive Problems of Process Control", *Chemical Engineering Progress*, vol 58, n. 9, 1962.
- Rosenbrock, H. H., " Calculation of the Transient Behaviour of Distillation Columns - Part 1,2,3.", *Brit. Chem. Eng.*, July, August, September, 1958.
- Sargent, R. W. H., " The Dynamic behaviour of Multi-Stage Systems : Further Improvements in The Numerical Solution ", *Trans. Instn. Chem. Engrs*, Vol. 41, p. 5, 1963.
- Sastry, V. A.; D. E. Seborg and R. K. Wood, " Self-tuning Regulator Applied to a Binary Distillation Column ", *Automatica*, vol. 13, p. 417 (1977).
- Scholander, P., "Computer Control of a Pilot Plant Stripping Column", p. 359,
- Schumann, R., "Konvergenz und Stabilität von Digitalen Parameteradaptiven Regler - Teil 1 : Konvergenzeigenschaften der Parameterschätzverfahren", *Automatisierungstechnik*, 34, H. 1, S. 32, 1986.
- Schumann, R., "Konvergenz und Stabilität von Digitalen Parameteradaptiven Regler - Teil 2 : Konvergenzeigenschaften der Parameteradaptiven Regler", *Automatisierungstechnik*, 34, H. 2, S. 66, 1986.
- Schwanke, C. O.; T. F. Edgar and J. O. Hougén, " Development of Multivariable Control Strategies for Distillation Columns", *ISA Transactions*, vol. 16, n. 4 ,p. 69, 1978.
- Seborg, D. E.; T. F. Edgar and S. L. Shah, " Adaptive control Strategies for Process Control : A Survey ", *AIChE Journal*, vol. 32, n.6, p. 881 (1986).
- Seborg, D. E. and R. K. Wood, " A Reply to Comments on Self-tuning Regulator Applied to a Binary Distillation Column ", *Automatica*, vol. 15, p.225 (1979).

- Seinfeld, J. H.; L. Lapidus and M. Hwang, " Review of Numerical Integration Techniques for Stiff Ordinary Differential Equations", Ind. Eng. Chem. Fundamentals, Vol. 9, n. 2, 1970.
- Shampine, L. F., "Stiffness and Nonstiff Differential Equation Solvers. II : Detecting Stiffness with Runge-Kutta Methods", ACM Transactions on Mathematical Software, vol. 3, n. 1, p.44, 1977.
- Shelton, R. J and A. W. Hutchinson, " Practical Determination of On-line Distillation Column Dynamics", Control, p. 398, May, 1968.
- Shinsky, F. G., " Predict Distillation Columns Response Using Relative Gains ", Hydrocarbon Processing, p. 196, May, 1981.
- Shinsky, F. G., "The Material-Balance Concept in Distillation Control", The Oil and Gas Journal, p. 76, July, 1969.
- Shinsky, F. G., "Distillation Control for Productivity and Energy Conservation, McGraw-Hill, 1984.
- Shunta, J. P. and W. L. Luyben, "Sampled-Data Noninteracting Control for Distillation Columns", Chemical Engineering Science, Vol. 27, n. 6, p. 1325, 1972.
- Shunta, J. P. and W. L. Luyben, " Dynamic Effects of Temperature Control Tray Location in Distillation Columns", AIChE Journal, vol. 17, n. 1, p. 92 , 1986.
- Suhnta, J. P. and L. W. Luyben, "Controlling Heat Integrated Columns", CEP, Vol. 71, n. 6, 195.
- Skogestad, S. and M. Morari, "Control Configuration Selection for Distillation Columns", AIChE Journal, vol. 33, n.10, p. 1620, 1987.
- Skogestad, S. and M. Morari, " LV-Control of a High-Purity Distillation Column", 10th World IFAC Congress, vol. 8, p.416, German, 1987.
- Skogestad, S. and M. Morari, " Robust Control of Distillations Columns", 10th World IFAC Congress, vol. 8, p.416, German, 1987.
- Söderström, T., "Convergence Properties of the Generalized Least Squares Identification Method", p. 691
- Sripada, N. R. and G. R. Fischer, " Improved Least Squares

- Identification for Adaptive Controllers", Proc. American Control Conference, p. 2027, Minneapolis, 1987.
- Stathaki, A., D. A. Mellichamp and D. Seborg, "Dynamic Simulation of A Multicomponent Distillation Column with Asymmetric Dynamics", The Canadian J. of Chemical Engineering, Vol. 63, p. 510, 1985.
- Stainthorp, F. P. and H. M. Searson, " The Dynamics of Fractionating Columns : a Reduced Model for Responses to Reflux Flow Changes", Trans. Instn. Chem. Engrs., vol. 51, p. 42 , 1973
- Stirl, E; L. P. Hunt and D. H. Sawyer, "High Temperature Reactions in the Silicon-Hydrogen-Chlorine System", J. Electrochem. Soc., Vol 121, n. 7, p. 919, 1974.
- Svoronos, S.; G. Stephanopoulos and R. Aris, " On bilinear estimation and Control", Int. J. Control, vol. 34, p. 651, 1981
- Svreck, W.Y., Ph. D. Thesis, Alberta University, 1967.
- Thompson, S., "Multivariable PID Controller for Unidentified Plant", Transactions of the ASME, vol 104, p. 270, 1982.
- Toivonen, H. and T. Westerlund, "Comments on Self-Tuning Regulator Applied to a Binary Distillation Column, Automatica, vol. 15, p.223 (1979).
- Toivonen, H. and T. Westerlund, " Reply by Toivonen and Westerlund ", Automatica, vol. 15, p.226 (1979).
- Tolliver, T. L. and L. C. McCune, "Finding the Optimum Temperature Control Tray for Distillation Columns", InTech, vol. 27, n. 9, p. 75, September, 1980.
- Tolliver, T. L. and R. C. Waggoner, " Distillation Column Control : A Review and Perspectives From the CPI ", Advances in Instrumentation, Vol. 35. n. 1, p. 83, 1980.
- Tuffs, P. S. and Clarke, D. W., "Self-tuning Control of Offset : A Unified Approach", Proc. IEEE, Vol. 32, Pt. D, n. 3, p. 100, 1985.
- Treanor, C. E., "A Method for the Numerical Integration of Coupled First-Order Differential Equations with Greatly Different Time Constants ", p.39
- Tyréus, B. D., " Multivariable Control System Design for an

- Industrial Distillation Column", *Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop.*, vol. 18, n. 1, 1979.
- Tyréus, B. D. and W. L. Luyben, "Controlling Heat Integrated Distillation Columns", *Chemical Engineering Progress*, p. 59, September, 1976.
- Tyréus, B. D. and W. L. Luyben, "Two Towers Cheaper than One?", *Hydrocarbon Processing*, July, p. 93, 1975.
- Tyréus, B. D. ; W. L. Luyben and W. E. Schiesser , "Stiffness in Distillation Models and the Use of an Implicit Integration Method to Reduce Computation Times", *Ind.Eng. Chem. Process Des. Develop.*, vol. 14, n. 4, 1975.
- Ydstie, B. E.; A. H. Kemna and L. K. Liu, "Multivariable Extended-Horizon Adaptive Control", *Comput. chem. Engng.*, vol. 12, n. 7, p. 733, 1988.
- Van Winckle, *Distillation*, MacGraw-Hill, New York, 1967.
- Vogel, E. F and T. F. Edgar, "An Adaptive Pole Placement Controller for Chemical Processes with Variable Dead Time", *Comput. chem. Engng.*, vol. 12, n. 1, p. 15, 1988.
- Wagonner, R.C. and C. D. Holland, " Solutions of Problems Involving Conventional and Complex Columns at Unsteady State Operation, *AIChE J.*, Vol 11, p. 112, 1965.
- Waller, K. V.; D. H. Finnermann; P. M. Sandelin; K. E. Häggblom, "Disturbance Sensitivity of Distillation Control Structures", *AIChE. Journal*, vol. 34, n.5, p. 853, 1988.
- Waller, K. V.; D. H. Finnermann; P. M. Sandelin; K. E. Häggblom and S. E. Gustafsson, " An Experimental Comparison of Four Structures for Two-Points Control of Distillation", *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 27, p. 624, 1988.
- Widlund, B. O., "A Note on Unconditionally Stable Linear Multistep Methods ",*Nordisk Tidskr. Informationsbehandling (BIT)*, v.7, p. 65, 1967.
- Wellstead, P. E. and Zanker, P., "Techniques of Self-Tuning", *Optimal Control Applications & Methods*, Vol. 3, 1982.
- Westerberg, A. W. and C. J. Debrosse, "An Optimization Algorithm for Structured Design Systems", *AIChE Journal*, Vol. 19, n. 2, p. 335, 1973.

- Wiemer, P. et al., " Application of Multivariable Model Reference Adaptive Control of a Binary Distillation Column", Prep. IFAC Workshop Adaptive. Syst. Cont. Signal Proc., San Francisco, 1983.
- Wilkinson, W. L. and W. D. Armstrong, "An Approximate Method of Predicting Composition Response of a Fractionating Column", Chemical Engineering Science, vol. 7, n.1/2, 1957
- Wood, R.K and M. W. Berry, "Terminal Composition Control of a Binary Distillation Column", Chemical Engineering Science, Vol. 28, p.1707, 1973.
- Wong, K. P., "Control and Modeling Strategies for Nonlinear Systems with Time Delays", P.h. Dissertation, University of California, Santa Barbara, 1985.
- Zalkind, C. S., " Practical Approach to Non-Interacting Control. Part 1", Instruments & Control Systems, p.89, March, 1967.