

MODELAGEM DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO MULTICOMPONENTE EM
ESTADO ESTACIONÁRIO

Este exemplar corresponde à redação final da tese de
Mestrado defendida pelo Eng.º Andréa Selene Embiassi
Xavier em 20/08/96

S. P. J.

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: SISTEMAS DE PROCESSOS QUÍMICOS
E INFORMÁTICA

MODELAGEM DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO MULTICOMPONENTE EM
ESTADO ESTACIONÁRIO

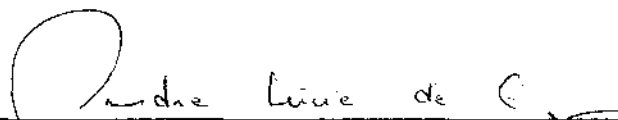
AUTOR: ANDRÉA SELENE EMBIRASSU XAVIER 19/

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

Aprovada por:



Prof. Dr. Sergio Persio Ravagnani



Prof.^a Dr.^a Sandra Lúcia da Cruz



Prof. Dr. Elias Basile Tambourgi

Agosto 1992

Campinas - SP - Brasil

A meus pais, Agnelo e Maria de Lourdes

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. Sérgio Persio / Ravagnani pela orientação clara e objetiva durante o desenvolvimento deste trabalho.

Ao Departamento de Engenharia de Sistemas Químicos da Faculdade de Engenharia Química da UNICAMP, pela oportunidade cedida para o aperfeiçoamento da minha carreira.

A CAPES devido à ajuda financeira, beneficiando a concretização deste trabalho.

A todos que de alguma forma contribuiu em termos de discussões e esclarecimentos, ressaltando-se a importância do companheirismo na realização desta tarefa.

RESUMO

A modelagem de uma coluna de destilação no regime estático, envolve um grande equacionamento referente ao balanço de massa e às relações de equilíbrio líquido-vapor. Uma simplificação neste sistema pode ser obtida com a aplicação da solução numérica da colocação ortogonal.

No presente caso, essa técnica transforma as equações diferenciais parciais em equações algébricas. Para isto, as funções discretas dos estágios que representam os perfis originais de composição e vazão, serão aproximadas para polinômios ortogonais. As variáveis do modelo se convertem em funções contínuas da altura adimensionalizada da coluna.

As alimentações e/ou as retiradas laterais promovem descontinuidades nos perfis da coluna; com o objetivo de minimizar esse efeito, uma redefinição das variáveis foi apresentada e portanto, temos como resultado um único polinômio descrevendo todo o comportamento da coluna. Obviamente, reduziu-se de um modo significativo a ordem do sistema proveniente da análise rigorosa, obtendo-se um tempo computacional mais baixo e uma concordância satisfatória.

As funções são analisadas em pontos bem definidos no espaço, os quais podem ser avaliados pelas raízes de uma certa família de polinômios ortogonais. No presente trabalho, esses pontos também são fixados em posições sensíveis da coluna afim de possibilitar uma melhor exatidão do modelo.

Este desenvolvimento foi aplicado a sistemas complexos, multicomponente, com acentuado número de pratos.

ABSTRACT

The modelling for a steady state distillation column, involves a great number of equations concerning to the mass balance and the vapor-liquid equilibrium relationships. A simplification in this system may be obtained with the application of the numerical solution by orthogonal collocation.

In the present case, this technique transforms the partial differential equations to algebraic equations. The discrete functions of the stages, which represent the original flow and composition profiles, will be approximated by orthogonal polynomials. The variables of the model are converted to continuous functions of the dimensionless height of the column.

The feeds and/or the sidestreams introduce discontinuities in column profiles; in order to reduce this effect, a redefinition of the variables was presented and then, we obtained, as a result, a single polynomial describing all column behaviour. Certainly, the order of the system related with the rigorous model was reduced in a significant way, resulting in a lower computation time with satisfactory agreement.

The functions are analysed at points well defined in the space, which may be estimated by the roots of a certain family of orthogonal polynomials. In the present work, these points are also fixed, in sensitive locations of the column to provide a better accuracy of the model.

This development was applied to complex systems, multicomponent, with considerable number of stages.

ÍNDICE

	pág
CAPÍTULO 1 - Introdução.....	1
CAPÍTULO 2 - Revisão bibliográfica.....	4
2.1 - Introdução.....	4
2.2 - Modelagem rigorosa de uma coluna de destilação no regime permanente.....	4
2.3 - Modelagem de ordem reduzida em coluna de destilação em regime permanente.....	9
CAPÍTULO 3 - Métodos matemáticos.....	13
3.1 - Introdução.....	13
3.2 - Método da colocação ortogonal.....	14
3.3 - Método de Newton-Raphson.....	20
3.4 - Método de Broyden ou Quasi-Newton.....	22
3.5 - Eliminação gaussiana.....	24
CAPÍTULO 4 - Modelagem matemática de uma coluna de destilação no regime estacionário - Aplicação da colocação ortogonal.....	26
4.1 - Introdução.....	26
4.2 - Modelagem matemática rigorosa no estado estacionário.....	27
4.3 - Aplicação da colocação ortogonal.....	30
4.4 - Procedimento para o cálculo da coluna.....	35
CAPÍTULO 5 - Resultados.....	39
5.1 - Introdução.....	39
5.2 - Influência do número e localização dos pontos de colocação.....	40
5.3 - Desenvolvimento e análise dos resultados	40

5.3.1 - Exemplo 1: acetona-cloroformio-metanol	43
5.3.2 - Exemplo 2: metanol-etanol-água- n-propanol	54
5.3.3 - Exemplo 3: etanol- 2-propanol -água	63
5.3.4 - Exemplo 4: etil-acetato-etanol- butil-acetato	71
5.3.5 - Exemplo 5: água-etanol- 1-propanol.....	77
5.3.6 - Exemplo 6: metil-acetato- metanol-água	84
5.3.7 - Exemplo 7: metil-ciclohexano- tolueno-fenol	90
5.3.8 - Exemplo 8: heptano-tolueno- 2-butanona	97
5.3.9 - Exemplo 9: acetona-metanol-água.....	103
5.3.10 - Exemplo 10: etanol - 1-propanol água - ácido acético.....	108
5.3.11 - Conclusão.....	115
CAPÍTULO 6 - Conclusões finais e sugestões.....	118
ANEXO 1 - Teoria e parâmetros das propriedades termodinâmicas.....	121
NOMENCLATURA.....	134
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	137

CAPITULO 1

1. INTRODUÇÃO

Nos dias atuais, a utilização de métodos matemáticos que proporcionem uma diminuição do tempo para avaliação de um processo químico, tornou-se um fator preponderante; permitindo uma crescente rapidez nas tomadas de decisão quanto ao comportamento desse processo. Consequente, existe uma procura intensa na realização de simulações cada vez mais ágeis e que representem o sistema adequadamente. Através do uso destes algoritmos, pode-se revalidar o campo das simulações nos estados estacionário e transiente, a análise de processos iterativos e de uma maneira ampla, a identificação de processo e o controle em tempo real.

Este trabalho visa demonstrar que a utilização apropriada de um método numérico pode simplificar consideravelmente a modelagem de uma coluna de destilação no regime permanente.

A importância da aplicação das simulações no estado estacionário, com auxílio de modelos de ordem reduzida, direciona-se principalmente para a obtenção de uma modelagem rápida com vistas a uma utilização em otimização aproximada nos projetos das unidades.

A vantagem fundamental dos resultados obtidos, implica numa drástica diminuição de tempo de processamento, com desvios absolutos desprezíveis em relação ao modelo clássico. Este, por sua vez, representa o processo através de uma análise rigorosa,

envolvendo grande número de equações matemáticas, com a finalidade de retratar, com boa precisão, as condições operantes na realidade. Entretanto, tal modelagem apresenta o contraponto de requerer um tempo computacional elevado para muitos sistemas complexos, limitando ainda o uso dos equipamentos disponíveis com restrição à velocidade.

O método aplicado para a redução da ordem do sistema foi o da COLOCAÇÃO ORTOGONAL [conforme VILLADSEN (1970)] associado ao método iterativo de BROYDEN (1965). Este último foi comparado com o método de NEWTON-RAPHSON [conforme CARNAHAN e colaboradores (1989)]. O objetivo consiste em avaliar o desempenho do algoritmo de BROYDEN, uma vez que este faz um cálculo aproximado do jacobiano do sistema de equações a serem resolvidas.

A COLOCAÇÃO ORTOGONAL, caso particular do método dos resíduos ponderados, aproxima as variáveis dependentes como polinômios ortogonais, obedecendo a um critério de minimização de erro e às condições de contorno originais. Isto segue o princípio de que os resíduos devem ser nulos em pontos bem definidos no espaço, onde são aplicadas as funções incógnitas. No presente trabalho, esses pontos são representados pelas raízes do polinômio de JACOBI [conforme VILLADSEN e MICHELSEN (1978)]. Por outro lado, a fixação dos pontos de colocação também foi testada em posições sensíveis da coluna, tal como o prato de alimentação ou ainda a saída lateral.

Pesquisou-se enfim, várias colunas de destilação multicomponente, com acentuado número de pratos e apresentando em alguns casos, múltiplas alimentações, acompanhados também de saída lateral.

Referindo-se ao desenvolvimento do modelo, as variáveis correspondentes aos balanços de massa e de equilíbrio líquido-vapor são convertidas em funções contínuas da altura adimensionalizada da coluna. No caso de regime estacionário, o sistema linearizado é formado apenas por equações algébricas.

Os programas computacionais foram executados em uma estação "PROCEDA", modelo 5370-CAD.

A seguir, temos os capítulos que detalham toda a elaboração da modelagem e de que forma os resultados foram obtidos.

CAPÍTULO 2

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 INTRODUÇÃO

No procedimento deste capítulo, abordaremos o histórico dos diversos métodos de modelagem para coluna de destilação no regime permanente; tanto referindo-se ao método rigoroso quanto aquele desenvolvido segundo a técnica da colocação ortogonal, a qual reduz a ordem das equações envolvidas na modelagem. Os itens acima serão discutidos mais amplamente em tópicos distintos na sequência.

2.2 MODELAGEM RIGOROSA DE UMA COLUNA DE DESTILAÇÃO NO REGIME PERMANENTE

As equações fenomenológicas que fazem parte da modelagem clássica de uma coluna de destilação, no regime estático, podem ser solucionadas segundo o melhor método de aplicabilidade em algoritmos numéricos.

No que se concerne à modelagem desse sistema, a operação de destilação se descreve através de um sistema de equações que basicamente são compostas dos balanços de massa por componente e global, de energia, além das relações de equilíbrio líquido-vapor no domínio de cada prato. Vale a pena salientar que no estudo do estado estacionário, as dimensões correspondentes à geometria da

coluna são irrelevantes, pois não se calcula o acúmulo molar que é normalmente empregado na simulação do regime transiente.

Evidentemente, os processos de separação multicomponente exigem um maior esforço computacional.

Os métodos de resolução podem ser divididos comumente em três grupos:

- 1- Métodos do cálculo prato a prato;
- 2- Métodos de grupo;
- 3- Métodos de aproximação sucessiva.

O primeiro consiste em fixar as condições num certo estágio no processo, e então, calcular os estágios remanescentes na sequência por procedimentos adequados.

O segundo método foi criado na tentativa de se evitar o cálculo demorado do prato a prato; já que calcula diretamente as composições no final de uma secção da coluna, através do conhecimento do número de estágios da respectiva. No entanto, sua precisão é limitada pela idealidade do sistema e pela uniformidade das vazões nas secções.

Enfocando-se ao método prato a prato, podemos citar que originalmente LEWIS e MATHESON (1932) desenvolveram a solução para destilação multicomponente, com apenas uma alimentação, excluída de retirada lateral e considerando o comportamento das soluções como ideal, além das vazões ao longo da coluna constantes. Os procedimentos de cálculo foram similares à aplicação gráfica do diagrama de McCABE-THIELE para uma mistura binária [conforme McCABE e THIELE (1925)]. Posteriormente, THIELE e GUEDES (1933) aperfeiçoaram tal algoritmo, indicando as temperaturas dos pratos e as vazões de vapor entre eles, como sendo variáveis de iteração.

LYSTER e colaboradores (1959) estenderam o desenvolvimento anterior através do método θ (teta), objetivando colunas complexas.

FRIDAY e SMITH (1964) mostraram que esses métodos são numericamente instáveis para colunas complexas, com múltiplas alimentações e retiradas laterais, já que são sistemas altamente não ideais e torna-se difícil estimar os produtos em cada estágio.

Com o aumento da disponibilidade dos computadores com altas velocidades, outros procedimentos computacionais rigorosos foram desenvolvidos para uma solução simultânea do sistema de equações. Daí, inclui-se o terceiro caso, dos métodos de aproximação sucessiva. Estes, por sua vez, são indicados para os problemas em que nenhuma composição do produto pode ser especificada completamente. O método realiza sucessivas aproximações, onde todos os estágios são analisados conjuntamente dentro de uma mesma iteração, cujas correções dependem da exatidão das condições iniciais assumidas para cada prato.

De uma forma bem clara, estes programas se tornam ineficientes no ponto de vista que requerem uma memória computacional grande e muitas vezes, um tempo alto para atingir a convergência, dependendo do critério adotado. Estas desvantagens foram amplamente discutidas na literatura e como fonte existente, temos o trabalho de WANG e HENKE (1966) que citaremos adiante.

AMUNDSON e PONTINEM (1958) apresentaram o método da matriz tridiagonal para sistemas que exibissem um comportamento de solução ideal, com o objetivo de tornar o método de resolução simultânea mais eficiente. O mecanismo consiste em posicionar os coeficientes constantes do conjunto das equações linearizadas,

numa matriz, de forma que só tenha entradas na diagonal principal e nas duas outras adjacentes. Um dos métodos matemáticos descritos mais convenientemente utilizado para resolver o problema exposto, é a ELIMINAÇÃO GAUSSIANA [CARNHAM e colaboradores (1969)]. A partir daí, obtém-se uma simplificação e rapidez consideráveis para o desenvolvimento computacional.

Nesses últimos trabalhos, o balanço energético, a não idealidade das soluções e as prováveis reações químicas foram de fato levados em conta.

WANG e HENKE (1966) seguiram esta linha de pesquisa, proporcionando uma modelagem na qual as vazões das fases entre os estágios para cada componente, são encontradas por intermédio da resolução simultânea das equações de balanço de massa por componente e do balanço energético. Considerou-se também a influência das temperaturas dos estágios sobre as relações de equilíbrio e sobre as equações do somatório das frações molares. Contudo, uma extrema dificuldade foi observada em encontrar a convergência para soluções com grande desvio para a lei de RAULT [PRAUSNITZ (1969)].

Na continuidade, temos em destaque os trabalhos de TOMICH (1970) e NAPHTHALI-SANDHOLM (1971) que atendem a grande número de sistemas restritos.

Reportando-se ao método de TOMICH, resolve-se o sistema linear composto pelo balanço de massa por componente e as equações de equilíbrio das fases através da técnica da matriz tridiagonal. Então, descobre-se as composições das fases em todos os estágios que são usadas para definir depois o balanço energético e o somatório das frações molares. Esta etapa, resolve-se

simultaneamente pelo método de BROYDEN (1965) para obter uma estimativa das temperaturas dos estágios e as vazões na fase vapor entre eles, as quais são assumidas como variáveis independentes. Entretanto, a independência entre as relações de equilíbrio líquido-vapor e as composições das fases comprometem a aplicabilidade nos casos de soluções não ideais.

O método de NAPHTHALI-SANDHOLM possui a mesma qualidade das equações citadas, só que no desdobramento, elas são agrupadas por estágio e então linearizadas pela técnica de NEWTON-RAPHSON, originando uma matriz tridiagonal das derivadas parciais. Ela permite a solução por ELIMINAÇÃO GAUSSIANA. Há também a possibilidade de se introduzir a equação de eficiência do prato [eficiência de Murphree, segundo KING (1980)] a qual participará conjuntamente das relações de equilíbrio. A vantagem implica na escolha das temperaturas e vazões das fases dos componentes como variáveis independentes, incorporando a não idealidade das soluções.

Várias referências sobre esse assunto foram publicadas, visando aperfeiçoar as falhas de convergência ainda existentes no tratamento de soluções altamente não ideais e naquelas misturas com pontos de ebulição próximos. A proposta consiste em descobrir novos parâmetros que minimizem o efeito de iteração e sensibilidade de algumas variáveis com a mudança de temperatura e vazão.

TSUBOKA e KATAYAMA (1977), HIROSE, KAWASE, SAMPEI e KAWAI (1980), KINOSHITA e TAKAMATSU (1983) e MORI, YAMADA, HIRAOKA e TSUIKI (1987) empenharam nesse objetivo.

2.3 MODELAGEM DE ORDEM REDUZIDA EM COLUNA DE DESTILAÇÃO EM REGIME PERMANENTE

Um dos melhores métodos conhecidos para a solução numérica das equações diferenciais na engenharia química é a "colocação ortogonal". Os fundamentos desse método são encontrados em SZEGÖ (1939), VILLADSEN (1970), VILLADSEN e MICHELSEN (1978) e FINLAYSON (1972,1981).

O uso da colocação ortogonal para a solução de modelos discretos foi inicialmente sugerido por WONG e LUUS (1980). Eles propuseram que as equações diferenciais a diferenças do modelo original (estado transiente), fossem transformadas em equações diferenciais parciais com aplicação subsequente da colocação ortogonal para formar um novo conjunto de equações diferenciais ordinárias, sendo resolvidas pelo método da matriz tridiagonal. No entanto, o balanço material não se conserva no regime estacionário.

CHO e JOSEPH (1983 a,b, 1984) discutem mais especificamente os aspectos da colocação. Eles selecionam a família de polinômios ortogonais, aproximando as derivadas parciais das grandezas do modelo da coluna de destilação em relação à variável espacial para polinômios de "Lagrange"; determinam a função peso adequada e os pontos de colocação como sendo raízes do polinômio de "Jacobi". Eles estendem o modelo para colunas com alimentações e retiradas laterais, as quais produzem uma descontinuidade no perfil da coluna e os autores contornam esse efeito parcialmente, através da redefinição de variáveis.

Assim, o perfil da coluna é representado por um simples polinômio; também incluíram um exemplo de sistema de quatro componentes não ideal e foi verificado que o modelo de redução não é alterado de algum modo pelos tipos existentes das propriedades termodinâmicas. Enfim, comparações foram realizadas com as soluções obtidas pelos modelos rigorosos prato a prato. É de suma importância, o fato de que os balanços de massa e energético foram conservados para o regime estacionário.

SRIVASTAVA e JOSEPH (1985, 1987 a-b) prosseguiram nas pesquisas divulgadas por CHO e JOSEPH, detendo-se em prever o dimensionamento adequado do modelo de ordem reduzida para colunas de separação. Porém, eles tratam apenas da boa estimativa do número e localização dos pontos de colocação que definem o grau do polinômio, sem aprofundarem nos estudos sobre os métodos de convergência. Para isto, definiu-se o parâmetro ORP, indicando em geral que o aumento de sua grandeza, vincula um maior número de pontos de colocação para se obter concordância melhor em relação ao modelo rigoroso. Sua fórmula é a seguinte:

$$\text{ORP} = N \ln (L/KV) \quad (2.1)$$

onde os termos são variáveis importantes da coluna tais como número de estágios N , a inclinação da linha de operação L/V e a constante de equilíbrio K . No aspecto da localização dos pontos, através de uma escolha adequada sobre os polinômios de "Jacobi" ou "Hahn", chegaram à alguma conclusão sobre a influência na escolha pela acentuosidade do perfil da coluna e pelo número de pratos correspondentes, não encontrando diferenças significativas entre as performances de ambos.

Desde que as múltiplas alimentações e saídas laterais de

uma coluna de destilação provocam uma descontinuidade no seu perfil, os autores tentam uma solução parcial desse problema; ela proporciona uma divisão da coluna em secções e cada qual é modelada usando polinômios contínuos, para enfim serem agrupadas nos pontos de alimentação ou saída lateral, por meio da interpolação das equações. Daí, o comportamento oscilatório da aproximação polinomial é reduzido, tornando-se mais atrativo que o método da redifinição de variáveis proposto por CHO e JOSEPH (1984). No mesmo âmbito, os autores tiveram o sentimento de analisar os perfis de composição com degrau e achatado pois a ordem de redução depende da natureza deles. Como indicador temos o parâmetro ORP que assume valores altos quando os perfis exigem mudanças rápidas numa parte da coluna e pouca ou nenhuma em outra parte. Isto implica numa resolução que exija um número grande de pontos de colocação, com as diferentes regiões do perfil sendo aproximadas por polinômios distintos. Houve avaliação da aplicação dos pontos de colocação locais, para cada componente não chave, o qual provoque degrau no perfil, tanto nas secções de retificação e esgotamento ou na coluna toda, com resultados bem sucedidos na redução da ordem, apesar da complexidade da modelagem.

Uma ressalva importante se refere ao trabalho de STEWART e colaboradores (1985) que abriram a precedência no uso da aproximação polinomial de um modo discreto, e recomendaram o polinômio de "Hahn" aos de "Jacobi", argumento este, não condizente com outras demonstrações.

PINTO e BISCAIA (1988) abordaram sobre as estratégias da ordem reduzida e suas múltiplas soluções, deduzindo que de uma

maneira geral, o comportamento não linear das colunas de destilação leva ao emprego da colocação seccional sem extrapolação, enquanto aquele linear, obtém-se resultados confiáveis numa colocação global.

O presente trabalho foi desenvolvido com base no algoritmo da tese de doutorado de RAVAGNANI (1988), cujas condições apresentadas são as seguintes:

- Todo o perfil da coluna é aproximado por um simples polinômio de "Lagrange" e os pontos de colocação são raízes do polinômio de "Jacobi".

- A simulação é desenvolvida para destilação multicomponente e processando soluções não ideais.

- O algoritmo da matriz tridiagonal é incorporado e o principal "loop" de cálculo é o método de "Newton-Raphson".

- As frações molares líquidas são escolhidas para variáveis independentes.

- O modelo de ordem reduzida é aplicado aos casos de colunas com múltiplas alimentações e saídas laterais.

Concluindo-se esse capítulo, podemos observar a diversidade de fatores que interferem na precisão do modelo de ordem reduzida. Cada sistema estudado proporciona uma solução particular, fazendo com que o emprego deste método tenha uma contribuição restrita para a obtenção de simulações com uma abrangência maior de aplicações. No entanto, o ganho na redução do tempo de processamento é substancial e permite assim, uma maior utilização deste método em algoritmos de otimização.

CAPITULO 3

3. MÉTODOS MATEMÁTICOS

3.1 INTRODUÇÃO

Este capítulo apresenta os métodos numéricos que compõem o programa de simulação desenvolvido nesse estudo.

O método da COLOCAÇÃO ORTOGONAL [VILLADSEN (1970)] foi inicialmente detalhado. Sua técnica permite transformar o sistema de equações diferenciais parciais em equações diferenciais ordinárias, através de uma discretização das variáveis espaciais. Dependendo das considerações sobre o sistema, pode-se obter em última etapa, um conjunto de equações algébricas. O problema antes dependente das condições de fronteira, passa a representar um problema de valor inicial. As equações podem ser integradas pelos diversos procedimentos habituais existentes na literatura.

O programa manipula com um grande número de variáveis, requisitando um uso frequente de métodos iterativos de cálculo, os quais viabilizam a resolução dos problemas envolvendo processos complexos. Aqui, essa questão se refere ao sistema multicomponente, com considerável número de pratos. Desta forma, as equações são avaliadas simultaneamente para todos estágios e teremos necessariamente uma aplicação conveniente dos recursos computacionais.

Os métodos iterativos utilizados compreendem o de NEWTON-RAPHSON [conforme CARNAHAN e colaboradores (1969)] e o de

BROYDEN (1965). Eles resolvem um sistema de equações algébricas não lineares.

O método da ELIMINAÇÃO GAUSSIANA [conforme CARNAHAN e colaboradores (1969)] foi introduzido para a resolução do sistema de equações algébricas lineares.

Trataremos de explicar cada método citado a seguir.

3.2 MÉTODO DA COLOCAÇÃO ORTOGONAL

A solução analítica de um sistema de equações diferenciais ordinárias ou parciais, torna-se uma tarefa difícil, mesmo que o problema apresente uma estrutura simples.

Um dos métodos numéricos mais versáteis para aplicações em computador é o denominado COLOCAÇÃO ORTOGONAL [VILLADSEN (1970)]. O princípio deste método consiste em expandir as equações diferenciais em polinômios ortogonais, obtendo desse modo uma solução aproximada.

Comumente, as equações diferenciais na engenharia são do tipo de condição de fronteira. A COLOCAÇÃO ORTOGONAL transforma este problema naquele de valor inicial, relevando as condições de contorno originais. É um dos chamados métodos dos resíduos ponderados, caracterizado pelo critério de que os resíduos devem ser nulos em pontos definidos no espaço para garantir uma melhor exatidão do modelo. Isto se deve a solução aproximada nesses pontos corresponder precisamente ao valor da função discretizada.

Supondo a equação diferencial:

$$g(y^m, y^{m-1}, \dots, y', x) = 0 \quad (3.1)$$

ela será aproximada para o polinômio:

$$y_N = \sum_{i=0}^N a_i x^i \quad (3.2)$$

ele será aplicado em cada ponto de colocação. temos então:

índice N = grau do polinômio;

x^i = $(N+1)$ pontos de colocação;

a_i = $(N+1)$ coeficientes dos pontos de colocação,
ajustáveis às condições de contorno.

O procedimento para cálculo dos coeficientes obedece a um critério de minimização de erro. Para isto, definiu-se o resíduo $R(x, y_N)$:

$$R(x, y_N) = g(y_N^m, y_N^{m-1}, \dots, y_N', y_N, x) \quad (3.3)$$

e sua integral ponderada no intervalo de colocação deve satisfazer:

$$\int_a^b W_j R(x, y_N) dx = 0 \quad (3.4)$$

onde: W_j = função ponderada;

a, b = limites do intervalo físico de colocação.

No caso da colocação, a escolha de W_j recai sobre a função delta de Dirac:

$$W_j = \delta(x - x_j) \quad (3.5)$$

cujas propriedades genéricas são as seguintes:

$$* \delta(x - x_j) = 0, \quad x \neq x_j$$

$$* \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_j) dx = 1 \quad (3.6)$$

$$* \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_j) f(x) dx = f(x)$$

assim, temos a dedução:

$$\int_a^b \delta(x-x_j) R(x, y_N) dx = R(x_j, y_N) = 0 \quad (3.7)$$

torna-se suficiente notar que os resíduos calculados nos pontos de colocação se anulam e a função polinomial se iguala à função original do problema nesses pontos. Daí, essa imposição fixa os coeficientes tais que promovam desvios pequenos da solução aproximada em relação aos resultados reais.

A série de polinômios ortogonais pertencente ao somatório existente na fórmula da colocação, atende às propriedades de ortogonalidade. Segundo essas condições, os coeficientes das citadas expansões são numericamente determinados. As raízes do polinômio ortogonal de maior grau são escolhidas para representar os pontos de colocação. Por exemplo, temos o desenvolvimento dos polinômios em combinações lineares através de

$$P_N^{(\alpha, \beta)}(x): \quad P_N^{(\alpha, \beta)}(x) = \sum_{i=0}^N (-1)^{N-i} c_i x^i \quad (3.8)$$

onde: α, β = vetores de posição;

$c_0 = 1$ e os "N" coeficientes remanescentes são encontrados diretamente das propriedades de ortogonalidade que correspondem a:

$$\int_0^1 W(x) P_k(x) P_N(x) dx = 0 \quad (3.9)$$

O índice $k \neq N$;

$k = 0, 1, \dots, N-1$;

assim, a função ponderação $W(x)$ é positiva no intervalo aberto de colocação $(0,1)$.

Como foi demonstrado, gerou-se uma família de polinômios ortogonais entre si, cuja interpretação geométrica pode ser vista como dois vetores perpendiculares no espaço de dimensão "N". Desde que "N" represente um valor grande, as coordenadas dos vetores são aproximadas às funções contínuas das variáveis independentes.

O polinômio escolhido para a determinação dos pontos de colocação foi o de JACOBI, extraíndo-se as raízes de sua respectiva expressão:

$$\int_0^1 x^{\rho} (1-x)^{\alpha} x^j P_N^{(\alpha, \beta)}(x) dx = 0 \quad (3.10)$$

O índice $j = 0, 1, \dots, N-1$.

O polinômio de interpolação de LAGRANGE foi utilizado neste trabalho para aproximação das equações diferenciais. Ele é representado pela seguinte fórmula:

$$Y_N(x) = \sum_{i=1}^{N+1} y(x_i) l_i(x) \quad (3.11)$$

onde: x_i = pontos de colocação;

l_i = função derivável e integrável.

O problema a ser resolvido, deve ser avaliado quanto a sua condição de simetria. Dependendo do seu comportamento físico, ele pode ser dividido em expansões de funções pares (simétrico) ou ímpares (não simétrico):

1 - PROBLEMA SIMÉTRICO

Utilizaremos polinômios em torno de x^2 ou x^4 , para garantir a simetria:

$$Y(x^2) = Y(1) + (1-x^2) \sum_{i=1}^N a_i P_{i-1}(x^2) \quad (3.12)$$

agrupando-se os termos:

$$Y(x^2) = \sum_{i=1}^{N+1} b_i P_{i-1}(x^2) = \sum_{i=1}^{N+1} d_i x^{2i-2} \quad (3.13)$$

2 - PROBLEMA NÃO SIMÉTRICO

$$Y(x) = x + x(1-x) \sum_{i=1}^N a_i P_{i-1}(x) \quad (3.14)$$

Reportando-se ao caso 2, presente neste trabalho e reescrevendo a equação (3.14):

$$Y(x) = \sum_{i=1}^{N+2} b_i P_{i-1}(x) \quad (3.15)$$

pode ser escrita ainda:

$$Y(x) = \sum_{i=1}^{N+2} d_i x^{i-1} \quad (3.16)$$

em cada ponto de colocação teremos:

$$Y(x_j) = \sum_{i=1}^{N+2} d_i x_j^{i-1} \quad (3.17)$$

e derivando:

$$\frac{dY(x_j)}{dx} = \sum_{i=1}^{N+2} d_i (i-1) x_j^{i-2} \quad (3.18)$$

$$\frac{d^2Y(x_j)}{d^2x} = \sum_{i=1}^{N+2} d_i (i-1)(i-2) x_j^{i-3}$$

colocando-se as equações (3.17) e (3.18) em notação matricial:

$$Y = Q d \quad \frac{dY}{dx} = C d \quad \frac{d^2Y}{d^2x} = D d$$

com:

$$Q_{ji} = x_j^{i-1} \quad C_{ji} = (i-1) x_j^{i-2} \quad D_{ji} = (i-1)(i-2) x_j^{i-3}$$

temos então:

$$d = Q^{-1} Y \quad (3.19)$$

e substituindo (3.19) nas equações (3.18):

$$\frac{dY}{dx} = C Q^{-1} Y = A Y = \sum_{i=1}^{N+2} A_{ji} Y(x_i)$$

(3.20)

$$\frac{d^2 Y}{dx^2} = D Q^{-1} Y = B Y = \sum_{i=1}^{N+2} B_{ji} Y(x_i)$$

O somatório que substitui as derivadas em cada ponto de colocação é expresso pelo produto de uma matriz de discretização pelo vetor composto pelos valores da variável derivada.

Analisando-se o sistema deduzido, as equações diferenciais apresentam uma solução relativamente simples. Conhecidos os valores dos pontos de colocação, temos condições de determinar as matrizes A e B, uma vez que são funções de C, D e Q^{-1} , as quais só dependem dos pontos de colocação.

Uma subrotina apresentada no programa desenvolvido neste trabalho, avalia esses pontos, além dos coeficientes que participam dos somatórios, baseando-se no cálculo das raízes da família de polinômios ortogonais escolhida. Os dados requisitados para tal, consistem na seleção do número de pontos internos e dos vetores de posição α e β ; lembrando que a quantidade desses pontos define a ordem do sistema.

Algumas referências dessas técnicas se encontram em publicações tais como VILLADSEN (1970), VILLADSEN e MICHELSEN (1978) e FINLAYSON (1980).

Nem sempre a designação de polinômios com grau elevado conduz uma maior precisão do método numérico. Um melhor aproveitamento pode ser obtido com reduzido número de pontos de colocação, caso estes sejam distribuídos em posições ótimas.

3.3 MÉTODO DE NEWTON-RAPHSON

O método de NEWTON-RAPHSON [conforme CARNAHAN e colaboradores (1969)] é um procedimento iterativo para resolver sistemas de equações algébricas não lineares. Assim, o conjunto das diversas variáveis que zeram as funções do problema é encontrado através do algoritmo, com todas elas sendo avaliadas simultaneamente numa mesma iteração.

Supondo os valores das raízes x_i onde $i = 1, 2, \dots, n$, os quais fazem parte de um sistema de equações algébricas não lineares:

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0 \\ &\vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0 \end{aligned} \quad (3.21)$$

se cada função for representada por uma expansão das séries de Taylor em torno do conjunto de valores x_j^0 , o seguinte resultado será obtido quando despreza-se todos os termos que possuem derivadas superiores à primeira:

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) &= f_1(x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0) + (x_1 - x_1^0) \left(\frac{\delta f_1}{\delta x_1} \right)^0 + \dots \\ &\quad + (x_n - x_n^0) \left(\frac{\delta f_1}{\delta x_n} \right)^0 \end{aligned} \quad (3.22)$$

$$\begin{aligned} f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) &= f_2(x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0) + (x_1 - x_1^0) \left(\frac{\delta f_2}{\delta x_1} \right)^0 + \dots \\ &\quad + (x_n - x_n^0) \left(\frac{\delta f_2}{\delta x_n} \right)^0 \end{aligned}$$

$$f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = f_n(x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0) + (x_1 - x_1^0) \left(\frac{\delta f_n}{\delta x_1} \right)^0 + \dots \\ + (x_n - x_n^0) \left(\frac{\delta f_n}{\delta x_n} \right)^0$$

O sistema assim obtido pelas equações (3.22), em combinação com (3.21), pode ser arranjado de uma forma matricial e genérica:

$$J_k \Delta X_k = -F_k \quad (3.23)$$

onde J_k é a matriz quadrática jacobiana de ordem n ; ΔX_k e F_k são vetores colunas.

Assim sendo:

$$J_k = J(x_k) = \begin{bmatrix} \left(\frac{\delta f_1}{\delta x_1} \right)^k & \left(\frac{\delta f_1}{\delta x_2} \right)^k & \dots & \left(\frac{\delta f_1}{\delta x_n} \right)^k \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \left(\frac{\delta f_n}{\delta x_1} \right)^k & \left(\frac{\delta f_n}{\delta x_2} \right)^k & \dots & \left(\frac{\delta f_n}{\delta x_n} \right)^k \end{bmatrix}$$

$$\Delta X_k = X_{k+1} - X_k; \quad X_k = [x_{1k}, x_{2k}, \dots, x_{nk}]^t$$

$$F_k = [f_{1k}, f_{2k}, \dots, f_{nk}]^t$$

onde o índice k = número de iterações.

Através dos valores iniciais de x , calcula-se F e a matriz J para a utilização posterior da técnica de eliminação gaussiana ou da inversão de matrizes. A partir daí, os novos valores de x são determinados, correspondendo à próxima iteração onde o critério de convergência é testado. Se satisfeito, teremos

encontrado a solução aproximada. Caso contrário, os últimos valores de x são introduzidos como valores iniciais e outra iteração é realizada com o novo cálculo do jacobiano. Este procedimento é realizado até que se atinja as características de convergência, ou o número máximo de iterações.

3.4 MÉTODO DE BROYDEN OU QUASI-NEWTON

O método de BROYDEN (1965) foi elaborado com a finalidade de introduzir certas modificações no método de NEWTON-RAPHSON. Elas consistem no amortecimento do novo valor de x correspondente à iteração $k+1$ quando as respectivas funções se apresentarem, na média, maiores que aquelas da iteração k . Outra proposta compreende uma estimativa da matriz inversa do jacobiano, usando os valores calculados de f_i a cada iteração sucessiva. Espera-se com esse incremento no algoritmo, haja uma redução no tempo de processamento pois a convergência pode ser avaliada sem a necessidade de inverter a matriz jacobiana. Enfim, além dessas vantagens operacionais, temos uma exigência menor sobre a memória do computador.

Para o desenvolvimento do método foi considerado o mesmo sistema de equações exposto em (3.21).

Os passos do procedimento de cálculo proposto por BROYDEN seguem:

1 - Assumir um conjunto inicial de valores para as variáveis X_0 e computar as funções:

$$f_0 = f(X_0) \quad (3.24)$$

2 - Aproximar os elementos de H_0 , onde H_0 é definido

como sendo igual a menos a inversa do jacobiano de acordo com:

$$H_0 = - J_0^{-1} \quad (3.25)$$

Os elementos da matriz jacobiana são aproximados em primeiro instante para a derivada numérica:

$$\frac{\delta f_i}{\delta x_j} = \frac{f_i(x_j+h_j) - f_i(x_j)}{h_j} \quad (3.26)$$

onde h_j torna-se aproximadamente o valor de $0.001 x_j$.

3 - Com base nos valores mais recentes de H e f , temos o cálculo:

$$P_k = H_k f_k \quad (3.27)$$

4 - Fazer $s_k=1$. Então, Verificar se a norma Euclidiana de $f(X_k + s_k P_k)$ é menor do que a de $f(X_k)$, satisfazendo a seguinte inequação:

$$\left[\sum_{i=1}^n f_i^2(X_k + s_k P_k) \right]^{1/2} < \left[\sum_{i=1}^n f_i^2(X_k) \right]^{1/2} \quad (3.28)$$

com avaliação dos vetores:

$$X_{k+1} = X_k + s_k P_k \quad (3.29)$$

$$f_{k+1} = f(X_{k+1}) \quad (3.30)$$

caso aconteça, proceder com o passo 5. De outro modo, calcula-se s_k através do uso da fórmula desenvolvida por BROYDEN para amortecimento dos valores de x :

$$s_{k,2} = [(1 + 6 \eta)^{1/2} - 1] / 3 \eta \quad (3.31)$$

onde:

$$\eta = \frac{\sum_{i=1}^n f_i^2(X_k + s_k P_k)}{\sum_{i=1}^n f_i^2(X_k)} \quad (3.32)$$

se a norma não for reduzida pelo uso de $s_{k,2}$, retornar ao passo 2 e reavaliar as derivadas parciais de J_k com base em X_k até que a

norma Euclidiana seja minimizada.

5 - Testar f_{k+1} para a convergência. Se não for atingida, calcula-se:

$$Y_k = f_{k+1} - f_k \quad (3.33)$$

6 - Computar:

$$H_{k+1} = H_k - \frac{(H_k Y_k + s_k P_k) P_k^t H_k}{P_k^t H_k Y_k} \quad (3.34)$$

e retornar ao passo 3.

3.5 ELIMINAÇÃO GAUSSIANA

A ELIMINAÇÃO DE GAUSS [conforme CARNAHAN e colaboradores (1969)] é um dos métodos diretos para resolver sistemas de equações algébricas lineares que podem ser representados de um modo conciso como segue:

$$B X = U \quad (3.35)$$

onde: B = matriz dos coeficientes;

$$U = [u_1, u_2, \dots, u_n]^t;$$

$$X = [x_1, x_2, \dots, x_n]^t, \text{ vetor solução.}$$

A técnica de resolução consiste em transformar a matriz dos coeficientes B em uma estrutura de triangularização superior, conforme demonstrado abaixo:

$$\begin{bmatrix} & & D \\ & & \\ 0 & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ \\ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u \\ \\ \end{bmatrix} \quad (3.36)$$

e depois aplicar o processo de retro-substituição.

Durante o procedimento dos cálculos, adota-se a estratégia da pivotação para minimizar os erros de truncamento. Este princípio se relaciona com a permutação das linhas,

objetivando colocar o coeficiente maior de cada k -ésima coluna na k -ésima linha. Daí, temos a ordenação dos elementos citados na diagonal principal da matriz dos coeficientes. Este algoritmo está disponível, e programado na linguagem FORTRAN em FREDENSLUND, A. e colaboradores, baseado nos trabalhos de NAPHTHALI-SANDHOLM (1971).

CAPITULO 4

4. MODELAGEM MATEMÁTICA DE UMA COLUNA DE DESTILAÇÃO NO REGIME ESTACIONÁRIO - APLICAÇÃO DA COLOCAÇÃO ORTOGONAL

4.1 INTRODUÇÃO

Este capítulo aborda sobre a modelagem do processo de uma coluna de destilação, no regime estacionário.

No presente trabalho, o modelo será estendido para sistemas multicomponente e a descontinuidade nos perfis da coluna, introduzida pelas alimentações e retiradas laterais, também será representada.

Em princípio, será apresentada a modelagem clássica. Ela descreve as operações de destilação, requerendo um grande número de equações algébricas não lineares e/ou equações diferenciais. Essas equações são agrupadas por estágio e a solução terá a forma do método prato a prato.

Posteriormente, será demonstrado um modelo de ordem reduzida utilizando a técnica da colocação ortogonal. Este desenvolvimento se baseia no método de aproximação polinomial dos perfis de composição e vazão da coluna.

Estabeleceu-se como referência para tais procedimentos, os trabalhos de CHO e JOSEPH (1983a, 1983b e 1984) e de RAVAGNANI (1988).

4.2 MODELAGEM MATEMÁTICA RIGOROSA NO ESTADO ESTACIONÁRIO

O modelo matemático que descreve a coluna de destilação no regime estacionário, deriva-se do sistema de equações formado pelo balanço de massa e pelas relações de equilíbrio líquido-vapor.

No entanto, os sistemas de separação multicomponente devem ser tratados com algumas considerações de ordem prática, pois o conhecimento sobre os dados que definem os sistemas não ideais desse tipo, ainda é bastante limitado. Desse modo, as propostas simplificadoras admitidas neste modelo são:

- a) as vazões molares de líquido e vapor nas secções da coluna são consideradas constantes;
- b) a composição ao longo do prato é uniforme e igual à do líquido que verte para o prato localizado imediatamente abaixo;
- c) as alimentações são feitas na forma de líquido saturado;
- d) condensador total. Em consequência, a vazão do refluxo se torna uma variável independente do problema.
- e) a retirada lateral é feita na forma de líquido;
- f) os efeitos térmicos de mistura são desprezíveis;
- g) pressão constante ao longo da coluna.

Diante das hipóteses a), c) e f) não foi incluído o balanço energético e o sistema se encontra em equilíbrio térmico.

A análise da operação da coluna será feita de uma maneira rigorosa. Sua configuração está mostrada na figura 4.1. Para um estágio arbitrário, inclui-se a possibilidade de haver alimentação e retirada lateral. A nomenclatura utilizada no esquema, com os índices atribuídos às composições de líquido e vapor que se cruzam em um determinado prato serem iguais, objetiva facilitar o emprego da colocação ortogonal.

Na sequência, expressaremos as equações que compõem o modelo matemático assim sugerido:

- Balanço de massa do componente i no prato k :

$$L_{k-1} x_{i,k-1} + V_k y_{i,k} + F_k z_{i,k} = L_k x_{i,k} + V_{k-1} y_{i,k-1} + W_k x_{i,k} \quad (4.1)$$

- Balanço de massa do componente i no refeedor :

$$L_n x_{i,n} = V_n y_{i,r} + R x_{i,r} \quad (4.2)$$

- Balanço de massa global e do componente i no condensador :

$$V_o = L_o + D \quad (4.3)$$

$$V_o y_{i,o} = L_o x_{i,o} + D x_{i,o} \quad (4.4)$$

ou seja: $y_{i,o} = x_{i,o} \quad (4.5)$

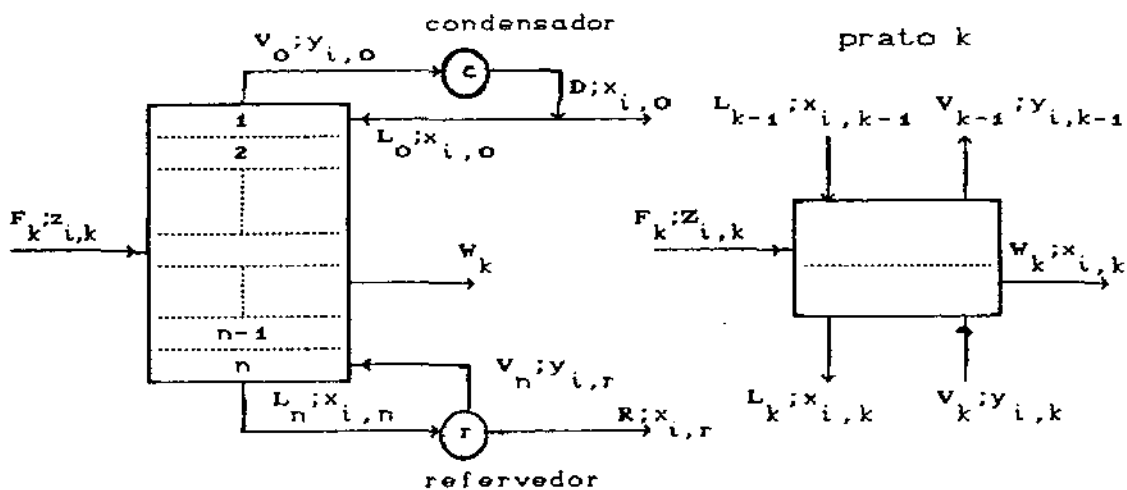


Figura 4.1 Configuração da coluna de destilação

As relações de equilíbrio líquido-vapor no prato assumem as seguintes condições:

- 1) A fase vapor é considerada ideal;
- 2) A eficiência de vaporização do prato é expressa através da eficiência de Murphree [conforme KING (1980)], dada a seguir:

$$E_{i,k}^m = \frac{y_{i,k-1} - y_{i,k}}{y_{i,k-1}^* - y_{i,k}} \quad (4.6)$$

desde que esses valores não variam grandemente de prato a prato para todos os componentes, consideramos simplesmente como constantes e iguais a E^m .

O cálculo da composição de vapor de equilíbrio para o componente i é o seguinte:

$$y_{i,k-1}^* = K_{i,k} x_{i,k} \quad (4.7)$$

Combinando (4.6) e (4.7), temos então:

$$y_{i,k-1} - y_{i,k} = E^m (K_{i,k} x_{i,k} - y_{i,k}) \quad (4.8)$$

completando as hipóteses simplificadoras que fazem parte das correlações da não idealidade da fase líquida, supomos que:

- todos os componentes sejam condensáveis e que a pressão do sistema assuma o valor próximo à pressão de saturação para o líquido puro i à mesma temperatura. Em consequência temos a correção de POYNTING [PRAUSNITZ (1969)] igual a um;

- considera-se a pressão do sistema moderadamente baixa, assim a fugacidade de referência para o componente i puro torna-se aproximadamente a pressão do vapor do componente puro na mesma temperatura da mistura.

Assim, a equação para a constante de equilíbrio

$K_{i,k}$ [conforme PRAUSNITZ (1969)] é :

$$K_{i,k} = \frac{y_{i,k}^*}{x_{i,k}} = \frac{\gamma_{i,k} \cdot P_{i,k}^{sat}}{P} \quad (4.9)$$

A pressão de saturação é calculada pela equação de ANTOINE e o coeficiente de atividade é obtido por intermédio dos parâmetros de WILSON (REID e colaboradores (1977)).

Convém acrescentar que a relação de equilíbrio para o referedor segue o modelo da equação (4.9).

Uma explanação sobre as correlações do equilíbrio líquido-vapor aplicadas neste trabalho estão inseridas no anexo 1. Ele apresenta as equações de ANTOINE e WILSON e seus parâmetros, além do volume molar tabelados. Dependendo das propriedades termodinâmicas, esses fatores representam um componente puro ou uma interação entre as espécies numa mistura.

Para concluir o desenvolvimento desse modelo, uma restrição deve ser tratada para garantir a conservação de massa no sistema envolvido. Ela consiste em normalizar as frações molares de líquido e de vapor através da seguinte condição:

$$\sum_{i=1}^{NC} x_{i,k} = 1 \quad \text{e} \quad \sum_{i=1}^{NC} y_{i,k} = 1 \quad (4.10)$$

onde o índice NC é o número de componentes da mistura.

4.3 APLICAÇÃO DA COLOCAÇÃO ORTOGONAL

O modelo matemático é adaptado de forma que os perfis de composição e vazão sejam aproximados para polinômios que são funções da variável espacial z.

Essas funções contínuas são obtidas através da expansão da série de Taylor, truncada nos termos de primeira ordem, tal como:

$$x_{i,k-1} = x_{i,k} - \frac{\delta x_i}{\delta z} \Delta z \quad (4.11)$$

$$y_{i,k-1} = y_{i,k} - \frac{\delta y_i}{\delta z} \Delta z \quad (4.12)$$

Afim de minimizar o efeito da descontinuidade nos perfís da coluna, introduzida pelas alimentações e retiradas laterais, CHO e JOSEPH apresentaram uma redefinição de variáveis. Isto possibilita o uso de polinômios mais adequadamente na aproximação dos perfís, com uma representação mais concisa do seu comportamento. Este efeito está ilustrado na figura 4.2.

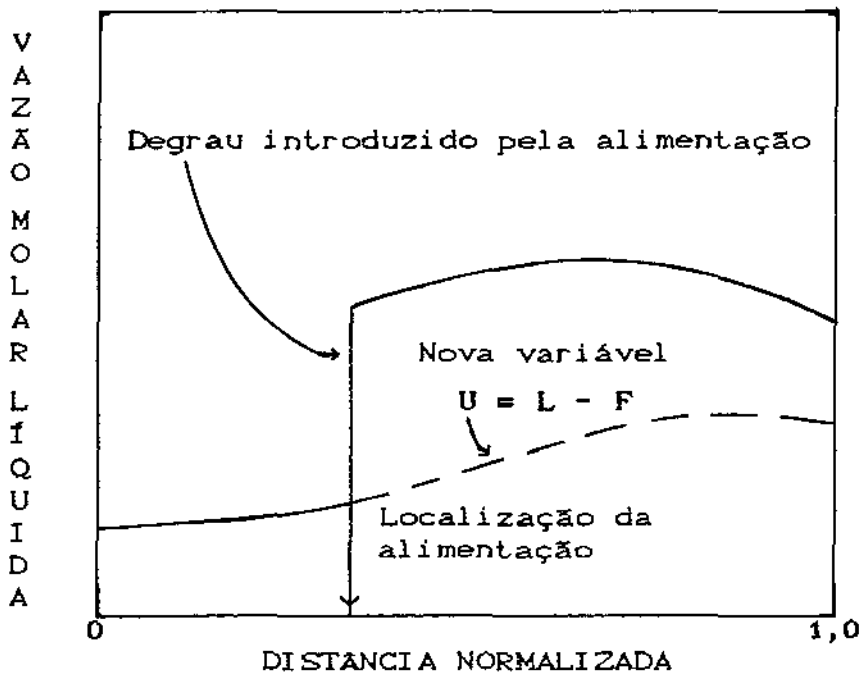


Figura 4.2 Efeito da alimentação no perfil da vazão molar líquida na coluna.

A nova variável $u_{i,k}$ simplifica o balanço de massa por componente, dada por:

$$\begin{aligned} u_{i,k} &= L_k x_{i,k} - V_k y_{i,k} && \text{para índice } k=0,1,\dots,f-1 \\ &= L_k x_{i,k} - V_k y_{i,k} - F_k z_{i,k} && \text{para " } k=f,\dots,w-1 \quad (4.13) \\ &= L_k x_{i,k} - V_k y_{i,k} - F_k z_{i,k} + W_k x_{i,k} && \text{para índice } k=w,\dots,n \end{aligned}$$

Substituindo as definições de $u_{i,k}$ na equação (4.1), temos:

$$u_{i,k-1} - u_{i,k} = 0 \quad \text{índice } k = 1,\dots,n \quad (4.14)$$

Ao expandirmos a função $u_{i,k}$ em série de Taylor e truncando-se nos termos de primeira ordem vem:

$$u_{i,k-1} = u_{i,k} - \frac{\delta u_i}{\delta z} \Delta z \quad (4.15)$$

Substituindo (4.15) em (4.14) e (4.12) em (4.8), temos:

$$\frac{\delta u_i}{\delta z} = 0 \quad (4.16)$$

e

$$y_{i,k} = K_{i,k} x_{i,k} + \frac{\Delta z}{E^m} \frac{\delta y_i}{\delta z} \quad (4.17)$$

O problema assim definido pelas equações (4.16) e (4.17) possui duas condições de contorno, as quais são expressas:

$$\text{quando índice } k = 0, \quad x_{i,k} = x_{i,0} \quad (4.18)$$

$$\text{quando índice } k = n, \quad y_{i,k} = y_{i,n} \quad (4.19)$$

Com a utilização do polinômio de JACOBI, que é ortogonal no intervalo de 0 a 1, é necessário normalizar a variável z de

modo a atender a este requisito. Assim sendo:

$$\Delta z = 1 / n \quad (4.20)$$

com $z=0$ no topo da coluna e $z=1$ em sua base.

Empregando-se agora o conceito de COLOCAÇÃO ORTOGONAL às equações (4.16) e (4.17), as derivadas das grandezas de vazão e composição em relação à variável espacial z serão substituídas por polinômios ortogonais. As expressões resultantes serão determinadas pela escolha dos N pontos de colocação internos e aplicadas nos j pontos de colocação, de acordo com:

$$\sum_{l=1}^{N+2} A_{j,l} u_{i,l} = 0, \quad \text{índice } j = 2, \dots, N+2 \quad (4.21)$$

ou

$$\sum_{l=1}^{N+2} A_{j,l} (L_l x_{i,l} - V_l y_{i,l} - F_{i,l}^* + W_{i,l}^*) = 0 \quad (4.22)$$

índice $j = 2, \dots, N+2$

$$\text{com } F_{i,l}^* = \sum_{m=1}^l F_m z_{i,m} \quad \text{e} \quad W_{i,l}^* = \sum_{m=1}^l W_m x_{i,m} \quad (4.23)$$

$$\text{e } y_{i,j} - K_{i,j} x_{i,j} + \frac{\Delta Z}{E^m} \sum_{l=1}^{N+2} A_{j,l} y_{i,l} = 0 \quad (4.24)$$

$$\text{índice } j = 1, \dots, N+1$$

sendo o valor de $x_{i,m}$ obtido através de interpolação linear. Os coeficientes $A_{j,l}$ são estabelecidos pela escolha do número de pontos de colocação e pelas suas localizações.

Aplicando-se a COLOCAÇÃO ORTOGONAL às condições de contorno, elas passam a ser:

$$\text{para } z = 0, \quad x_i = x_{i,1} \quad (4.25)$$

$$\text{para } z = 1, \quad y_i = y_{i,N+2} \quad (4.26)$$

e as equações (4.2), (4.5) e a relação de equilíbrio para o

refervedor com novas notações, são respectivamente:

$$L_{N+2} x_{i,N+2} - V_{N+2} y_{i,N+2} - R x_{i,N+3} = 0 \quad (4.27)$$

$$y_{i,1} = x_{i,1} \quad (4.28)$$

$$y_{i,N+2} = K_{i,N+3} x_{i,N+3} \quad (4.29)$$

Desse modo, temos um sistema formado por $(2N+5)$ incógnitas e $(2N+5)$ equações para cada componente, satisfazendo a determinação do perfil completo da coluna. É notória a redução do número de equações com aplicação desse método.

O sistema gerado é programado para se obter uma solução, utilizando o método de convergência com aproximação sucessiva.

A ordem de solução entre as variáveis, pode ser arbitrada preferencialmente para aquela fisicamente mais sensível. Dependendo da escolha mais adequada para o processo quanto as variáveis de temperatura ou vazões globais, dois arranjos são possíveis e classificam-se segundo FRIDAY e SMITH (1964) como:

"Método BP (bubble-point)" - caracterizado por determinar em primeiro lugar a temperatura, utilizando o algoritmo do cálculo do ponto de bolha, e só então as vazões globais, através do balanço de energia. Este caso é típico em que os efeitos do calor latente predominam sobre aqueles do calor sensível. Temos como exemplo, a destilação de uma mistura de componentes os quais apresentem pontos de ebulição próximos.

"Método SR (sum of rates)" - envolve o cálculo das vazões globais em primeiro plano, pela soma das vazões de cada componente e determinam a temperatura através do balanço energético. Este método obtém bom desempenho para situações onde

os efeitos de calor sensível superam aqueles de calor latente. É recomendável para colunas de absorção ou de extração líquido-líquido.

Optamos neste desenvolvimento pela indicação do "método BP". Desde que o nosso problema se transformou naquele de valor inicial, a primeira estimativa para os valores de temperatura ao longo da coluna, foi limitada na faixa entre os pontos de ebulição máximo e mínimo das espécies presentes. Os novos valores de temperatura passam a derivar das composições líquidas normalizadas para cada ponto de colocação, através do cálculo da temperatura do ponto de bolha. Convém lembrar que o balanço energético foi eliminado desse "loop" de convergência.

O programa de computador do modelo prato a prato utilizado para as comparações foi o de FREDENSLUND e colaboradores (1977), sendo feitas modificações para o cálculo do coeficiente de atividade, uma vez que os autores empregaram o modelo UNIQUAC.

4.4 PROCEDIMENTO PARA O CÁLCULO DA COLUNA

A notação admitida para relacionar a alimentação ou retirada lateral com o devido ponto de colocação, corresponde a associá-las com o ponto de colocação situado imediatamente abaixo. Aproveitando a ilustração da figura 4.3, a alimentação está vinculada ao ponto NP2.

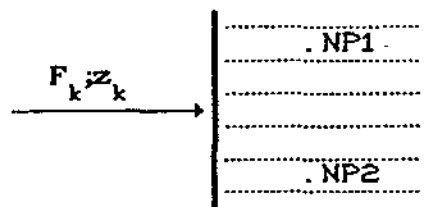


Figura 4.3 Relação entre a alimentação e os pontos de colocação

Os dados que devem ser fixados para a coluna seguem as especificações relacionadas abaixo:

- número de pratos da coluna;
- vazão de destilado;
- vazão, composição e localização das alimentações;
- vazão e localização das retiradas laterais;
- pressão de operação da coluna;
- eficiência de Murphree;
- razão de refluxo.

As temperaturas iniciais do topo e da base da coluna são estimadas, assumindo respectivamente o valor mínimo e máximo entre os pontos de ebulição das substâncias presentes na mistura, à pressão da coluna. Elas são multiplicadas por um mesmo fator de amortecimento, o qual pode ser arbitrado no intervalo aberto de zero a um. A partir dessas temperaturas, calcula-se a pressão de saturação; daí, as composições molares iniciais na fase líquida, nas citadas posições, serão definidas por:

$$x_{i,\text{topo}} = \frac{P}{p_{i,\text{topo}}^{\text{sat}} - P} \quad i = 1, \dots, \text{NC} \quad (4.30)$$

$$x_{i,\text{base}} = \frac{P}{p_{i,\text{base}}^{\text{sat}} - P} \quad i = 1, \dots, \text{NC} \quad (4.31)$$

Um esclarecimento a respeito da notação utilizada é que a base da coluna está relacionada com as condições do refeedor.

Após a normalização das composições molares líquidas, descobrimos o perfil inicial para toda a coluna, através de interpolação linear, cujo procedimento também é realizado para as

temperaturas. Conhecendo-se esses valores, calcula-se a constante de equilíbrio e baseadas na equação (4.24), as frações molares de vapor são avaliadas para cada componente nos pontos de colocação.

Diante dos cálculos anteriores, inicia-se a resolução das equações de balanço de massa dadas por (4.22) e (4.27), determinando-se os elementos da matriz Jacobiana. O próximo passo consiste em aplicar o método iterativo de Broyden, já detalhado em 3.4, obtendo-se os novos valores das frações molares líquidas e de temperatura, sendo este procedimento executado até que o critério de convergência seja atendido. A medida que os novos perfis das frações molares líquidas são gerados, uma subrotina auxiliar contendo a equação (4.24) é solicitada para cálculo dos perfis correspondentes das frações molares de vapor; este sistema composto por $N+1$ equações algébricas lineares, será resolvido pelo método de eliminação gaussiana. Nesta etapa também se avalia as composições molares de vapor no refeedor, utilizando a equação (4.29). Segue uma normalização dessas últimas variáveis calculadas para enfim aplicar a equação (4.28).

É suficiente para que se determine a solução das equações de balanço de massa e de equilíbrio líquido-vapor, a dedução para apenas $NC-1$ componentes da mistura.

A convergência é testada após a normalização das frações molares do líquido, adotando-se o seguinte critério:

$$\left[\sum_{i=1}^{NC-1} \sum_{j=2}^{N+3} \Delta x_{i,j}^2 \right]^{1/2} < 0,001 (N+2) (NC-1) \quad (4.32)$$

Um diagrama de blocos representado pela figura 4.4 representa uma versão simplificada do procedimento de cálculo.

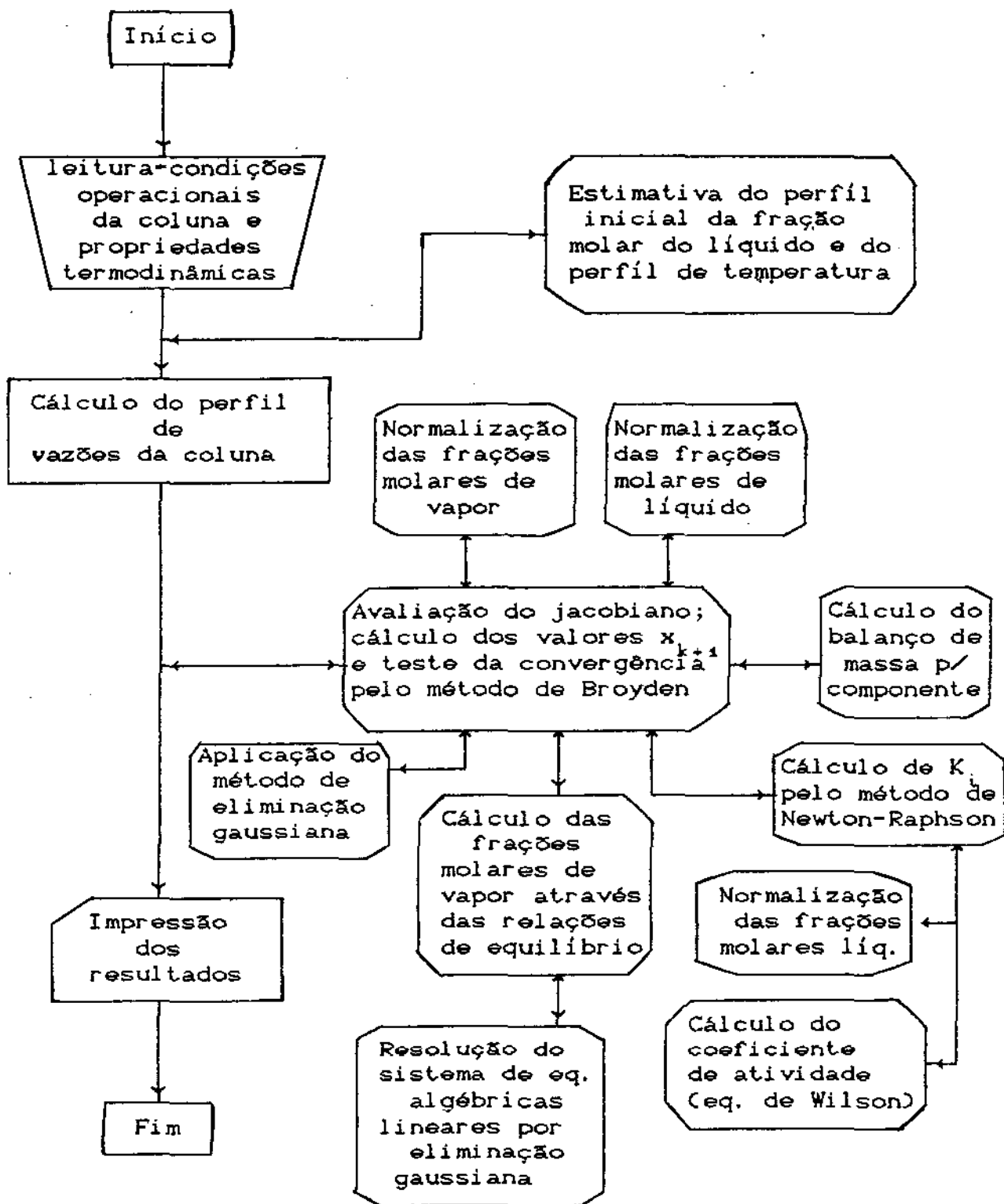


Figura 4.4 Diagrama de blocos simplificado do programa utilizado neste trabalho.

CAPITULO 5

5. RESULTADOS

5.1 INTRODUÇÃO

No presente capítulo, os resultados da aplicação da colocação ortogonal para os diversos sistemas trabalhados, serão apresentados na forma de tabelas e gráficos, os quais reproduzem os perfís de composição e temperatura ao longo da coluna. Uma análise comparativa é realizada, em termos do tempo de processamento e dos desvios absolutos das variáveis do processo, em relação ao modelo rigoroso.

No início será abordada a influência do número e localização dos pontos de colocação sobre o comportamento dos perfís. As considerações empregadas na avaliação dos resultados para a coluna de destilação, no regime estacionário, serão descritas no decorrer do capítulo.

Observou-se também se o método numérico de BROYDEN (1965) possui um melhor desempenho na resolução do sistema de equações, quando comparado com o método de NEWTON-RAPHSON [conforme CARNAHAN e colaboradores (1969)].

Os pontos de colocação foram avaliados quando se determinou através das raízes do polinômio de JACOBI, e de outra forma, também foram escolhidos, fixando-os em posições sensíveis da coluna, incluindo-se a alimentação e saída lateral.

No entanto, pelas próprias características dos resultados, cada sistema foi analisado individualmente. Cada qual, apresentando um comportamento particular quanto a melhor condição para o uso da colocação ortogonal.

5.2 INFLUÊNCIA DO NÚMERO E LOCALIZAÇÃO DOS PONTOS DE COLOCAÇÃO

De um modo geral, na interpretação dos resultados da aplicação do modelo de ordem reduzida, considera-se a influência do número e posições dos pontos de colocação, sobre a precisão relacionada com o modelo rigoroso. Outro aspecto discutido se refere às vantagens sobre o tempo de processamento.

Não existe uma regra básica para que se defina a priori, o grau do polinômio ortogonal que proporcione uma aproximação mais eficiente para o sistema estudado. Um aproveitamento significativo pode depender do sucesso da localização dos pontos. Podemos constatar estes efeitos nos exemplos que serão expostos adiante.

Durante as simulações, foi realizada uma variação de dois a dez pontos internos de colocação e de suas respectivas distribuições ao longo da coluna.

5.3 DESENVOLVIMENTO E ANÁLISE DOS RESULTADOS

Na recomposição do perfil prato a prato para o modelo reduzido, utilizou-se a técnica de interpolação linear. Este procedimento evita, por vez, certas impossibilidades físicas nos resultados, tais como frações molares negativas. Neste caso, os

cálculos para os perfis de composição e temperatura, seguem a equação descrita abaixo:

$$f(z) = f_1 + \frac{f_2 - f_1}{z_2 - z_1} (z - z_1) \quad (5.1)$$

onde: $z_1 < z < z_2$;

z_1 e z_2 são os limites do intervalo de colocação;

z é a razão do número do prato pelo número total de pratos da coluna.

A interpolação polinomial utilizando o mesmo polinômio que descreve o sistema (polinômio de LAGRANGE), é outro recurso que pode ser empregado. Porém, como já foi demonstrado no trabalho de RAVAGNANI (1988), os desvios em relação ao modelo clássico são compatíveis com aqueles apresentados pela interpolação linear. Ainda assim, possui o inconveniente de por ventura os dados adquiridos serem negativos, para os pratos que possuem os valores das variáveis próximos de zero. Ondulações na curva também podem ser vistas, inviabilizando a formação de um perfil adequado.

Avaliou-se a média dos desvios absolutos das frações molares dos componentes da mistura na fase líquida, no topo e na base, em relação ao modelo clássico. Ela é representada pelo fator DXS.. Uma boa perspectiva para esse fator, corresponde a valores assumidos menores que 0,01.

A importância da análise nos extremos da coluna é devida à necessidade de se conhecer as correntes de entrada e saída nos casos de otimização de processos em regime permanente. Torna-se evidente a vantagem do emprego do modelo de ordem reduzida para simplificar os cálculos nos diversos módulos envolvidos.

Convém salientar que os resultados foram apresentados com a notação para os estágios da coluna, de forma invertida de como foram calculados, isto é, ordem crescente da base para o topo da mesma.

A informação sobre o tempo de processamento, dado por t.CPU (min:seg); obtém-se através de um comando específico no momento em que se executa o programa, acionando assim uma função interna existente na placa do computador.

Os gráficos ilustrados nos exemplos, estão associados a resoluções pelo método de BROYDEN, sendo uma das finalidades enfatizadas para o estudo desse trabalho. Uma análise comparativa é realizada com o método de NEWTON-RAPHSON, observando-se o favorecimento entre ambos, sobre o qual oferece uma melhor exatidão e tempos computacionais menores. Para se ter uma idéia sobre as diferenças quantitativas entre eles, foi calculado o erro relativo percentual como segue:

$$ER = \frac{DXS_{\text{Broyden}} - DXS_{\text{N. Raphson}}}{DXS_{\text{N. Raphson}}}} \times 100 \quad (5.2)$$

O número máximo de iterações para que o critério de convergência seja atendido é cinquenta. Entretanto, mesmo que a convergência seja alcançada antes do limite, há casos em que o tempo de processamento se torna superior ao do modelo rigoroso. Daí, o modelo de ordem reduzida perde sua utilidade. Essas simulações serão destacadas nas tabelas através de asterisco.

Na continuidade, temos a análise dos resultados para cada sistema trabalhado.

5.3.1 EXEMPLO 1: ACETONA-CLOROFORMIO-METANOL

Neste exemplo, verificaremos tres condições operacionais, conforme a tabela 5.1.

Em princípio, detalhemo-nos na primeira condição. Os resultados das simulações se encontram na tabela 5.2, com os cálculos dos pontos de colocação através de polinômio ortogonal.

O critério adotado para que os pontos sejam fixados, corresponde a associá-los aos pratos da coluna, inclusive a alimentação e saída lateral, caso haja.

TABELA 5.1 Condições operacionais da coluna de destilação.

Condições do exemplo 1	1	2	3
Número de componentes	3	3	3
Número de pratos	25	25	41
Vazão de destilado (Kmol/h)	1,8	0,5	0,9
Razão de refluxo	8,0	4,0	64,0
Eficiência de Murphree	0,5	0,5	0,5
Pressão (atm)	1,0	1,0	1,0
Alimentação 1			
estágio	12	12	20
vazão molar (Kmol/h)	3,6	1,0	1,0
composição	acetona 0,46 clformio 0,33 metanol 0,21	acetona 0,46 clformio0,33 metanol 0,21	acetona 0,46 clformio0,33 metanol 0,21

Tabela 5.2 Resultados das simulações, FATOR = 0,5.

DESVIOS PARA O MODELO RIGOROSO							TEMPO DE CPU			
NP	ALFA	BETA	DXS Newton- Raphson	DXS Broyden	ER %	MÉTODO	AMBOS	N. - BROYDEN	BROYDEN	NEWTON-R
⊗ 4	0,0	0,0	0,0004	0,0004	0	A	0:09	0:02	0:02	A
4	1,0	0,0	0,0066	0,0052	-21	B	0:09	0:03	0:04	NR
4	2,0	0,0	0,0391	0,0680	+74	NR	0:09	0:03	0:02	B
4	3,0	0,0	0,3084	0,0627	-80	B	0:09	0:44	0:03	B
4	5,0	0,0	não conver.	não conver.	-	-	-	-	-	-
4	0,0	1,0	0,0013	0,0010	-23	B	0:09	0:02	0:04	NR
4	0,0	2,0	0,0050	0,0020	-60	B	0:09	0:02	0:04	NR
4	0,0	3,0	0,0085	0,0021	-75	B	0:09	0:02	0:05	NR
4	0,0	5,0	0,0140	não conver.	-	-	0:09	0:02	-	-
2	0,0	0,0	0,0148	0,0029	-80	B	0:09	0:02	0:02	A
6	0,0	0,0	0,0002	0,0002	0	A	0:09	0:03	0:02	B
8	0,0	0,0	0,0002	0,0002	0	A	0:09	0:05	0:03	B
⊗ 10	0,0	0,0	0,0001	0,0002	+100	NR	0:09	0:07	0:04	B
* 10	2,0	0,0	0,0259	0,0358	+38	NR	0:09	0:11	0:10	B
10	4,0	0,0	não conver.	não conver.	-	-	-	-	-	-
10	0,0	2,0	0,0010	0,0022	+120	NR	0:09	0:07	0:04	B
⊗ 10	0,0	4,0	0,0014	0,0042	+200	NR	0:09	0:07	0:04	B

TEMPO DE CPU (min:seg)

A = AMBOS; B = Broyden; NR = Newton-Raphson

* tempo de processamento maior do que o modelo rigoroso, resolução pelo método de Broyden.

⊗ pontos selecionados para a construção dos perfis de composição e temperatura.

Utilizou-se para esta condição, o fator da estimativa inicial de temperatura igual a 0,5.

Analizando-se o figura 5.1, temos que a solução das frações molares nos extremos da coluna, comporta-se melhor para quatro pontos internos de colocação do que o perfil obtido com dez pontos. Tanto para os desvios relativos como para o tempo computacional.

Observando-se a figura 5.2, podemos ter aproximações melhores com dez pontos internos de colocação, quando se altera suas localizações. No entanto, não há ganho do tempo de processamento quando comparado com quatro pontos. O perfil correspondente de temperatura apresenta um comportamento geral muito bom, ao compararmos com o rigoroso, isto é verificado na figura 5.3.

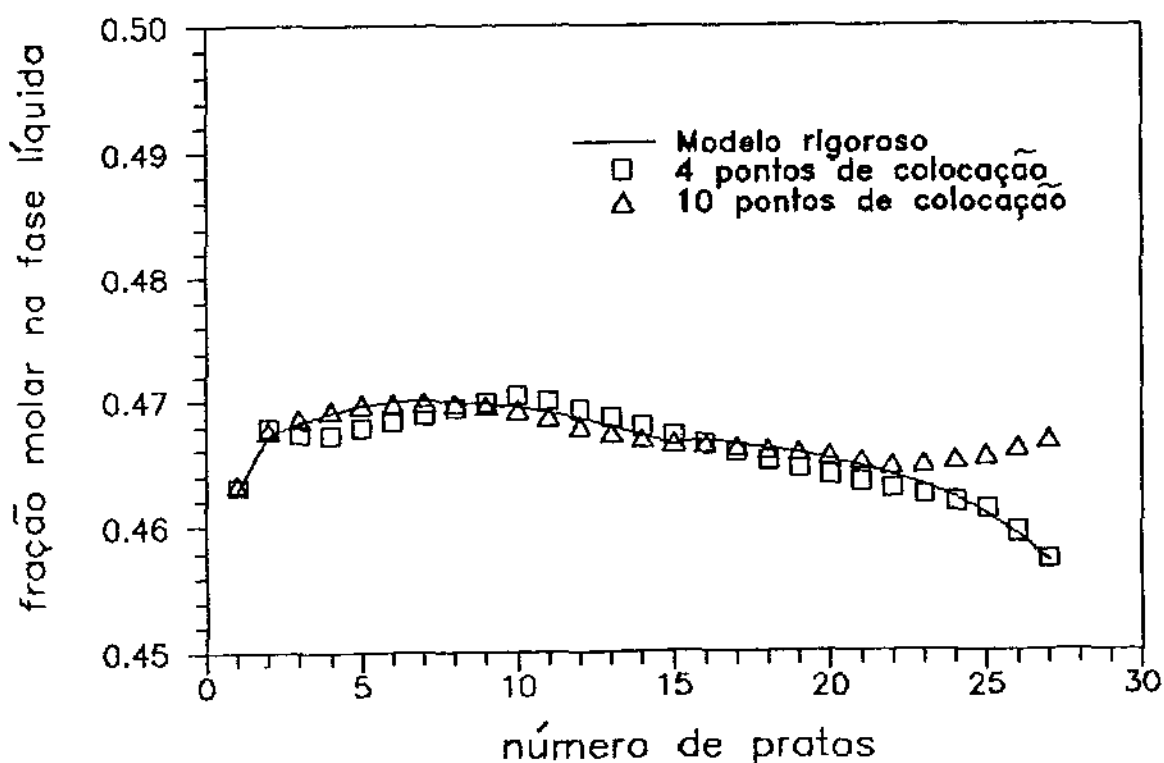


Figura 5.1 Perfil de composição para acetona. □ 4(0,0) Δ 10(0,4)

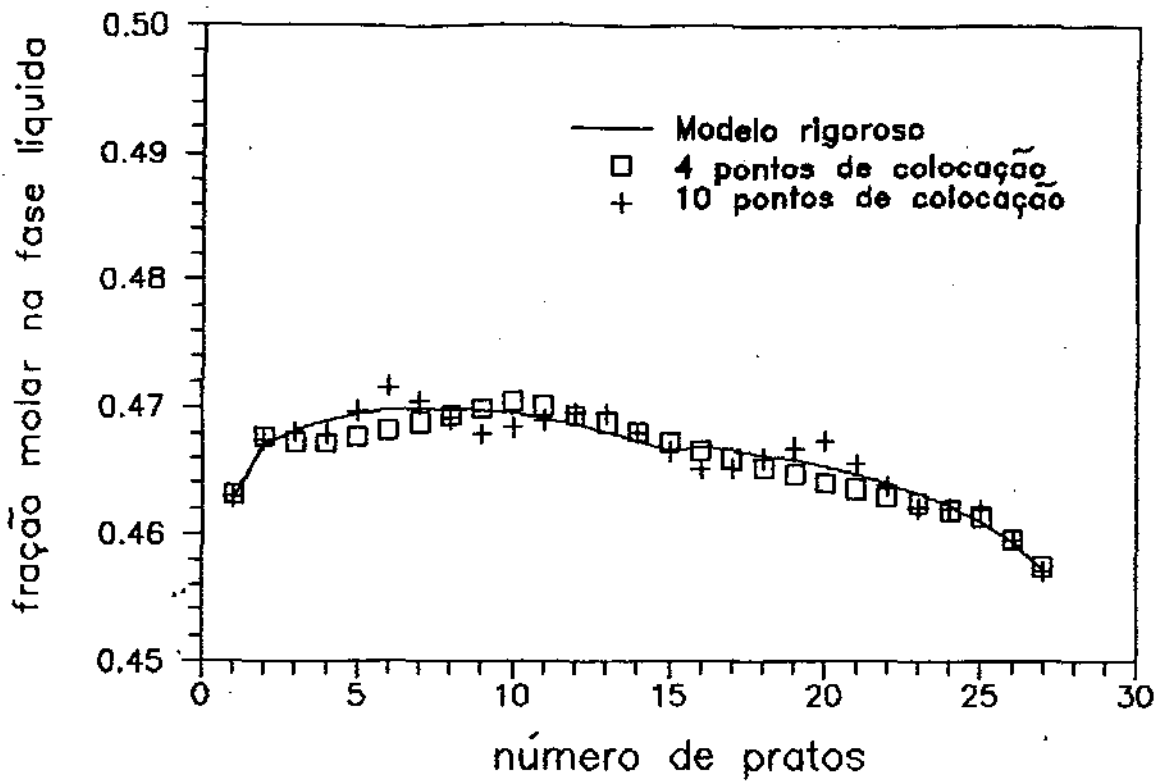


Figura 5.2 Perfil de composição para acetona. □ 4(0,0) + 10(0,0)

Quando fixamos os pontos para o mesmo sistema, segundo as simulações demonstradas na tabela 5.3, a precisão nos extremos se tornou inferior em relação aos pontos adquiridos pelo polinômio de JACOBI. Porém, a precisão continuou satisfatória, nos casos de oito e nove pontos internos. Ainda foi observada uma estabilidade na ordem de grandeza dos erros relativos, com a variação do fator de temperatura de 0,1 a 0,95. A redução do tempo foi nítida.

A grande vantagem na fixação arbitrária dos pontos de colocação, incluindo a alimentação e retirada lateral, consiste em diminuir a ordem do sistema de equações a ser resolvido. Já que se elimina o cálculo dos respectivos pontos através do polinômio de JACOBI.

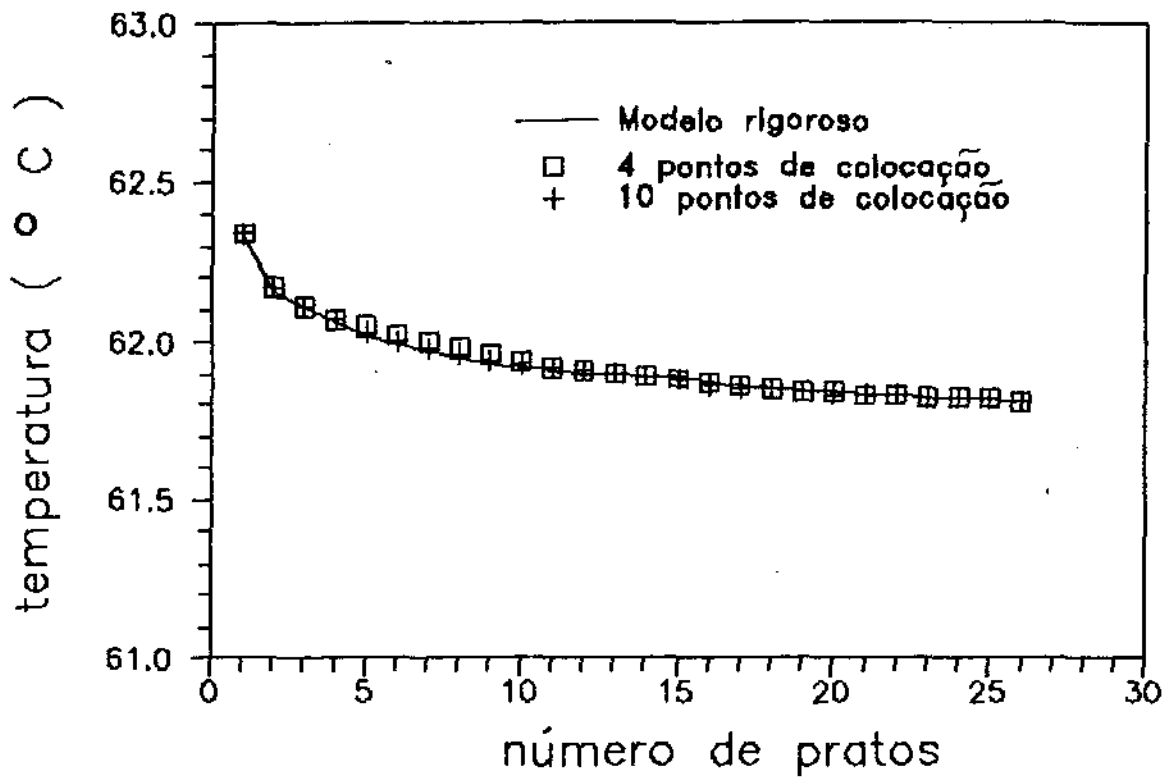


Figura 5.3 Perfil de temperatura para acetona. □ 4(0,0) + 10(0,0)

3 pontos internos fixos

- Prato 6 = 0,24
- Prato 12 = 0,48
- Prato 18 = 0,72

5 pontos internos fixos

- Prato 4 = 0,16
- Prato 8 = 0,32
- Prato 12 = 0,48
- Prato 16 = 0,64
- Prato 20 = 0,80

Tabela 5.3 Resultados das simulações.

DESVIOS PARA O MODELO RIGOROSO						TEMPO DE CPU			
NP	FATOR	DXS NEWTON- RAPHSON	DXS BROYDEN	ER %	F Y O R D E L	R O T O Q U E	N. R O T A C O E S	B L O C O S	F Y O R D E L
3	0,1	não converge	não converge	-	-	-	-	-	-
3	0,2	0,3024	"	-	-	0:09	0:13	-	-
3	0,3	não converge	"	-	-	-	-	-	-
3	0,4	"	"	-	-	-	-	-	-
3	0,5	0,2563	"	-	-	0:09	0:16	-	-
3	0,6	0,2840	"	-	-	0:09	0:31	-	-
3	0,7	0,2770	"	-	-	0:09	0:24	-	-
3	0,8	não converge	"	-	-	-	-	-	-
3	0,95	"	"	-	-	-	-	-	-
5	0,1	0,0039	"	-	-	0:09	0:05	-	-
5	0,2	0,0061	"	-	-	0:09	0:05	-	-
5	0,3	0,0064	"	-	-	0:09	0:05	-	-
5	0,4	0,0062	"	-	-	0:09	0:05	-	-
5	0,5	0,0058	"	-	-	0:09	0:05	-	-
5	0,6	0,0140	"	-	-	0:09	0:02	-	-
5	0,7	0,0056	"	-	-	0:09	0:04	-	-
5	0,8	0,0052	não converge	-	-	0:09	0:04	-	-
5	0,95	0,0247	"	-	-	0:09	0:05	-	-

continuação da tabela 5.3.
Pontos internos de colocação

8 pontos		9 pontos		12 pontos	
prato 3 = 0,12		prato 2 = 0,08		prato 2 = 0,08	
" 6 = 0,24		" 3 = 0,12		" 4 = 0,16	
" 9 = 0,36		" 6 = 0,24		" 6 = 0,24	
□ " 12 = 0,48		" 9 = 0,36		" 8 = 0,32	
" 15 = 0,60		□ " 12 = 0,48		" 10 = 0,40	
" 18 = 0,72		" 15 = 0,60		□ " 12 = 0,48	
" 21 = 0,84		" 18 = 0,72		" 14 = 0,56	
" 24 = 0,96		" 21 = 0,84		" 16 = 0,64	
		" 24 = 0,96		" 18 = 0,72	
				" 20 = 0,80	

DESVIOS PARA O MODELO RIGOROSO						TEMPO DE CPU			
NP	FATOR	DXS NEWTON- RAPHSON	DXS BROYDEN	ER %	F V P O V P V P V P V P	0 B O T O G R A D O	N. - R E D U Z I D O	B L O C O S E C	F V P O V P V P V P
8	0,1	0,0013	0,0055	+285	NR	0:09	0:05	0:03	B
8	0,2	0,0013	0,0056	+331	NR	0:09	0:05	0:03	B
8	0,3	0,0013	0,0054	+315	NR	0:09	0:05	0:03	B
8	0,4	0,0012	0,0059	+392	NR	0:09	0:05	0:03	B
⊗ 8	0,5	0,0012	0,0060	+400	NR	0:09	0:05	0:03	B
8	0,6	0,0013	0,0038	+192	NR	0:09	0:05	0:03	B
8	0,7	0,0020	0,0085	+325	NR	0:09	0:03	0:03	A
⊗ 8	0,8	0,0014	0,0018	+286	NR	0:09	0:05	0:03	B
8	0,95	0,0012	0,0033	+175	NR	0:09	0:09	0:08	B
⊗ 9	0,5	0,0019	0,0018	-5	B	0:09	0:06	0:07	NR
⊗ 9	0,8	0,0020	0,0018	-10	B	0:09	0:06	0:07	NR
* 9	0,95	0,0019	0,0021	+11	NR	0:09	0:13	0:10	B
12	0,5	0,0065	0,0069	+6	NR	0:09	0:11	0:06	B
* 12	0,95	0,0065	0,0049	-246	B	0:09	0:21	0:15	B

TEMPO DE CPU (min:seg)

A = AMBOS; B = Broyden; NR = Newton-Raphson

* tempo de processamento maior do que o modelo rigoroso, resolução pelo método de Broyden.

⊙ pontos selecionados para a construção dos perfis de composição.

□ prato de alimentação.

Uma ressalva a respeito dos comparativos entre os resultados dos métodos de NEWTON-RAPHSON e de BROYDEN, temos a conclusão que o tempo de processamento para o último, apresenta-se sensivelmente mais reduzido; enquanto a precisão não apresenta essa vantagem.

As figuras 5.4 e 5.5 ilustram respectivamente, os resultados para os extremos da coluna, para os pontos escolhidos, comportando-se iguais, e quando um maior número de pontos definem uma aproximação melhor.

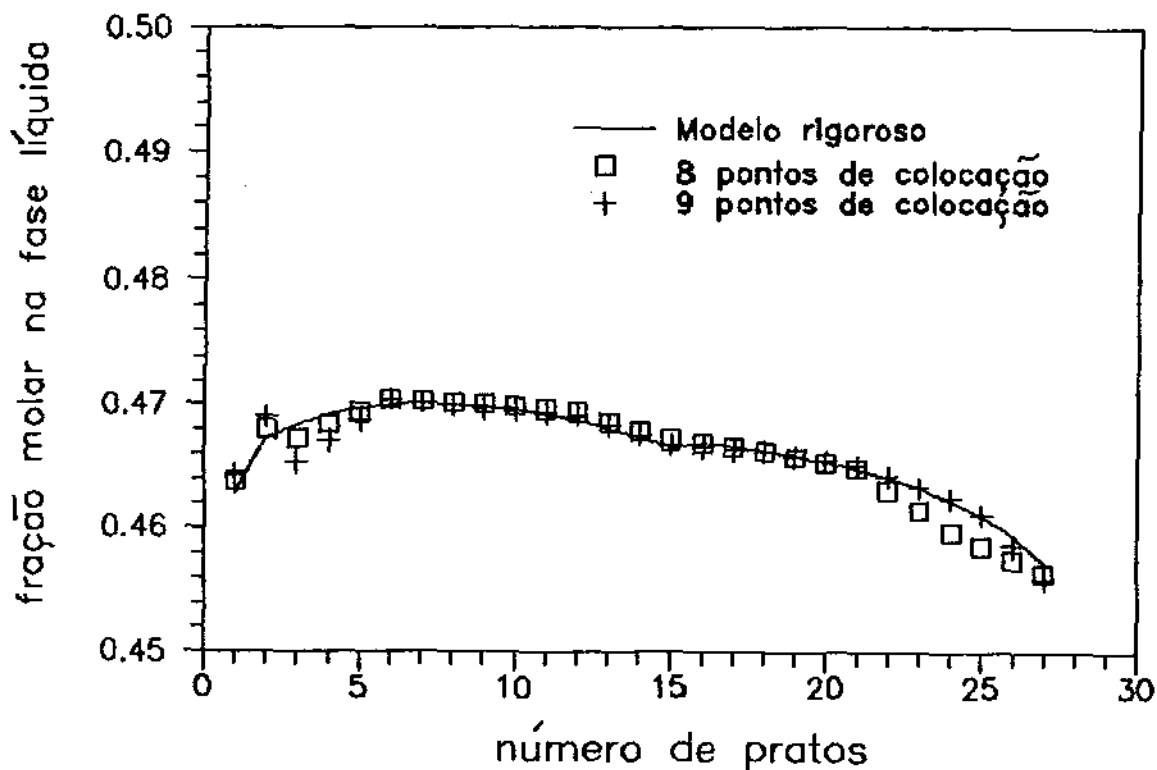


Figura 5.4 Perfil de composição para acetona → FATOR=0,8

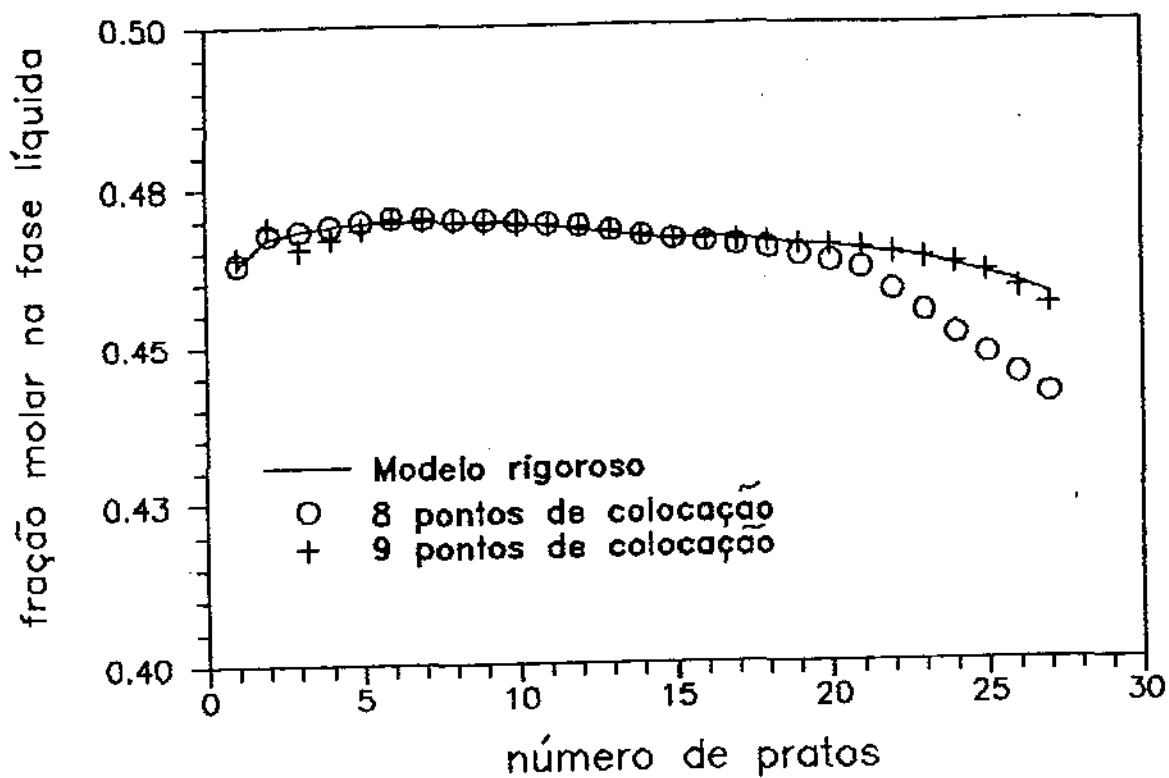


Figura 5.5 Perfil de composição para acetona \Rightarrow FATOR=0,5

Trabalhou-se com as condições 2 e 3 para esse sistema, cujas simulações estão contidas nas tabelas 5.4 e 5.5 na mesma ordem. Nesta análise da influência do número e localizações dos pontos de colocação, as figuras 5.6 e 5.7 representam os gráficos, na mesma ordem das condições citadas, onde se visualiza o efeito da melhor aproximação para um maior número de pontos.

Tabela 5.4 Resultados das simulações. FATOR = 0,5.

DESVIOS PARA O MODELO RIGOROSO							TEMPO DE CPU			
NP	ALFA	BETA	DXS Newton- Raphson	DXS Broyden	ER %	F A V O R A V E L	R I G O R O S O	N. - R O D R I G O S O	B R O Y D E N	F A V O R A V E L
⊗ 4	0,0	0,0	0,0009	0,0009	0	A	0:08	0:02	0:02	A
4	0,0	1,0	0,0017	0,0015	-12	B	0:08	0:02	0:04	NR
2	0,0	0,0	0,0121	0,0032	-74	B	0:08	0:02	0:03	NR
6	0,0	0,0	0,0006	0,0009	+50	NR	0:08	0:03	0:02	B
8	0,0	0,0	0,0006	0,0005	-17	B	0:08	0:05	0:03	B
⊗ 10	0,0	0,0	0,0005	0,0005	0	A	0:08	0:07	0:04	B

Tabela 5.5 Resultados das simulações. FATOR = 0,5.

DESVIOS PARA O MODELO RIGOROSO							TEMPO DE CPU			
NP	ALFA	BETA	DXS Newton- Raphson	DXS Broyden	ER %	F A V O R A V E L	R I G O R O S O	N. - R O D R I G O S O	B R O Y D E N	F A V O R A V E L
4	0,0	0,0	0,0024	não conver.	-	-	0:23	0:05	-	-
⊗ 4	0,0	1,0	0,0014	0,0017	+21	NR	0:23	0:06	0:13	NR
* 2	0,0	0,0	0,3252	0,3474	+7	NR	0:23	0:13	0:26	NR
6	0,0	0,0	0,0004	0,0011	+175	NR	0:23	0:11	0:08	B
⊗ 8	0,0	0,0	0,0002	0,0005	+150	NR	0:23	0:10	0:09	B
* 10	0,0	0,0	0,0006	0,0006	0	A	0:23	0:16	0:25	NR

TEMPO DE CPU (min:seg)

A = AMBOS; B = Broyden; NR = Newton-Raphson

* tempo de processamento maior do que o modelo rigoroso, resolução pelo método de Broyden.

⊗ pontos selecionados para a construção dos perfis de composição.

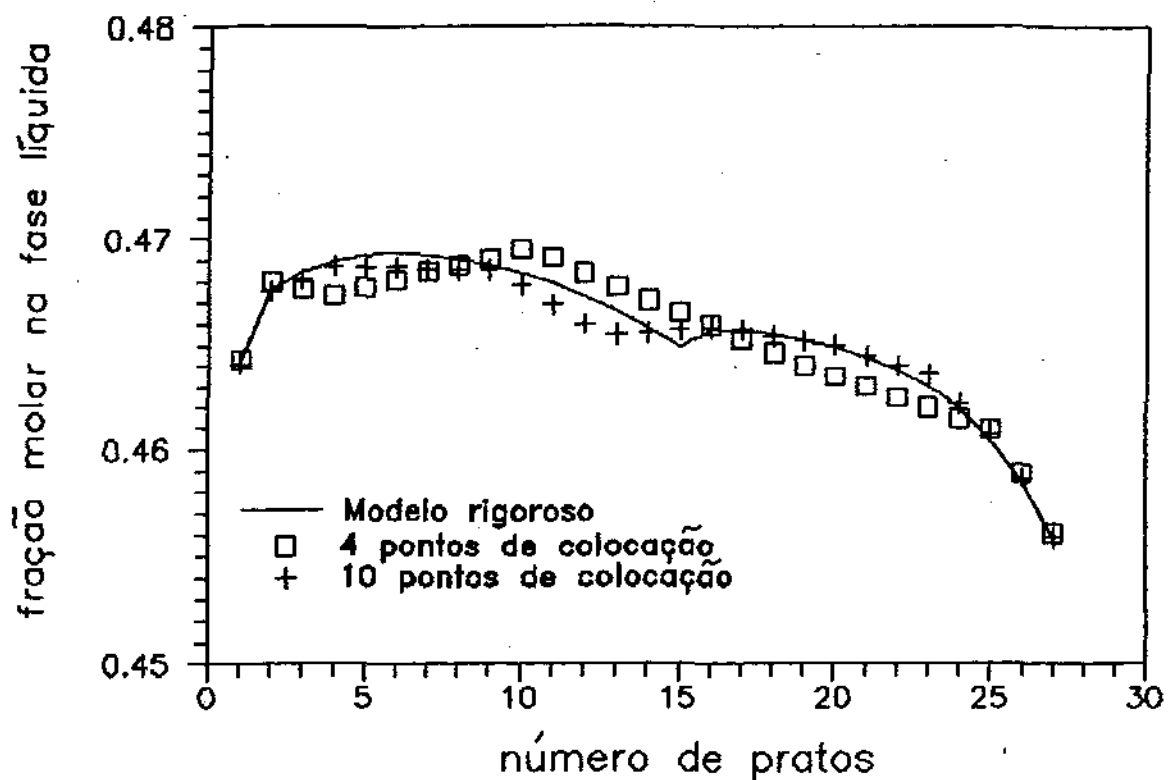


Figura 5.6 Perfil de composição para acetona. \square 4(0,0) + 10(0,0)

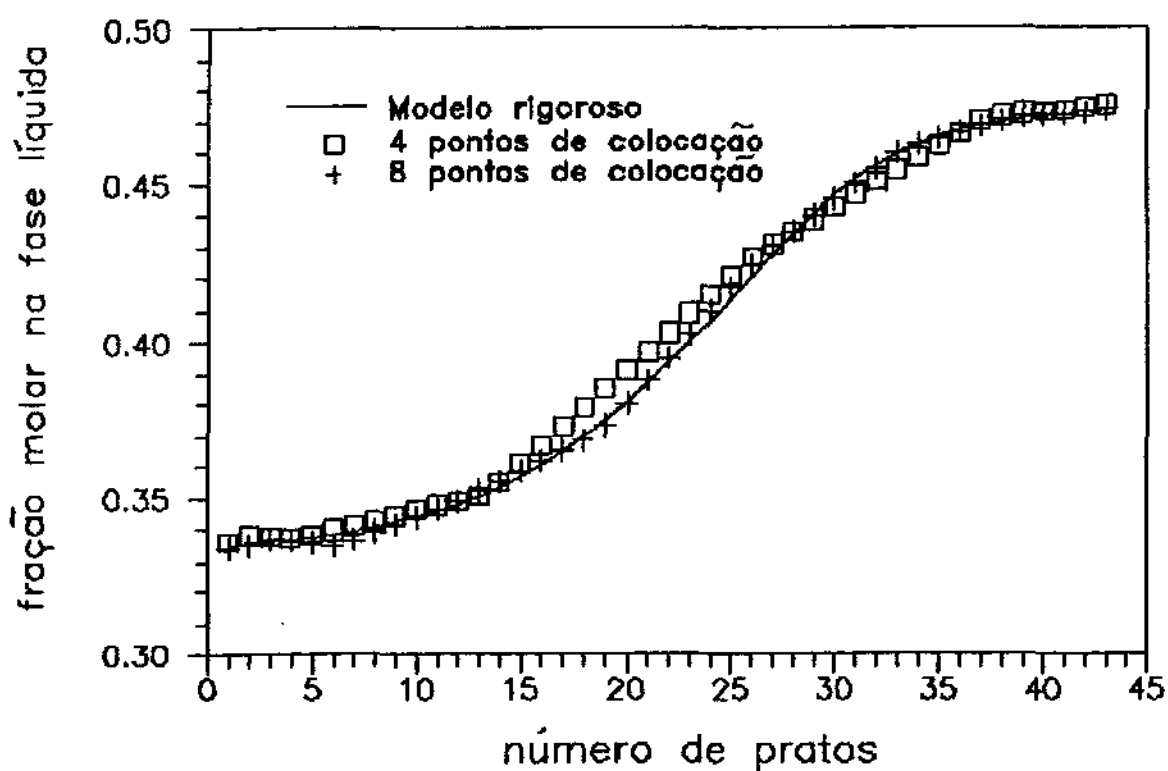


Figura 5.7 Perfil de composição para acetona. \square 4(0,1) + 8(0,0)

5.3.2 EXEMPLO 2: METANOL-ETANOL-ÁGUA- n-PROPANOL

As condições operacionais para esse sistema multicomponente se encontram tabeladas em 5.6.

Como destaque nestas simulações, podemos observar a drástica diminuição de tempo em relação ao modelo rigoroso. Tanto para os resultados, utilizando-se o polinômio de JACOBI (tabela 5.7), como fixando-se os pontos de colocação conforme tabela 5.8.

Tabela 5.6 Condições operacionais da coluna de destilação.

Exemplo	2
Número de componentes	4
Número de pratos	20
Vazão de destilado (Kmol/h)	0,9
Razão de refluxo	2,0
Eficiência de Murphree	0,5
Pressão (atm)	1,0
Alimentação 1	
estágio	10
vazão molar (Kmol/h)	2,0
composição	metanol = 0,25 etanol = 0,25 água = 0,25 n-propanol = 0,25

Tabela 5.7 Resultados das simulações. FATOR = 0,95

DESVIOS PARA O MODELO RIGOROSO							TEMPO DE CPU			
NP	ALFA	BETA	DXS Newton- Raphson	DXS Broyden	ER %	AMBOS	RIGOROSO	NR	BROYDEN	AMBOS
⊗ 4	0,0	0,0	0,0027	0,0027	0	A	1:04	0:04	0:03	B
4	1,0	0,0	0,0075	0,0071	-5	B	1:04	0:04	0:04	A
4	2,0	0,0	0,0193	0,0219	+14	NR	1:04	0:06	0:03	B
4	3,0	0,0	não conver.	não conver.	-	-	-	-	-	-
4	5,0	0,0	"	"	-	-	"	-	-	-
4	0,0	1,0	0,0042	0,0040	-5	B	1:04	0:04	0:02	B
4	0,0	2,0	0,0063	0,0055	-13	B	1:04	0:04	0:03	B
4	0,0	3,0	0,0038	0,0042	+11	NR	1:04	0:05	0:04	B
4	0,0	5,0	0,0038	0,0043	+13	NR	1:04	0:04	0:03	B
2	0,0	0,0	0,0151	0,0149	-1	B	1:04	0:03	0:02	B
6	0,0	0,0	0,0011	0,0015	+36	NR	1:04	0:06	0:04	B
8	0,0	0,0	0,0010	0,0011	+10	NR	1:04	0:09	0:06	B
⊗ 10	0,0	0,0	0,0010	0,0012	+20	NR	1:04	0:15	0:08	B
10	2,0	0,0	não conver.	não conver.	-	-	-	-	-	-
10	4,0	0,0	"	"	-	-	-	-	-	-
⊗ 10	0,0	2,0	0,0038	0,0039	+3	NR	1:04	0:19	0:10	B
10	0,0	4,0	0,0027	0,0027	0	A	1:04	0:15	0:08	B

TEMPO DE CPU (min:seg)

A = AMBOS; B = Broyden; NR = Newton-Raphson

⊗ pontos selecionados para a construção dos perfis de composição.

3 pontos internos fixos

prato 5 = 0,25
 □ " 10 = 0,5
 " 15 = 0,75

5 pontos internos fixos

prato 3 = 0,15
 " 6 = 0,30
 □ " 10 = 0,50
 " 13 = 0,65
 " 16 = 0,80

Tabela 5.8 Resultados das simulações.

DESVIOS PARA O MODELO RIGOROSO						TEMPO DE CPU			
NP	FATOR	DXS NEWTON- RAPHSON	DXS BROYDEN	ER %	F A V O R Á V E L	R I G O R O S O	N. - R E L A C I O	B L O C O	F A V O R Á V E L
3	0,1	0,0305	0,0297	-3	B	1:04	0:04	0:05	NR
3	0,2	0,0305	0,0303	-1	B	1:04	0:04	0:05	NR
3	0,3	0,0304	0,0301	-1	B	1:04	0:04	0:06	NR
3	0,4	0,0304	0,0278	-9	B	1:04	0:04	0:05	NR
3	0,5	0,0305	0,0303	-1	B	1:04	0:04	0:04	A
3	0,6	0,0305	0,0245	-20	B	1:04	0:03	0:03	A
3	0,7	0,0305	0,0303	-1	B	1:04	0:04	0:04	A
⊙ 3	0,8	0,0308	0,0243	-21	B	1:04	0:03	0:02	B
3	0,95	0,0308	0,0314	+2	NR	1:04	0:03	0:03	A
5	0,1	0,0269	0,0251	-7	B	1:04	0:05	0:03	B
5	0,2	0,0269	0,0251	-7	B	1:04	0:05	0:03	B
5	0,3	0,0270	0,0252	-7	B	1:04	0:05	0:03	B
5	0,4	0,0270	0,0253	-6	B	1:04	0:05	0:03	B
5	0,5	0,0276	0,0269	-3	B	1:04	0:05	0:04	B
5	0,6	0,0270	0,0249	-8	B	1:04	0:06	0:04	B
5	0,7	0,0278	0,0258	-7	B	1:04	0:04	0:03	B
5	0,8	0,0268	0,0268	0	A	1:04	0:04	0:04	A
5	0,95	0,0276	0,0252	-9	B	1:04	0:04	0:03	B

continuação da tabela 5.8

7 pontos internos fixos		9 pontos internos fixos	
prato	2 = 0,1	prato	2 = 0,1
"	5 = 0,25	"	4 = 0,2
"	8 = 0,40	"	6 = 0,3
□	10 = 0,50	"	8 = 0,4
"	12 = 0,60	□	10 = 0,5
"	15 = 0,75	"	12 = 0,6
"	18 = 0,90	"	14 = 0,7
		"	16 = 0,8
		"	18 = 0,9

DESVIOS PARA O MODELO RIGOROSO					TEMPO DE CPU				
NP	FATOR	DXS NEWTON- RAPHSON	DXS BROYDEN	ER %	F E V A R I A V E L	R I G O R O S O	N. - R O D O S O	B R O Y D E N	F E V A R I A V E L
7	0,1	0,1030	0,0195	-81	B	1:04	0:04	0:25	NR
7	0,2	0,0195	0,0197	+1	NR	1:04	0:36	0:15	B
7	0,3	0,0195	0,0196	+1	NR	1:04	0:19	0:15	B
7	0,4	0,0195	0,0193	-1	B	1:04	0:18	0:24	NR
7	0,5	0,0194	0,0196	+1	NR	1:04	0:14	0:14	A
7	0,6	0,0195	0,0195	0	A	1:04	0:29	0:39	NR
7	0,7	0,0195	0,0200	+3	NR	1:04	0:34	0:15	B
⊙	0,8	0,0195	0,0195	0	A	1:04	0:18	0:14	B
7	0,95	0,0195	0,0194	-1	B	1:04	0:21	0:18	B
9	0,1	0,0310	não converge	-	-	1:04	0:09	-	-
9	0,5	0,0349	"	-	-	1:04	0:12	-	-
9	0,95	0,0464	"	-	-	1:04	0:22	-	-

TEMPO DE CPU (min:seg)

A = AMBOS; B = Broyden; NR = Newton-Raphson

⊙ pontos selecionados para a construção dos perfis de composição.

□ prato de alimentação.

Como podemos observar, permaneceu a uniformidade dos desvios relativos quando variamos o fator inicial de temperatura. Então, afim de se estabelecer se essa condição se deve ao fato de fixarmos os pontos de colocação, inclusive na alimentação, foram realizadas simulações, utilizando-se o polinômio de JACOBI. Esses resultados se encontram descritos na tabela 5.9.

Desde que o comportamento para os desvios relativos se manteve na mesma faixa de valores, no caso de variarmos o fator de temperatura para cada número de pontos do polinômio de JACOBI, não indicaremos a fixação dos pontos de colocação como o mais vantajoso. Esta escolha fica desse modo vinculada a particularidade de cada sistema.

As figuras 5.8 e 5.9 demonstram respectivamente, quando um menor número de pontos favorece uma precisão mais eficiente nos extremos da coluna em relação ao modelo rigoroso, e vice e versa. Estes gráficos correspondem a resolução através do polinômio de JACOBI. Podemos, assim, constatar que a aproximação de ambos para toda a coluna não difere consideravelmente, sendo satisfatória; e portanto, resta-nos avaliarmos qual das duas situações, oferece uma redução do tempo computacional mais significativa. O primeiro caso atende essa conveniência, e seu perfil de temperatura tem um comportamento geral muito bom, de acordo com a figura 5.10.

A figura 5.11 mostra o perfil de composição para os pontos escolhidos, os quais são representativos dos resultados ineficientes que foram adquiridos ao fixarmos os pontos de colocação.

Tabela 5.9 Resultados das simulações, $\alpha = 0$ e $\beta = 0$.

DESVIOS PARA O MODELO RIGOROSO				TEMPO DE CPU		
NP	FATOR	DXS NEWTON- RAPHSON	DXS BROYDEN	MODELO RIGOROSO	NEWTON- RAPHSON	BROYDEN
4	0,1	0,0027	0,0026	1:04	0:04	0:03
4	0,2	0,0027	0,0026	1:04	0:04	0:03
4	0,3	0,0027	0,0026	1:04	0:04	0:03
4	0,4	0,0027	0,0027	1:04	0:04	0:03
4	0,5	0,0027	0,0027	1:04	0:04	0:03
4	0,6	0,0027	0,0029	1:04	0:04	0:04
4	0,7	0,0027	0,0029	1:04	0:03	0:03
4	0,8	0,0027	0,0028	1:04	0:03	0:03
4	0,95	0,0027	0,0027	1:04	0:03	0:03
6	0,1	0,0011	0,0011	1:04	0:06	0:04
6	0,2	0,0011	0,0011	1:04	0:06	0:04
6	0,3	0,0011	0,0011	1:04	0:07	0:04
6	0,4	0,0011	0,0011	1:04	0:07	0:04
6	0,5	0,0011	0,0015	1:04	0:06	0:04
6	0,6	0,0011	0,0012	1:04	0:07	0:05
6	0,7	0,0011	0,0010	1:04	0:06	0:04
6	0,8	0,0011	0,0015	1:04	0:05	0:05
6	0,95	0,0011	0,0015	1:04	0:06	0:04

continuação da tabela 5.9.

DESVIOS PARA O MODELO RIGOROSO				TEMPO DE CPU		
NP	FATOR	DXS NEWTON- RAPHSON	DXS BROYDEN	MODELO RIGOROSO	NEWTON- RAPHSON	BROYDEN
8	0,1	0,0010	0,0010	1:04	0:10	0:06
8	0,2	0,0010	0,0010	1:04	0:10	0:06
8	0,3	0,0010	0,0010	1:04	0:09	0:06
8	0,4	0,0010	0,0011	1:04	0:12	0:06
8	0,5	0,0010	0,0011	1:04	0:09	0:06
8	0,6	0,0010	0,0015	1:04	0:12	0:06
8	0,7	0,0010	0,0012	1:04	0:09	0:06
8	0,8	0,0010	0,0011	1:04	0:09	0:06
8	0,95	0,0010	0,0011	1:04	0:09	0:06
10	0,1	não converge	0,0141	1:04	-	0:16
10	0,2	"	não converge	-	-	-
10	0,5	"	"	-	-	-
10	0,95	"	"	-	-	-

TEMPO DE CPU (min:seg)

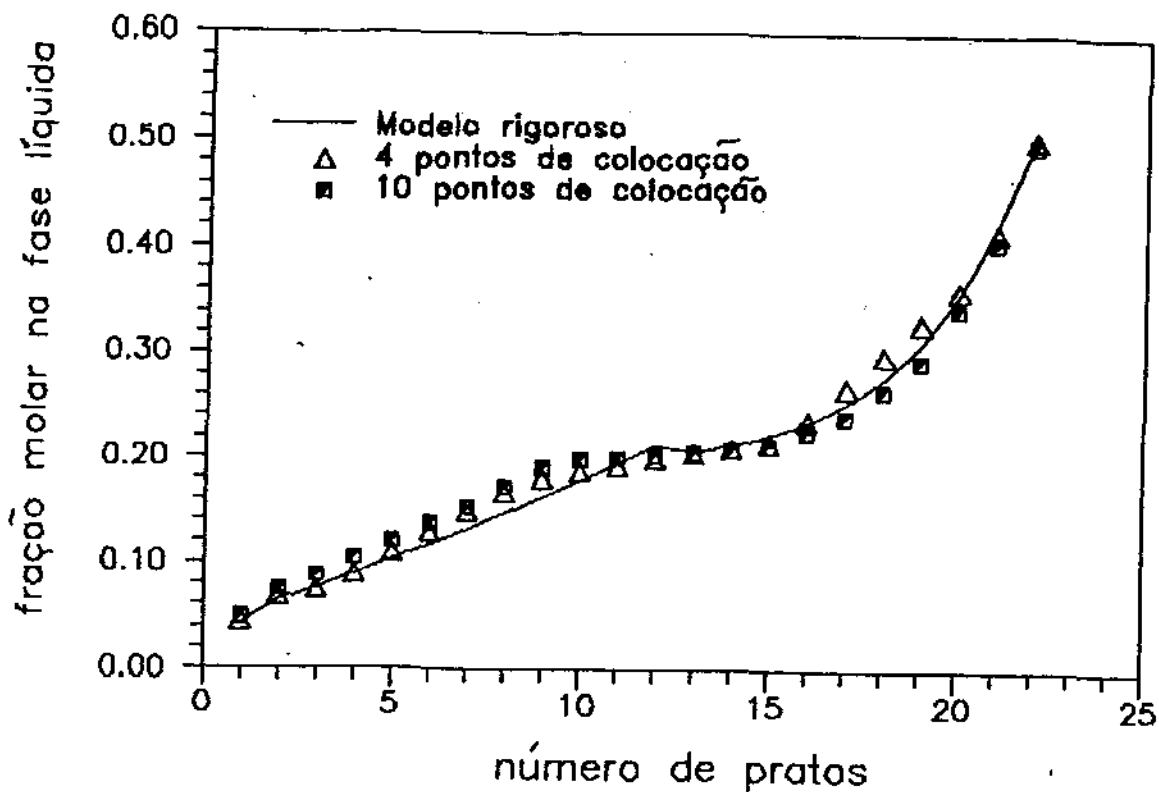


Figura 5.8 Perfil de composição para metanol. Δ 4(0,0) \square 10(0,2)

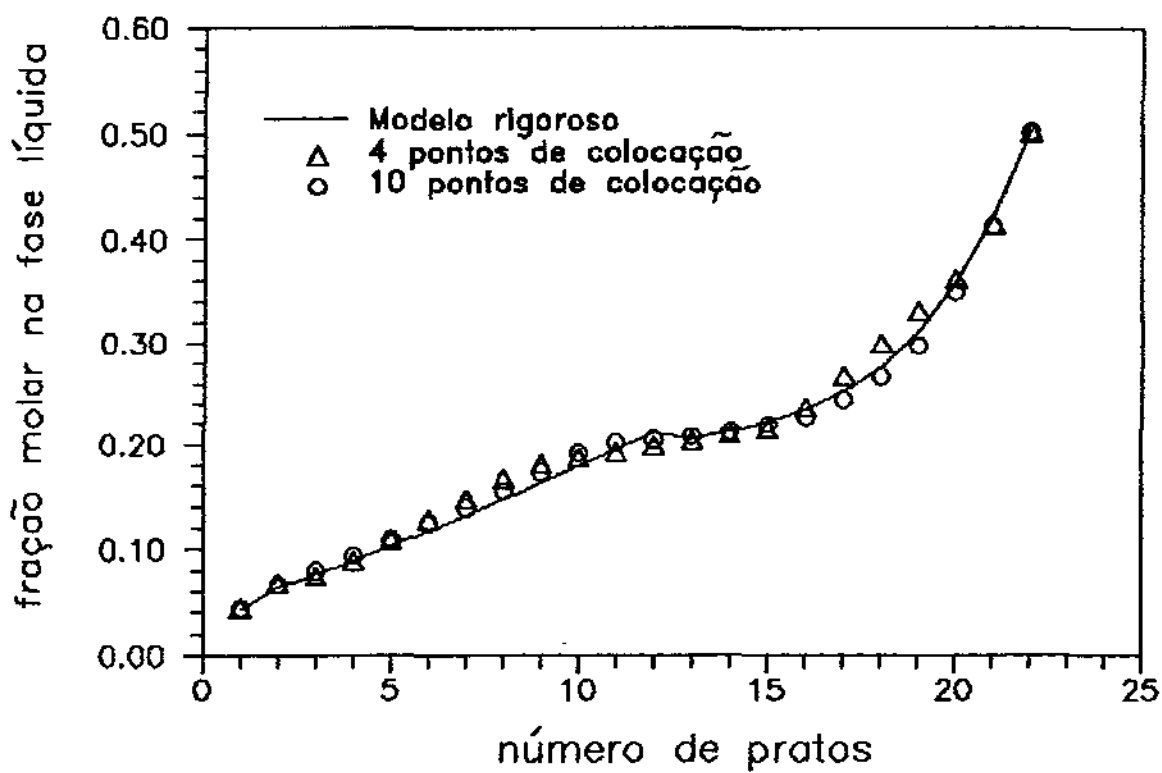


Figura 5.9 Perfil de composição para metanol. Δ 4(0,0) \circ 10(0,0)

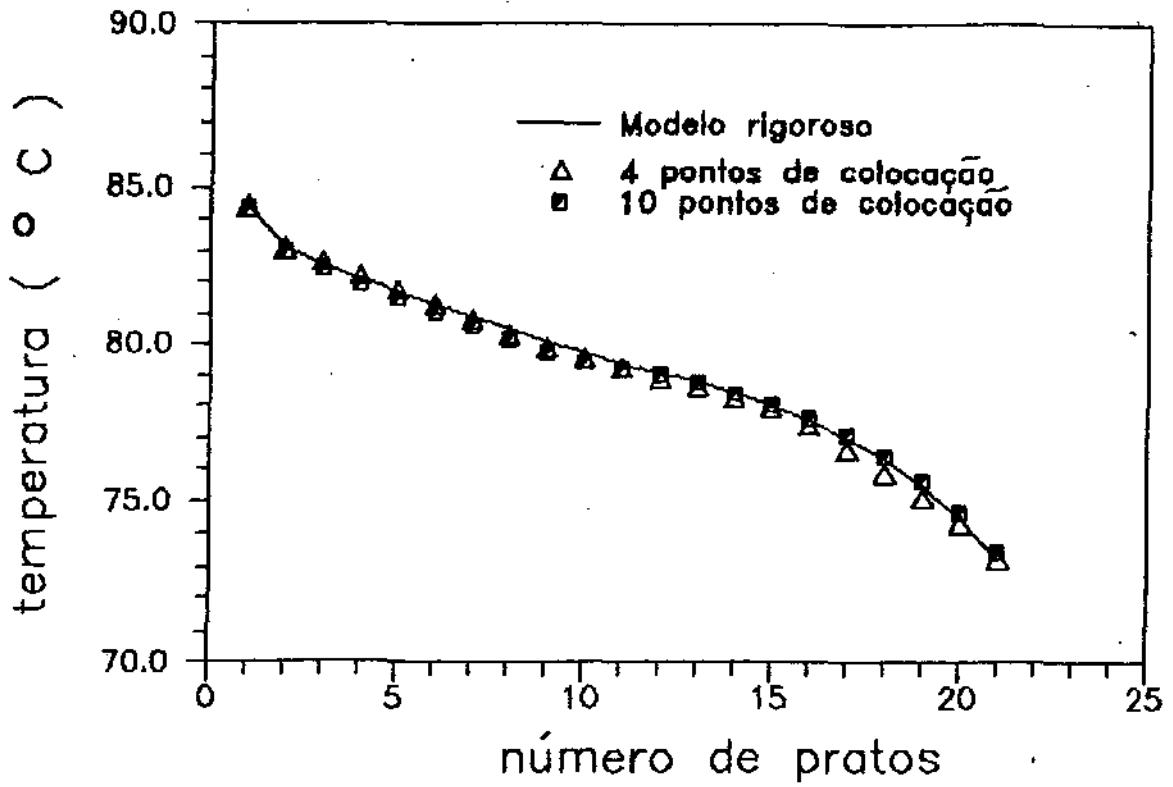


Figura 5.10 Perfil de temperatura para metanol. Δ 4(0,0) ■ 10(0,2)

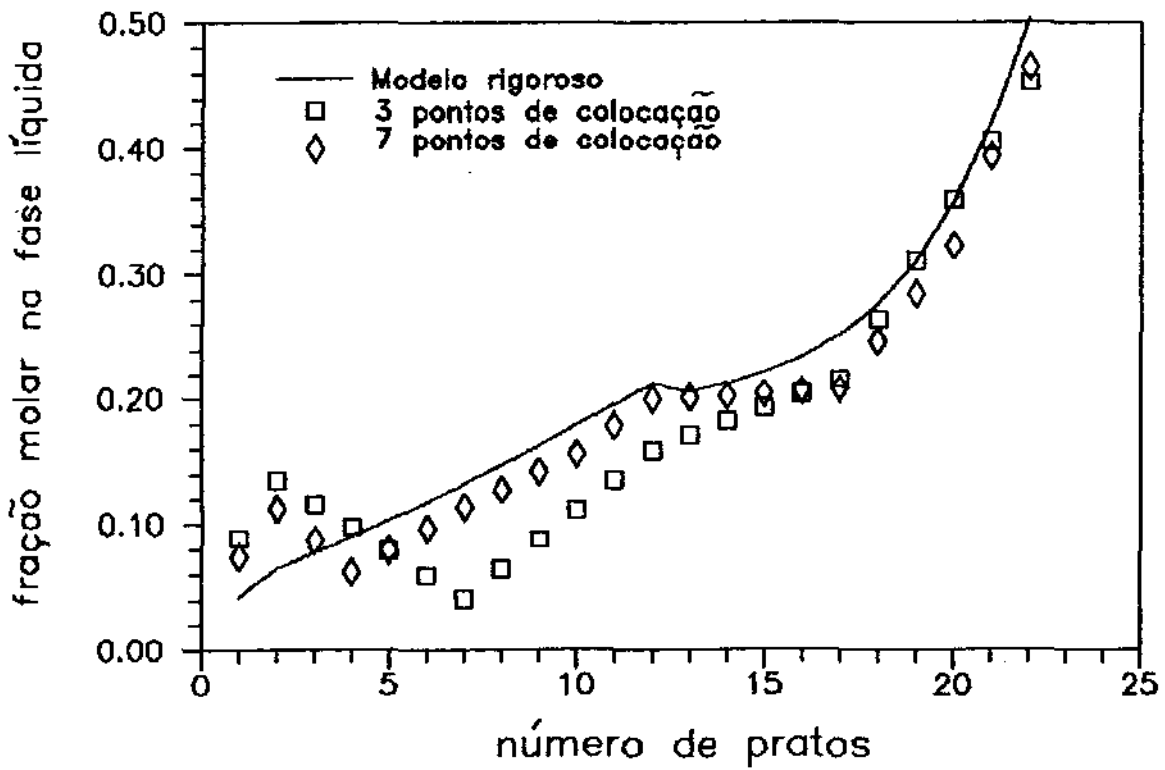


Figura 5.11 Perfil de composição para metanol. ⇒ FATOR=0,8

5.3.3 EXEMPLO 3: ETANOL - (2)-PROPANOL - ÁGUA

Este exemplo concerne um requisito interessante para o estudo de destilação multiestágio. O número de pratos da coluna é acentuado, assim dispomos de um sistema complexo para o emprego do modelo de ordem reduzida.

As condições operacionais, utilizadas neste exemplo, estão expressas na tabela 5.10.

Tabela 5.10 Condições operacionais para a coluna de destilação.

Exemplo	3
Número de componentes	3
Número de pratos	40
Vazão de destilado (Kmol/h)	216,0
Razão de refluxo	4,5
Eficiência de Murphree	0,5
Pressão (atm)	1,0
Alimentação 1	
estágio	25
vazão molar (Kmol/h)	360,0
composição	etanol = 0,55 (2)-propanol = 0,05 água = 0,40

As simulações desenvolvidas com o uso do polinômio de JACOBI, estão representadas na tabela 5.11. Aquelas cujos procedimentos se baseiam em fixar os pontos de colocação, inclusive na alimentação, podem ser vistas na tabela 5.12.

Tabela 5.11 Resultados das simulações. FATOR = 0,95

DESVIOS PARA O MODELO RIGOROSO							TEMPO DE CPU			
NP	ALFA	BETA	DXS Newton- Raphson	DXS Broyden	ER %	F av or a v e l	R i g o r o s o	N. - R e p e t i ç õ e s	B r o y d e n	F a v o r a v e l
4	0,0	0,0	0,0034	0,0034	0	A	0:15	0:03	0:02	B
⊗ 4	1,0	0,0	0,0033	0,0029	-12	B	0:15	0:03	0:03	A
4	2,0	0,0	0,0028	0,0035	+25	NR	0:15	0:03	0:03	A
4	3,0	0,0	0,0034	0,0082	+141	NR	0:15	0:03	0:02	B
4	5,0	0,0	0,0053	0,0054	+2	NR	0:15	0:06	0:07	NR
4	0,0	1,0	0,0006	0,0006	0	A	0:15	0:03	0:02	B
4	0,0	2,0	0,0011	0,0016	+46	NR	0:15	0:03	0:02	B
4	0,0	3,0	0,0053	0,0048	-9	B	0:15	0:03	0:03	A
4	0,0	5,0	0,0131	0,0251	+92	NR	0:15	0:03	0:08	NR
2	0,0	0,0	0,0054	0,0055	+2	NR	0:15	0:02	0:03	NR
6	0,0	0,0	0,0025	0,0024	-4	B	0:15	0:04	0:03	B
8	0,0	0,0	0,0015	0,0014	-7	B	0:15	0:06	0:05	B
⊗ 10	0,0	0,0	0,0007	0,0009	+29	NR	0:15	0:10	0:07	B
10	2,0	0,0	0,0018	0,0034	+89	NR	0:15	0:10	0:08	B
10	4,0	0,0	0,0051	não conver.	-	-	0:15	0:40	-	-
10	0,0	2,0	0,0014	0,0014	0	A	0:15	0:10	0:07	B
⊗ 10	0,0	4,0	0,0056	0,0056	0	A	0:15	0:10	0:07	B

4 pontos internos fixos
 prato 5 = 0,125
 " 15 = 0,375
 □ " 25 = 0,625
 " 35 = 0,875

6 pontos internos fixos
 prato 6 = 0,150
 " 12 = 0,300
 " 18 = 0,450
 □ " 25 = 0,625
 " 30 = 0,750
 " 36 = 0,900

Tabela 5.12 Resultados das simulações.

DESVIOS PARA O MODELO RIGOROSO						TEMPO DE CPU			
NP	FATOR	DXS NEWTON- RAPHSON	DXS BROYDEN	ER %	F v o l u m e	R o b o	N. - o s	B r o y d e n	F v o l u m e
4	0,1	0,0025	0,0029	+16	NR	0:15	0:03	0:04	NR
4	0,2	0,0029	0,0028	-3	B	0:15	0:03	0:04	NR
4	0,3	0,0032	0,0028	-13	B	0:15	0:02	0:03	NR
4	0,4	0,0029	0,0028	-3	B	0:15	0:03	0:03	A
4	0,5	0,0029	0,0029	0	A	0:15	0:03	0:03	A
4	0,6	0,0029	0,0029	0	A	0:15	0:03	0:03	A
4	0,7	0,0027	0,0031	+15	NR	0:15	0:03	0:04	NR
4	0,8	0,0029	0,0028	+4	NR	0:15	0:03	0:04	NR
⊗ 4	0,95	0,0029	0,0028	+4	NR	0:15	0:03	0:03	A
6	0,1	0,0021	0,0019	-10	B	0:15	0:04	0:04	A
6	0,2	0,0019	0,0019	0	A	0:15	0:04	0:04	A
6	0,3	0,0020	0,0019	-5	B	0:15	0:04	0:05	NR
6	0,4	0,0019	0,0013	-32	B	0:15	0:04	0:05	NR
6	0,5	0,0021	0,0020	-5	B	0:15	0:03	0:05	NR
6	0,6	0,0019	0,0020	+5	NR	0:15	0:04	0:05	NR
6	0,7	0,0019	0,0017	-11	B	0:15	0:04	0:05	NR
6	0,8	0,0021	0,0019	-10	B	0:15	0:04	0:06	NR
⊗ 6	0,95	0,0019	0,0019	0	A	0:15	0:04	0:03	B

Continuação da tabela 5.12

7 pontos internos

prato 5 = 0,125
 " 10 = 0,250
 " 15 = 0,375
 " 20 = 0,500
 □ " 25 = 0,625
 " 30 = 0,750
 " 35 = 0,875

8 pontos internos

prato 6 = 0,150
 " 10 = 0,250
 " 14 = 0,350
 " 18 = 0,450
 " 22 = 0,550
 □ " 25 = 0,625
 " 30 = 0,750
 " 34 = 0,850

DESVIOS PARA O MODELO RIGOROSO						TEMPO DE CPU			
NP	FATOR	DXS NEWTON- RAPHSON	DXS BROYDEN	ER %	F BROYDEN	R RIGOROSO	N. - R RIGOROSO	B BROYDEN	F BROYDEN
7	0,1	0,0053	0,0048	-9	B	0:15	0:04	0:04	A
7	0,2	0,0053	0,0053	0	A	0:15	0:04	0:03	B
7	0,3	0,0053	0,0049	-8	B	0:15	0:04	0:04	A
7	0,4	0,0052	0,0053	+2	NR	0:15	0:05	0:03	B
7	0,5	0,0051	0,0053	+4	NR	0:15	0:05	0:04	B
7	0,6	0,0053	0,0052	-2	B	0:15	0:05	0:04	B
7	0,7	0,0053	0,0055	+4	NR	0:15	0:06	0:04	B
7	0,8	0,0053	0,0052	-2	B	0:15	0:06	0:04	B
7	0,95	0,0053	0,0052	-2	B	0:15	0:06	0:04	B
8	0,1	0,0333	0,0241	-28	B	0:15	0:08	0:06	B
8	0,5	0,0352	0,0232	-34	B	0:15	0:09	0:05	B
⊗ 8	0,95	0,0477	0,0246	-48	B	0:15	0:08	0:05	B

A = AMBOS; B = BROYDEN; NR = NEWTON-RAPHSON;

⊗ pontos escolhidos para a elaboração dos perfis de composição e temperatura;

□ prato de alimentação.

Fazendo-se uma análise sucinta sobre as diferenças entre o método de BROYDEN e NEWYON-RAPHSON, notamos não haver uma tendência preferencial para um dos métodos.

Os resultados nos desvios relativos quando variamos o fator inicial de temperatura, permanecem praticamente constantes, nas simulações que envolvem pontos fixos. Como já foi discutido anteriormente, essa estabilidade não se torna exclusiva desse tipo de aplicação, pois verificamos o mesmo desdobramento, com as localizações arbitrárias do polinômio de JACOBI.

Contudo, observou-se o seguinte comportamento para os perfis ilustrados:

- As curvas apresentaram boas aproximações para os produtos de base e de topo da coluna quando comparadas com a modelagem clássica.

As figura 5.12 corresponde ao gráfico de composição com o uso do polinômio de JACOBI, mostrando que a distribuição com um menor número de pontos de colocação, pode-se obter um melhor aproveitamento do que a designação de polinômios ortogonais com grau elevado. No entanto, a figura 5.13 mostra uma situação inversa, mas que a redução do tempo de CPU para um maior número de pontos, torna-se substancialmente mais desfavorável. O correspondente perfil de temperatura apresenta uma boa performance (figura 5.14).

Na continuidade, temos o perfil de composição para os pontos selecionados na tabela 5.12, conforme figura 5.15. Os resultados podem ser considerados tão vantajosos quanto aqueles introduzidos com os cálculos dos pontos por intermédio de polinômio ortogonal.

Assim, o perfil de temperatura também foi plotado (figura 5.16). O comportamento em relação ao modelo rigoroso segue a mesma tendência do perfil de composição; inclusive os desvios maiores se concentram na mesma faixa do número de pratos. Porém, isto é de se esperar, desde que os cálculos de temperatura e composição são interdependentes, caracterizados pelo "método BP (bubble point)".

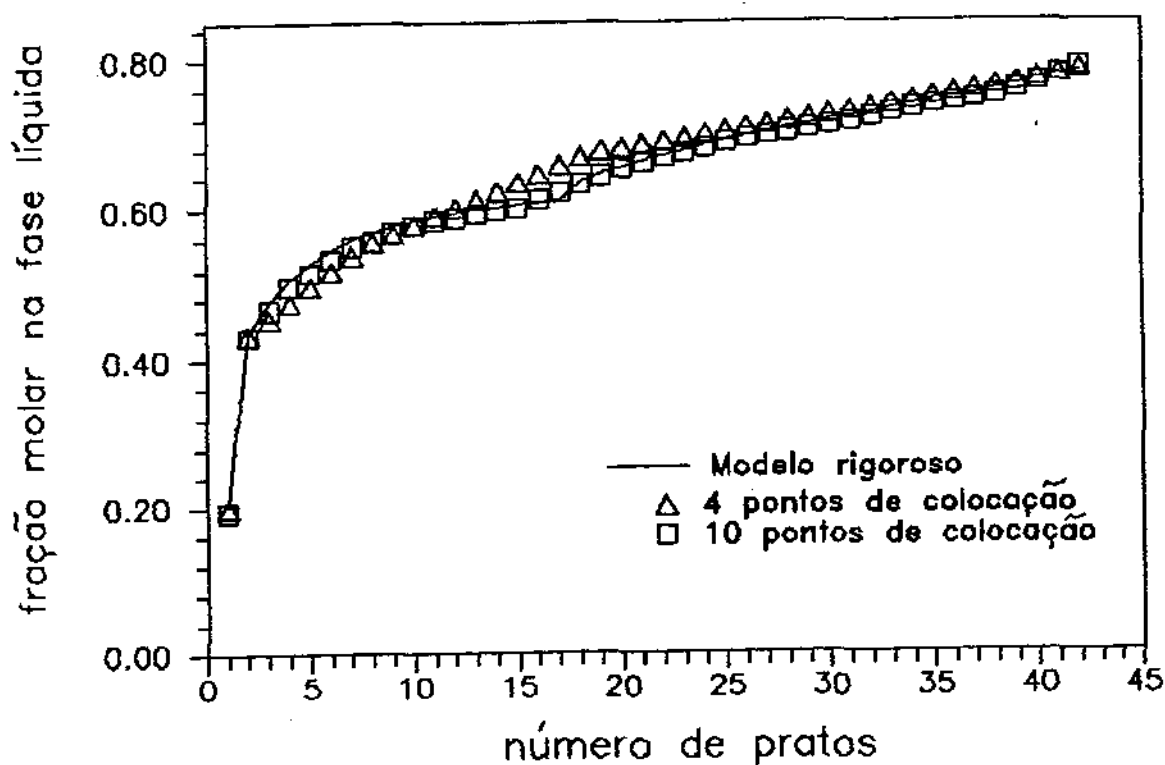


Figura 5.12 Perfil de composição para etanol. Δ 4(1,0) \square 10(0,4)

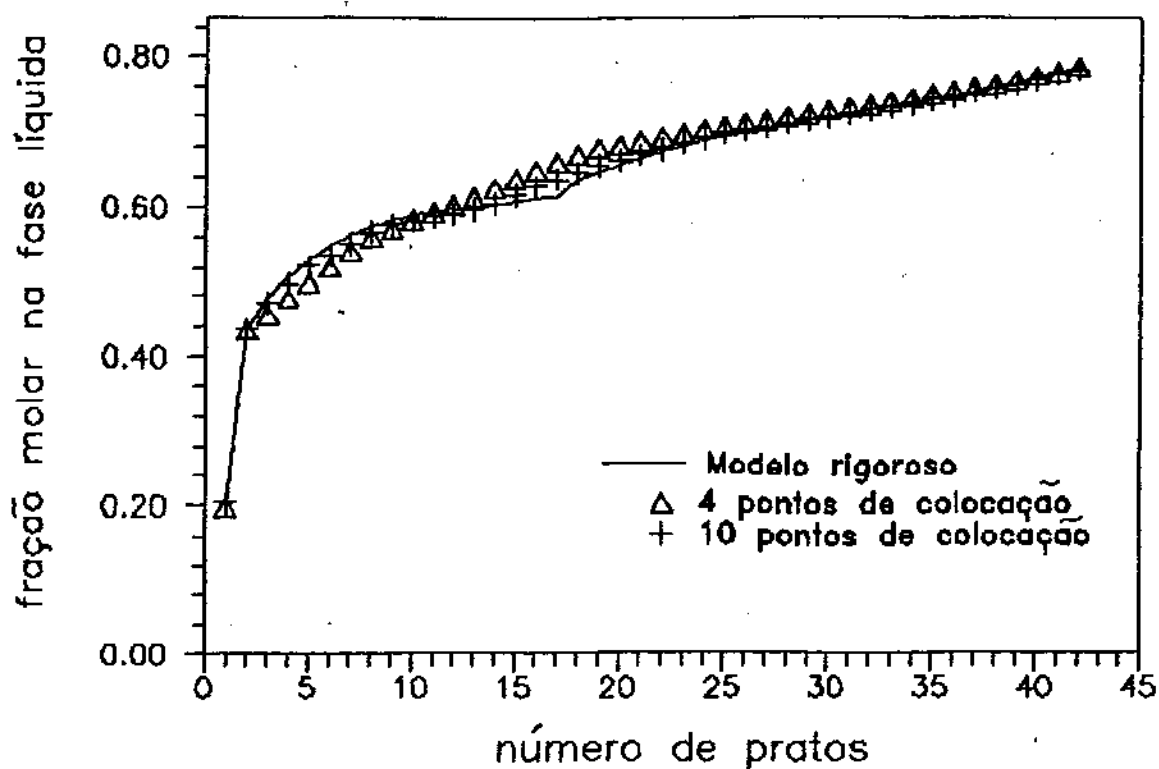


Figura 5.13 Perfil de composição para etanol. Δ 4(1,0) $+$ 10(0,0)

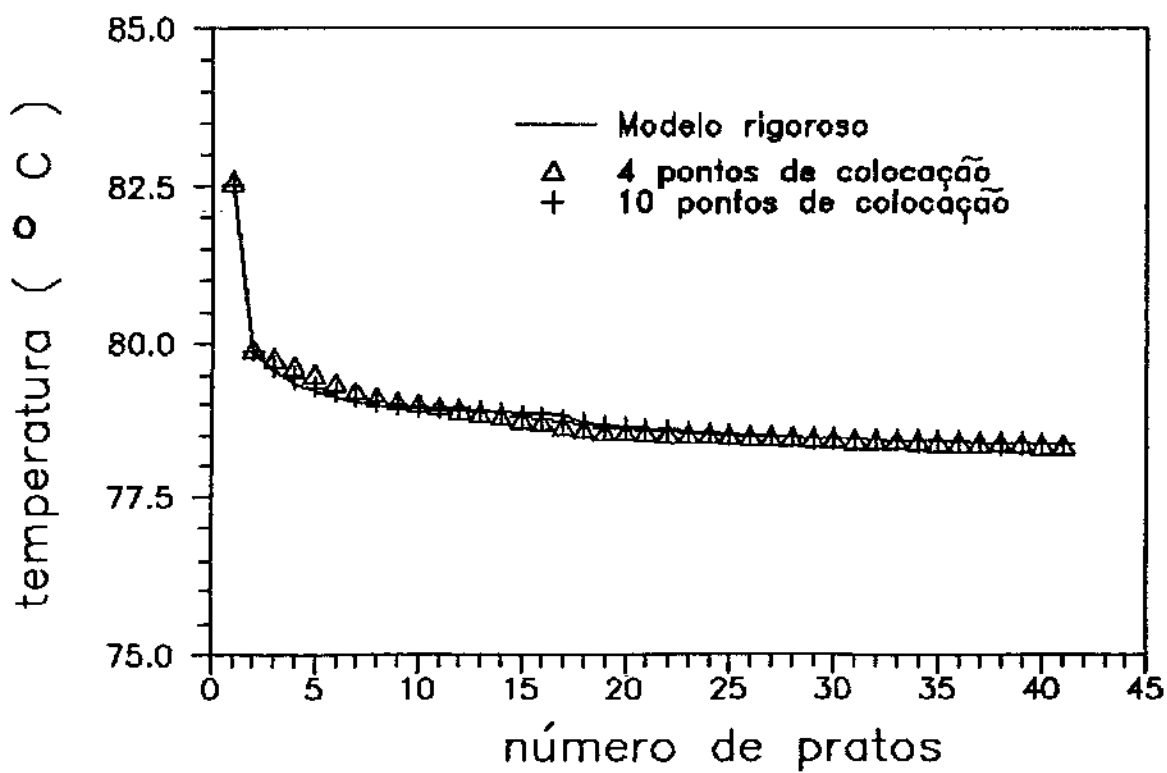


Figura 5.14 Perfil de temperatura para etanol. Δ 4(1,0) $+$ 10(0,0)

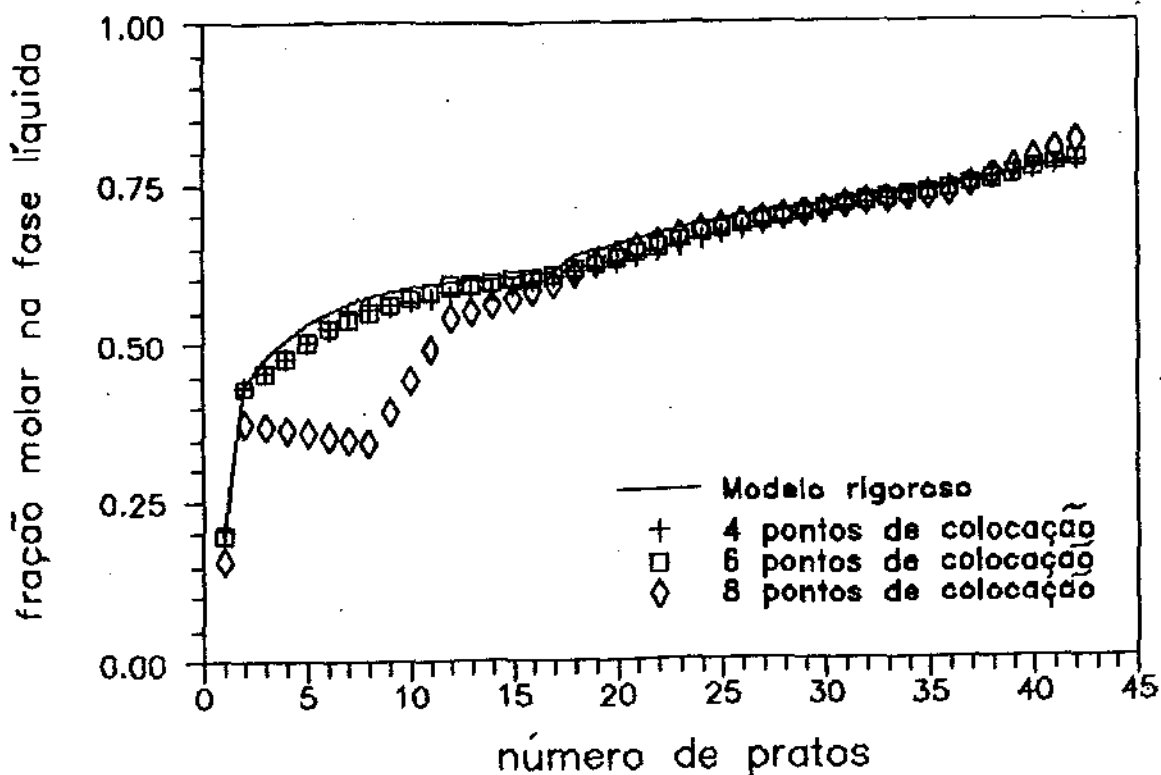


Figura 5.15 Perfil de composição para etanol → FATOR = 0,95

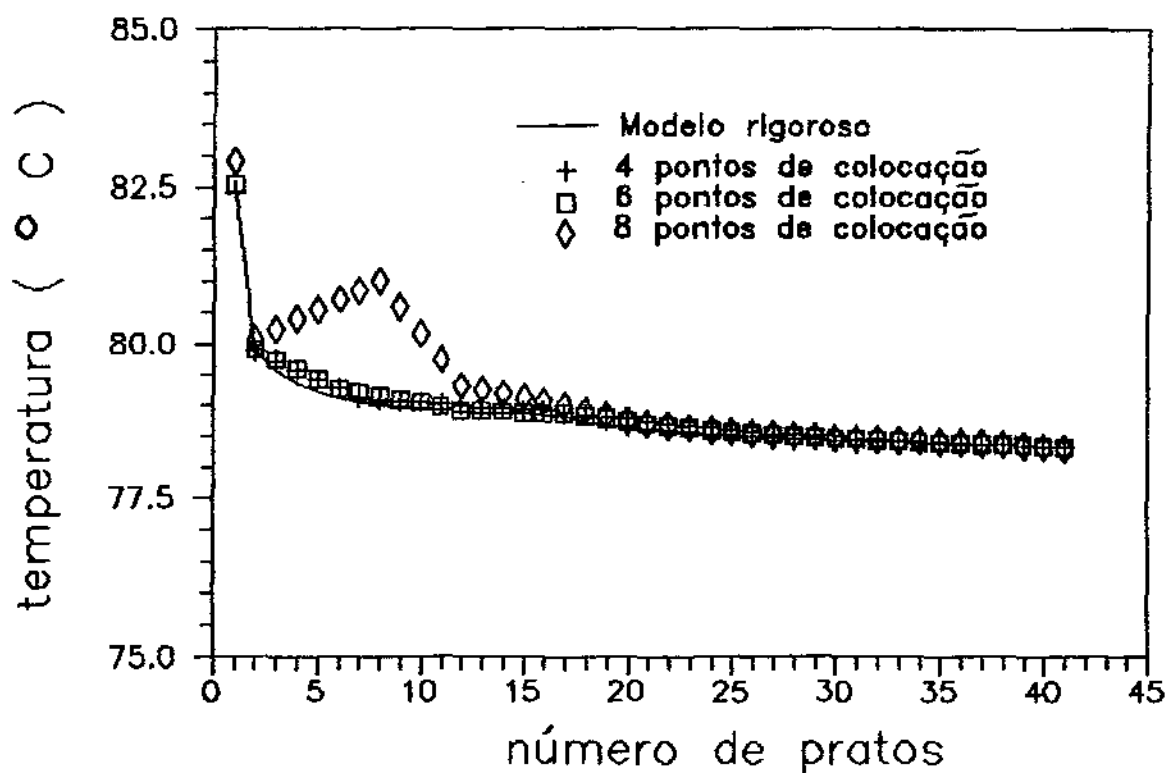


Figura 5.16 Perfil de temperatura para etanol → FATOR = 0,95

5.3.4 EXEMPLO 4: ETIL-ACETATO - ETANOL - BUTIL-ACETATO

Este exemplo contribui para avaliação do efeito da descontinuidade nos perfis da coluna, devido a existência de múltiplas alimentações.

As condições operacionais trabalhadas estão inseridas na tabela 5.13.

Tabela 5.13 Condições operacionais da coluna de destilação.

Exemplo	4
Número de componentes	3
Número de pratos	26
Vazão de destilado (Kmol/h)	0,8
Razão de refluxo	7,0
Eficiência de Murphree	0,6
Pressão (atm)	1,0
Alimentação 1 estágio	3
vazão molar (Kmol/h)	2,0
composição	etil-acetato = 0,0 etanol = 0,0 butil-acetato = 1,0
Alimentação 2 estágio	9
vazão molar (Kmol/h)	1,0
composição	etil-acetato = 0,0 etanol = 0,0 butil-acetato = 1,0
Alimentação 3 estágio	15
vazão molar (kmol/h)	1,0
composição	etil-acetato = 0,5 etanol = 0,5 butil-acetato = 0,0

A seguir, apresentamos as tabelas 5.14 e 5.15, com os resultados das simulações desenvolvidas respectivamente com os pontos escolhidos através do polinômio de JACOBI, e com a fixação dos pontos de colocação, incluindo-se as alimentações.

Tabela 5.14 Resultados das simulações. FATOR = 0,95

DESVIOS PARA O MODELO RIGOROSO							TEMPO DE CPU			
NP	ALFA	BETA	DXS Newton- Raphson	DXS Broyden	ER %	F avaliada	R ordenada	N. - R ordenada	B ordenada	F ordenada
4	0,0	0,0	0,0146	0,0146	0	A	0:13	0:03	0:03	A
⊗ 4	1,0	0,0	0,0051	0,0049	-4	B	0:13	0:05	0:03	B
4	2,0	0,0	não conver.	não conver.	-	-	-	-	-	-
4	3,0	0,0	0,0295	"	-	-	0:13	0:04	-	-
* 4	5,0	0,0	0,0146	0,0121	-17	B	0:13	0:08	0:32	NR
4	0,0	1,0	0,0130	0,0118	-9	B	0:13	0:03	0:05	NR
4	0,0	2,0	0,0126	0,0068	-46	B	0:13	0:03	0:05	NR
4	0,0	3,0	0,0322	0,0057	-82	B	0:13	0:03	0:11	NR
4	0,0	5,0	0,0359	0,0419	+17	NR	0:13	0:05	0:07	NR
2	0,0	0,0	não conver.	não conver.	-	-	-	-	-	-
6	0,0	0,0	0,0017	0,0016	-6	B	0:13	0:05	0:04	B
8	0,0	0,0	0,0159	0,0163	+3	NR	0:13	0:06	0:05	B
10	0,0	0,0	0,0051	0,0053	+4	NR	0:13	0:09	0:05	B
10	2,0	0,0	não conver.	não conver.	-	-	-	-	-	-
10	4,0	0,0	"	"	-	-	-	-	-	-
⊗ 10	0,0	2,0	0,0008	0,0011	+38	NR	0:13	0:07	0:05	B
⊗ 10	0,0	4,0	0,0144	0,0139	-4	B	0:13	0:09	0:06	B

3 pontos internos fixos

□	prato 3	= 0,1153846
□	" 9	= 0,3461538
□	" 15	= 0,576923

6 pontos internos fixos

□	prato 3	= 0,11538460
□	" 9	= 0,34615380
□	" 12	= 0,4615384
□	" 15	= 0,5769230
□	" 19	= 0,7307692
□	" 23	= 0,8846153

Tabela 5.15 Resultados das simulações.

DESVIOS PARA O MODELO RIGOROSO						TEMPO DE CPU			
NP	FATOR	DXS NEWTON- RAPHSON	DXS BROYDEN	ER %	F A V O R A B L E	0 M I N I M O	N. - R E D U C I D O	B L O C O	M A X I M O
3	0,1	0,0849	0,0847	0	A	0:13	0:07	0:05	B
3	0,2	0,2287	0,0847	-63	B	0:13	0:12	0:11	B
3	0,3	0,0849	0,0848	0	A	0:13	0:03	0:02	B
3	0,4	0,0841	0,0847	+1	NR	0:13	0:03	0:04	NR
⊗ 3	0,5	0,1485	0,0846	-43	B	0:13	0:18	0:08	B
3	0,6	0,0840	0,0847	+1	NR	0:13	0:11	0:03	B
3	0,7	0,0851	0,0853	0	A	0:13	0:03	0:06	NR
3	0,8	0,0851	0,0842	-1	B	0:13	0:03	0:08	NR
3	0,95	0,1626	0,0853	-48	B	0:13	0:08	0:03	B
6	0,1	0,0116	0,0139	+20	NR	0:13	0:12	0:06	B
6	0,2	0,0115	0,0111	-4	B	0:13	0:12	0:05	B
6	0,3	0,0113	0,0118	+4	NR	0:13	0:11	0:06	B
6	0,4	0,0112	0,0131	+17	NR	0:13	0:11	0:06	B
⊗ 6	0,5	0,0118	0,0119	+1	NR	0:13	0:11	0:05	B
6	0,6	0,0110	0,0126	+15	NR	0:13	0:06	0:05	B
6	0,7	0,0120	0,0116	-3	B	0:13	0:11	0:06	B
6	0,8	0,0113	0,0139	+23	NR	0:13	0:08	0:04	B
6	0,95	0,0116	0,0110	-5	B	0:13	0:04	0:04	A

A figura 5.18 já mostra a influência da localização dos pontos de colocação, pois o novo arranjo dos dez pontos, faz com que a precisão se torne superior do que aquela com quatro pontos. Lembrando que o interesse para destilação no estado estacionário, concentra-se na análise dos produtos de topo e de base.

Neste exemplo, a opção de fixar os pontos de colocação nas alimentações, não contribuiu para a otimização dos resultados. Em consequência, o comportamento geral para os perfis foi insatisfatório, desde que os valores de DXS se apresentaram maiores que um por cento. A figura 5.19 representa graficamente, o afastamento do modelo de ordem reduzida para o rigoroso. Os pontos escolhidos traduzem bem essas diferenças, sendo representativos das simulações realizadas.

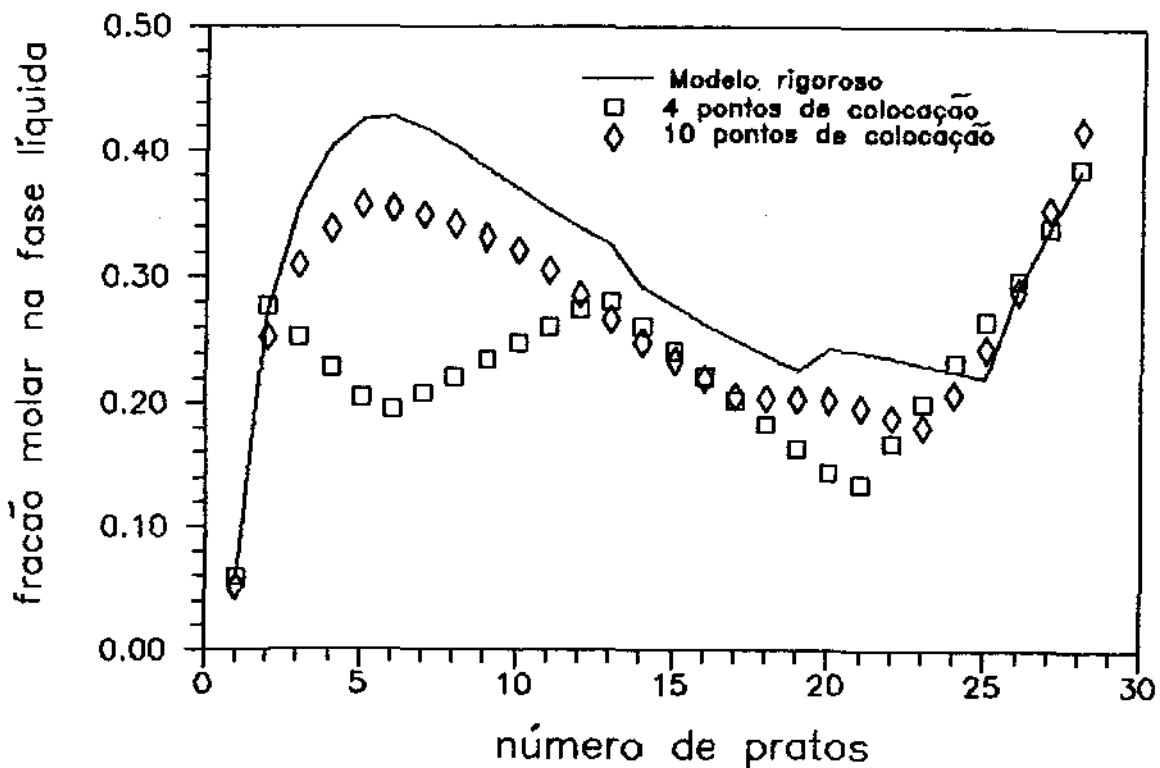


Figura 5.17 Perfil de composição para e-acetato □ 4(1,0) ◇ 10(0,4)

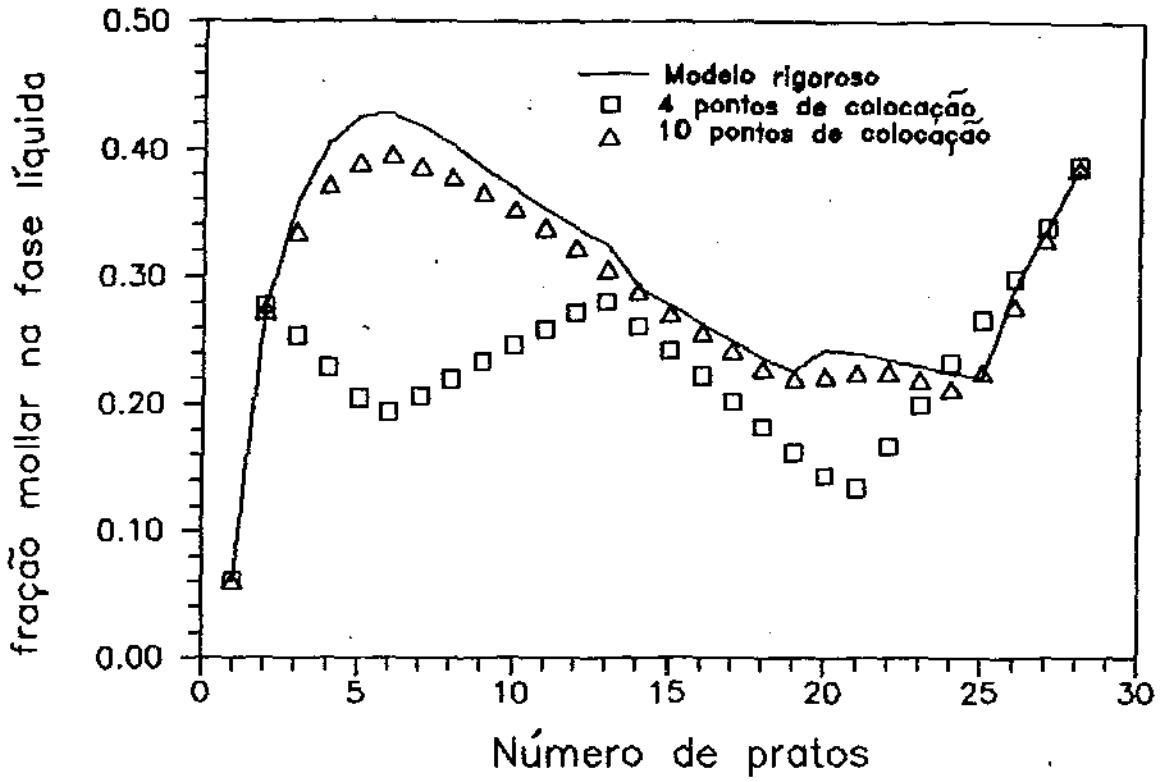


Figura 5.18 Perfil de composição para e-acetato □ 4(1,0) △ 10(0,2)

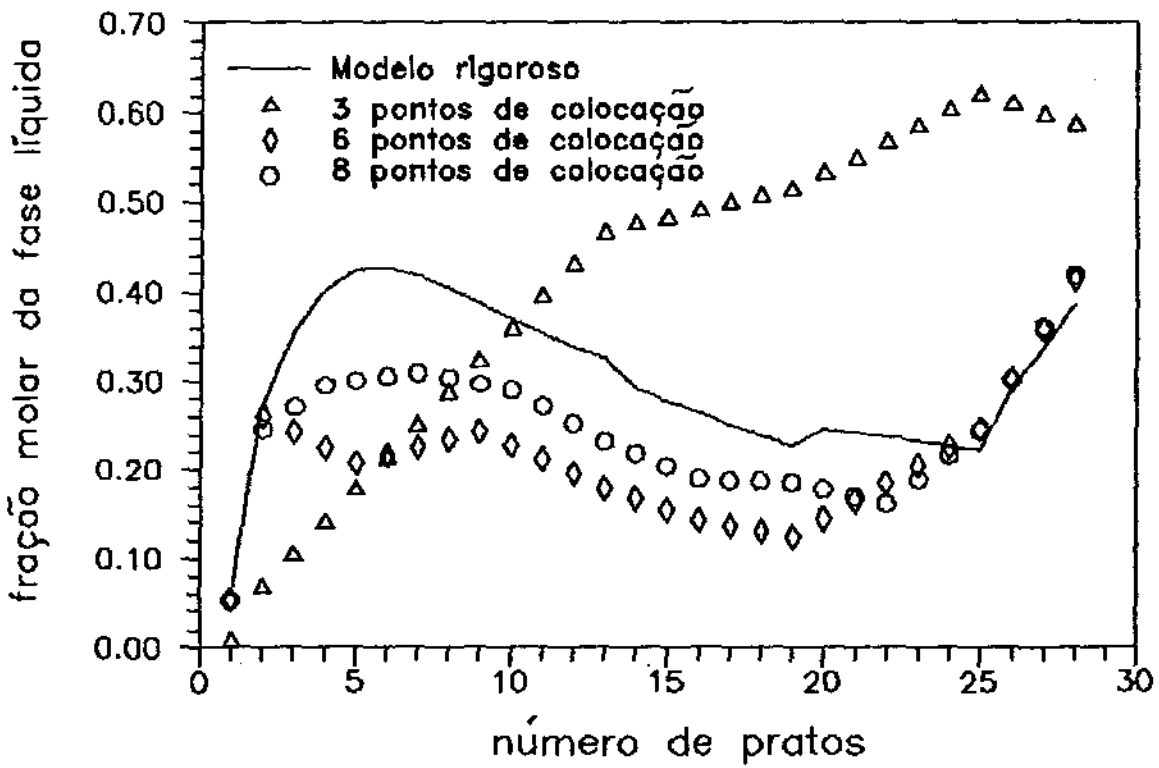


Figura 5.19 Perfil de composição para e-acetato. FATOR = 0,5

5.3.5 EXEMPLO 5: ÁGUA - ETANOL - (1)-PROPANOL

Destacamos este exemplo, com o propósito de termos um pouco mais, sobre o efeito de fixarmos os pontos de colocação na alimentação.

As condições operacionais estão descritas na tabela 5.16.

Tabela 5.16 Condições operacionais da coluna de destilação.

Exemplo	5
Número de componentes	3
Número de pratos	20
Vazão de destilado (Kmol/h)	0,05
Razão de refluxo	2,0
Eficiência de Murphree	0,89
Pressão (atm)	1,0
Alimentação 1	
estágio	10
vazão molar (Kmol/h)	0,10
composição	água = 0,5 etanol = 0,2 (1)-propanol = 0,3

A avaliação da influência do número e das localizações dos pontos de colocação, pode ser realizada, consultando-se as tabelas 5.17 e 5.18.

Tabela 5.17 Resultados das simulações. FATOR = 0,5

DESVIOS PARA O MODELO RIGOROSO							TEMPO DE CPU			
NP	ALFA	BETA	DXS Newton- Raphson	DXS Broyden	ER %	F A V O R A V E L	R I G O R O S O	N. - R A P P H S O N	B R O Y D E N	F A V O R A V E L
⊗ 4	0,0	0,0	0,0013	0,0010	-23	B	0:09	0:02	0:03	NR
4	1,0	0,0	0,0011	0,0012	+9	NR	0:09	0:03	0:03	A
4	2,0	0,0	0,0120	0,0010	-92	B	0:09	0:02	0:04	NR
4	3,0	0,0	não conver.	não conver.	-	-	-	-	-	-
* 4	5,0	0,0	0,2672	0,0393	-85	B	0:09	0:05	0:26	NR
4	0,0	1,0	0,0034	0,0020	-41	B	0:09	0:02	0:02	A
* 4	0,0	2,0	0,0226	0,0194	-14	B	0:09	0:02	0:09	NR
4	0,0	3,0	0,0552	0,0052	-90	B	0:09	0:04	0:04	A
* 4	0,0	5,0	0,0903	0,1071	+19	NR	0:09	0:02	0:10	NR
2	0,0	0,0	0,0636	não conver.	-	-	0:09	0:03	-	-
6	0,0	0,0	0,0004	0,0009	+125	NR	0:09	0:05	0:03	B
8	0,0	0,0	0,0013	0,0013	0	A	0:09	0:05	0:04	B
10	0,0	0,0	0,0012	0,0038	+216	NR	0:09	0:07	0:05	B
10	2,0	0,0	não conver.	não conver.	-	-	-	-	-	-
10	4,0	0,0	0,0081	"	-	-	0:09	0:20	-	-
⊗ 10	0,0	2,0	0,0042	0,0064	+52	NR	0:09	0:07	0:05	B
⊗ 10	0,0	4,0	0,0009	0,0007	-22	B	0:09	0:07	0:05	B

3 pontos internos fixos

prato 5 = 0,25
 □ " 10 = 0,5
 " 15 = 0,75

5 pontos internos fixos

prato 3 = 0,15
 " 6 = 0,30
 □ " 10 = 0,50
 " 14 = 0,70
 " 17 = 0,85

Tabela 5.18 Resultados das simulações.

DESVIOS PARA O MODELO RIGOROSO						TEMPO DE CPU			
NP	FATOR	DXS NEWTON- RAPHSON	DXS BROYDEN	ER %	F A V O R A V E L	R i g o r o s o	N. - R a p h s o n	B r o y d e n	F a v o r a v e l
* 3	0,1	0,0875	0,0564	-36	B	0:09	0:08	0:16	NR
* 3	0,2	0,0434	0,0524	+21	NR	0:09	0:05	0:22	NR
3	0,3	0,0629	0,0111	-82	B	0:09	0:04	0:08	NR
3	0,4	0,0137	0,0293	+114	NR	0:09	0:08	0:04	B
* 3	0,5	0,0633	0,0369	-42	B	0:09	0:06	0:19	NR
* 3	0,6	0,0336	0,0180	-46	NR	0:09	0:10	0:27	NR
* 3	0,7	0,0212	0,0572	+170	NR	0:09	0:20	0:20	A
* 3	0,8	0,0455	0,0414	-9	B	0:09	0:07	0:18	NR
3	0,95	0,0096	não converge	-	-	0:09	0:04	-	-
5	0,1	0,0097	0,0106	+9	NR	0:09	0:03	0:04	NR
5	0,2	0,0097	0,0106	+9	NR	0:09	0:03	0:04	NR
5	0,3	0,0097	0,0106	+9	NR	0:09	0:03	0:04	NR
5	0,4	0,0096	0,0105	+9	NR	0:09	0:03	0:04	NR
5	0,5	0,0096	0,0104	+8	NR	0:09	0:03	0:04	NR
5	0,6	0,0095	0,0078	-18	B	0:09	0:03	0:02	B
⊗ 5	0,7	0,0094	0,0099	+5	NR	0:09	0:03	0:03	A
5	0,8	0,0106	0,0119	+12	NR	0:09	0:03	0:03	A
5	0,95	0,0096	0,0120	+25	NR	0:09	0:03	0:02	B

continuação da tabela 5.18

7 pontos internos fixos

prato 3 = 0,15
 " 6 = 0,30
 " 9 = 0,45
 □ " 10 = 0,50
 " 13 = 0,65
 " 16 = 0,80
 " 19 = 0,95

9 pontos internos fixos

prato 2 = 0,1
 " 4 = 0,2
 " 6 = 0,3
 " 8 = 0,4
 □ " 10 = 0,5
 " 12 = 0,6
 " 14 = 0,7
 " 16 = 0,8
 " 18 = 0,9

DESVIOS PARA O MODELO RIGOROSO						TEMPO DE CPU			
NP	FATOR	DXS NEWTON- RAPHSON	DXS BROYDEN	ER %	ER >0,100	R- 100,000	N. - ROLEMO	R- 100,000	ER >0,100
7	0,1	0,0047	0,0072	+53	NR	0:09	0:06	0:05	B
7	0,2	0,0047	0,0081	+72	NR	0:09	0:06	0:05	B
7	0,3	0,0047	0,0074	+57	NR	0:09	0:06	0:05	B
7	0,4	0,0046	0,0086	+87	NR	0:09	0:06	0:05	B
7	0,5	0,0046	0,0082	+78	NR	0:09	0:06	0:05	B
7	0,6	0,0046	0,0089	+94	NR	0:09	0:07	0:05	B
⊙ 7	0,7	0,0352	0,0044	-88	B	0:09	0:06	0:07	NR
7	0,8	0,0051	0,0081	+59	NR	0:09	0:06	0:04	B
7	0,95	0,0051	0,0046	-10	B	0:09	0:07	0:04	B
9	0,1	0,0200	não converge	-	-	0:09	0:08	-	-
9	0,2	0,0200	"	-	-	0:09	0:08	-	-
9	0,3	0,0286	"	-	-	0:09	0:08	-	-
9	0,4	0,0265	"	-	-	0:09	0:11	-	-
9	0,5	0,0187	"	-	-	0:09	0:06	-	-
9	0,6	0,0196	"	-	-	0:09	0:08	-	-
9	0,7	0,0299	"	-	-	0:09	0:08	-	-
9	0,8	0,0222	"	-	-	0:09	0:09	-	-
9	0,95	0,0263	"	-	-	0:09	0:07	-	-

A = AMBOS; B = BROYDEN; NR = NEWTON-RAPHSON;

- * tempo de processamento maior que o modelo rigoroso;
- pontos escolhidos para a elaboração dos perfis de composição;
- prato de alimentação.

Como podemos observar, não existe diferenças significativas entre os resultados do método de BROYDEN e o de NEWTON-RAPHSON. Isto reproduz a mesma característica da maioria dos exemplos citados.

Os gráficos apresentados nas figuras 5.20 e 5.21, demonstram nesta ordem, quando a escolha de um menor número de pontos de colocação, possui uma precisão melhor do modelo, nos extremos da coluna, e vice-versa. Para visualizar esta diferença na figura 5.21, onde é quase imperceptível, foi elaborado o gráfico dos desvios da composição da fase líquida ao longo da coluna. Ele está representado na figura 5.22. Então, fica evidente nestes sistemas, utilizando o polinômio de JACOBI, que os desvios maiores para modelo prato a prato, compreende a vizinhança do prato de alimentação.

A alternativa de fixar os pontos, inclusive na alimentação, promoveu razoavelmente, uma diminuição do efeito da descontinuidade para este exemplo. Isto pode ser verificado na figura 5.23. No entanto, a grande vantagem está na redução no tempo de processamento alcançada por cinco pontos de colocação internos, com desvios médios das composições molares das correntes de saída satisfatórios. Deste modo, permite uma utilização mais intensiva deste tipo de abordagem em esquemas de otimização.

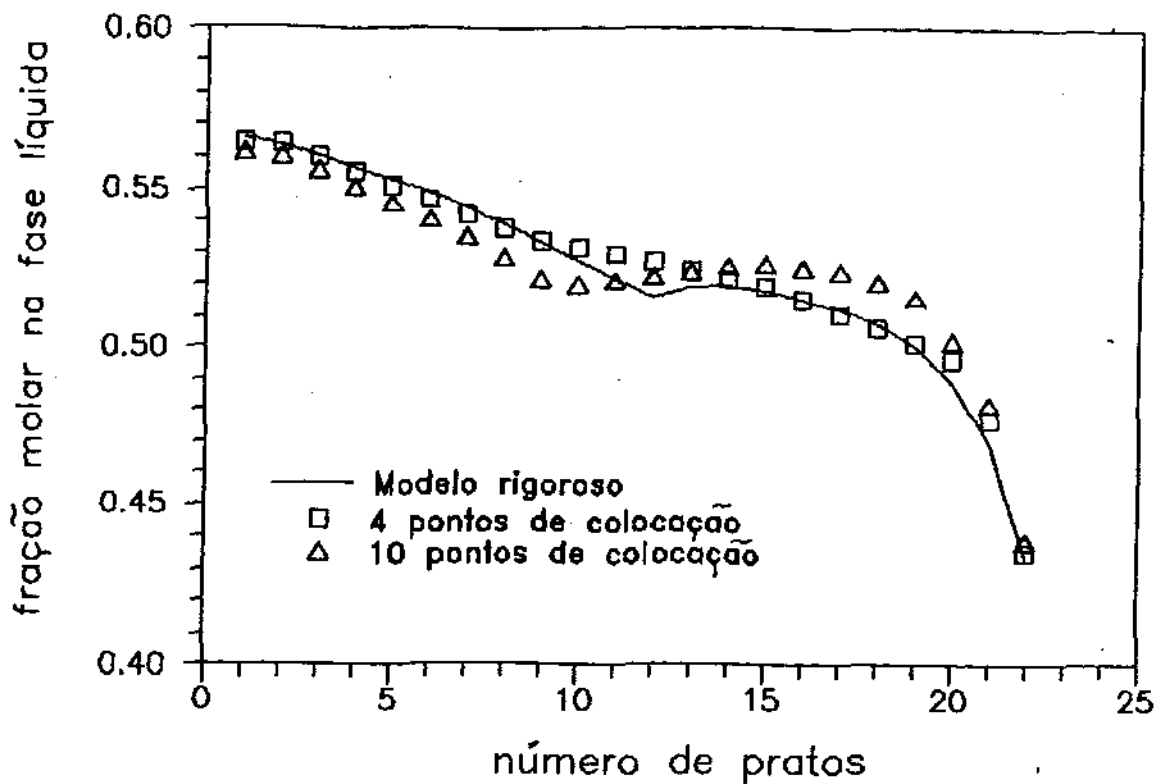


Figura 5.20 Perfil de composição para água. □ 4(0,0) △ 10(0,2)

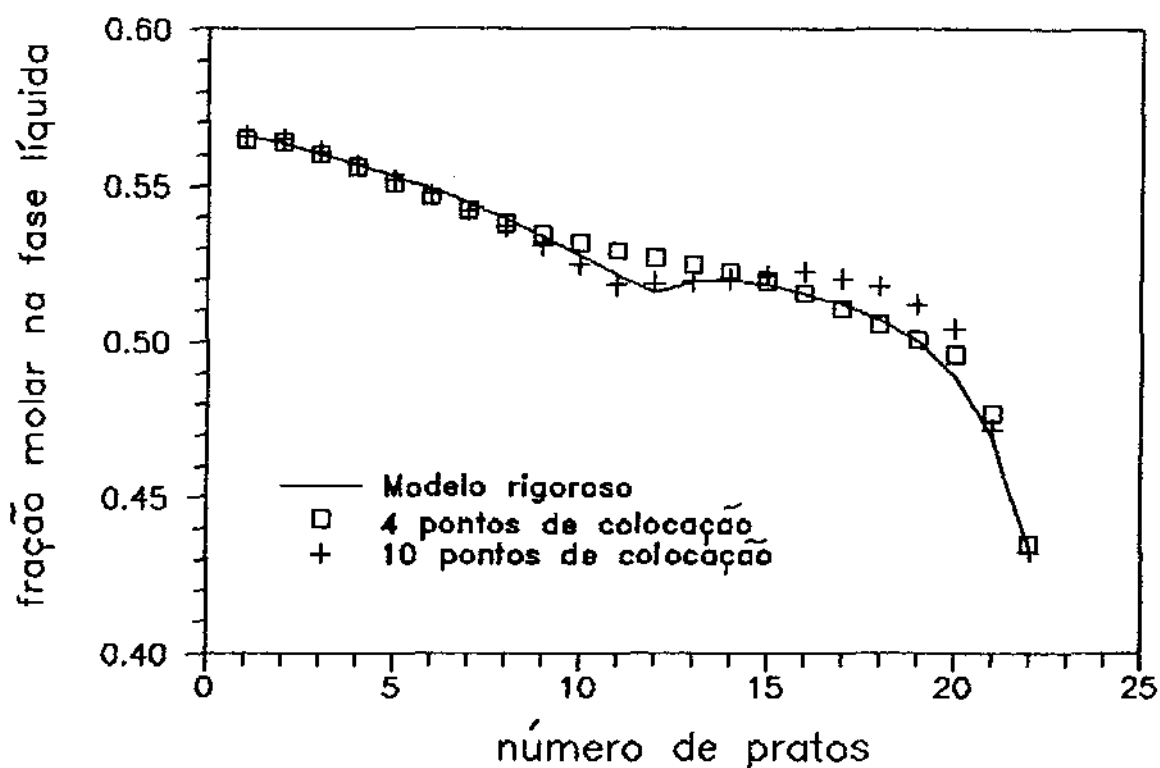


Figura 5.21 Perfil de composição para água. □ 4(0,0) + 10(0,4)

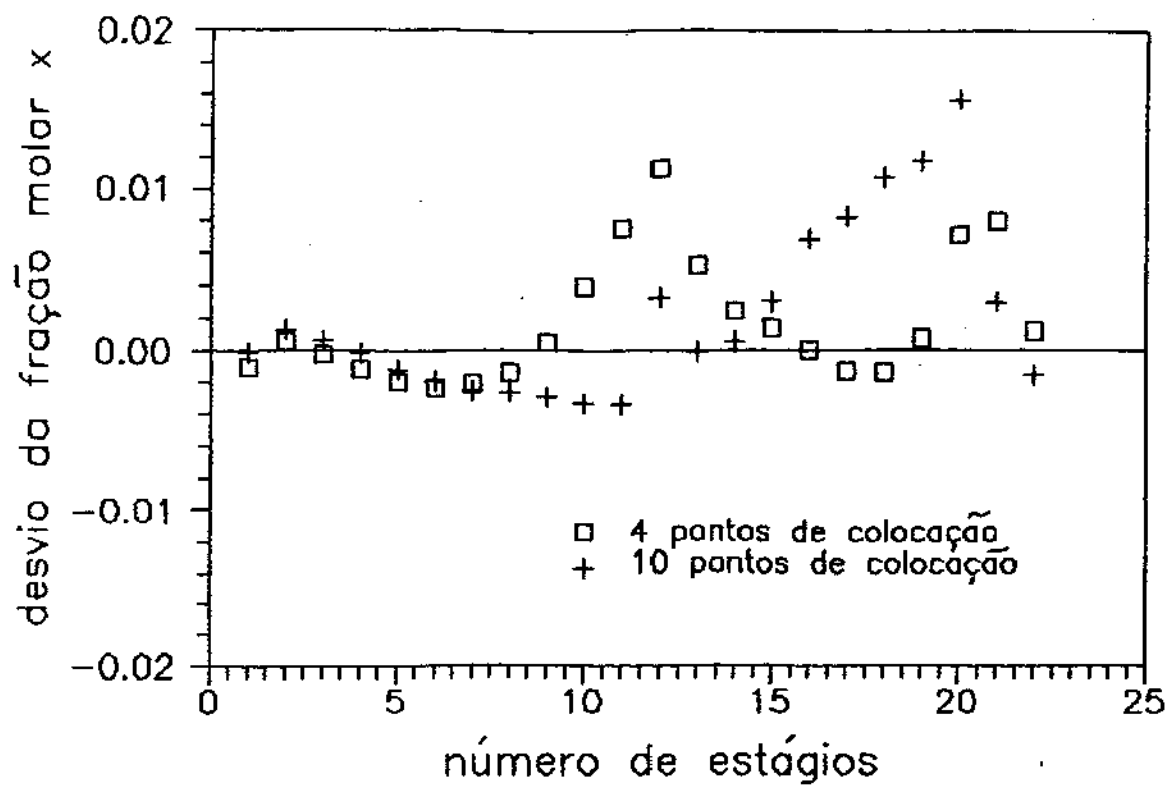


Figura 5.22 Desvios relativos para água. □ 4(0,0) + 10(0,4)

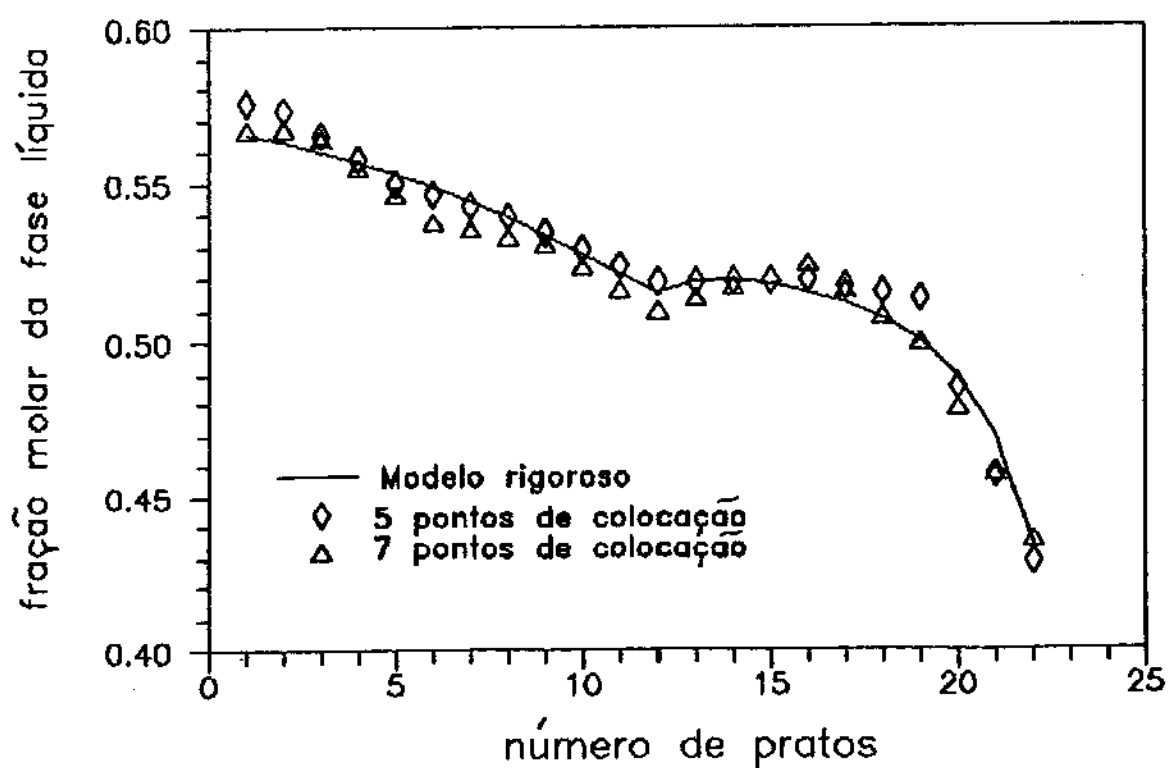


Figura 5.23 Perfil de composição para água. FATOR = 0,7

5.3.6 EXEMPLO 6: METIL-ACETATO - METANOL - ÁGUA

Neste tópico, veremos resultados muito bons para os sistemas trabalhados, em termos da redução do tempo de processamento, chegando a quinze vezes menor que o modelo prato a prato. Principalmente, pelo aspecto da complexidade do esquema de destilação, multicomponente e apresentando tres alimentações.

A escolha arbitrária dos pontos de colocação, fixando-os inclusive nas alimentações, merece uma atenção especial, pois suavizou as descontinuidades nas proximidades dessas localizações.

As condições operacionais podem ser observadas na tabela 5.19.

Os resultados para as simulações desenvolvidas, no caso dos cálculos dos pontos de colocação através de polinômio ortogonal, encontram-se na tabela 5.20. Aqueles, cujos procedimentos consistem em fixar os pontos de colocação, estão contidos na tabela 5.21.

Antecedendo a análise dos gráficos propostos, temos a média dos desvios das correntes de topo e de base da coluna baixa, igual a 0,0010 para quatro pontos de colocação; além disso, houve uma drástica diminuição de tempo computacional (figura 5.24). São condições melhores do que dez pontos. Verificou-se também um afastamento maior para o modelo prato a prato na região onde estão inseridas as alimentações.

Dependendo do interesse sobre o assunto, quando fixamos os cinco pontos de colocação, dentro dos quais, incluem-se as alimentações, temos o afastamento citado no parágrafo anterior, amenizado (figura 5.25). O desvio DXS continua bom, igual a

0,0053, apenas houve um aumento no tempo computacional, o qual não compromete o modelo de ordem reduzida, sendo o valor ainda muito baixo.

Tabela 5.19 Condições operacionais de coluna de destilação.

Exemplo	6
Número de componentes	3
Número de pratos	25
Vazão de destilado (Kmol/h)	0,5
Razão de refluxo	10,0
Eficiência de Murphree	0,6
Pressão (atm)	1,0
Alimentação 1 estágio	3
vazão molar (Kmol/h)	0,6
composição	metil-acetato = 0,0 metanol = 0,0 água = 1,0
Alimentação 2 estágio	8
vazão molar (Kmol/h)	0,6
composição	metil-acetato = 0,0 metanol = 0,0 água = 1,0
Alimentação 3 estágio	13
vazão molar (Kmol/h)	1,0
composição	metil-acetato = 0,5 metanol = 0,5 água = 0,0

Figura 5.20 Resultados das simulações. FATOR = 0,95

DESVIOS PARA O MODELO RIGOROSO							TEMPO DE CPU			
NP	ALFA	BETA	DXS Newton- Raphson	DXS Broyden	ER %	FAVORAVEL	RIGOROSO	N. - RIGOROSO	BROYDEN	FAVORAVEL
4	0,0	0,0	0,0066	0,0023	-65	B	0:31	0:04	0:04	A
4	1,0	0,0	0,0123	0,0103	-16	B	0:31	0:04	0:04	A
4	2,0	0,0	0,0054	0,0040	-26	B	0:31	0:04	0:03	B
4	3,0	0,0	0,0024	0,0024	0	A	0:31	0:02	0:02	A
⊗ 4	5,0	0,0	0,0010	0,0010	0	A	0:31	0:02	0:02	A
4	0,0	1,0	0,0099	0,0055	-44	B	0:31	0:04	0:04	A
4	0,0	2,0	0,0078	0,0041	-55	B	0:31	0:04	0:03	B
4	0,0	3,0	0,0084	0,0077	-8	B	0:31	0:04	0:02	B
4	0,0	5,0	0,0183	0,0265	+45	NR	0:31	0:03	0:05	NR
2	0,0	0,0	0,0069	0,0024	-65	B	0:31	0:03	0:02	B
6	0,0	0,0	0,0052	0,0010	-81	B	0:31	0:06	0:06	A
8	0,0	0,0	0,0060	0,0039	-35	B	0:31	0:10	0:07	B
10	0,0	0,0	0,0064	0,0026	-59	B	0:31	0:14	0:10	B
10	2,0	0,0	0,0020	0,0021	+5	NR	0:31	0:09	0:07	B
10	4,0	0,0	0,0030	0,0030	0	A	0:31	0:09	0:07	B
10	0,0	2,0	0,0071	0,0023	-68	B	0:31	0:14	0:12	B
⊗ 10	0,0	4,0	0,0158	0,0148	-6	B	0:31	0:14	0:08	B

3 pontos internos fixos			5 pontos internos fixos		
□	prato 3	= 0,12	□	prato 3	= 0,12
□	" 8	= 0,32	□	" 8	= 0,32
□	" 13	= 0,52	□	" 13	= 0,52
			□	" 18	= 0,72
			□	" 23	= 0,92

Tabela 5.21 Resultados das simulações.

DESVIOS PARA O MODELO RIGOROSO						TEMPO DE CPU			
NP	FATOR	DXS NEWTON- RAPHSON	DXS BROYDEN	ER %	FACTORIAL	R BROYDEN	N. - R BROYDEN	B BROYDEN	A BROYDEN
3	0,1	0,0097	0,0098	+1	NR	0:31	0:02	0:02	A
3	0,2	0,0097	0,0096	-1	B	0:31	0:02	0:02	A
3	0,3	0,0097	0,0097	0	A	0:31	0:02	0:03	NR
3	0,4	0,0097	0,0100	+31	NR	0:31	0:02	0:02	A
⊗ 3	0,5	0,0097	0,0097	0	A	0:31	0:02	0:02	A
3	0,6	0,0482	0,0096	-80	B	0:31	0:02	0:01	B
3	0,7	0,0405	0,0482	+19	NR	0:31	0:02	0:02	A
3	0,8	0,0097	0,0096	-1	B	0:31	0:02	0:02	A
3	0,95	0,0097	0,0097	0	A	0:31	0:03	0:02	B
5	0,1	0,0053	0,0055	+4	NR	0:31	0:12	0:04	B
5	0,2	0,0053	0,0053	0	A	0:31	0:13	0:03	B
5	0,3	0,0053	0,0053	0	A	0:31	0:14	0:05	B
5	0,4	0,0227	0,0053	-77	B	0:31	0:12	0:06	B
⊗ 5	0,5	0,0349	0,0053	-85	B	0:31	0:11	0:09	NR
5	0,6	0,0425	0,0053	-88	B	0:31	0:10	0:09	B
5	0,7	0,0053	0,0055	+4	NR	0:31	0:07	0:03	B
5	0,8	0,0053	0,0053	0	A	0:31	0:06	0:04	B
5	0,95	0,0181	0,0060	-67	B	0:31	0:04	0:05	NR

continuação da tabela 5.21

8 pontos internos fixos

- prato 3 = 0,12
- " 6 = 0,24
- " 8 = 0,32
- " 11 = 0,44
- " 13 = 0,52
- " 16 = 0,64
- " 19 = 0,76
- " 22 = 0,88

DESVIOS PARA O MODELO RIGOROSO					TEMPO DE CPU				
NP	FATOR	DXS NEWTON- RAPHSON	DXS BROYDEN	ER %	AMBOS	RIGOROSO	N. - RIGOROSO	BROYDEN	AMBOS
⊗ 8	0,5	0,0294	0,0295	0	A	0:31	0:07	0:06	B
8	0,95	0,0291	0,0292	0	A	0:31	0:09	0:08	B

A = AMBOS; B = BROYDEN; NR = NEWTON-RAPHSON;

* tempo de processamento maior que o modelo rigoroso;

⊗ ponto escolhido para a construção do perfil de composição;

□ prato de alimentação.

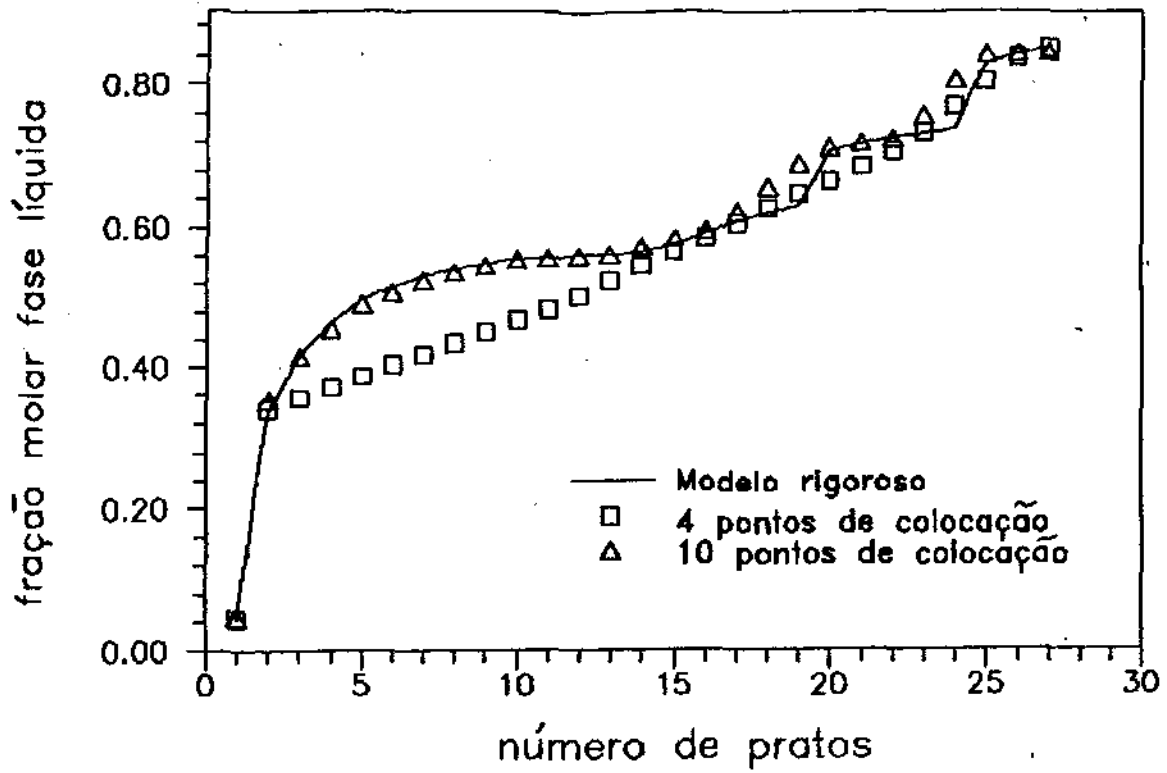


Figura 5.24 Perfil de composição p/ m-acetato. □ 4(5,0) △ 10(0,4)

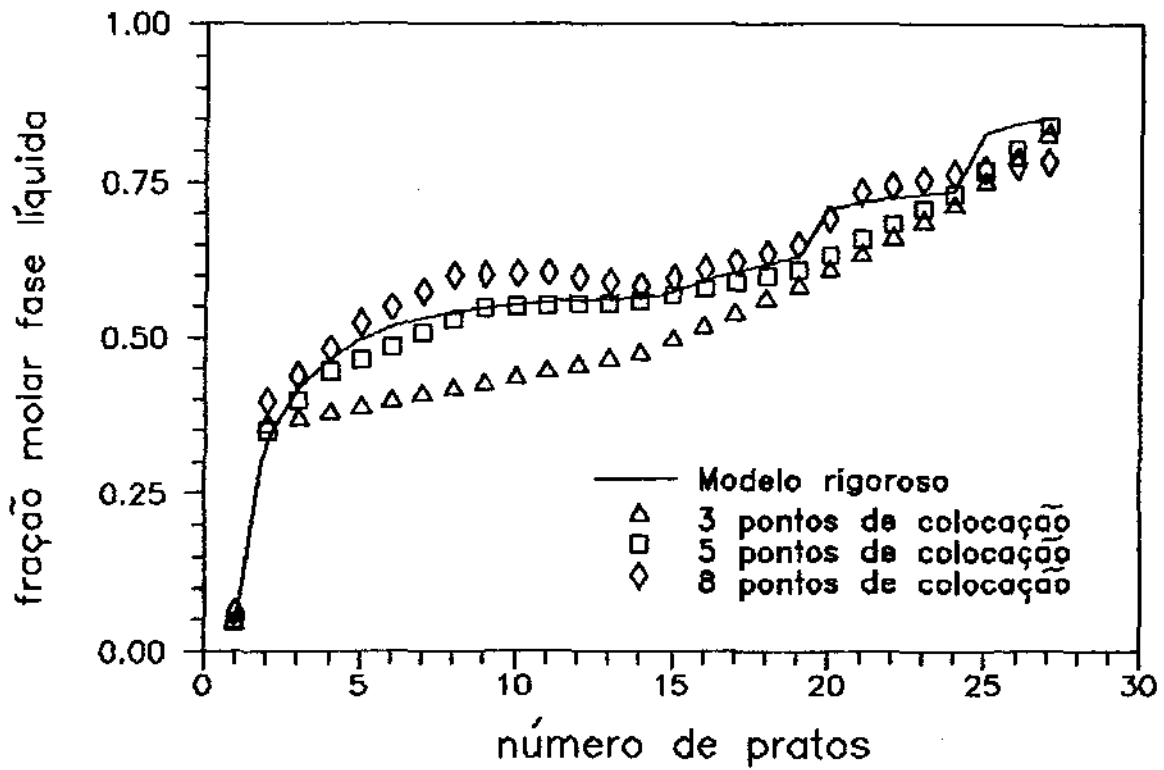


Figura 5.25 Perfil de composição para metil-acetato. FATOR = 0,5

5.3.7 EXEMPLO 7: METIL-CICLOHEXANO - TOLUENO - FENOL

Este exemplo foi selecionado, por se tratar de uma destilação de uma mistura multicomponente, onde a configuração da coluna apresenta duas alimentações. Desse modo, torna-se um sistema de estrutura complexa, no qual constataremos se as vantagens do emprego do modelo de ordem reduzida prevalecem.

As condições de operação da coluna estão tabeladas em 5.22.

Figura 5.22 Condições operacionais da coluna de destilação.

Exemplo	7
Número de componentes	3
Número de pratos	21
Vazão de destilado (Kmol/h)	12,24
Razão de refluxo	8,1
Eficiência de Murphree	1,0
Pressão (atm)	1,0
Alimentação 1	
estágio	10
vazão molar (Kmol/h)	76,74
composição	m-ciclohexano = 0,0 tolueno = 0,0 fenol = 1,0
Alimentação 2	
estágio	15
vazão molar (Kmol/h)	23,26
composição	m-ciclohexano = 0,5 tolueno = 0,5 fenol = 0,0

A tabela 5.23 representa as simulações realizadas utilizando o polinômio de JACOBI. Tres pontos foram escolhidos para a construção dos gráficos de composição, os quais estão presentes nas figuras 5.26 e 5.27. Cada qual indicando nesta ordem, uma maior precisão nos extremos da coluna, para um menor número de pontos de colocação e o outro correspondendo a comportamentos similares. A finalidade é de demonstrar a diversidade nos resultados. O tempo de processamento, no entanto, sobressai como uma redução mais eficiente para um menor número de pontos. Daí, esta alternativa oferece melhores condições para a otimização e o controle de processos. Um acompanhamento dos desvios relativos à modelagem prato a prato para o gráfico 5.26, podem ser vistos na figura 5.28. Observa-se também maiores desvios nas proximidades das alimentações.

A tabela 5.24 apresenta os resultados das simulações, quando arbitramos os pontos de colocação, incluindo-se as alimentações. De um modo geral, os resultados foram insuficientes e não determinaram qualquer vantagem sobre o sistema anteriormente discutido. Além disso, divergem das conclusões observadas no exemplo 6. Não houve, então, uma diminuição do efeito da descontinuidade gerada pelas alimentações da coluna; assim, verifica-se que esta propriedade é bem específica de cada sistema.

Referindo-se ainda à questão anterior, a figura 5.29 apresenta os desvios dos perfis de composição para os pontos escolhidos. Eles demonstram que a aplicação do modelo de ordem reduzida não é condizente para este caso.

Tabela 5.23 Resultados das simulações. FATOR = 0,95

DESVIOS PARA O MODELO RIGOROSO						TEMPO DE CPU				
NP	ALFA	BETA	DXS Newton- Raphson	DXS Broyden	ER %			N. - R	B	
⊗ 4	0,0	0,0	0,0035	0,0034	-3	B	0:14	0:03	0:03	A
4	1,0	0,0	0,0145	0,0125	-14	B	0:14	0:04	0:05	NR
4	2,0	0,0	0,0091	não conver.	-	B	0:14	0:14	-	-
4	3,0	0,0	0,0186	"	-	-	0:14	0:03	-	-
4	5,0	0,0	0,1186	"	-	-	0:14	0:05	-	-
4	0,0	1,0	0,0063	0,0061	-3	B	0:14	0:03	0:03	A
4	0,0	2,0	0,0119	0,0123	+3	NR	0:14	0:03	0:03	A
4	0,0	3,0	0,0189	0,0192	+2	NR	0:14	0:04	0:04	A
4	0,0	5,0	0,0423	0,0387	-9	B	0:14	0:04	0:06	NR
2	0,0	0,0	0,0168	não conver.	-	-	0:14	0:02	-	-
6	0,0	0,0	0,0014	0,0019	+36	NR	0:14	0:04	0:04	-
8	0,0	0,0	0,0027	0,0028	+4	NR	0:14	0:07	0:06	B
⊗ 10	0,0	0,0	0,0030	0,0031	+3	NR	0:14	0:12	0:08	A
10	2,0	0,0	0,0168	não conver.	-	-	0:14	0:19	-	-
10	4,0	0,0	não conver.	não conver.	-	-	-	-	-	-
10	0,0	2,0	0,0031	0,0032	+3	NR	0:14	0:12	0:08	B
⊗ 10	0,0	4,0	0,0097	0,0097	0	NR	0:14	0:11	0:11	A

⊗ pontos escolhidos para a construção dos gráficos de composição.

2 pontos internos fixos

4 pontos internos fixos

□ prato 10 = 0,4761904

□ prato 5 = 0,23809520

□ " 15 = 0,7142857

□ " 10 = 0,4761904

□ " 15 = 0,7142857

" 20 = 0,9523809

Tabela 5.24 Resultados das simulações.

DESVIOS PARA O MODELO RIGOROSO						TEMPO DE CPU			
NP	FATOR	DXS NEWTON- RAPHSON	DXS BROYDEN	ER %	Erro	Newton	Broyden	Block	Erro
2	0,1	0,0240	não converge	-	-	0:14	0:07	-	-
2	0,2	0,0234	"	-	-	0:14	0:13	-	-
2	0,3	0,0241	"	-	-	0:14	0:17	-	-
2	0,4	0,0220	"	-	-	0:14	0:08	-	-
2	0,5	0,0211	"	-	-	0:14	0:03	-	-
2	0,6	0,0208	"	-	-	0:14	0:08	-	-
2	0,7	0,0241	"	-	-	0:14	0:03	-	-
2	0,8	0,0215	"	-	-	0:14	0:03	-	-
2	0,95	0,0241	"	-	-	0:14	0:02	-	-
4	0,1	0,0168	0,0168	0	A	0:14	0:04	0:03	B
4	0,2	0,0168	0,0168	0	A	0:14	0:03	0:04	NR
4	0,3	0,0168	0,0168	0	A	0:14	0:04	0:03	B
4	0,4	0,0168	0,0168	0	A	0:14	0:05	0:05	A
4	0,5	0,0167	0,0168	+1	NR	0:14	0:06	0:05	B
4	0,6	0,0168	0,0168	0	A	0:14	0:03	0:04	NR
4	0,7	0,0168	0,0167	-1	B	0:14	0:06	0:12	NR
4	0,8	0,0168	0,0168	0	A	0:14	0:02	0:03	NR
4	0,95	0,0168	0,0168	0	A	0:14	0:03	0:06	NR

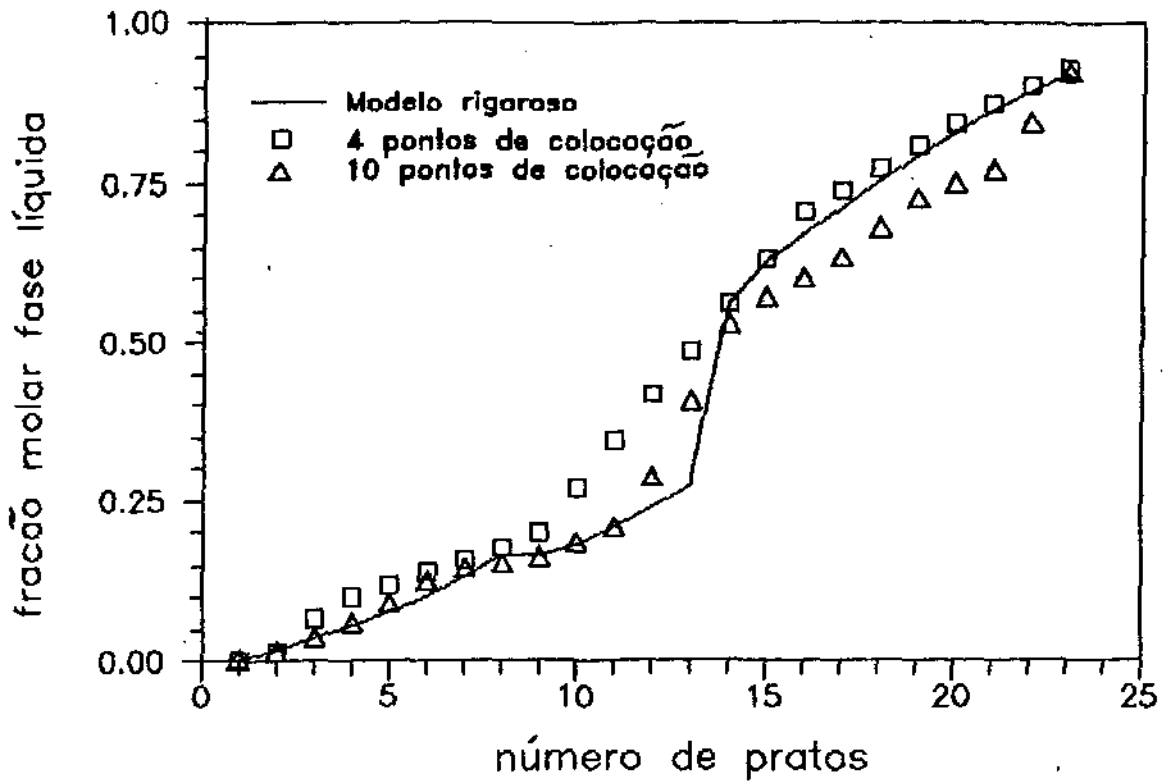


Figura 5.26 Perfil de composição m-ciclohexano □ 4(0,0) △ 10(0,4)

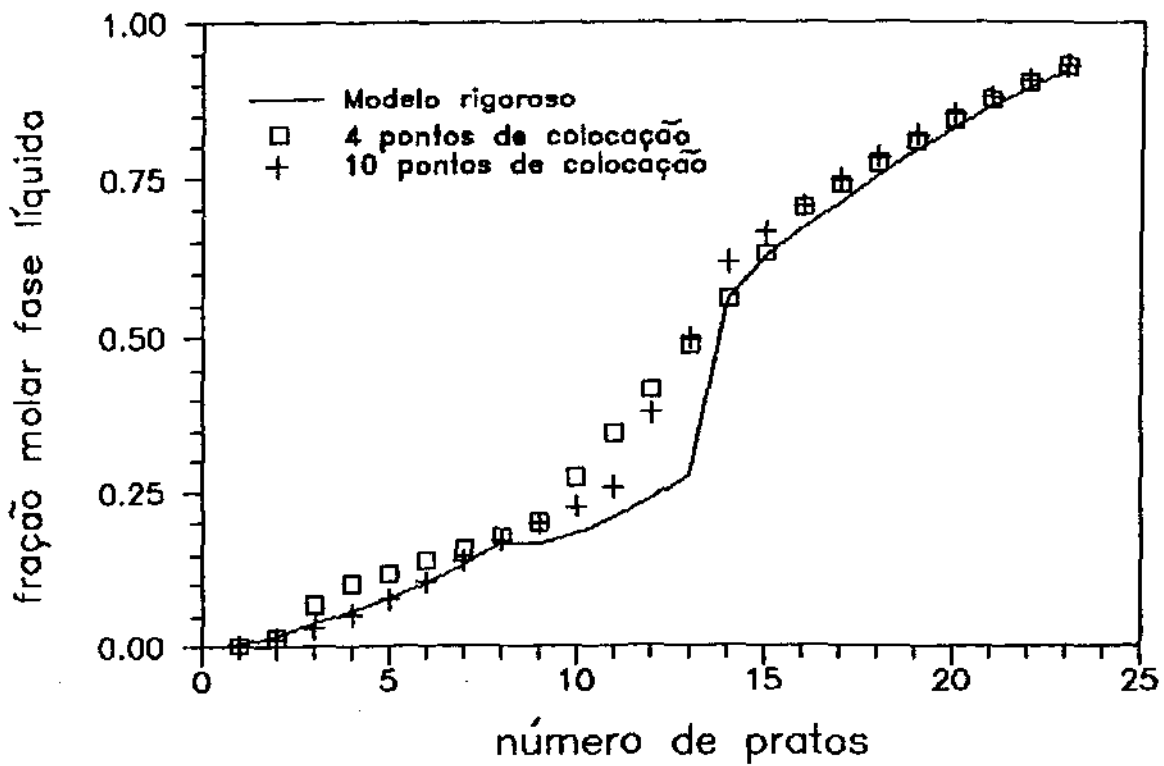


Figura 5.27 Perfil de composição m-ciclohexano □ 4(0,0) + 10(0,0)

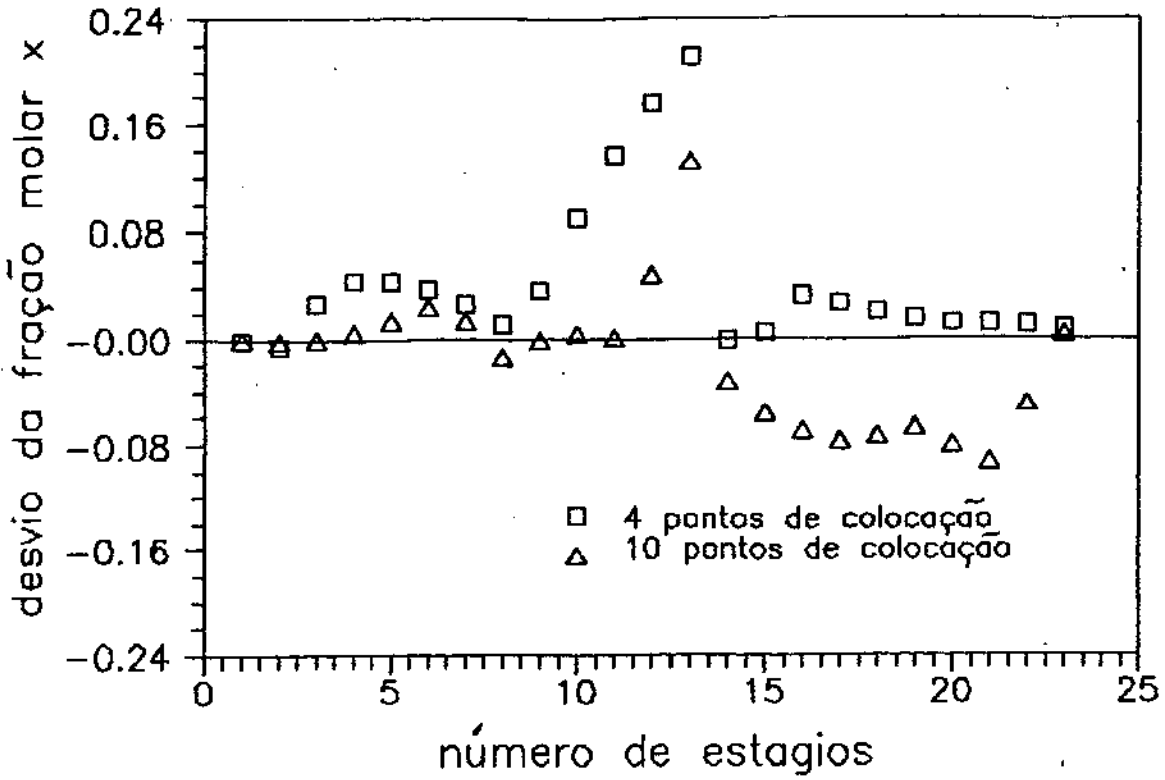


Figura 5.28 Desvios relativos p/ o rigoroso. □ 4(0,0) △ 10(0,4)

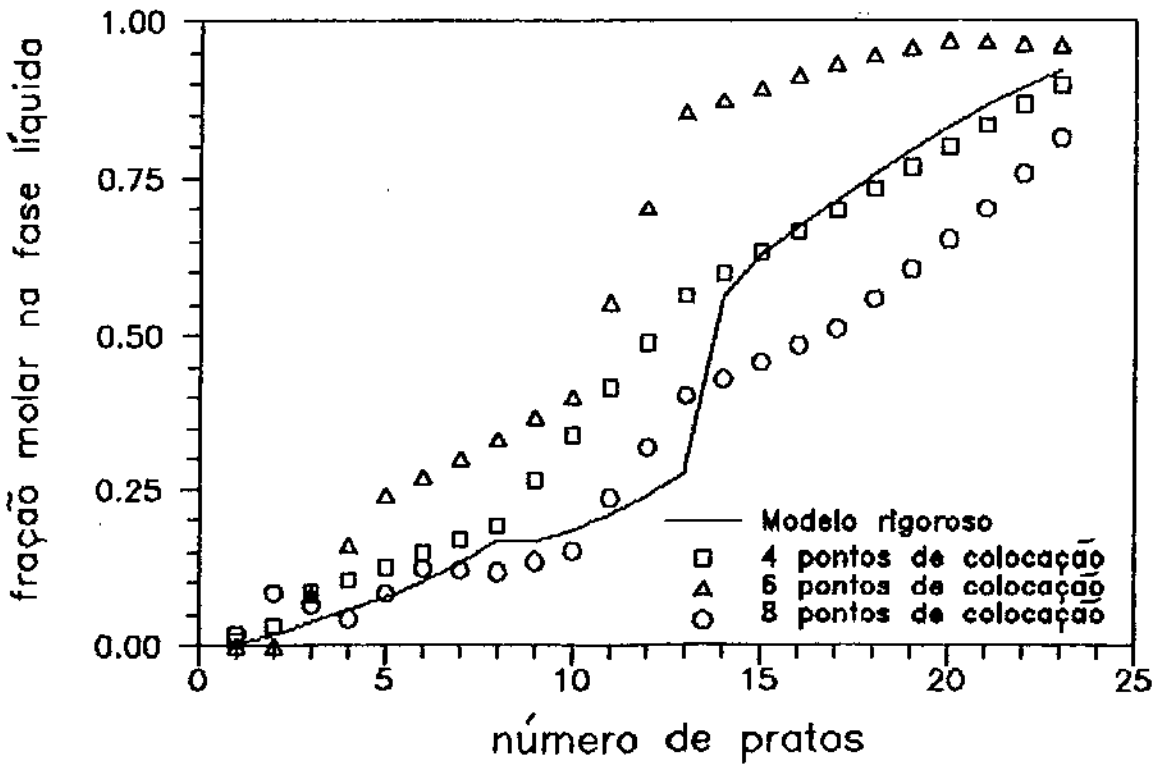


Figura 5.29 Perfil de composição p/ m-ciclohexano. FATOR = 0,95

5.3.8 EXEMPLO 8: HEPTANO - TOLUENO - 2-BUTANONA

Este exemplo mostra que a maioria dos resultados apresenta um tempo de processamento superior a modelagem clássica, ou muitas vezes a convergência do algoritmo de cálculo pelo método de BROYDEN não é alcançada. Isto acontece tanto para as determinações dos pontos de colocação pelo polinômio de JACOBI, como arbitrando-se os pontos, incluindo-se as alimentações. Mesmo assim, alguma vantagem foi adquirida através dos pontos de colocação selecionados para a elaboração do perfil de composição.

Apesar da configuração da coluna de destilação, possuir duas alimentações, igual ao exemplo anterior, o comportamento dos resultados não se equivalem. Aqui, temos o sucesso da aplicação do modelo de ordem reduzida, mais restrito. Principalmente, no âmbito do tempo computacional.

As condições operacionais da coluna de destilação estão descritas na tabela 5.25.

As simulações desenvolvidas se apresentam nas tabelas 5.26 e 5.27.

O perfil de composição para os pontos escolhidos na tabela 5.26, está demonstrado na figura 5.30. Daí, avalia-se que um menor número de pontos, satisfaz melhor a expectativa de uma aproximação mais eficiente para os extremos da coluna, em relação ao modelo prato a prato. Além disso, a diminuição no tempo de processamento é mais notória.

Enfim, comprova-se novamente a falta de abrangência para as estimativas dos resultados. O empreendimento do modelo reduzido é muito específico para cada caso estudado.

Tabela 5.25 Condições operacionais da coluna de destilação.

Exemplo	8
Número de componentes	3
Número de pratos	15
Vazão de destilado (Kmol/h)	0,249
Razão de refluxo	1,5
Eficiência de Murphree	1,0
Pressão (atm)	1,0
Alimentação 1	
estágio	6
vazão molar (Kmol/h)	0,197
composição	heptano = 0,28 tolueno = 0,23 2-butanona = 0,49
Alimentação 2	
estágio	10
vazão molar (Kmol/h)	0,097
composição	heptano = 0,0 tolueno = 0,0 2-butanona = 1,0

Tabela 5.26 Resultados das simulações. FATOR = 0,5

DESVIOS PARA O MODELO RIGOROSO							TEMPO DE CPU			
NP	ALFA	BETA	DXS Newton- Raphson	DXS Broyden	ER %	F A V O R A V E L	R I G O R O S O	N. - R E S O L V E D O	B L O C O	F A V O R A V E L
* 4	0,0	0,0	0,0153	0,0063	-59	B	0:07	0:07	0:10	NR
⊙ 4	1,0	0,0	0,0063	0,0019	-70	B	0:07	0:06	0:04	B
4	2,0	0,0	0,0120	não conver.	-	-	0:07	0:03	-	-
4	3,0	0,0	0,0533	"	-	-	0:07	0:10	-	-
4	5,0	0,0	não conver.	"	-	-	-	-	-	-
4	0,0	1,0	0,0115	0,0114	-1	B	0:07	0:08	0:05	B
4	0,0	2,0	0,0289	não conver.	-	-	0:07	0:19	-	-
* 4	0,0	3,0	0,0181	0,0140	-23	B	0:07	0:33	0:07	B
* 4	0,0	5,0	0,0250	0,0519	+108	NR	0:07	0:06	0:23	NR
2	0,0	0,0	0,0502	não conver.	-	-	0:07	0:09	-	-
* 6	0,0	0,0	0,0035	0,0032	-9	B	0:07	0:08	0:07	B
⊙ 8	0,0	0,0	0,0050	0,0076	+52	NR	0:07	0:12	0:06	B
* 10	0,0	0,0	0,0023	0,0041	+78	NR	0:07	0:18	0:23	NR
* 10	2,0	0,0	0,0248	0,0234	-6	B	0:07	0:14	1:04	NR
10	4,0	0,0	não conver.	não conver.	-	-	-	-	-	-
* 10	0,0	2,0	0,0262	0,0018	-93	B	0:07	0:28	0:17	B
* 10	0,0	4,0	0,0052	0,0051	-2	B	0:07	0:16	0:15	B

A = AMBOS; B = BROYDEN; NR = NEWTON-RAPHSON;

* tempo de processamento maior ou igual ao modelo rigoroso;

⊙ ponto escolhido para a construção do perfil de composição;

4 pontos internos fixos

6 pontos internos fixos

prato 3 = 0,200
 □ " 6 = 0,400
 □ " 10 = 0,667
 " 14 = 0,933

prato 2 = 0,133
 " 4 = 0,267
 □ " 6 = 0,400
 " 8 = 0,533
 □ " 10 = 0,667
 " 12 = 0,800

Tabela 5.27 Resultados das simulações.

DESVIOS PARA O MODELO RIGOROSO						TEMPO DE CPU			
NP	FATOR	DXS NEWTON- RAPHSON	DXS BROYDEN	ER %	F V A R I Á V E L	R O T O R I O	N. R O T A S	B L O C O S	F V A R I Á V E L
* 4	0,1	0,0096	0,0101	+5	NR	0:07	0:04	0:07	NR
4	0,2	0,0072	0,0082	+14	NR	0:07	0:10	0:04	B
* 4	0,3	0,0035	0,0110	+214	NR	0:07	0:07	0:11	NR
* 4	0,4	0,0099	0,0259	+161	NR	0:07	0:08	0:32	NR
* 4	0,5	0,0097	0,0106	+9	NR	0:07	0:12	0:13	NR
* 4	0,6	0,0230	0,0135	-41	B	0:07	0:10	0:18	NR
* 4	0,7	0,0075	0,0119	+59	NR	0:07	0:09	0:08	NR
* 4	0,8	0,0099	0,0120	+21	NR	0:07	0:11	0:07	NR
* 4	0,95	0,0343	0,0103	-70	B	0:07	0:10	0:07	B
6	0,1	0,09542	não converge	-	-	0:07	0:21	-	-
6	0,2	0,0542	"	-	-	0:07	0:35	-	-
6	0,3	0,0782	"	-	-	0:07	1:14	-	-
6	0,4	0,0557	"	-	-	0:07	1:14	-	-
6	0,5	0,0584	"	-	-	0:07	0:30	-	-
6	0,6	0,0527	"	-	-	0:07	0:14	-	-
6	0,7	não converge	"	-	-	-	-	-	-
6	0,8	0,0501	"	-	-	0:07	0:22	-	-
6	0,95	0,1571	não converge	-	-	0:07	0:10	-	-

continuação da tabela 5.27

8 pontos internos fixos

prato 1 = 0,067
 " 2 = 0,133
 " 4 = 0,267
 □ " 6 = 0,400
 " 8 = 0,533
 □ " 10 = 0,667
 " 12 = 0,800
 " 14 = 0,933

DESVIOS PARA O MODELO RIGOROSO					TEMPO DE CPU				
NP	FATOR	DXS NEWTON- RAPHSON	DXS BROYDEN	ER %	A B	N. R	A B	A B	
8	0,1	0,0079	0,0050	-37	B	0:07	0:11	0:06	B
* 8	0,2	0,0054	0,0060	+111	NR	0:07	0:11	0:07	B
* 8	0,3	0,0056	0,0052	-7	B	0:07	0:12	0:07	B
8	0,4	0,0054	0,0053	-2	B	0:07	0:10	0:06	B
* 8	0,5	0,0056	0,0061	+9	NR	0:07	0:15	0:09	B
* 8	0,6	0,0058	0,0081	+40	NR	0:07	0:18	0:08	B
8	0,7	0,0057	0,0048	-16	B	0:07	0:11	0:06	B
* 8	0,8	0,0056	0,0057	+2	NR	0:07	0:17	0:21	NR
* 8	0,95	0,0054	0,0056	+4	NR	0:07	0:13	0:07	B

- A = AMBOS; B = BROYDEN; NR = NEWTON-RAPHSON;
 * tempo de processamento maior ou igual ao modelo rigoroso;
 ⊙ ponto escolhido para a construção do perfil de composição;
 □ prato de alimentação.

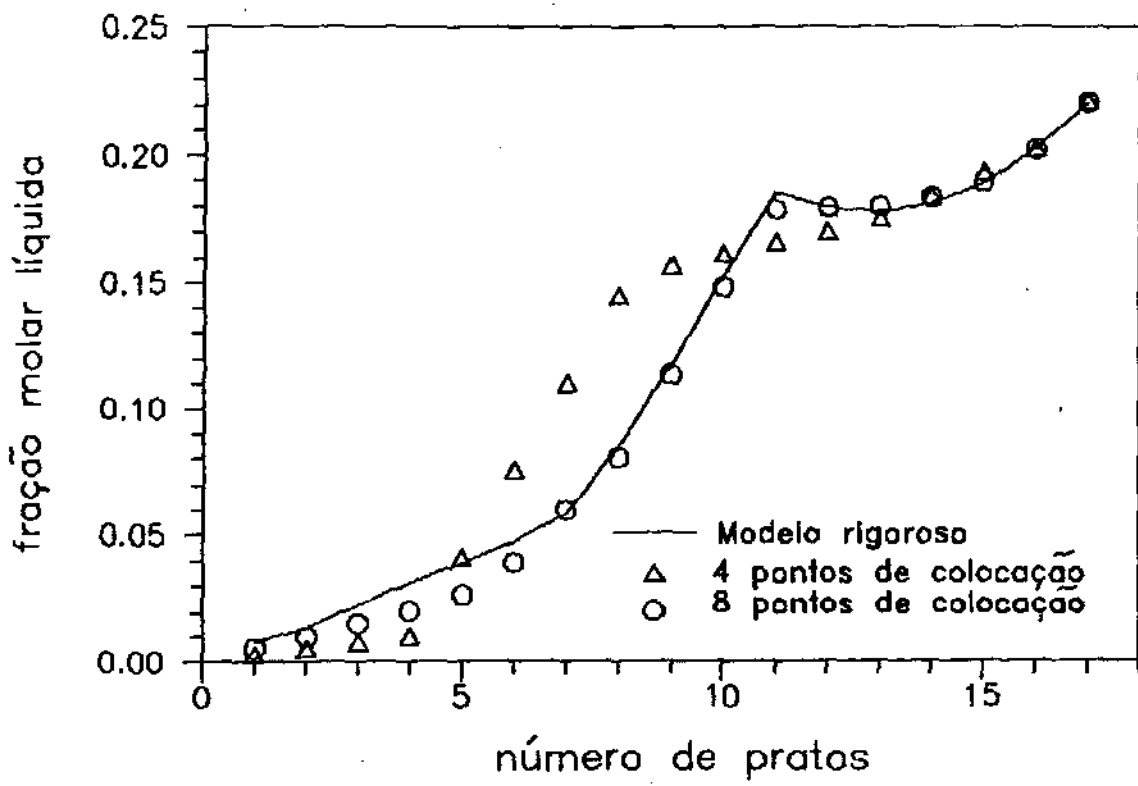


Figura 5.30 Perfil de composição para heptano. Δ 4(1,0) \circ 8(0,0)

5.3.9 EXEMPLO 9: ACETONA - METANOL - ÁGUA

A complexidade desse sistema é acentuada devido às duas alimentações e uma retirada lateral, as quais promovem descontinuidades nos perfis das variáveis do processo. Desse modo, torna-se mais difícil, obter uma boa aproximação das equações diferenciais ordinárias para polinômios ortogonais.

As condições operacionais da coluna de destilação se encontram na tabela 5.28.

As simulações foram realizadas, levando-se em conta a variação do número e localização dos pontos de colocação, conforme os exemplos anteriores. Esses resultados estão ilustrados nas tabelas 5.29 e 5.30.

Foram adquiridos valores razoáveis na redução do tempo de processamento, com precisões aceitáveis no caso da aplicação do polinômio de JACOBI.

No entanto, quando fixamos os pontos, incluindo-se as alimentações e a retirada lateral, nenhuma vantagem foi observada. O procedimento não minimizou o efeito da descontinuidade, e além disso, o algoritmo de cálculo não convergiu para os pontos escolhidos. Convém lembrar que esta análise recai sobre a resolução pelo método de BROYDEN.

As figura 5.31 representa graficamente as aproximações bem sucedidas para a média das frações molares do topo e da base da coluna. A prioridade consta para um menor número de pontos, com a redução do tempo computacional também favorecendo o polinômio de menor grau.

Tabela 5.28 Condições operacionais da coluna de destilação.

Exemplo	9
Número de componentes	3
Número de pratos	13
Vazão de destilado (Kmol/h)	11,62
Razão de refluxo	2,7
Eficiência de Murphree	0,95
Pressão (atm)	1,0
Alimentação 1	
estágio	10
vazão molar (Kmol/h)	17,74
composição	acetona = 0,6290 metanol = 0,3710 água = 0,0000
Alimentação 2	
estágio	5
vazão molar (Kmol/h)	29,44
composição	acetona = 0,0000 metanol = 0,0000 água = 1,0000
Vazão da retirada lateral (Kmol/h)	2,0
estágio	3

Tabela 5.29 Resultados das simulações. FATOR = 0,95

DESVIOS PARA O MODELO RIGOROSO							TEMPO DE CPU			
NP	ALFA	BETA	DXS Newton- Raphson	DXS Broyden	ER %	Algoritmo utilizado	Newton Raphson	Broyden	Newton Raphson	Broyden
6	0,0	0,0	0,0093	não conver.	-	-	0:30	0:08	-	-
6	1,0	0,0	não conver.	"	-	-	-	-	-	-
6	2,0	0,0	0,0463	"	-	-	0:30	0:14	-	-
6	3,0	0,0	0,0206	0,0206	0	A	0:30	0:21	0:24	NR
6	5,0	0,0	0,0117	não conver.	-	-	0:30	0:16	-	-
6	0,0	1,0	0,0047	0,0047	0	A	0:30	0:08	0:14	NR
6	0,0	2,0	0,0027	0,0038	+41	NR	0:30	0:08	0:07	B
⊗ 6	0,0	3,0	0,0065	0,0035	-46	B	0:30	0:06	0:11	NR
6	0,0	5,0	0,0336	0,0402	+20	NR	0:30	0:08	0:11	NR
2	0,0	0,0	0,0112	não conver.	-	-	0:30	0:05	-	-
4	0,0	0,0	0,0042	"	-	-	0:30	0:03	-	-
8	0,0	0,0	0,0059	0,0062	+5	NR	0:30	0:10	0:14	NR
⊗ 10	0,0	0,0	0,0035	0,0037	+6	NR	0:30	0:16	0:14	B
10	2,0	0,0	0,0111	não conver.	-	-	0:30	0:02	-	-
10	4,0	0,0	0,0463	"	-	-	0:30	0:16	-	-
⊗ 10	0,0	2,0	0,0047	0,0043	-9	B	0:30	0:16	0:11	B
10	0,0	4,0	0,0168	não conver.	-	-	0:30	0:31	-	-

A = AMBOS; B = BROYDEN; NR = NEWTON-RAPHSON

⊗ ponto escolhido para a construção do perfil de
composição.

3 pontos internos fixos

5 pontos internos fixos

■ prato 3 = 0,2307692
 □ " 5 = 0,3846153
 □ " 10 = 0,7692307

■ prato 3 = 0,2307692
 □ " 5 = 0,3846153
 □ " 8 = 0,6153846
 □ " 10 = 0,7692307
 □ " 12 = 0,9230769

Tabela 5.30 Resultados das simulações.

DESVIOS PARA O MODELO RIGOROSO						TEMPO DE CPU			
NP	FATOR	DXS NEWTON- RAPHSON	DXS BROYDEN	ER %	F R E Q U E N C I A	R E S O L U C I O E S	N. R E S O L U C I O E S	B L O C O S	F R E Q U E N C I A
3	0,1	0,0355	não conver.	-	-	0:30	0:27	-	-
3	0,2	não conver.	"	-	-	-	-	-	-
3	0,3	0,0782	"	-	-	0:30	0:22	-	-
3	0,4	não conver.	0,0490	-	-	0:30	-	0:18	-
3	0,5	"	não conver.	-	-	-	-	-	-
3	0,6	"	"	-	-	-	-	-	-
3	0,7	0,0541	"	-	-	0:30	0:12	-	-
3	0,8	não conver.	"	-	-	-	-	-	-
3	0,95	0,0405	"	-	-	0:30	0:14	-	-
5	0,1	0,0137	"	-	-	0:30	0:18	-	-
5	0,2	0,0160	"	-	-	0:30	0:17	-	-
5	0,3	0,0235	"	-	-	0:30	0:19	-	-
5	0,4	0,0128	"	-	-	0:30	0:28	-	-
5	0,5	0,0245	"	-	-	0:30	0:08	-	-
5	0,6	0,0154	"	-	-	0:30	0:11	-	-
5	0,7	0,0331	"	-	-	0:30	0:06	-	-
5	0,8	0,0527	"	-	-	0:30	0:04	-	-
5	0,95	0,0440	"	-	-	0:30	0:17	-	-

- A = AMBOS; B = BROYDEN; NR = NEWTON-RAPHSON;
- ⊗ ponto escolhido para a construção do perfil de composição.
- prato de alimentação;
- prato da retirada lateral.

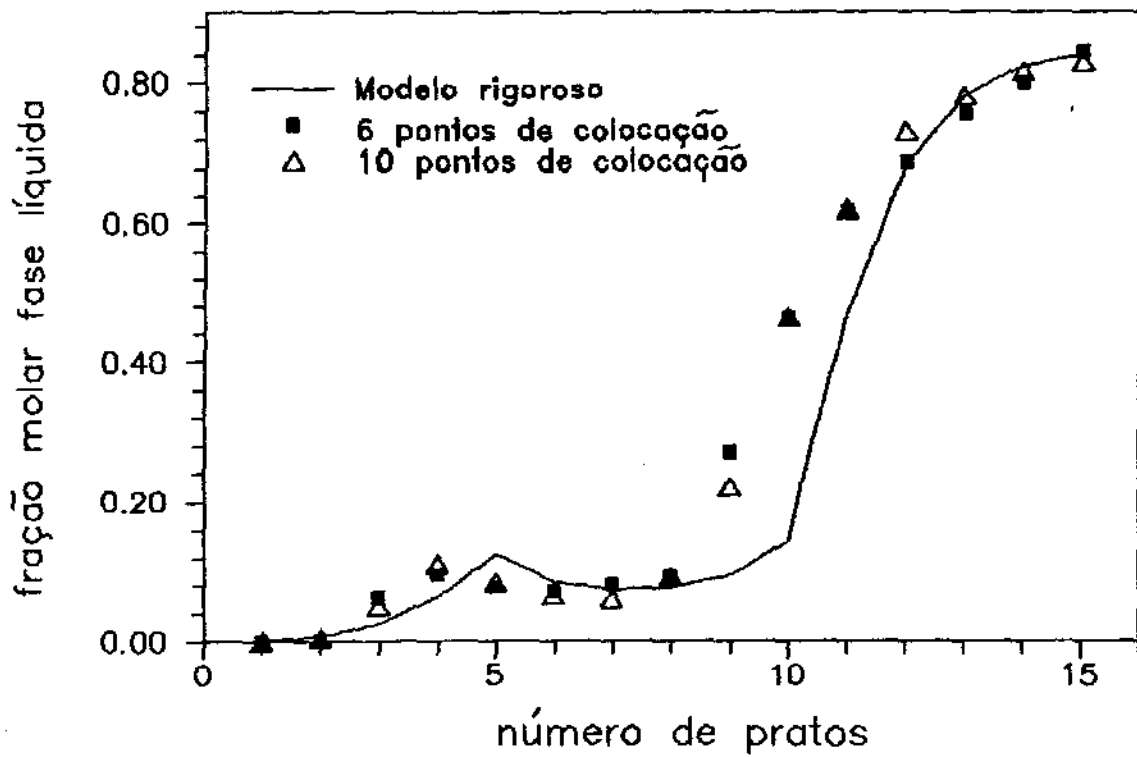


Figura 5.31 Perfil de composição p/ acetona. ■ 6(0.3) △ 10(0.2)

5.3.10 EXEMPLO 10: ETANOL - 1-PROPANOLÁGUA - ÁCIDO ACÉTICO

Este sistema multicomponente, faz um contraponto aos resultados adquiridos no exemplo anterior. Também se trata de uma coluna de destilação com duas alimentações e uma retirada lateral. Só que neste caso, a resolução do problema por intermédio da colocação ortogonal, tanto utilizando-se o polinômio de JACOBI e melhor ainda, fixando os pontos de colocação, alcançaram resultados satisfatórios de uma maneira geral.

As condições de operação podem ser vistas na tabela 5.31.

Os resultados das simulações para os dois tipos de distribuição dos pontos de colocação, apresentam-se nas tabelas 5.32 e 5.33.

A figura 5.32 mostra que a precisão para a média das frações molares nos extremos da coluna, é mais vantajosa quando empregamos um maior número de pontos. No entanto, esta vantagem não prevalece quando comparamos o tempo computacional.

A figura 5.33 mostra o mesmo perfil, sendo que os pontos de colocação foram arbitrados, incluindo-se as alimentações e retiradas laterais. Houve um aperfeiçoamento nos resultados no âmbito geral, em relação aos anteriormente descritos. O afastamento para toda a coluna quando avaliado sobre o modelo prato a prato foi diminuído. Assim, confirma-se para este exemplo, uma redução do efeito das descontinuidades geradas pelos pontos de entrada e saída intermediários à coluna. O perfil correspondente de temperatura acompanha esta característica, já que seus cálculos

estão intrinsecamente ligados às variações de composição. Ele pode ser visto na figura 5.34.

Tabela 5.31 Condições operacionais da coluna de destilação.

Exemplo	10
Número de componentes	4
Número de pratos	28
Vazão de destilado (Kmol/h)	0,04
Razão de refluxo	2,0
Eficiência de Murphree	0,7
Pressão (atm)	1,0
Alimentação 1	
estágio	7
vazão molar (Kmol/h)	0,05
composição	etanol = 0,5 1-propanol = 0,25 água = 0,25 ácido acético = 0,0
Alimentação 2	
estágio	23
vazão molar (Kmol/h)	0,05
composição	etanol = 0,0 1-propanol = 0,25 água = 0,25 ácido acético = 0,5
Vazão da retirada lateral (Kmol/h)	0,020
estágio	20

Tabela 5.32 Resultados das simulações. FATOR = 0,95

DESVIOS PARA O MODELO RIGOROSO							TEMPO DE CPU			
NP	ALFA	BETA	DXS Newton- Raphson	DXS Broyden	ER %	Algoritmo	Newton-Raphson	Broyden	Newton-Raphson	Broyden
4	0,0	0,0	0,0090	não conver.	-	-	0:52	0:07	-	-
4	1,0	0,0	0,0250	"	-	-	0:52	0:11	-	-
4	2,0	0,0	0,0389	"	-	-	0:52	0:22	-	-
4	3,0	0,0	0,0313	"	-	-	0:52	0:08	-	-
4	5,0	0,0	0,0323	"	-	-	0:52	0:13	-	-
⊗ 4	0,0	1,0	0,0054	0,0050	-7	B	0:52	0:06	0:09	NR
4	0,0	2,0	0,0036	0,0038	+6	NR	0:52	0:06	0:11	NR
4	0,0	3,0	0,0116	0,0107	-8	B	0:52	0:18	0:23	NR
4	0,0	5,0	0,0666	não conver.	-	-	0:52	0:13	-	-
2	0,0	0,0	0,0341	"	-	-	0:52	0:10	-	-
6	0,0	0,0	0,0121	"	-	-	0:52	0:08	-	-
8	0,0	0,0	0,0046	0,0042	-9	B	0:52	0:13	0:12	B
10	0,0	0,0	0,0032	0,0035	+9	NR	0:52	0:24	0:11	B
10	2,0	0,0	0,0196	não conver.	-	-	0:52	0:39	-	-
10	4,0	0,0	não conver.	"	-	-	-	-	-	-
⊗ 10	0,0	2,0	0,0028	0,0027	-4	B	0:52	0:20	0:12	B
10	0,0	4,0	0,0231	não conver.	-	-	0:52	0:30	-	-

A = AMBOS;

B = BROYDEN;

NR = NEWTON-RAPHSON;

⊗ ponto escolhido para a construção do perfil de composição.

4 pontos internos fixos

□ prato 7 = 0,250
 " 14 = 0,500
 ■ " 20 = 0,714
 □ " 23 = 0,821

6 pontos internos fixos

prato 4 = 0,143
 □ " 7 = 0,250
 " 10 = 0,357
 " 15 = 0,536
 ■ " 20 = 0,714
 □ " 23 = 0,821

Tabela 5.33 Resultados das simulações.

DESVIOS PARA O MODELO RIGOROSO						TEMPO DE CPU			
NP	FATOR	DXS NEWTON- RAPHSON	DXS BROYDEN	ER %	F B R O Y D E N	R 0 0 0 1 0 0 0	N. - R 0 0 0 0 0 0 0 0	B R O Y D E N	F 0 0 0 0 0 0 0 0
4	0,1	0,0294	0,0124	-58	B	0:52	0:16	0:45	NR
4	0,2	0,0132	não converge	-	-	0:52	0:29	-	-
4	0,3	0,0300	"	-	-	0:52	0:40	-	-
4	0,4	0,0186	0,0118	-37	B	0:52	0:07	0:22	NR
4	0,5	0,0203	não converge	-	-	0:52	0:10	-	-
4	0,6	0,0249	0,0118	-53	B	0:52	0:08	0:28	NR
4	0,7	0,1432	0,0122	-92	B	0:52	0:19	0:05	NR
4	0,8	0,0154	0,0119	-23	B	0:52	0:06	0:11	NR
4	0,95	0,0208	0,0120	-42	B	0:52	0:20	0:24	NR
6	0,1	0,0285	0,0023	-92	B	0:52	0:15	0:20	NR
6	0,2	0,0403	0,0032	-92	B	0:52	0:09	0:07	B
6	0,3	0,0025	0,0054	+116	NR	0:52	0:34	0:10	B
6	0,4	0,0135	0,0040	-70	B	0:52	0:17	0:09	B
6	0,5	0,0813	0,0051	-94	B	0:52	0:22	0:43	NR
6	0,6	0,0318	0,0035	-89	B	0:52	0:49	0:13	NR
6	0,7	0,0036	0,0034	-6	B	0:52	0:23	0:15	B
6	0,8	0,0043	0,0027	-37	B	0:52	0:13	0:12	B
6	0,95	0,0635	não converge	-	-	0:52	0:31	-	-

continuação da tabela 5.33

8 pontos internos fixos				10 pontos internos fixos			
□	prato 4 = 0,143	□	prato 4 = 0,143	■	prato 20 = 0,714		
□	" 7 = 0,250	□	" 7 = 0,250	□	" 23 = 0,821		
	" 10 = 0,357		" 10 = 0,357	"	" 25 = 0,893		
	" 13 = 0,464		" 12 = 0,429				
	" 16 = 0,571		" 14 = 0,500				
■	" 20 = 0,714		" 16 = 0,571				
□	" 23 = 0,821		" 18 = 0,643				
	" 26 = 0,929						

DESVIOS PARA O MODELO RIGOROSO						TEMPO DE CPU			
NP	FATOR	DXS NEWTON- RAPHSON	DXS BROYDEN	ER %	F v g r o v a r i a n t e	R e s o l u t o	N. i t e r a c i o e s	B l o c o q u e	P o t e n c i a l
8	0,1	0,0068	0,0071	+4	NR	0:52	0:14	0:08	B
8	0,2	0,0064	0,0073	-14	B	0:52	0:14	0:08	B
8	0,3	0,0070	0,0076	+9	NR	0:52	0:14	0:08	B
8	0,4	0,0064	0,0103	+70	NR	0:52	0:13	0:37	NR
8	0,5	0,0095	0,0101	+6	NR	0:52	0:16	0:38	NR
8	0,6	0,0122	0,0050	-59	B	0:52	0:25	0:14	B
8	0,7	0,0262	0,0110	-58	B	0:52	0:22	0:44	NR
8	0,8	0,0068	0,0107	+57	NR	0:52	0:13	0:19	NR
8	0,95	0,0073	0,0105	-	-	0:52	0:13	0:33	NR
10	0,1	0,1434	não converge	-	-	0:52	0:31	-	-
10	0,2	0,1105	"	-	-	0:52	1:00	-	-
10	0,3	0,1062	"	-	-	0:52	0:26	-	-
10	0,4	0,1048	"	-	-	0:52	0:59	-	-
10	0,5	0,0764	"	-	-	0:52	0:59	-	-
10	0,6	0,0810	"	-	-	0:52	0:44	-	-
10	0,7	0,0608	"	-	-	0:52	0:35	-	-
10	0,8	não converge	"	-	-	-	-	-	-
10	0,95	0,0554	"	-	-	0:52	1:34	-	-

A = AMBOS: B = BROYDEN: NR = NEWTON-RAPHSON:

⊗ ponto escolhido para a construção do perfil de composição.

□ prato de alimentação;

■ prato da retirada lateral.

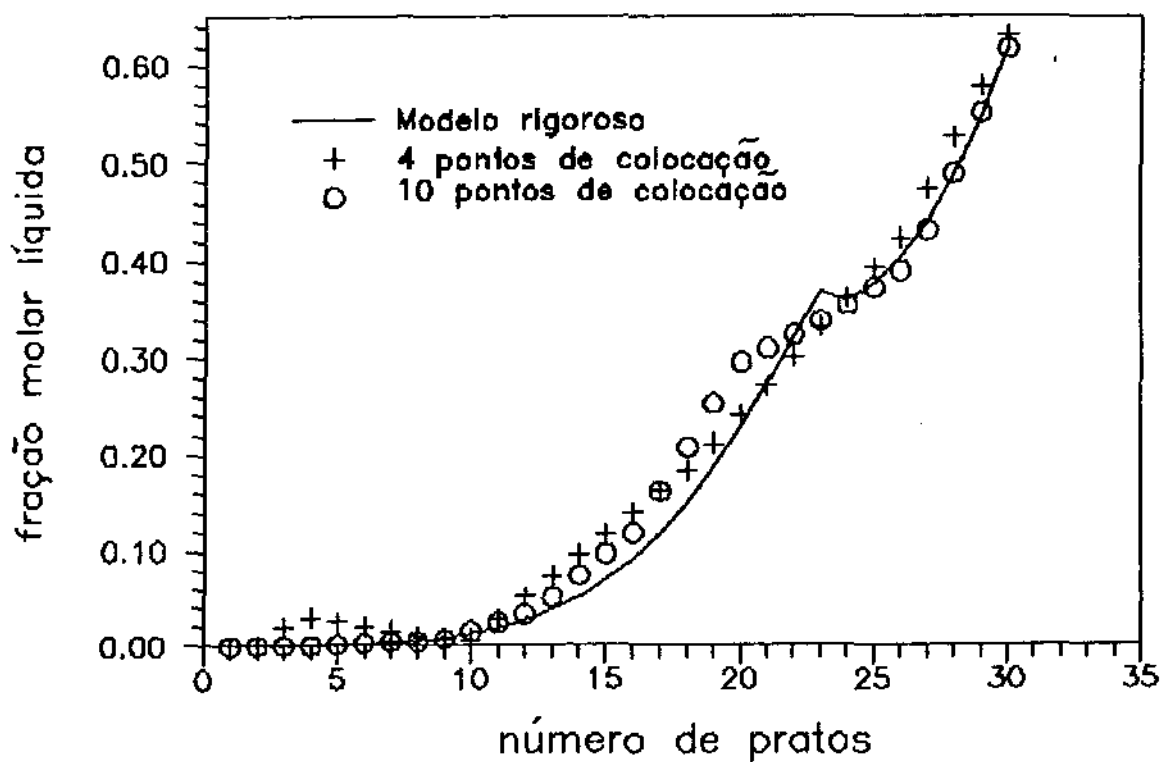


Figura 5.32 Perfil de composição p/ etanol. + 4(0.1) o 10(0.2)

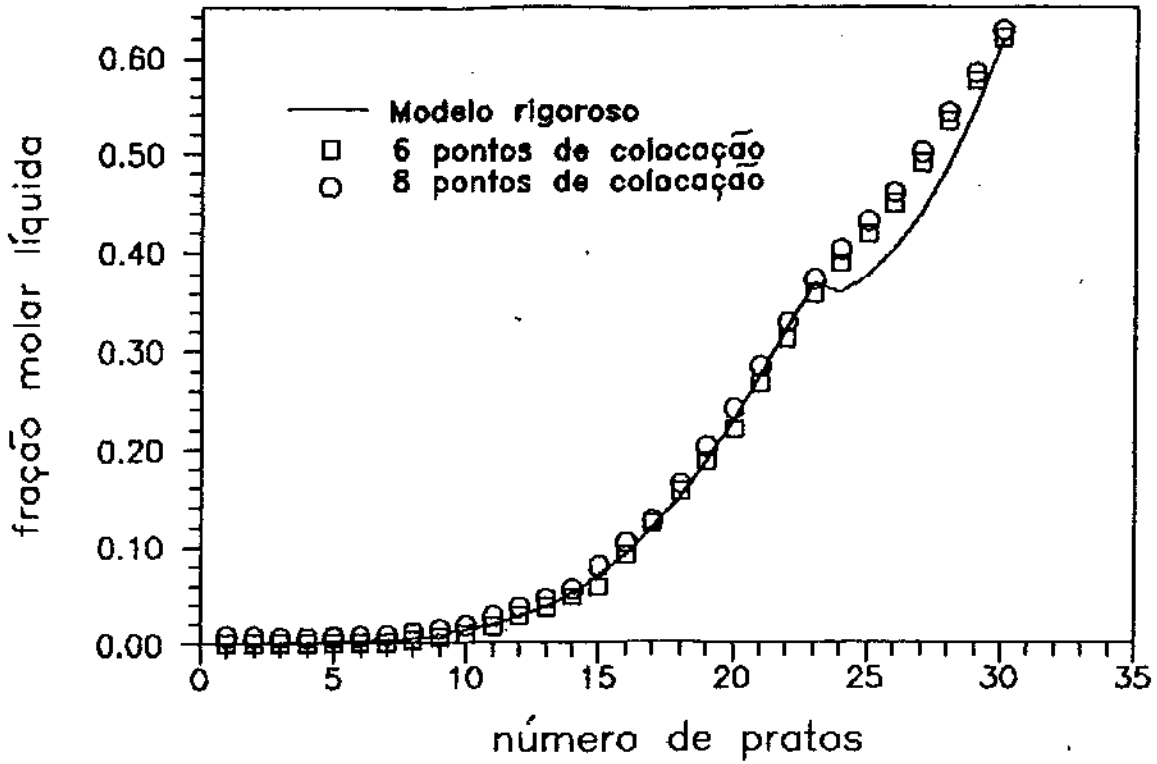


Figura 5.33 Perfil de composição para etanol \Rightarrow FATOR = 0.2

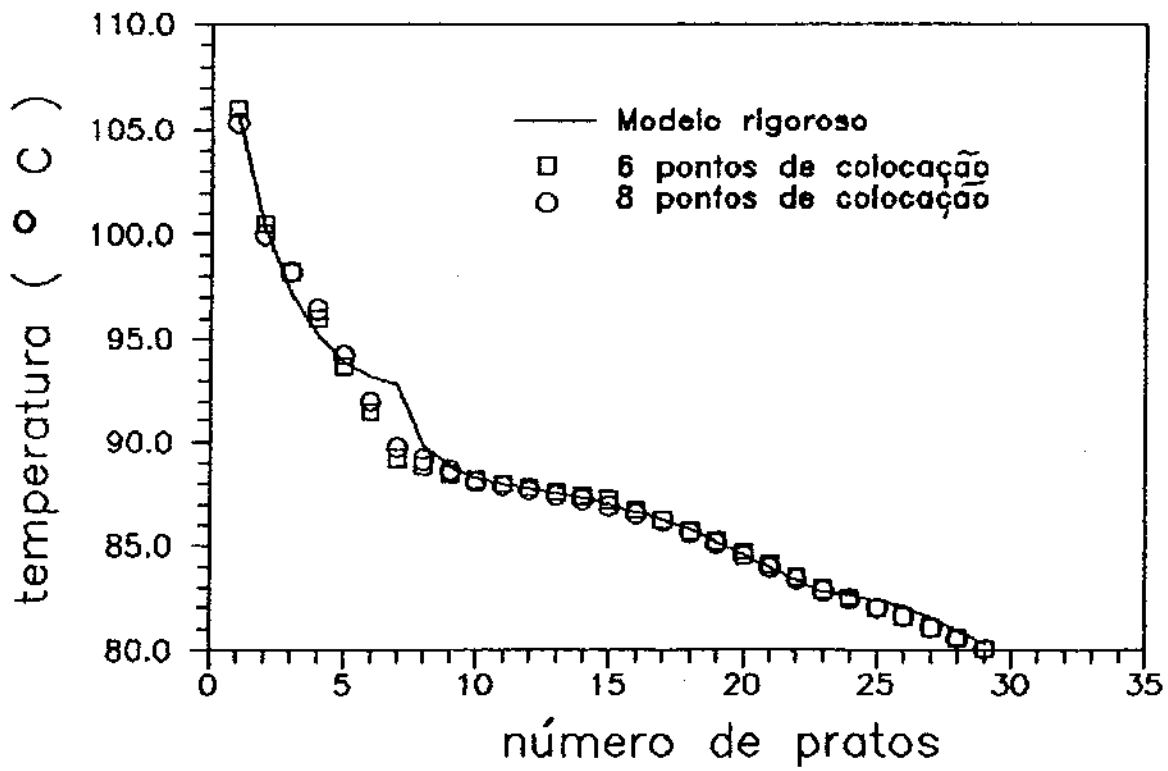


Figura 5.34 Perfil de temperatura para etanol \Rightarrow FATOR = 0.2

5.3.11 CONCLUSÃO

O método de aproximação polinomial proposto neste trabalho, torna-se uma maneira eficiente para diminuir o número total de equações e variáveis, requeridas na modelagem dos sistemas de destilação. Em consequência, temos uma redução no tempo computacional, sem comprometer a precisão dos resultados.

Uma multiplicidade de respostas foi obtida para os exemplos estudados, pois há um conjunto de fatores que interferem na qualidade das soluções. Desse modo, o sucesso das simulações desenvolvidas, não depende exclusivamente do tipo de estratégia adotada pelo emprego do modelo reduzido. Nem está vinculado apenas à tendência fortemente não linear dos perfis de vazão molar ou composição molar para os estágios da coluna. Como pode ser visto neste trabalho, existem representações dos perfis por intermédio de curvas altamente não lineares, mas que apresentam uma aproximação eficiente para o modelo rigoroso. De acordo com o exemplo 1, verificou-se também a influência da variação das condições operacionais. Neste caso, a precisão das respostas nos extremos da coluna, permaneceu praticamente uniforme. Além disso, analisou-se o efeito da variação das estimativas iniciais de temperatura para a coluna, fixando-se o número de pontos de colocação. Contudo, para a maioria dos exemplos, as diferenças nos resultados são consideradas desprezíveis, adquirindo uma certa estabilidade. O que pode ser obviamente entendido, é que cada sistema possui um comportamento particular com a aplicação da técnica da colocação ortogonal.

Na verdade, dentro de todos os critérios adotados para a

análise, da complexidade das respostas, a atribuição sobre a interação específica entre o modelo reduzido e o sistema real é um fator relevante. As condições de não idealidade existentes neste último, podem não ser coerentemente preservadas quando as representamos de uma forma simplificada.

Um dos objetivos dessa pesquisa, consistiu em aplicar o método numérico de BROYDEN para a resolução do sistema de equações, e comparar os resultados adquiridos com aqueles obtidos com a aplicação do método de NEWTON-RAPHSON. Houveram excessões entre os exemplos, onde o favoretismo em termos da redução do tempo de processamento foi sensivelmente melhor para o primeiro método. Os exemplos 1 e 6 confirmam essa posição. Entretanto, como regra geral, relacionando-se a frequência do mais favorável em cada ponto e o erro relativo entre eles, não houve vantagem substancial para qualquer um dos métodos. Tanto na precisão do modelo reduzido como para a diminuição no tempo computacional. Provavelmente, essa diferença se acentua para o último item, adaptando-se melhor para o método de BROYDEN, caso se trabalhe com colunas de destilação com um grande número de pratos. Essas razões já foram justificadas anteriormente, devido ao algoritmo citado empreender menos vezes o cálculo demorado da matriz inversa do jacobiano.

A sugestão para fixar os pontos de colocação, incluindo-se as alimentações e as retiradas laterais, não contribuiu para aumentar a precisão nos extremos da coluna em relação ao mecanismo do polinômio de JACOBI. A redução do tempo de processamento se tornou compatível e muitas vezes a convergência não foi alcançada. Porém, a expectativa sobre uma aproximação mais

adequada no interior da coluna, foi atendida para alguns exemplos, tais como os de número 6 e 10. Nestes casos, parece que houve uma remoção parcial do efeito das descontinuidades nos perfis, proporcionadas pelas alimentações e retiradas laterais. Esta recomendação, no entanto, não se aplica seguramente para todos os exemplos trabalhados.

Fazendo-se uma abordagem geral, não mais que quatro pontos de colocação foram necessários para assegurar uma aproximação razoável, com drástica redução no tempo de execução do programa da modelagem.

Enfim, afirmaremos que o modelo reduzido proposto, apresenta grande flexibilidade para a otimização de processos de coluna de destilação, no estado estacionário. Particularmente se sobressai em estudos de simulações repetitivas, e aplicações adequadas em otimizações de colunas com grande número de estágios ou processos com estrutura de cascata. Acompanha assim, os requisitos necessários para o avanço tecnológico nesta era da informática, utilizando potencialmente os recursos concernidos e antecipando com bastante agilidade, as iniciativas voltadas ao aperfeiçoamento deste campo.

CAPITULO 6

CONCLUSÕES FINAIS E SUGESTÕES

O programa elaborado neste trabalho, atende ao objetivo de reduzir a ordem do sistema de equações, existente na modelagem matemática de uma coluna de destilação no estado estacionário.

Para os vários exemplos numéricos, incluindo-se misturas não ideais e condições operacionais complexas, o critério de convergência foi alcançado. Isto permite uma utilização do algoritmo de uma maneira ampla. Ele é compatível para o uso em microcomputadores IBM-PC, os quais são bastantes difundidos devido a sua facilidade de aquisição e manuseio.

Os exemplos foram escolhidos com características diferenciadas, existentes na literatura e já simulados por outros programas.

Efetivamente, temos resultados satisfatórios onde o tempo de processamento é bastante minimizado em comparação com o modelo clássico, demonstrando também uma precisão muito boa. No entanto, algumas observações devem ser esclarecidas para um melhor entendimento do modelo:

- Ele não visa substituir a representatividade do modelo rigoroso. O modelo de ordem reduzida apresentado, contribui para a realização de um projeto em condições otimizadas de segurança e performance da coluna, com uma estimativa razoável. Torna-se vantajoso principalmente, quando o tempo de processamento da análise rigorosa se trata de um parâmetro inviável, para uma

verificação prática dos problemas de destilação.

- Com o uso do método numérico de BROYDEN para a resolução das equações, não foi revelada para a grande maioria dos exemplos estudados, uma superioridade na redução do tempo computacional em relação ao método de NEWTON-RAPHSON. Uma recomendação para o seguimento desta linha de pesquisa, consiste na averiguação deste comportamento, nos casos de simulações em colunas com número de estágios mais elevado. Dependendo das características de amortecimento das variáveis independentes para o sistema escolhido, a convergência pode ser atendida mais rapidamente para o primeiro método de um modo significativo. A justificativa, como já dita anteriormente, se deve ao fato de calcular a matriz inversa do jacobiano com menos frequência.

- Considerando-se a aproximação geral dos perfis representados em relação ao modelo prato a prato, um maior número de pontos de colocação a serem utilizados, reproduzem muitas vezes uma eficiência mais notável. Contudo, o interesse nos diversos testes realizados, visa a abordagem sobre a média dos desvios das composições molares, nas correntes de saída da coluna. Logo, nesse aspecto, um menor número de pontos de colocação corresponde à expectativa de cálculos mais ágeis, sem comprometer a precisão dos resultados, como consta na maior parte dos exemplos; incluindo-se até aqueles de estrutura complexa, com múltiplas alimentações e saída lateral. No entanto, para a comodidade do usuário, ele pode emitir um diagnóstico imediato sobre a consistência dos resultados gerais da coluna, na própria execução do programa; isto é, as frações molares por componente e a temperatura em cada estágio, seus desvios absolutos para o rigoroso, além do balanço de massa

global por componente são mostrados através dos detalhes criados na tela do monitor de vídeo.

- Os testes realizados, fixando-se os pontos de colocação e incorporando-se as alimentações e retirada lateral, proporcionaram algumas vantagens sobre a aplicação do polinômio de JACOBI. Para determinados exemplos, as descontinuidades nos perfis foram amenizadas, com uma aproximação aceitável para os extremos da coluna e uma adequada redução do tempo computacional. Para outros exemplos, os desenvolvimentos foram improdutivos. Uma sugestão para os trabalhos futuros, implica em adaptar o programa proposto, para o estudo de processos interativos em sistemas de colunas de destilação no regime estacionário. Isto porque esses processos químicos são representados por módulos, os quais são interligados de acordo com os dados das correntes de entrada e saída dos fluxos de material, entre as unidades das planta; requerendo assim, grande esforço computacional.

- Outra recomendação consiste em reconhecer nas relações termodinâmicas, a não idealidade da fase vapor, afim de atingir uma gama maior dos exemplos numéricos existentes na literatura.

Concluindo, as simulações apresentam resultados particularizados para cada sistema trabalhado. Desta forma, torna-se complexa a formação de um pacote que atenda as necessidades dessa área.

A medida que essa especificidade vai sendo pesquisada, os conhecimentos vão sendo evidenciados como um caminho propulsor para o avanço científico e tecnológico.

ANEXO 1

TEORIA E PARAMETROS DAS PROPRIEDADES TERMODINAMICAS

Este anexo apresenta um resumo sobre as equações e os dados termodinâmicos utilizados neste trabalho.

A pressão de saturação para os componentes puros é calculada pela equação de ANTOINE e os coeficientes de atividade das misturas multicomponente são determinados pelas correlações de WILSON. A teoria pode ser vista conforme REID e colaboradores (1977).

- Equação de ANTOINE :

$$\text{Log } P^{\text{sat}} = \text{ANTA} - \frac{\text{ANTB}}{T + \text{ANTC}} \quad (\text{A1})$$

com P^{sat} em mm Hg e T em °C

As constantes ANTA, ANTB e ANTC, baseadas apenas nas propriedades das espécies puras, encontram-se tabeladas de acordo com os exemplos estudado. Elas foram extraídas dos trabalhos de GMEHHLING & ONKEN (1977).

O coeficiente de atividade para a fase líquida, é utilizado para estimar os desvios da não idealidade da mistura nesta fase. A teoria da não idealidade é baseada na proposição de que há diferentes forças de atração entre as espécies presentes na mistura. As correlações de WILSON podem ser aplicadas a misturas de compostos polares. Para os cálculos dos coeficientes de atividade, deve-se definir as constantes de interação binária Λ_{ij} . Elas dependem dos parâmetros de interação energética D_{ij} e dos

volumes molares V_b para cada componente puro. Esses valores foram compilados dos trabalhos de GMEHHLING & ONKEN (1977). Eles se encontram listados de acordo com os exemplos estudados.

- Correlação de WILSON :

$$\ln \gamma_i = -\ln \left[\sum_j^{NC} x_j \hat{\Lambda}_{ij} \right] + 1 - \sum_k^{NC} \frac{x_i \hat{\Lambda}_{ki}}{\sum_j x_j \hat{\Lambda}_{kj}} \quad (A2)$$

$$\hat{\Lambda}_{ij} = \frac{V_{b_j}}{V_{b_i}} \exp \left[-\frac{D_{ij}}{RT} \right] \quad (A3)$$

onde R é a constante dos gases perfeitos, igual a $82,05 \text{ cm}^3 \cdot \text{atm/mol} \cdot \text{K}$.

As tabelas com os valores das constantes citadas, estão descritas nas próximas páginas, para cada exemplo avaliado neste trabalho. Para facilitar a consulta, elas foram ordenadas do primeiro ao décimo exemplo, formando uma sequência crescente da numeração.

EXEMPLO 1	CONSTANTES DE ANTOINE			VOLUME MOLAR
SUBSTANCIA	CANT A	CANT B	CANT C	V_b cm^3/mol
ACETONA	7,11714	1210,595	229,664	74,05
CLOROFORMIO	6,95465	1170,966	226,232	80,67
METANOL	7,76879	1408,360	223,60	40,73

COEFICIENTES BINÁRIOS DA EQUAÇÃO DE WILSON				
EXEMPLO 1	i	j	D_{ij}	D_{ji}
ACETONA (1)	1	2	140,084	-514,782
CLOROFORMIO (2)	1	3	-1263,801	7756,534
METANOL (3)	2	3	-43,313	989,072

EXEMPLO 2	CONSTANTES DE ANTOINE			VOLUME MOLAR
SUBSTANCIA	CANT A	CANT B	CANT C	V_b cm^3/mol
METANOL	7,76879	1408,360	223,60	40,73
ETANOL	8,11220	1592,864	226,184	58,69
ÁGUA	8,07131	1730,630	233,426	18,07
N-PROPANOL	7,74416	1437,686	198,463	75,14

COEFICIENTES BINÁRIOS DA EQUAÇÃO DE WILSON				
EXEMPLO 2	i	j	D_{ij}	D_{ji}
METANOL (1)	1	2	-51,9507	124,0399
	1	3	-66,3736	450,8741
ETANOL (2)	1	4	150,2057	-33,8819
	2	3	8028,806	770,285
ÁGUA (3)	2	4	137,135	-141,718
	3	4	1257,239	6569,395

EXEMPLO 3	CONSTANTES DE ANTOINE			VOLUME MOLAR
SUBSTANCIA	CANT A	CANT B	CANT C	V_b cm^3/mol
ETANOL	8,11220	1592,864	226,184	58,69
2-PROPANOL	8,87829	2010,330	252,636	76,92
ÁGUA	8,07131	1730,630	233,426	18,07

COEFICIENTES BINÁRIOS DA EQUAÇÃO DE WILSON				
EXEMPLO 3	i	j	D_{ij}	D_{ji}
ETANOL (1)	1	2	-28,622	112,886
2-PROPANOL (2)	1	3	674,599	868,589
ÁGUA (3)	2	3	937,957	1177,709

EXEMPLO 4	CONSTANTES DE ANTOINE			VOLUME MOLAR
SUBSTANCIA	CANT A	CANT B	CANT C	V_b cm^3/mol
ETIL-ACETATO	7,10179	1244,950	217,881	98,49
ETANOL	8,11220	1592,864	226,184	58,69
BUTIL-ACETATO	7,02845	1368,50	204,000	132,55

COEFICIENTES BINÁRIOS DA EQUAÇÃO DE WILSON				
EXEMPLO 4	i	j	D_{ij}	D_{ji}
ETIL-ACETATO (1)	1	2	1,9964	671,5589
ETANOL (2)	1	3	2416,207	-736,603
BUTIL-ACETATO (3)	2	3	623,290	175,4539

EXEMPLO 5	CONSTANTES DE ANTOINE			VOLUME MOLAR
SUBSTANCIA	CANT A	CANT B	CANT C	V_b cm^3/mol
ÁGUA	8,07131	1730,630	233,426	18,07
ETANOL	8,11220	1592,864	226,184	58,69
1-PROPANOL	7,74416	1437,686	198,463	75,14

COEFICIENTES BINÁRIOS DA EQUAÇÃO DE WILSON				
EXEMPLO 5	i	j	D_{ij}	D_{ji}
ÁGUA (1)	1	2	770,285	8028,806
ETANOL (2)	1	3	1257,239	6569,395
1-PROPANOL (3)	2	3	137,135	-141,718

EXEMPLO 6	CONSTANTES DE ANTOINE			VOLUME MOLAR
SUBSTANCIA	CANT A	CANT B	CANT C	V_b cm^3/mol
METIL-ACETATO	7,06524	1157,630	219,726	79,84
METANOL	7,76879	1408,360	223,600	40,73
ÁGUA	8,07131	1730,630	233,426	18,07

COEFICIENTES BINÁRIOS DA EQUAÇÃO DE WILSON				
EXEMPLO 6	i	j	D_{ij}	D_{ji}
METIL-ACETATO (1)	1	2	6,247	465,899
METANOL (2)	1	3	9046,689	1990,709
ÁGUA (3)	2	3	-464,936	902,980

EXEMPLO 7	CONSTANTES DE ANTOINE			VOLUME MOLAR
SUBSTANCIA	CANT A	CANT B	CANT C	V_b cm^3/mol
M-CICLOHEXANO	6,83900	1278,570	222,168	128,34
TOLUENO	6,95070	1342,310	219,187	106,85
FENOL	6,93051	1382,650	159,493	83,14

COEFICIENTES BINÁRIOS DA EQUAÇÃO DE WILSON				
EXEMPLO 7	i	j	D_{ij}	D_{ji}
M-CICLOHEXANO (1)	1	2	198,9630	-171,7550
TOLUENO (2)	1	3	-514,0650	2248,9150
FENOL (3)	2	3	-694,9640	2603,2490

EXEMPLO 8	CONSTANTES DE ANTOINE			VOLUME MOLAR
	SUBSTANCIA	CANT A	CANT B	CANT C
HEPTANO	6,89386	1264,370	216,64	147,47
TOLUENO	6,95087	1342,310	219,187	106,85
2-BUTANONA	7,06356	1261,340	221,969	90,17

COEFICIENTES BINÁRIOS DA EQUAÇÃO DE WILSON				
EXEMPLO 8	i	j	D_{ij}	D_{ji}
HEPTANO (1)	1	2	64,4582	187,3255
TOLUENO (2)	1	3	45,0122	1003,2634
2-BUTANONA (3)	2	3	265,7726	49,8132

EXEMPLO 9	CONSTANTES DE ANTOINE			VOLUME MOLAR
	SUBSTANCIA	CANT A	CANT B	CANT C
ACETONA	7,11714	1210,59497	229,664	74,05
METANOL	8,08097	1582,271	239,726	40,73
ÁGUA	8,07131	1730,630	233,426	18,07

COEFICIENTES BINÁRIOS DA EQUAÇÃO DE WILSON				
EXEMPLO 9	i	j	D_{ij}	D_{ji}
ACETONA (1)	1	2	-765,4210	2011,2170
METANOL (2)	1	3	1827,6650	1334,5360
ÁGUA (3)	2	3	-360,9040	626,9720

EXEMPLO 10	CONSTANTES DE ANTOINE			VOLUME MOLAR
SUBSTANCIA	CANT A	CANT B	CANT C	V_b cm^3/mol
ETANOL	8,11220	1592,864	226,184	58,68
1-PROPANOL	8,37895	1788,020	227,438	75,14
ÁGUA	8,07131	1730,630	233,426	18,07
ÁC. ACÉTICO	8,02100	1936,010	258,451	57,54

COEFICIENTES BINÁRIOS DA EQUAÇÃO DE WILSON				
EXEMPLO 10	i	j	D_{ij}	D_{ji}
ETANOL (1)	1	2	-129,533	215,222
	1	3	195,822	994,362
1-PROPANOL (2)	1	4	192,1403	-265,2895
	2	3	1576,665	1255,580
ÁGUA (3)	2	4	-1,6044	-24,3059
	3	4	658,8168	296,2875

NOMENCLATURA

- A_{ji} coeficientes matriciais para o cálculo da derivada de primeira ordem de acordo com o método da colocação ortogonal
- ANTA constante da equação de Antoine - equação (A.1)
- ANTB constante da equação de Antoine - equação (A.1)
- ANTC constante da equação de Antoine - equação (A.1)
- a_i coeficientes definidos na equação (3.12) e (3.14)
- C_{ji} coeficientes definidos pela notação matricial da primeira equação de (3.18)
- D vazão molar do destilado
- $D_{i,j}$ parâmetro de interação molecular da equação de Wilson - equação (A.3)
- d_i coeficientes definidos na equação (3.19)
- E^m eficiência de Murphree
- $E_{i,k}^m$ eficiência de Muphree do componente i no prato k .
- FATOR parâmetro da estimativa inicial do perfil de temperatura
- F_k vazão molar da alimentação no prato k
- $F_{i,l}^*$ função definida pela equação (4.23)
- $f(x)$ função genérica
- g equação diferencial genérica
- J matriz jacobiana definida pela equação (3.23)
- $K_{i,j}$ constante de equilíbrio líquido-vapor para o componente i no ponto de colocação j
- $K_{i,k}$ constante de equilíbrio líquido-vapor para o componente i no prato k
- L vazão molar de líquido

- L_j vazão molar de líquido no ponto de colocação j
 L_k vazão molar de líquido que deixa o prato k
 n número de pratos da coluna
 N número de pontos internos de colocação empregados
 NC número total de componentes na mistura
 ORP parâmetro definido pela equação (2.1)
 P pressão de operação da coluna
 $P_{i,k}^{sat}$ pressão de saturação do componente i no prato k
 $P_N(x)$ polinômio definido pela equação (3.8)
 Q_{ji} coeficientes definidos pela notação matricial da equação (3.17)
 R vazão molar do produto de fundo
 $R(x, y_N)$ residuo definido pela equação (3.3)
 T temperatura
 $u_{i,k}$ função definida pela equação (4.13)
 V vazão molar de vapor
 Vb_i volume molar do componente i
 V_j vazão molar de vapor no ponto de colocação j
 V_k vazão molar de vapor que chega ao prato k
 x variável independente
 $x_{i,j}$ fração molar do componente i no líquido no ponto de colocação j
 $x_{i,k}$ fração molar do componente i no líquido no prato k
 y função genérica
 $y_{i,j}$ fração molar do componente i no vapor no ponto de colocação j
 $y_{i,k-1}$ fração molar do componente i no vapor no prato k

$y_{i,k-1}^*$ fração molar do componente i no vapor em equilíbrio com o líquido do prato k

y_N polinômio definido pela equação (3.2)

W_k retirada lateral molar no prato k

$W_{i,j}^*$ função definida pela equação (4.23)

W_j função ponderação

z variável espacial (altura)

$z_{i,k}$ fração molar do componente i na alimentação do prato k

letras gregas

α parâmetro do polinômio de Jacobi

ρ parâmetro do polinômio de Jacobi

η parâmetro representado pela equação 3.32

Δz altura de um estágio

γ_i coeficiente de atividade do componente i

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AMUNDSON, N.R. et alii. Multicomponent Distillation a Large Digital Computer. A.I.Ch.E. Journal, 5(3) : 295-300, 1958.

BROYDEN, C.G. A Class of Methods for solving Non-Linear Simultaneous Equations. Mathematics of Computation, 19 : 577-93, 1965.

CARNAHAM, B. et alii. Applied Numerical Methods. New York, John Wiley & Sons, Inc., 1969.

CHO, Y.S. and JOSEPH, B. Reduced-Order Steady-State and Dynamic Models for Separation Processes. Part I. Development of the Model Reduction Procedure. A.I.Ch.E Journal, 29(2) : 261-9, 1983a.

CHO, Y.S. and JOSEPH, B. Reduced-Order Steady-State and Dynamic Models for Separation Processes. Part II. Applications to Nonlinear Multicomponent Systems. A.I.Ch.E. Journal, 29(2) : 270-6, 1983b.

CHO, Y.S. and JOSEPH, B. Reduced-Order Models for Separation Columns - III. Applications to Columns with Multiple Feeds and Sidestreams. Computers & Chemical Engineering, 8(2) : 81-90, 1984.

FINLAYSON, B. A. Nonlinear Analysis in Chemical Engineering. New York, McGraw-Hill, Inc., 1980.

FREDENSLUND, A. et alii. Vapor-Liquid Equilibria Using UNIFAC. A Group-Contribution Method. Amsterdam, Elsevier Scientific Publishing Company, 1977.

FRIDAY, J.R. and SMITH, B.D. An Analysis of the Equilibrium Stage Separations Problem - Formulation and Convergence. A.I.Ch.E. Journal, 10(5) : 698-707, 1964.

GEMEHLIG, J. and ONKEN, U. Vapour-Liquid Equilibrium Data Collection, Dechema Chemistry Data Series (1977).

HIROSE Y., KAWASE Y., SAMPEI K. and KAWAI T. A New Approach to Distillation Column at Total Reflux. Computers and Chemical Engineering, 4(2) : 133-38, 1980.

KING, J. C. Separation Processes. New York, McGraw-Hill, Inc. 1980.

KINOSHITA M., HASHIMOTO I. and TAKAMATSU T. A New Simulation Procedure for Multicomponent Distillation Column Processing Nonideal Solutions or Reative Solutions. Journal of Chemical Engineering of Japan, 16(5) : 370-77, 1983.

LEWIS, W.K. and MATHESON, G.L. Design of Rectifying Columns for Natural and Refinery Gasoline. Industrial and Engineering Chemistry, 24(5) : 494-98, 1932.

LISTER, W. N. et alii. Figure Distillation this New Way. Part 1 New Convergence Method will Handle Many Cases. Petroleum Refiner, 38(6) : 221-30, 1959.

MCCABE, W. L. and THIELE, E. W. Graphical Design of Fractionating Columns. Industrial and Engineering Chemistry, 17 : 605-11, 1925.

MORI H., YAMADA I., TSUIKI T. and HIRAOKA S. Multicomponente Distillation Calculation by a Successive Relaxation Method Using a Finite Difference Approximation. Journal of Chemical Engineering of Japan, 20(5) : 460-67, 1987.

NAPHTALI, L. M. and SANDHOLM, D. P. Multicomponente Separation Calculations by Linearization. A.I.Ch.E Journal, 17(1) : 148-53, 1971.

PINTO, J. C. and BISCAIA Jr., E. C. Order Reduction Strategies for Models of Staged Separation Systems. Computers and Chemical Engeneering, 12(8) : 821-31, 1988.

PRAUSNITZ, J.M. Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria. New Jersey, Prentice-Hall, Inc. 1969.

RAVAGNANI, S. P. Modelos de Ordem Reduzida para Processos de Separação por Destilação Multicomponente em Colunas de Pratos. Aplicação a sistemas Complexos. Tese de Doutorado, USP, 1988.

REID, R. C. et alii. Properties of Gases and Liquids. New York, McGraw-Hill, Inc. 1977.

SRIVASTAVA, R. K. and JOSEPH, B. Reduced-Order Models for Separation Columns-V. Selection of Collocation Points. Computers and Chemical Engineering, 9(6) : 601-13, 1985.

SRIVASTAVA, R. K. and JOSEPH, B. Reduced-Order Models for Separation Columns-IV. Treatment of Columns with Multiple Feeds and Sidestreams Via Spline Fitting. Computers and Chemical Engineering, 11(2) : 159-64, 1987a.

SRIVASTAVA, R.K. and JOSEPH, B. Reduced-Order Models for Separation Columns-VI. Columns with Steep and Composition Profiles. Computers and Chemical Engineering, 11(2) : 165-76, 1987b.

STEWART W. E., LEVIEN K. L. and MORARI, M. Simulation of Fractionation by Orthogonal Collocation. Chemical Engineering Science, 40(3) : 409-21, 1985.

SZEGŐ, G. Orthogonal Polynomials. American Mathematical Society, Providence, 1939.

THIELE, E. W. and GEDDES, R. L. Computation of Distillation Apparatus for Hydrocarbon Mixtures. Industrial and Engineering Chemistry, 25(3) : 289-95, 1933.

TOMICH, J. F. A New Simulation Method for Equilibrium Stage Processes. A.I.Ch.E Journal, 16(2) : 229-32, 1970.

TSUBOKA T. and KATAYAMA T. An Improved Algorithm for Solving Distillation Problems. Journal of Chemical Engineering of Japan, 10(5) : 379-84, 1977.

VILLADSEN, J. Selected Approximation Methods for Chemical Engineering Problems. Lyngby, Danmarks Tekniske Højskole, 1970.

VILLADSEN, J. and MICHELSEN, M. L. Solution of Differential Equation Models by Polynomial Approximation. New Jersey, Prentice-Hall, Inc., 1978.

WANG, J. C. and HENKE, G. E. Tridiagonal Matrix for Distillation. Hydrocarbon Processing, 45(8) : 155-63, 1966.

WONG, K. T. and LUUS, R. Model Reduction of High-Order. Multistage Systems by Method of Orthogonal Collocation. The Canadian J. of Chemical Engineering, 58 : 382-88, 1980.