SIMULACION DE PROCESOS DE SEPARACION POR MODELOS DE ORDEN REDUCIDO. PARTE I: METODOLOGIA GENERAL. SISTEMAS IDEALES. SISTEMAS NO IDEALES CON UNA SOLA FASE LIQUIDA

Ernesto C. Martínez Ramón L. Cerro INGAR - Instituto de Desarrollo y Diseño Avellaneda 3657 3000 - Santa Fe-Argentina

RESUMEN

En este trabajo se analizan las propiedades relevantes de un méto do de simulación por modelos de orden reducido usando aproximación polinomial directa: tipo de polinomios de interpolación y esquema de colocación. Los importantes resultados obtenidos muestran las propiedades requeridas para las funciones de interpolación y el esquema óptimo de colocación.

ABSTRACT

In this paper are analyzed the most important properties of a Simulation Method by reduced order models using direct polynomial approximation: kind of interpolation polynomials and collocation schemes.Valuable results obtained shown the requirements for the interpolation functions and for an optimal collocation scheme.

INTRODUCCION

A pesar de los valiosos avances que se han logrado en los últimos años en simulación de procesos de separación (en especial de estado es tacionario), existen ciertas aplicaciones (tales como síntesis, diseño, control, optimización en línea, etc.) donde múltiples simulaciones son requeridas y los métodos plato-a-plato dan consumos de tiempo computacional excesivos. Por otra parte en este tipo de aplicaciones la rigurosidad de los métodos plato-a-plato no es necesaria y alguna pérdida de exactitud es tolerable. Tradicionalmente se ha apelado a simplifica ciones que transforman los modelos rigurosos en lineales, de los cuales se derivan técnicas tipo short-cut [1], [2]. La principal desven taja de este tipo de tratamiento es la considerable pérdida de informa ción originada por la transformación matemática del modelo. Con el fin de remediar este problema ha evolucionado la idea de que una columna se separación puede ser aproximada como un Sistema distribuido en el cual los perfiles de caudal y temperatura puedan ser representados como variables continuas a lo largo de la columna. Esta representación del problema permite aproximar las variables de destado del problema por polinomios de interpolación y sobre esta base numerosos métodos de reducción han sido propuestos.

La mayor parte de las técnicas utilizan como paso previo a la obtención del modelo reducido la formulación de ecuaciones diferenciales parciales que representan el modelo distribuido de la columna. En [3] se utiliza esta aproximación para obtener la respuesta de una columna de destilación binaria a través del uso de la transformación de Laplace. En [4]y [5] se muestra que muchos tipos de ecuaciones diferenciales pue den ser obtenidos para un sistema por etapas. En [6] usa esta metodología para obtener la respuesta aproximada de una columna de extracción y más recientemente en [7] se ha propuesto un método de colocación ortogonal aplicable a un tipo especial de problema.

Como ha notado Cho [8] no es necesario desarrollar las ecuaciones diferenciales parciales asociadas para aplicar el procedimiento de apro ximación polinomial, más aún resultaría más conveniente aplicar directa mente la aproximación polinomial. En este trabajo se generaliza el méto do directo propuesto en [8], [9], [10], [11] con la intención de investigar dos aspectos fundamentales de la metodología:

i) Propiedades de los polinomios de interpolación que permiten al modelo reducido verificar los balances de materia en estado estacionario.

ii) Optimización del esquema de colocación.

2. FUNDAMENTOS DE LA METODOLOGIA

Un detallado tratamiento de la metodología de reducción por aproximación polinomial directa se da en [8], aquí la técnica se generaliza con el fin de estudiar aquellos aspectos sometidos a estudio. Consideramos el balance de materia alrededor del j-ésimo plato como se muestra en la fig. l:

$$M_{j} \frac{dX_{j}}{dt} = (LX - V_{y})_{j-1} - (LX - V_{y})_{j}$$
(2.1)

donde N es el número de platos de una columna de destilación binaria isotérmica con M, L y V constantes (el caso más general es tratado en [8]y [11]. El conjunto de ecuaciones (2.1) contiene N variables de estado que deben ser determinadas para describir el perfil de concentraciones a lo largo de la columna. Con el fin de reducir la dimensio nalidad del problema, aceptemos que el perfil de concentraciones X pue de expresarse en función de una Variable continua Z y del tiempo, según:

$$X = X (Z,t)$$
 (2.2)

donde $0 \le Z \le 1$, es una longitud adimensional; podemos aproximar X por:

$$X \simeq X_{n+1} = \sum_{k=1}^{n+1} P_k(Z) x_k(t)$$
(2.3)

donde los P_k(Z) son polinomios de interpolación, de cuyas caract<u>e</u> rísticas y propiedades depende en gran medida las cualidades de los mo delos reducidos; x_k(t) representa x_k evaluada en el punto Z_k en función del tiempo. Reemplazando en (2.1):

$$M \left(\frac{dx}{dt}\right)_{zj} = (LX - Vy)_{Zj-\Delta Z} \quad (LX - Vy)_{Zj} \quad (2.4)$$

$$j = 1, 2, \dots, N$$

donde ΔZ es la distancia entre platos. Un modelo reducido puede obtenerse asumiendo que (2.4) se cumple en n puntos arbitrarios Z, y usando dos condiciones extremas (condiciones de entrada de las corrientes), siendo n << N. La exactitud de la aproximación se ve mejorada si se se lecciona a los puntos Z, como zeros de polinomios ortogonales [8]y [12]

Sustituyendo (2.3) en (2.4):

$$M \frac{d}{dt} \left(\sum_{k=1}^{n+2} P_{k} (Z) x_{k} \right) |_{Z} = Z_{j} = (2.5)$$

$$= \sum_{k=1}^{n+2} [P_{k} (Z_{j} - \Delta Z) - P_{k} (Z_{j})] (LX_{k} - Vy_{k})$$

Si los polinomios de interpolación satisfacen la propiedad (como por ej. los polinomios de Lagrange):

$$\sum_{k=1}^{L} P_{k} (Z) X_{k} | Z = Z_{j} = X_{j}$$
(2.6)

El modelo reducido (2.5) puede escribirse en forma más compacta:

$$M \frac{dx_{j}}{dt} \Big|_{Z=Z_{j}} = \sum_{k=1}^{n+2} \Big[P_{k} (Z_{j} - \Delta Z) - P_{k} (Z_{j}) \Big] (Lx_{k} - Vy_{k})$$
(2.7)

y llamando;

$$A_{jk} = P_k(Z_j - \Delta Z) - P_k(Z_j)$$
 (2.8)



con lo cual el modelo reducido:

$$M \frac{dx_{j}}{dt} = \sum_{\substack{k=1\\ j \in \mathbb{Z}^{n+2}}} A_{jk} (Lx_{k} - Vy_{k})$$
(2.9)

$$j = 2, 3, ..., n+2$$

Para este caso isotérmico, el modelo reducido se completa escribiendo la forma reducida de la reducción de equilibrio. La condición de equi librio en el j-ésimo plato es:

$$y_{j} = K x_{j+1}$$
(2.10)

donde K es la constante de equilibrio a la temperatura del sistema. A partir de (2.6):

$$y_{j} = K \sum_{k=1}^{n+2} P_{k} (Z_{j} + \Delta Z) x_{k}$$
(2.11)

o en forma compacta:

$$y_{j} = \sum_{k=1}^{n+2} B_{jk} x_{k}$$
(2.12)

(2.9) y (2.12) constituyen el modelo reducido para una columna de destilación binaria isotérmica con M, L y V constantes.

Como han notado Cho et.al [10] una de las desventajas de la metodología de aproximación polinomial directa es la dicontinuidad que se presentan en los perfiles de caudales, concentración y temperatura ante el ingreso (o extracción) de corrientes másicas o energéticas (véase fig.2).

Si bien varias alternativas son disponibles para remediar el problema (Uso de funciones"spline"como método de ajuste, [12]), la redefi nición de variables que mantienen la continuidad a lo largo de la columna [11], parece ser más apropiado en este caso.



Supongamos que la columna isotérmica que se muestra en la fig.3 ingresa, en el plato f, una alimentación totalmente líquida con caudal F, y composición Z. Las ecuaciones que describen el comportamiento di nâmico de la columna son:

$$M_{j} \frac{dx_{j}}{dt} = (L_{o} x_{j-1} - V_{o} y_{j-1}) - (Lx_{j} - V_{o} y_{j}) \quad (2.13.a)$$

j = 1,2,...,f-1

$$M_{j} \frac{dx_{j}}{dt} = (L_{0} x_{j-1} - V_{0} y_{j-1}) - (L_{1} x_{j} - F_{1} Z_{1})$$
(2.13.b)
 $j = f$

$$M_{j} \frac{dx_{j}}{dt} = (L_{1} x_{j-1} - V_{1} y_{j-1}) - (L_{1} x_{j} - V_{1} y_{j}) \quad (2.13.c)$$
$$j = f+1, \dots, N$$

$$j = f+1,...$$

las ecuaciones (2.13.c) pueden reescribirse como:

$$M_{j} \frac{dx_{j}}{dt} = (L_{1} x_{j-1} - V_{1} y_{j-1} - F_{1}Z_{1}) - (L_{1}x_{j} - V_{1}y_{j} - F_{1}Z_{1})$$
(2.14)

Definiendo una nueva variable tal que:

$$U_{j} = \begin{cases} L_{o}x_{j} - V_{o}y_{j} ; Si, j = 0, ..., f-1 \\ L_{1}x_{j} - V_{1}y_{j} - F_{1}Z_{1} ; Si, j = f_{1}..., N \end{cases}$$
(2.15)

en función de esta nueva variable, las ecuaciones (2.13) pueden reescribirse como: dx,

$$M_{j} \frac{du_{j}}{dt} = U_{j-1} - U_{j}, \ j = 1, \dots, N$$
 (2.16)

es importante remarcar que U es una variable continua que no posee abruptas variaciones como Lx o Vy a pesar del ingreso o extracción de corrientes. Utilizando el procedimiento de aproximación polinomial:el modelo reducido puede escribirse en función de U, como:

$$M_{j} \frac{dx_{j}}{dt} = \sum_{k=1}^{n+2} A_{jk} U_{k}, j = 2,...,n+2 \qquad (2.17)$$

llamando ni a los puntos que están por encima de la alimentación:

$$U_{k} = L_{0} \cdot x_{k} - V_{0} \cdot y_{k}, \quad k = 1, 2, ..., n1$$

= $L_{1} \cdot x_{k} - V_{1} \cdot y_{k} - F_{1}Z_{1}, \quad k = n1+1, ..., n+2$

3. LOS POLINOMIOS DE INTERPOLACION Y EL BALANCE DE MATERIA

Como se muestra en [9] el método de reducción de modelo propuesto en [7] no verifica la condición física del balance de materia en estado estacionario, lo cual puede provocar severas dificultades, principalmente en caso de sistemas fuertemente no-lineales. En esta sección se muestran las propiedades de los polinomios de interpolación que los hacen aptos para verificar el balance de materia. Si en (2.9) ó (2.17) se aplica la condición de estado estacionario:

o en forma expandida:

$$\begin{array}{l} n+2 \\ \Sigma & Aj_k & U_k + A_{j1} & U_1 = 0 \\ k=2 & k & j1 & 1 \end{array} , \quad j = 2, \dots n+2 \quad (3.2)$$

como se sugiere en [8], las ecuaciones (3.1) δ (3.2) pueden ser vistas como (n+1) ecuaciones con (n+1) incógnitas, que en forma compacta:

$$\underset{\approx}{\mathbf{B}} \underbrace{\mathbf{y}}_{1} + \underbrace{\alpha}_{2} \mathbf{u}_{1} = \mathbf{0} \tag{3.3}$$

donde:

$$\mathbf{B} = \begin{vmatrix} \mathbf{A}_{22} & \mathbf{A}_{23} & \cdots & \mathbf{A}_{2,n+2} \\ \mathbf{A}_{32} & \mathbf{A}_{33} & \cdots & \mathbf{A}_{3,n+2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ \mathbf{A}_{n+2,2} & \mathbf{A}_{n+2,3} & \mathbf{A}_{n+2,n+2} \end{vmatrix}, \qquad \underline{\alpha} = \begin{vmatrix} \mathbf{A}_{21} \\ \mathbf{A}_{31} \\ \vdots \\ \mathbf{A}_{n+2,1} \end{vmatrix}, \qquad \underline{U} = \begin{vmatrix} \mathbf{U}_{2} \\ \mathbf{U}_{3} \\ \vdots \\ \mathbf{U}_{n+2} \end{vmatrix}$$

Cualquiera sea el tipo de polinomios de interpolación debe existir una $\psi(Z)$, tal que:

$$r^{+2}$$

 $\Sigma P_{k}(Z) = \psi(Z), \quad 0 \le Z \le 1$ (3.4)
 $j=1$

derivando ec. (3.4):

evaluando (3.5) en un punto Z cualquiera del intervalo $0 \le Z \le 1$:

$$\begin{array}{c|c} \mathbf{n+2} & \mathbf{P}_{\mathbf{k}} & (\mathbf{Z}) \\ \Sigma & \mathbf{d} & \mathbf{k} \\ \mathbf{k-1} & \mathbf{d} & \mathbf{Z} \end{array} \right|_{\mathbf{Z}=\mathbf{Z}_{j}} = \psi' (\mathbf{Z}_{j}) , j = 2, \dots, n+2 \quad (3.6)$$

pero según se muestra en Apéndice 1,

$$\frac{d}{dz} \frac{P_k(z)}{z} = A_{jk}$$
(3.7)

con lo cual (3.6) puede escribirse:

$$\underline{B} \cdot \underline{1} + \underline{\alpha} = \underline{\psi}^{\dagger}$$
 (3.8)

donde:

$$\underline{1}_{\underline{1}}^{T} = [1, 1, ..., 1], \quad (\underline{\psi}')^{T} = [\psi'(Z_{1}), \psi'(Z_{2}), ..., \psi'(Z_{n+2})]$$

Combinando (3.3) y (3.8):

$$\underset{\approx}{\underline{B}} \underbrace{\underline{u}}_{} + (\underbrace{\psi}' - \underbrace{\underline{B}}_{}, \underbrace{1}) u_{,} = 0 \qquad (3.9)$$

$$\underset{\approx}{B} (\underline{u} - \underline{1} \ u_{1}) + \underline{\psi} \ u_{1} = \underline{0}$$
 (3.10)

pero la condición de estado estacionario exige que:

ψ

$$U_1 = U_1$$
, $i = 2, 3, ..., n+2$
 $U_i = 1, U_i = 0$ (3.11)

y de (3.10):

ó

puesto que $U_1 \neq 0$, $\psi' = 0$

de donde:

(Z) = CONSTANTE = ,
$$0 \le Z \le 1$$

reemplazando en (3.4):

n+2

$$\Sigma P_{k}(Z) = CTE. 0 \le Z \le 1$$
 (3.13)
k=1

(3.12)

y es obvio a partir de (3.13) que la propiedad buscada es que los poli nomios puedan representar una función constante o sea que posean el término independiente. Así por ejemplo los polinomios de Lagrange L satisfacen:

$$\begin{array}{l} n+2\\ \Sigma & L_k(Z) = 1, \quad 0 \le Z \le 1\\ k=1 \end{array}$$

y por lo tanto serán aptos para verificar el balance de materia de estado estacionario.

4. ESQUEMA OPTIMO DE COLOCACION

Como se hace notar en [8] y [12] considerables mejoras pueden obte nerse si los puntos de colocación se eligen como zeros de polinomios ortogonales. En esta Sección se analiza la forma "óptima de colocación tomándo como base la familia bi-paramétrica de polinomios ortogonales de Jacobi, cuya condición de ortogonalidad está dada por:

$$P_{i} (2) P_{j}(2) (1-2)^{\alpha} z^{\beta} dz = C_{i}^{(\alpha,\beta)} \delta_{ij}$$
(4.1)

donde δ_{ii} es la delta de Kronecker y:

$${}^{(\alpha,\beta)}_{C_{i}} = \int_{0}^{1} {}^{(\alpha,\beta)}_{P_{i}} {}^{(\alpha,\beta)}_{(2)} {}^{(\alpha,\beta)}_{P_{i}} {}^{(2)}_{(2)} {}^{(1-2)^{\alpha}}_{Z^{\beta}} {}^{dZ}$$

$$(4.2)$$

Debido a la dimensionalidad del modelo reducido, identificamos dos per files (véase fig. 4):

i) perfil exacto x(Z)

1

ii) perfil aproximado por interpolación polinomial, $x_{n+1}(Z)$.

Si
$$x_{n+1}(Z)$$
 es una buena aproximación a X(Z) debe cumplirse:

$$\int_{0}^{1} x_{n+1}(Z) dZ \cong \int_{0}^{1} X(Z) dZ \qquad (4.3)$$

o con respecto a una función de "peso" cualquiera, w(Z):

$$\int_{0}^{1} w(Z) x_{n+1}(Z) d_{Z} \stackrel{\simeq}{=} \int_{0}^{1} w(Z) X(Z) dZ$$

Elegimos como w (Z):

$$w(Z) = Z^{\beta} (1-Z)^{\alpha}$$
, $(\alpha \beta) > -1$ (4.4)

El primer miembro de (4.3) puede expresarse como un producto escalar de dos vectores en la siguiente forma [12]:

$$\int_{0}^{1} \mathbf{w}(\mathbf{Z}) \mathbf{x}_{n+1} (\mathbf{Z}) d\mathbf{Z} = \sum_{k=1}^{n+2} \mathbf{x}_{k} \int_{0}^{1} \mathbf{P}_{k}(\mathbf{Z}) \mathbf{w}(\mathbf{Z}) d\mathbf{Z}$$
(4.5)

Si $P_k = L_k$:

$$\begin{cases} 1 & \mathbf{w}(\mathbf{Z}) & \mathbf{x}_{n+1} & (\mathbf{Z}) & d\mathbf{Z} = \mathbf{w}^{\mathrm{T}} \\ \mathbf{x} & (4, 6) \end{cases}$$

donde:

$$\mathbf{w}_{i} = \frac{(2n + \alpha + \beta + 5) \frac{C_{n+2}}{(\alpha, \beta)}}{\left(\alpha, \beta\right)}$$

$$\mathbf{x}_{i} (1 - \mathbf{x}_{i}) \left[(P_{n+2} (\mathbf{x}_{i})) \right]^{2}$$
(4.7)

1. 0.

- 217 -



El segundo miembro de 2.3 puede obtenerse a partir de información adicional, como por ejemplo el perfil completo en la columna para un caso bajo estudio, en este caso:

$$\int_{0}^{1} \frac{N}{w(Z)X(Z)} \frac{dZ}{dZ} \stackrel{\approx}{\simeq} \frac{N}{\Sigma} \underset{k=0}{W_{i}} \underset{k}{X_{k}(Z)} = I \qquad (4.8)$$

Al analizar la expresión de w. comprobamos que tenemos como variables independientes: $\alpha, \beta \ y \ x_k$, $k = {}^i 1, 2, \dots, n+2$. Si además especificamos que los x_ están evaluados en Z. que son ceros de los polinomios de Jacobi; qudan como variables del esquema de colocación $\alpha \ y \beta$ que pueden determi narse a partir de:

$$\min \{ \mathbf{w}^{\mathrm{T}} \mathbf{x} - \mathbf{I} \}$$
(4.9.a)

sujeto a
$$\alpha > -1$$
 (4.9.b)

$$\beta > -1 \qquad (4.9.c)$$

5. SISTEMAS IDEALES

Un sistema ideal compuesto de propano y N-Butano fue estudiado, las condiciones para este ejemplo se dan en [9]. En la tabla I se comparan los perfiles "rigurosos" con lo obtenidos por el método reducido con distintos esquemas de colocación; las columnas 3^2 y 4^2 corresponden a los resultados previamente obtenidos en [9]tomando $\alpha = \beta = 1$; las columnas 5^2 y 6^2 corresponden a $\alpha = 1$ y $\beta = 3$. Como se aprecia de la tabla y de la fig. 5 existe muy poca sensibilidad del esquema de colocación con α y solo una ligera sensibilidad con β . β^* óptimo parece ser próximo a 3, lo cual podría interpretarse de la siguiente forma: para un α dado el aumento de β permite ubicar más puntos de colocación hacia el final de la columna (lo cual es beneficioso en este caso), no obstante β no pude aumentar demasiado puesto que en ese caso la información de la parte superior de la columna no sería utilizada.

Estudios dinámicos con los modelos de orden reducido para este ejemplo han sido llevados a cabo con C.S.M.P.[13]. En la fig. 6 se mues tran las respuestas a un escalón en la alimentación líquida para la si mulación rigurosa y de orden reducido con $\alpha = 1$ y $\beta = 3$.



f	i	g.	6
_	_	-	-

TABLA I. perfiles de estado estacionario del ejempl	LO .	1.
---	------	----

	modelo riguroso [9]*		modelo reducido [9]		modelo reducido óptimo	
plato Nº	X1	L	<u></u> X1	L	<u>X1</u>	L
ent rada	0.98	21.0	0.98	21.0	0.98	21.0
1	0.95905	20.7436	0.97913	20.8192	0.97545	20.7832
2	0.97738	20.7432	0.97853	20.7257	0.97934	20.7393
3	0.97382	20.7422	0.97578	20.6993	0.96690	20.7298
4	0.96634	20.7387	0.96716	20.7117	0 .95068	20.7264
5	0.95092	20.7268	0.95065	20.7265	0.9488	20.7014
6	0.92039	20.6848	0.91994	20.6992	0.92000	20.6899
7	0.86458	20.5516	0.87041	20.5772	0.8688	20.5701
8	0.77577	20.2118	0.79615	20.3000	0.7814	20.2800
9	0.66100	19.5843	0.69054	19.7989	0.6840	18.6 9 73
10	0.54632	18.9974	0.54627	1 8.9 972	0.54630	18.9972

* fuente de la información

El ejemplo 2 consiste también de una mezcla ideal de propano y N-butano pero, con una corriente de alimentación intermedia en aproximadamente la mitad de la columna. En este caso la dependencia con el número de puntos de colocación y el esquema de colocación se hace más apreciable, fig. 7. Las condiciones de operación de este ejemplo se dan en [11]



6. SISTEMAS NO IDEALES

El ejemplo en este caso consiste de 4 componentes (metanol, aceto na, etanol y agua). El problema ha sido tomado de Holland [14] y consiste en una columna de 40 platos con alimentación en los platos 5 y 20. Las condiciones de operación para este ejemplo se dan en [11]. Las figuras 8 y 9 muestran el comportamiento de los modelos reducidos y ri gurosos, y en la tabla II se reportan los tiempos de CPU para algunas corridas de estos tres ejemplos.



Tabla II. Comparación de tiempos de CPU (ejemplo 3)

perturbación	Tiempo simulado	modelo riguroso	modelo reducido	
l mol/min	30 minutos de ope- ración de la columna	50 min	4 min	

7. Conclusiones

Sin intentar ser un sustituto de la simulación rigurosa plato-aplato, la metodología de simulación reducida permite hoy una utilización más efectiva y económica del computador en síntesis, diseño, control, etc. Los tiempos de C.P.U. muestran una drástica reducción del consumo que avalan su potencialidad. No obstante, y debido a la discri minación de la cantidad de información disponible, no es posible mejo rar indefinidamente la calidad de los modelos reducidos. Los esfuerzos se orientan hoy a una optimización del uso de la información reducida, la cual puede hacerse buscando grupos de funciones de interpolación más flexible y esquemas de colocación estratégicamente elegidos. Así por ejemplo el uso de polinomios de interpolación inversos parece presentar ventajas que serán presentadas en una futura publicación.

BIBLIOGRAFIA

- [1] Waller, K.V, "Simple Models for distillation Dynamics", trabajo pre sentado en el congreso del AICHE, Houston, Abril 1979.
- 2 Weigand, W.A., Jhawar A.K. y Williams T.J., "Calculation method for the response time to step inputs for approximate Dynamic models for distillation columns", AICHE J., Vol 18, N² 6, 1972, pag. 1243
- 3 Wilkinson, W.I., Armstrong, W.D., "An Approximate method for predicting composition response of a fractionating Column", Chem.Eng. Sci, Vol 7, 1958, Nº 1.
- 4 Holt, A.V., "Simplified Approximations to countercurrent stage processes", M.S. thesis, Case Western Reserve, 1966.
- 5 Ballard, D., Brosilow C.B., Kahn C., "Dynamic Simulation of multicomponent distillation columns", trabajo N^o 42a, Congreso del AICHE en Miami, Nov. 1978.
- 6 Friedly, J.C., "Dynamic Behaviour of Processes", Prentice Hall, N.J, 1972.
- 7 Wong, K.T., Luus R., "Model reduction of high-order multistage sys tems by the method of orthogonal collocations", Can J. Chem.Eng., Vol 58, 1980, pág. 382.
- 8 Cho Y.S., "Reduced order models for separation processes", D.Sc. Thesis.
- 9 Cho Y.S. y Joseph B., "Reduced order steady state and Dynamic models for separation processes, Part I: development of the model reduction procedure", AICHE J., Vol 29, 1983, pág. 261.
- 10 Cho Y.S. y Joseph B., "Reduced order steady-State and dynamic models for separation processes. Parte II: Application to multicomponent distillation", AICHE J., Vol 29, 1983, pág. 270.
- 11 Cho Y.S. y Joseph B,, "Reduced-order Models for Separation columns part III: Application to columns with multiple feeds and sidestreams" comp. and Chem.Eng. Vol 8, 1984, pág. 81-90.
- 12 Villadsen, J. y Michelsen M., "Solutions of differential equation

models by polynomial approximation", Prentice Hall, N.J., 1978.

[13] Continuos system modelling program (C.S.M.P.), User's Manual', International Business Machine Corporation.

· Apéndice I: expresión 3.7

Un modelo de parámetros distribuido para la columna régida por las ecuaciones (2.1) y (2.10) puede obtenerse de la siguiente forma, [9]: se asume que x e y son variables contínuas de la variable espacial Z, de forma tal que una aproximación de primer orden del tipo (I.1) y (I.2) puede escribirse:

$$\mathbf{x}_{j-1} = \mathbf{x}_j - \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{z}} \quad \Delta \mathbf{z}$$
 (I.2)

$$y_{j-1} = y_j - \frac{\partial y}{\partial Z} \quad \Delta Z$$
 (1.2)

siendo $\triangle Z$ la "altura de una etapa". Reemplazando en (2.1) y (2.10), se obtiene el modelo de parámetro distribuido:

$$M \frac{\partial x}{\partial t} = V \frac{\partial y}{\partial Z} - L \frac{\partial x}{\partial Z}$$
(1.3)

$$y = K x + \frac{\partial y}{\partial z} \Delta z \qquad (1.4)$$

donde M es el holdup por unidad de longitud de columna, M = M./ ΔZ . To-mando L y V como constantes, estado estacionario y recordando^jque:

$$\mathbf{x}(\mathbf{Z},\mathbf{t}) = \sum_{\substack{\Sigma \\ \mathbf{k}=1}}^{\mathbf{n+2}} \mathbf{P}_{\mathbf{k}}(\mathbf{Z}) \mathbf{x}_{\mathbf{k}}(\mathbf{t})$$

(I.3) puede escribirse para un dado Z.:

$$0 = V \left(\frac{\partial y}{\partial z} \right)_{z=z_j} - \sum_{k=1}^{n+2} L \left(\frac{\partial \tilde{P}_k}{\partial z} \right)_{z_j} \mathbf{x}_k (t)$$
(1.5)

 $(\frac{\partial y}{\partial Z})$ se obtiene de (I.4); despreciando los términos Z=Z, de 2[°] orden en adelante:

$$0 = \sum_{k=1}^{n+2} (L \mathbf{x}_{k}(t) - k \nabla \mathbf{x}_{k+1}(t)) \left(\frac{\partial \mathbf{P}_{k}}{\partial \mathbf{Z}}\right)_{\mathbf{Z}=\mathbf{Z}_{j}}$$
(I.6)

$$= \sum_{k=1}^{n+2} (L x_{k}(t) - Vy_{k}) \left(\frac{\partial P_{k}}{\partial Z}\right)_{Z=Z_{i}}$$
(1.7)

y comparando con 2.9 para estado estacionario:

$$\mathbf{A}_{jk} \left(\frac{\partial \mathbf{P}_{k}}{\partial \mathbf{Z}} \right) \mathbf{Z} = \mathbf{Z}_{j}$$
(1.8)