



Evaluación de Técnicas de Reducción de Sistemas de Ecuaciones Diferenciales Ordinarias

Gustavo E. Vazquez

Departamento de Ciencias de la Computación - Universidad Nacional del Sur
Av. Alem 1253 - (8000) - Bahía Blanca - ARGENTINA
e-mail: gvazquez@criba.edu.ar

Pedro E. Ugrin, Néhida B. Brignole¹

Departamento de Matemática - Universidad Nacional del Sur
Planta Piloto de Ingeniería Química - UNS - CONICET
12 de Octubre 1842 - (8000) - Bahía Blanca - ARGENTINA
e-mail: dybrigno@criba.edu.ar

Resumen: Se ha realizado un estudio del desempeño de dos técnicas para reducción de sistemas de ODEs: la de compartimentación y la de autovalores dominantes. La primera técnica permite incorporar no linealidades en el modelo reducido, lo cual posibilita analizar configuraciones complejas. Por esta razón, se propusieron mejoras para la selección de los compartimientos, la identificación de las variables sensibles y el cálculo de las no sensibles en base a conceptos extraídos de la técnica de autovalores dominantes. Para facilitar el análisis y comparación de sistemas, técnicas y resultados y permitir la experimentación con distintos integradores numéricos, se desarrolló en Visual Basic 3.0 un entorno general con una interfase amigable.

1. Introducción

La resolución simultánea de conjuntos de ecuaciones diferenciales ordinarias (ODEs) puede demandar una cantidad prohibitiva de tiempo de cómputo cuando los sistemas son grandes, en aplicaciones de procesamiento de información en tiempo real y/o sistemas que deben ser resueltos repetidas veces con distintos parámetros.

Existen dos procedimientos básicos para disminuir el esfuerzo computacional asociado a un sistema de ODEs a nivel de modelamiento. Por un lado, la simplificación de modelos implica descartar alguna/s características del modelo original, reduciendo la complejidad y/o cantidad de ecuaciones del mismo. Por otro, la reducción intenta transformar el modelo original en otro que contenga menor cantidad de ecuaciones, aunque preservando las propiedades del modelo original. En muchos casos, la rigurosidad debe ser preservada en el modelo de bajo orden; por lo tanto, la técnica de reducción se presenta como más indicada.

Una técnica de reducción ideal debería satisfacer, desde el punto de vista de la matemática aplicada, los requerimientos de precisión (buena concordancia entre los resultados del modelo riguroso y el reducido), robustez (poder resolver un amplio espectro de problemas) y eficiencia (rapidez de cálculo con bajo costo en el almacenamiento de los datos). Además, desde el punto de vista de las aplicaciones concretas, debe preservar la claridad de la relación entre el modelo y el proceso físico representado, mantener el significado físico de las variables y al menos preservar la cantidad de parámetros y el grado de dificultad para ajustarlos.

2. Técnicas de Reducción

Un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden puede expresarse como:

$$\frac{dx}{dt} = f(x, u, t) \quad (2.1) \quad x(t_0) = x_0 \quad (2.2)$$

donde la expresión (2.2) indica que el problema es a valor inicial.

En este trabajo consideraremos las siguientes simplificaciones de esta formulación:

¹ Autor a quien debe enviarse la correspondencia.

(2.i) Caso lineal

$$\dot{x} = A_{(t)}x + B_{(t)}u \quad (2.i.1)$$

$$y = C_{(t)}x + D_{(t)}u \quad (2.i.2)$$

$$x(t_0) = x_0 \quad (2.i.3)$$

(2.ii) Caso lineal invariante en el tiempo

$$\dot{x} = Ax + Bu \quad (2.ii.1)$$

$$y = Cx + Du \quad (2.ii.2)$$

$$x(t_0) = x_0 \quad (2.ii.3)$$

A partir de esta clasificación, se presentan en 2.1 y 2.2 las técnicas de reducción analizadas.

2.1 Técnica de compartimentación (Benallou et al., 1986)

La técnica de compartimentación propone dividir el conjunto de ODEs en subconjuntos de ecuaciones cuyas soluciones tienen una forma similar. De esta manera, se asocia la respuesta correspondiente a cada subconjunto de ecuaciones a una de sus variables, a la que llamaremos sensible. Las variables restantes que forman el compartimiento se calculan a través de relaciones algebraicas. Así, el vector de variables diferenciales puede permearse para lograr la partición $x = [Xs | Xns]^T$, donde Xs contiene todas las variables sensibles.

Cada subconjunto de ecuaciones se denomina compartimiento. Consideremos una subdivisión en m compartimientos C_i , $i=1, \dots, m$. Se verifican las siguientes afirmaciones: $Xs_i \in C_i$, $C_i \neq \emptyset$, $C_i \cap C_j = \emptyset$ para $i \neq j$ y

$$\sum_{i=1}^m |C_i| = m$$

donde el elemento i -ésimo de Xs representa la variable sensible correspondiente al compartimiento C_i . Dado el sistema de ODEs (2.1)-(2.2), el modelo reducido de orden m ($m < n$) asociado se define como:

$$\frac{dXs}{dt} = \tilde{f}(Xs, u, t) \quad (2.1.1) \quad Xns = \tilde{g}(x, u, t) \quad (2.1.2)$$

La calidad del modelo reducido resultante depende de la forma en que se eligen los compartimientos y sus correspondientes variables sensibles. Los trabajos existentes sobre esta técnica proponen políticas de selección fuertemente dependientes de la aplicación específica, sin formalizarlas rigurosamente. En este trabajo se analizan algunas estrategias para el caso particular de modelamiento de columnas de destilación binarias.

2.2 Técnica de Autovalores Dominantes (Litz, 1980; Litz L. and H. Roth, 1981)

La técnica parte del modelo en variables de estado lineal invariante en el tiempo (2.ii) asociado al sistema de ODEs original. La metodología consiste en particionar el sistema linealizado en un subsistema diferencial que refleja los modos dominantes y un subsistema algebraico con los restantes estados, cuantificando el efecto de cada autovalor de la matriz A sobre todas las salidas y , identificándose los modos dominantes.

Se pretende lograr que $\tilde{x} = [\tilde{x}_1 | \tilde{x}_2]^T$ e \tilde{y} representen buenas aproximaciones de los vectores originales $x = [x_1 | x_2]^T$ e y . Este objetivo puede alcanzarse representando solamente los fenómenos lentos asociados a las respuestas.

Consideremos un sistema estable, donde los autovalores de la matriz de estados son negativos y distintos. Cabe aclarar que los autovalores positivos son siempre dominantes. Es posible afirmar cualitativamente que los autovalores pequeños en valor absoluto influyen básicamente en los modos lentos de la respuesta, razón por la cual su efecto debe preservarse. En rigor, el grado de dominancia no se corresponde en forma exacta con el ordenamiento de los autovalores porque existe acoplamiento de los modos, es decir que cada autovalor afecta a todos los estados del sistema.

Considerando $D=0$ en (2.ii), la técnica se basa en la partición:

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= A_{11}x_1 + A_{12}x_2 + B_1u \\ \dot{x}_2 &= A_{21}x_1 + A_{22}x_2 + B_2u \\ y &= C_1x_1 + C_2x_2 \end{aligned} \quad (2.2.1)$$

donde $\dot{x}_1 \in \mathbb{R}^n$, $\dot{x}_2 \in \mathbb{R}^{n-m}$, $u \in \mathbb{R}^p$, $y \in \mathbb{R}^q$. Como para los modos no dominantes es posible despreciar \dot{x}_2 , se obtiene el modelo de orden reducido:

$$\begin{aligned} \text{a) } \dot{\tilde{x}}_1 &= A_0\tilde{x}_1 + B_0u \\ \text{b) } \tilde{x}_2 &= -A_{22}^{-1}(A_{21}\tilde{x}_1 + B_2u) \\ \text{c) } \tilde{y} &= C_1\tilde{x}_1 + C_2\tilde{x}_2 \end{aligned} \quad (2.2.2)$$

$$A_0 = A_{11} - A_{12}A_{22}^{-1}A_{21} \quad (2.2.3)$$

$$B_0 = B_1 - A_{12}A_{22}^{-1}B_2$$

El primer paso es determinar los autovalores dominantes en la salida y . La respuesta y_{kj} de la k -ésima variable de salida cuando la j -ésima variable de entrada u_j es perturbada por una función escalón puede expresarse como:

$$y_{kj}(t) = \sum_{i=1}^n \frac{c_{ky}}{\lambda_i} (e^{\lambda_i t} - 1) \quad (2.2.4)$$

Es posible definir el siguiente índice de dominancia R asociado al autovalor λ_i :

$$R(\lambda_i) = \frac{1}{qp} \sum_{k=1}^q \frac{1}{\mu_k} \left(\sum_{j=1}^p \left| \frac{c_{ky}}{\lambda_i} \gamma_j \right| \right) \quad (2.2.5)$$

donde μ_k , γ_j son valores de normalización para la k -ésima salida y la j -ésima entrada respectivamente. Los autovalores λ_i con mayores índices de dominancia R serán los autovalores dominantes del sistema (2.ii).

El segundo paso es encontrar las variables de estado más influenciadas por los modos dominantes. Para esto se usa la medida:

$$S_k(\lambda_i) = \frac{1}{p} \sum_{j=1}^p \left| \frac{r_{kj}}{\lambda_i} \gamma_j \right| \quad (2.2.6)$$

donde $S_k(\lambda_i)$ indica la influencia de λ_i sobre la k -ésima variable de estado.

Reordenando los autovalores λ_i en forma decreciente de acuerdo al índice de dominancia definido en (2.2.5), es decir: $R(\lambda_{i+1}) \leq R(\lambda_i)$, $i = 1, \dots, n-1$, se puede construir la Tabla 2-1 para estudiar la dependencia entre las variables de estado y los autovalores.

Variables de estado	Autovalores				
	λ_1	...	λ_r	...	λ_n
$[x]_1$	S_{11}	...	S_{1r}	...	S_{1n}
\vdots	\vdots		\vdots		\vdots
$[x]_k$	S_{k1}	...	S_{kr}	...	S_{kn}
\vdots	\vdots		\vdots		\vdots
$[x]_n$	S_{n1}	...	S_{nr}	...	S_{nn}

Tabla 2-1: dependencia entre las variables de estado y los autovalores (S_{ki} es una notación abreviada para $S_k(\lambda_i)$).

El aporte porcentual del autovalor λ_i sobre la k -ésima variable de estado, $P_k(\lambda_i)$, puede calcularse como:

$$P_k(\lambda_i) = \frac{100 S_k(\lambda_i)}{\sum_{j=1}^n S_k(\lambda_j)} \quad (2.2.7)$$

Luego, la medida

$$Q_k = \sum_{i=1}^j P_i(\lambda_i) \quad (2.2.8)$$

indica la influencia de los primeros j autovalores dominantes sobre la respuesta de la variable de estado x_k . Obviamente, $j = n$ implica $Q_{kn} = 100$, $k=1, \dots, n$.

Con las medidas dadas en (2.2.8), la Tabla 2-2 se utiliza para elegir el subconjunto de estados dominantes.

Variables de estado	Autovalores				
	λ_1	\dots	λ_r	\dots	λ_n
$[x]_1$	Q_{11}	\dots	Q_{1r}	\dots	Q_{1n}
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
$[x]_k$	Q_{k1}	\dots	Q_{kr}	\dots	Q_{kn}
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
$[x]_n$	Q_{n1}	\dots	Q_{nr}	\dots	Q_{nn}

Tabla 2-2: dependencia entre las variables de estado y los subconjuntos de autovalores.

Si se asume que el orden del modelo reducido es m , la m -ésima columna de la Tabla 2-2 es usada para elegir los componentes de x_j en (2.2.1) a partir de los siguientes criterios:

Criterio 1: los elementos de x_j en (2.2.1) son las m variables de la Tabla 2-2 que tienen los mayores valores de Q_{jm} , es decir las variables de estado más influenciadas por el conjunto de los m autovalores dominantes.

Criterio 2: un sistema reducido puede calcularse con orden m :

- si en la Tabla 2-2 los elementos de la columna $m+1$ no son significativamente mayores que los de la columna m , y
- si los m elementos de la columna m , candidatos a ser elegidos por el Criterio 1, tienen una media aritmética mayor que 90.

Naturalmente, el criterio es de tipo heurístico. La condición a) es equivalente a considerar que el agregado de una ecuación diferencial más no proporcionará una mejora sustancial en las respuestas. La condición b) apunta a asegurar que la estructura refleja suficientemente bien el comportamiento del sistema original. En los casos donde se requiera mayor o menor precisión en la respuesta podrá incrementarse o disminuirse la cantidad de ecuaciones del modelo reducido.

La presencia de autovalores cercanos a cero debe ser considerada por separado, ya que no se puede evaluar (2.2.5)-(2.2.6) pues se produce una división por cero. Este caso puede ser reconocido por la presencia de filas o columnas de ceros en la matriz A . Como estos autovalores son siempre dominantes, es posible excluirlos del estudio eliminando las ecuaciones y variables asociadas a dichas filas o columnas y trabajando con las matrices resultantes.

3. Resultados

Una de las principales dificultades que surgen del modelamiento matemático dinámico de sectores de plantas industriales es la gran dimensión de los sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias que representan los procesos. La reducción de estos modelos puede conducir a ahorros significativos. En particular, las columnas de destilación son equipos industriales de gran interés dada la cantidad de ecuaciones involucradas y las dificultades que surgen de su modelamiento.

El caso de estudio seleccionado es una columna cuya función es deshidratar una mezcla de alcohol y agua, obteniendo en el tope una composición cercana al azeótropo binario. Este ejemplo permitió

chequear las técnicas de reducción implementadas en este trabajo. La Tabla 3-1 y la Figura 3-1 muestran los parámetros de la columna y su representación gráfica.

Parámetros	
Platos N	22
Plato de alimentación f	14
Condensador	parcial
Caudal de Alimentación F	1676
Reflujo zona de rectificación L _r	315
Reflujo zona de despojo L _s	1991
Vapour boil-up zona de rectificación V _r	520
Vapour boil-up zona de despojo V _s	520
Calidad de alimentación q	1
Fracción molar ipa en alimentación xF	0.082

Tabla 3-1: Parámetros del caso de estudio

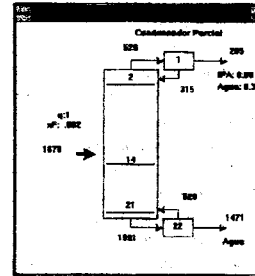


Figura 3-1: Representación gráfica del problema de aplicación

La dinámica de una columna de destilación binaria, sin incluir balances de energía, puede ser modelada a partir del siguiente sistema de ODEs:

$$M_1 \dot{X}_1 = V_R Y_2 - L_R X_1 - (V_R - L_R) Y_1 \quad (3.1)$$

$$M_i \dot{X}_i = L_R (X_{i-1} - X_i) + V_R (Y_{i+1} - Y_i); \quad 2 \leq i \leq N_f - 1 \quad (3.2)$$

$$M_{N_f} \dot{X}_{N_f} = L_R X_{N_f-1} - L_s X_{N_f} + V_s Y_{N_f+1} - V_R Y_{N_f} + F z_f \quad (3.3)$$

$$M_i \dot{X}_i = L_s (X_{i-1} - X_i) + V_s (Y_{i+1} - Y_i); \quad N_f + 1 \leq i \leq N - 1 \quad (3.4)$$

$$M_N \dot{X}_N = L_s X_{N-1} - V_s Y_N - (L_s - V_s) X_N \quad (3.5)$$

con las relaciones de equilibrio:

$$Y_i = K_i(T, P, X_i, Y_i) X_i; \quad 1 \leq i \leq N \quad (3.6)$$

El conjunto de ecuaciones (3.6) modela el equilibrio termodinámico entre el líquido y el vapor en cada plato. El modelo elegido para la constante de equilibrio *K* es una funcionalidad no lineal de la mezcla. En este trabajo se empleó un enfoque más simplificado que consiste en calcular *K* empíricamente considerándolo invariante en el tiempo. Para mayor precisión, se repitieron los cálculos empleando ecuaciones en función de la temperatura por regresión no lineal en base a datos de planta.

La técnica de compartimentación propone dividir este conjunto de ODEs en subconjuntos de ecuaciones cuyas soluciones tienen una forma similar. Sean *r* y *t* la *r*-ésima y *t*-ésima ecuación definida en el sistema (3.1)-(3.5), con *r* < *t*; para este subconjunto de ODEs, la técnica de compartimentación asocia una ecuación diferencial:

$$M_c \dot{X}_s = L_{r-1} X_{r-1} + V_{t+1} Y_{t+1} - L_r X_r - V_t Y_t \quad (3.7), \quad \text{donde} \quad M_c = \sum_{i=r}^t M_i$$

De esta manera, la ecuación (3.7) representa la respuesta de las ecuaciones *r*-ésima y *t*-ésima del modelo (3.1)-(3.5). Las variables restantes que forman el compartimento se calculan a través de las ecuaciones algebraicas realizadas sobre envoltentes que parten del tope ó del fondo de la columna (Figura 3-3):

$$X_j = \frac{V Y_{j+1} - D Y_1}{L}$$

ó

$$Y_j = \frac{L X_{j-1} - B X_N}{V}$$

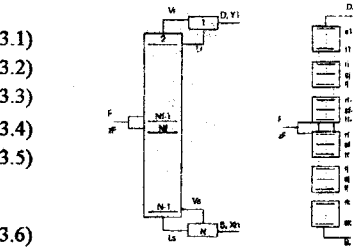


Figura 3-2: Esquema de compartimentación.

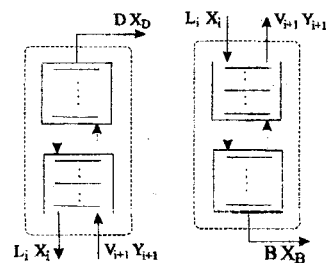


Figura 3-3: Envoltentes para el cálculo de variables no sensibles

Para realizar este estudio se seleccionó el caso de una columna de destilación industrial de alta pureza, cuyo modelo conduce a un sistema de ODEs con relación de stiffness $S = \lambda_{\max}/\lambda_{\min} \approx 500$. El valor de S denota la presencia de diferentes escalas de tiempo, lo cual está asociado a la existencia de componentes rápidos y lentos en la respuesta. Por esta razón, el sistema se resolvió con el integrador GEAR, que es muy robusto y maneja adecuadamente el tamaño del paso para lograr estabilidad. Este problema constituye una aplicación original porque los heurísticos propuestos en la literatura corresponden a columnas de baja pureza y con caudales de productos de similar magnitud (simétricas), propiedades que suelen estar asociadas a sistemas de ecuaciones no stiff.

Un aspecto no formalizado hasta el presente es la política de selección de los compartimientos y las variables sensibles. A continuación se discute el desempeño de diferentes propuestas para mejorar la formulación original de esta técnica, comparándose las respuestas dinámicas ante perturbaciones en el caudal de alimentación.

En primera instancia se intentó determinar una agrupación de variables en base a las constantes de tiempo del problema ante las perturbaciones de mayor interés. Una regla heurística mencionada en Horton et al., 1991, indica que el plato (variable) sensible en un compartimiento de la sección de rectificación debe ser elegido a $1/4$ de distancia del tope del compartimiento, mientras que para la sección de despojo debe estar a $1/4$ de distancia del fondo del compartimiento. Un modelo reducido obtenido a partir de estos lineamientos es el presentado en la Tabla 3-2:

Tabla 3-2: Reducción obtenida por análisis de ctes. de tiempo	Compart.	Variable. Sensible
		1-2
	3-4	3
	5	5
	6-7	6
	8-11	9
	12-13	12
	14-16	14
	17-22	22

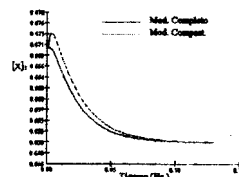


Figura 3-4: Respuesta temporal plato 1 con la reducción de Tabla 3-2.

Esta regla no funcionó bien en este caso; esto puede deberse a que los lineamientos presentados corresponden a un estudio realizado sobre columnas con purezas y caudales similares en tope y fondo, no pudiendo extenderse a columnas de alta pureza y, por lo tanto, asimétricas. Como se observa en el Figura 3-4 correspondiente a la respuesta en el tope de la columna, el modelo no representa correctamente los primeros instantes; este fenómeno también se repite en los platos restantes.

El segundo enfoque considerado se basa en el análisis de los perfiles de temperatura del sistema. El criterio consiste en agrupar las ecuaciones asociadas a platos con temperaturas similares. Para elegir los platos sensibles se efectuaron perturbaciones en caudal de alimentación y se calcularon las ganancias de estado estacionario. Dado un compartimiento, su plato sensible es el que posee mayor ganancia de estado estacionario. Un modelo reducido obtenido con esta técnica se presenta en la Tabla 3-3:

Tabla 3-3: reducción obtenida por análisis de sensibilidad.	Compart.	Variable. Sensible
		1-2
	3-4	3
	5	5
	6	6
	7	7
	8	8
	9-10	9
	11-13	11
	14-17	14
	18-22	22

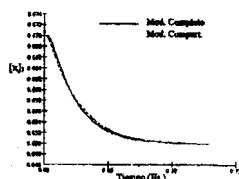


Figura 3-5: Respuesta temporal plato 1 con la reducción de Tabla 3-3

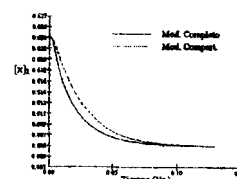


Figura 3-6: Respuesta temporal plato 2 con la reducción de Tabla 3-3

Los resultados obtenidos fueron bastante satisfactorios. Sin embargo, la metodología carece de un soporte formal para su aplicación y es engorrosa porque para garantizar la sensibilidad deben efectuarse simulaciones ante todas las perturbaciones de interés. Este último inconveniente podría subsanarse simulando sólo las “peores” perturbaciones, elegidas mediante un estudio de direccionamiento (Tolliver and McCune, 1978).

Otra de las propuestas de este trabajo es usar la noción de dominancia de autovalores para la elección de las variables sensibles en el modelo reducido. La primera fila de la Tabla 3-5 muestra los autovalores del problema en orden de dominancia decreciente. El resto de la tabla representa la matriz Q , que muestra la influencia de los autovalores sobre las variables de estado en forma acumulativa. Siguiendo los Criterios 1 y 2 mencionados en la sección 2.2, se obtuvo la compartimentación mostrada en la Tabla 3-4, que corresponde a considerar que los primeros ocho autovalores de la Tabla 3-5 son el subconjunto dominante.

Compart.	Variable Sensible
1	1
2-4	2
5	5
6	6
7	7
8-9	8
10-12	10
13	13
14-17	14
17-22	22

Tabla 3-4: reducción obtenida por análisis de dominancia de autovalores

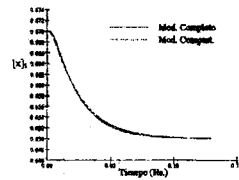


Figura 3-7: Respuesta temporal plato 1 (var. sensible) con la reducción de Tabla 3-4

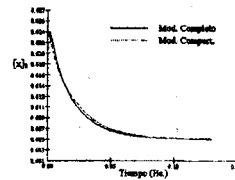


Figura 3-8: Respuesta temporal plato 2 (var. sensible) con la reducción de Tabla 3-4

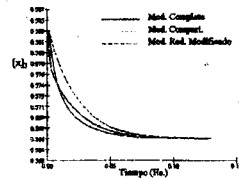


Figura 3-9: Respuesta temporal plato 3 (var. no sensible) con la reducción de Tabla 3-4

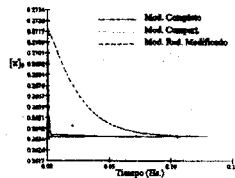


Figura 3-10: Respuesta temporal plato 9 (var. no sensible) con la reducción de Tabla 3-4

Nótese que el modelo reducido así obtenido tiende a desacoplar los modos rápidos de los lentos, lo cual conduce a una reducción en la relación de stiffness.

Las respuestas temporales muestran excelente concordancia en los platos sensibles (Figuras 3-7 y 3-8). Sin embargo, el cálculo de las variables no sensibles no resulta satisfactorio como se observa en las Figuras 3-9 y 3-10 (Mod. Compart.). Consideramos que estas desviaciones se deben a que el modelo compartimentado calcula las variables no sensibles mediante relaciones de estado estacionario en base a balances de masa sobre envoltantes que parten del tope ó del fondo para las variables que se encuentran por encima ó por debajo de la alimentación respectivamente, tal como se esquematiza en la Figura 3-3. Por lo tanto, los elementos de X_{ns} se asocian sólo a algunos elementos de X_s , lo cual implica pérdida de precisión ya que, en rigor, $X_{ns}=f(X_s)$. Por lo tanto, proponemos una formulación alternativa para calcular $X_s(t)$, que consiste en emplear (2.2.2) b), donde $X_{ns}=f(X_s)$. Las Figuras 3-9 y 3-10 (Mod. Red. Modificado) muestra las mejoras resultantes de aplicar este enfoque.

4. Descripción de la Aplicación RedSis

Como se muestra en la Figura 4-1, la aplicación RedSis desarrollada permite la especificación de modelos completos, modelos reducidos, herramientas de análisis de utilidad para la reducción de

Autovalores	λ_1	λ_2	λ_3	λ_4	λ_5	λ_6	λ_7	λ_8	λ_9	λ_{10}	λ_{11}	λ_{12}	λ_{13}	λ_{14}	λ_{15}	λ_{16}	λ_{17}	λ_{18}	...	λ_{22}
	-8117	-6974	-8825	-10644	-56	-6303	-9924	-11522	-7643	-205	-13410	-13870	-12602	-584	-3358	-1141	-1652	-17232	...	-29336
$[x]_1$	0.002	0.006	0.007	0.007	84.470	84.473	84.473	84.473	84.473	97.816	97.816	97.816	97.816	99.512	99.515	99.906	100	100	...	100
$[x]_2$	0.127	0.352	0.408	0.4278	88.099	88.252	88.268	88.273	88.293	90.406	90.407	90.407	90.407	95.824	95.916	98.902	100	100	...	100
$[x]_3$	1.848	4.579	5.463	5.836	72.320	73.983	74.261	74.369	74.641	91.630	91.644	91.648	91.655	97.193	97.641	98.501	100	100	...	100
$[x]_4$	14.114	31.616	39.039	42.894	68.702	78.152	80.844	82.031	83.974	96.628	96.807	96.872	96.953	97.122	98.234	98.352	100	100	...	100
$[x]_5$	23.751	48.448	62.188	70.987	73.100	84.923	90.608	93.566	96.616	98.027	98.553	98.752	98.975	99.282	99.886	99.975	99.999	100	...	100
$[x]_6$	24.566	45.968	61.605	73.963	74.062	83.140	90.525	95.060	98.003	98.072	99.024	99.396	99.773	99.791	99.990	99.997	99.999	100	...	100
$[x]_7$	22.749	37.447	54.234	72.159	72.166	77.113	86.726	94.126	96.560	96.561	98.488	99.275	99.975	99.976	99.998	99.998	99.999	100	...	100
$[x]_8$	20.352	45.271	52.382	65.594	65.595	76.588	79.314	88.813	91.776	91.777	96.477	98.624	99.989	99.989	99.995	99.995	99.995	99.999	...	100
$[x]_9$	0.270	29.927	42.100	57.142	57.143	76.001	86.396	86.749	88.429	88.429	95.110	98.816	99.982	99.982	99.984	99.984	99.984	99.999	...	100
$[x]_{10}$	14.891	30.093	48.132	60.266	60.266	82.418	83.137	90.175	90.550	90.550	95.845	99.808	99.956	99.956	99.956	99.956	99.956	99.997	...	100
$[x]_{11}$	16.747	33.578	34.309	41.874	41.874	75.817	83.096	87.763	89.439	89.439	93.967	99.229	99.840	99.840	99.840	99.840	99.840	99.840	...	100
$[x]_{12}$	5.107	14.624	24.309	36.191	36.191	84.293	84.770	87.662	89.521	89.521	92.291	98.581	99.437	99.437	99.437	99.437	99.437	99.437	...	100
$[x]_{13}$	6.957	8.980	15.564	18.642	18.642	79.319	84.356	89.345	90.311	90.311	91.086	97.672	98.155	98.155	98.155	98.155	98.155	98.155	...	100
$[x]_{14}$	8.479	11.104	12.798	19.771	19.771	86.104	86.948	87.892	87.932	87.932	88.479	94.400	94.419	94.419	94.419	94.419	94.419	94.419	...	100
$[x]_{15}$	5.645	9.321	12.476	15.460	15.460	56.566	87.630	89.163	89.484	89.484	89.906	90.785	90.929	90.929	90.929	90.929	90.929	90.929	...	100
$[x]_{16}$	2.237	6.120	9.055	15.671	15.671	77.171	80.035	80.429	81.012	81.012	82.176	91.835	91.998	91.998	91.998	91.998	91.998	91.998	...	100
$[x]_{17}$	11.950	15.491	16.624	30.394	30.394	77.155	80.423	82.013	82.779	82.779	83.315	90.431	90.443	90.443	90.443	90.443	90.443	90.443	...	100
$[x]_{18}$	21.654	24.876	26.353	39.486	39.486	75.533	77.456	80.084	80.999	80.999	81.901	87.339	87.555	87.555	87.555	87.555	87.555	87.555	...	100
$[x]_{19}$	30.261	33.199	37.600	40.661	40.661	69.036	69.950	71.623	72.647	72.647	74.295	88.828	89.074	89.074	89.074	89.074	89.074	89.074	...	100
$[x]_{20}$	31.615	33.918	40.021	51.786	51.786	71.464	75.300	76.372	77.307	77.307	77.762	83.656	83.660	83.660	83.660	83.660	83.660	83.660	...	100
$[x]_{21}$	27.310	28.956	35.052	55.932	55.932	68.754	73.910	77.221	77.963	77.963	79.397	90.614	91.015	91.015	91.015	91.015	91.015	91.015	...	100
$[x]_{22}$	17.920	18.889	23.196	41.581	41.581	48.691	52.827	56.599	56.599	56.599	58.614	76.311	76.640	76.640	76.640	76.640	76.640	76.640	...	100

Tabla 3-5: dependencia entre las variables de estado y los subconjuntos de autovalores para el caso de estudio

modelos, un módulo destinado a la integración numérica de los modelos definidos (completos y reducidos) y otro para la visualización de los resultados.

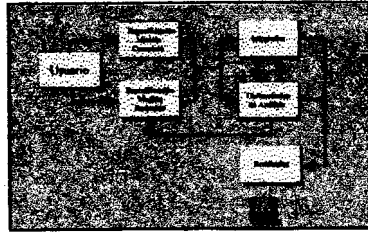


Figura 4-1: Esquema de la aplicación RedSis y sus funciones

Las funciones implementadas en la aplicación hasta el momento incluyen: especificación del modelo completo de columna binaria, especificación del correspondiente modelo reducido usando la técnica de compartimentación y autovalores dominantes, análisis de sensibilidad, constantes de tiempo, autovalores del sistema y dominancia en el módulo de herramientas, integradores (Gear, Runge-Kutta adaptivo 2^o-3^o orden, Runge-Kutta adaptivo 4^o-5^o orden) y el subsistema de graficación para la visualización de los resultados. Una barra de herramientas (*Toolbar*) provee funciones comunes a todos estos módulos, usando la técnica "Arrastrar y soltar"

(*Drag and Drop*). Algunas de estas funciones son: Imprimir, Grabar en disco, Configurar la impresora, Configurar el programa, etc.

La concepción modular usada al momento del diseño de la aplicación permite la expansión de sus funciones en forma rápida y sencilla, conforme se incrementen las técnicas de reducción a estudiar, la incorporación de otros integradores numéricos o herramientas de análisis. En este sentido, se prevee agregar a la aplicación funciones para el tratamiento simbólico de los sistemas.

A continuación se describen los distintos módulos de la Figura 4-1 que conforman la aplicación RedSis.

4.1 Especificación del modelo completo

El módulo para la especificación de modelos completos de columnas binarias incluye las funciones: Nuevo Modelo, Edición de un modelo existente, Representación gráfica de un modelo y simulación de perturbaciones en el caudal de alimentación de la columna. Se incluyen las opciones para especificar distintos estados estacionarios e integrar numéricamente el modelo completo. La Figura 4-2 muestra la ventana correspondiente a la especificación de los parámetros que determinan el sistema de ODEs completo para una columna de destilación binaria.

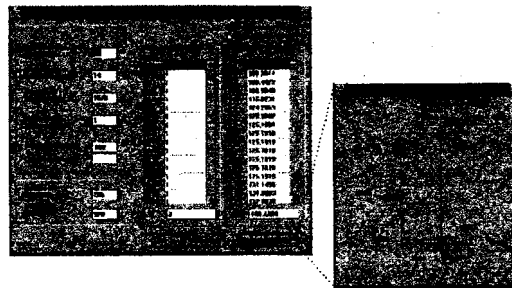


Figura 4-2: Ventanas correspondientes a la especificación de un modelo completo de columna y su representación

4.2 Especificación del modelo reducido

El usuario dispone de la función Crear/Editar modelos reducidos en la aplicación, además de las opciones para la integración numérica de los mismos. La Figura 4-3 muestra la ventana

correspondiente a la especificación del modelo reducido a partir de la técnica de compartimentación para una columna de destilación.



Figura 4-3: Especificación de un modelo compartimentado y su representación

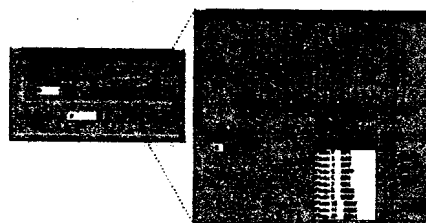


Figura 4-4: Herramienta para Análisis de Constantes de Tiempo

4.3 Herramientas de análisis

A partir de los datos del modelo completo, la aplicación ofrece algunas herramientas de análisis como asistencia en la especificación del modelo reducido. La Figura 4-4 muestra la ventana de la aplicación correspondiente a las funciones de análisis de constantes de tiempo. El usuario determina la perturbación a aplicar sobre el modelo completo y como resultado se obtiene un gráfico de las constantes de tiempo para cada variable de estado.

4.4 Integrador

La aplicación dispone de la función de integración numérica, tanto para los modelos completos, los modelos reducidos y para las herramientas de análisis que las necesiten. Por ejemplo, el usuario puede definir el modelo reducido, integrarlo y mostrar los resultados; o definir el modelo completo, utilizar alguna/s herramienta/s de análisis (requiriendo eventualmente el uso del integrador) para definir el modelo reducido, luego integrar ambos modelos (completo y reducido) y mostrar los resultados para su comparación. Cada corrida del integrador genera un archivo de resultado .crr en formato binario y opcionalmente un archivo ASCII.

4.5 Graficación de resultados

El módulo correspondiente a la graficación de resultados permite leer corridas a partir de los archivos .crr generados por el integrador numérico para luego visualizarlas. Se disponen de opciones para imprimir los gráficos y almacenarlos en archivos en formato WMF (estándar de Windows). Las Figuras 3-4 hasta 3-10 muestran las curvas del modelo completo y el modelo reducido correspondientes al problema de aplicación.

5. Conclusiones

Se implementaron dos técnicas de reducción de orden: por compartimentación y por autovalores dominantes. El enfoque compartimentado tiene la ventaja de trabajar en base al sistema de ODEs no lineal original, a diferencia del enfoque modal donde se requiere generar la representación en variables de estado, lo cual involucra una pérdida de precisión que puede resultar inaceptable en aplicaciones complejas donde se necesita preservar la rigurosidad en el modelamiento. Sin embargo, la formulación original de la técnica de compartimentación no contiene una política sistemática para la selección de los compartimentos y las variables sensibles, ni para el cálculo de las variables no sensibles.

En este trabajo se muestra que el empleo del análisis de dominancia de autovalores puede servir como base para desarrollar una compartimentación adecuada. Además, la calidad de las respuestas dinámicas puede mejorarse cambiando la formulación del sistema de ecuaciones algebraicas para el cálculo de las variables no sensibles.

6. Referencias

- Benallou A., D. E. Seborg and D. A. Mellichamp, Dynamic compartmental models for separation processes. *AIChE J* 32, 1067-1078 (1986).
- Horton R. R., B. W. Bequette and T. F. Edgar, Improvements in dynamic compartmental modeling for distillation. *Comp. Chem. Engng.* 15, 197-201 (1991).
- Litz L., Order Reduction of linear state-space models via optimal approximation of the nondominant modes. Proc. IFAC, 195-202 (1980).
- Litz L. and H. Roth, State decomposition for singular perturbation order reduction-A modal approach. *Int. J. Control* 34, no.5, 937-954 (1981).
- Tolliver T.L. and L.C. McCune, Distillation control design based on steady state simulation. *ISA Trans.* 17, 3-10 (1978).

7. Notación

7.1 Notación General

μ : valor de normalización
 γ : valor de normalización
 λ : autovalor

$A \in \mathcal{R}^{n \times n}$

$B \in \mathcal{R}^{n \times q}$

$C \in \mathcal{R}^{n \times n}$

C: compartimiento

$D \in \mathcal{R}^{n \times q}$

p: entradas del sistema

q: salidas del sistema

t: variable independiente

t_0 : punto inicial

$u \in \mathcal{R}^q$: vector de parámetros

$x \in \mathcal{R}^n$: vector de variables diferenciales

$x_0 \in \mathcal{R}^n$: vector de valores iniciales del sistema

$X_{ns} \in \mathcal{R}^{n-m}$: vector de variables no sensibles

$X_s \in \mathcal{R}^m$: vector de variables sensibles

$y \in \mathcal{R}^n$: vector de salidas

7.2 Notación caso de estudio

B: Caudal del fondo

D: Caudal del destilado

f: Plato de alimentación

F: Caudal de alimentación

K: Constante de equilibrio

N: Número de platos de la columna

Lr: Reflujo zona de rectificación

Ls: Reflujo zona de despojo

Nf: Plato de alimentación

q: Calidad de alimentación

Vr: Vapour boil-up zona de rectificación

Vs: Vapour boil-up zona de despojo

xF: Fracción molar ipa en alimentación

