

UNICAMP<sup>i</sup>  
BIBLIOTECA CENTRAL  
SEÇÃO CIRCULANTE

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO  
SISTEMAS DE PROCESSOS QUÍMICOS E INFORMÁTICA

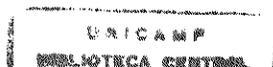
***CONTROLE "ON-LINE" DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO EM  
BATELADA DE ALTA PUREZA***

Autora: Ronia Marques Oisiovici  
Orientadora: Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Sandra Lúcia da Cruz  
Co-Orientador: Prof. Dr. João Alexandre F. R. Pereira

Tese de Doutorado apresentada à Faculdade de Engenharia Química como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Doutor em Engenharia Química.

Campinas - São Paulo  
Maio/ 2001

DN15872



UNIVERSIDADE	Be
CHAMADA	UNICAMP
Diário	
Ex.	
IMBO BC	45668
ROC.	16-392101
C	<input type="checkbox"/>
D	<input checked="" type="checkbox"/>
REC	R\$ 11,00
ATA	02108101
CPD	

CM00158272-9

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA  
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA - BAE - UNICAMP

O57c

Oisiovici, Ronia Marques

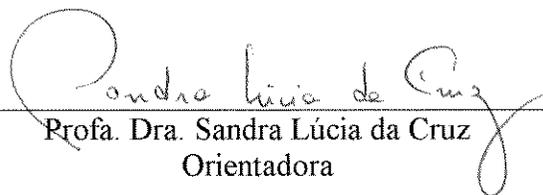
Controle "on-line" de colunas de destilação em batelada de alta pureza / Ronia Marques Oisiovici. --Campinas, SP: [s.n.], 2001.

Orientadores: Sandra Lúcia da Cruz, João Alexandre F. R. Pereira.

Tese (doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Destilação. 2. Controle de processo - Automação.  
I. Cruz, Sandra Lúcia da. II. Pereira, João Alexandre F. R.  
III. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. IV. Título.

Tese de Doutorado defendida e aprovada em 07 de Maio de 2001 pela banca examinadora constituída pelos professores doutores:



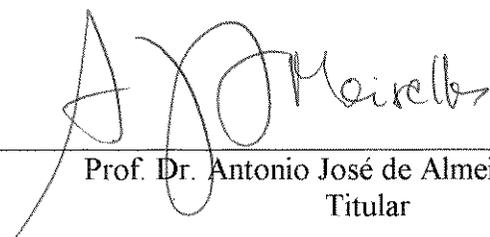
---

Prof.ª. Dra. Sandra Lúcia da Cruz  
Orientadora



---

Prof. Dr. Reinaldo Giudici  
Titular



---

Prof. Dr. Antonio José de Almeida Meirelles  
Titular



---

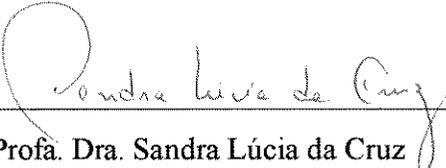
Prof.ª. Dra. Ana Maria Frattini Fileti  
Titular



---

Prof. Dr. Sérgio Persio Ravagnani  
Titular

Esta versão corresponde à redação final da Tese de Doutorado em Engenharia Química, defendida por Ronia Marques Oisiovici e aprovada pela Comissão Julgadora em 07 de Maio de 2001.



---

Profª. Dra. Sandra Lúcia da Cruz

Orientadora

## AGRADECIMENTOS

"Certa vez, um rabino observou de longe um trapezista que se equilibrava na corda bamba.

Quando este encerrou suas atividades, foi então interpelado pelo rabino:

-- Qual é o segredo para conseguir equilibrar-se ?

O equilibrista perguntou:

-- Para onde é que você acha que se deve olhar para encontrar equilíbrio?

O rabino respondeu:

-- Com certeza não é nem para o chão nem para a corda.

-- Correto - completou o equilibrista - devemos olhar sempre para os postes no final da corda. E você sabe qual é o momento mais perigoso ?

Respondeu o rabino:

-- O instante em que se tem de dar a volta e se perde momentaneamente o poste de vista.

-- Exatamente - concordou o equilibrista.

O ato de pensar não pode estar comprometido com o imediatismo do próximo passo. Assegurar-se de que o próximo passo será correto é similar a olhar para a corda. Compromete-se assim a caminhada maior que deve estar sempre vinculada à meta, ao poste no final da corda bamba. São os momentos de virada, quando permanecemos sem o poste diante de nós, que representam os momentos-chave para a manutenção do equilíbrio e para que, a contento, possamos levar ao final o processo de inquirição.

Atravessar a corda bamba do pensamento sem cair por conta do próprio desequilíbrio diz respeito ao questionamento dos interesses menores e imediatos, ao próximo passo na corda, por conta do objetivo maior de concluir com sucesso a travessia no trapézio do pensar." (*História chassídica sobre a metodologia de pensar*)

Meus sinceros agradecimentos ao Daniel e a meus pais Oséas e Chêla, as pessoas mais importantes da minha vida que sempre me ensinaram a não perder de vista o *poste no final da corda* e sempre me apoiaram nos *momentos de virada*.

O meu agradecimento especial à Prof<sup>ª</sup>. Sandra e ao Prof. Pereira, que me ajudaram a dar mais um *passo na corda*. O que aprendi com eles está sendo muito útil nos outros passos que estou dando na vida.

Finalmente, agradeço à FAPESP pelo apoio financeiro para o desenvolvimento do presente projeto de pesquisa.

## RESUMO

Os processos em batelada são largamente empregados nas indústrias de Química Fina, produtos bioquímicos, polímeros e fármacos. As plantas em batelada tendem a crescer, já que esse tipo de configuração apresenta características que são desejáveis nas chamadas "plantas do futuro": flexibilidade operacional, resposta rápida às exigências do mercado, capacidade de processar produtos de alta pureza e alto valor agregado. A destilação em batelada, em particular, é a operação unitária mais frequentemente utilizada nas plantas em batelada. Algumas dificuldades encontradas na sua automação são: fortes não-linearidades, desvios entre o modelo e o processo, ganhos variáveis no tempo, presença de ruídos nas medidas, analisadores de composição "on-line" complexos ou lentos, estimativa do estado do sistema difícil e cara em termos computacionais. O controle de colunas de destilação contínuas de alta pureza é um tópico bastante abordado na literatura. Porém, trabalhos sobre destilação em batelada de alta pureza são escassos e, normalmente, apenas simulações são apresentadas.

Esse trabalho teve como objetivo o desenvolvimento de um sistema de controle por inferência para colunas de destilação em batelada de alta pureza robusto às dificuldades de automação encontradas na prática. O algoritmo de controle foi testado por simulação e, para confirmar a aplicabilidade do controlador desenvolvido, corridas experimentais foram realizadas numa coluna de destilação em batelada em escala piloto.

Um Filtro de Kalman Estendido (FKE) para colunas de destilação em batelada foi desenvolvido para fornecer estimativas de composições instantâneas a partir de algumas medidas de temperatura. O FKE foi combinado a uma estratégia de controle baseada na estrutura GLC ("Globally Linearizing Control"), resultando num sistema de controle por inferência que mantém constante a composição do produto de topo de colunas de destilação em batelada de alta pureza. O controlador GLC foi testado numa coluna de destilação em batelada em escala piloto com 29 pratos perfurados. As corridas experimentais foram realizadas com o sistema etanol/1-propanol. A interface entre o computador e o processo foi feita através de uma placa AD/DA. Termopares foram utilizados para medir temperaturas instantâneas em alguns estágios da coluna.

A cada período de amostragem, o FKE fornece valores de composição instantâneos, utilizando os dados de temperatura lidos pelo computador. Com o objetivo de manter a pureza do produto de topo no valor especificado, o controlador GLC atualiza a razão de refluxo baseado nas estimativas mais recentes de composição. A razão de refluxo calculada é, então, implementada pelo computador que controla a posição e o tempo de abertura da válvula magnética de refluxo.

O número de sensores e o intervalo de integração do modelo da coluna foram variáveis importantes no projeto do FKE. Convergência mais rápida e estimativas mais exatas foram obtidas aumentando-se o número de sensores e/ou reduzindo-se o intervalo de integração. No entanto, acima de um certo número de sensores, as melhorias na exatidão das estimativas são insignificantes. Nas corridas em malha fechada, a variável manipulada (razão de refluxo) apresentou um comportamento do tipo liga/desliga quando os sensores de temperatura foram posicionados nos estágios próximos ao topo da coluna, onde as variações de temperatura são pequenas. Afastando-se os sensores do topo da coluna, perfis mais suaves das variáveis manipulada e controlada foram observados e desvios inferiores a 0,2% entre a composição média do destilado estimada e a composição média do destilado medida foram obtidos. Para o controle da composição do destilado de alta pureza, os sensores devem ficar afastados do topo, mas não tão distantes a ponto de diminuir a exatidão das estimativas de composição.

Devido à sua robustez em relação aos desvios entre o modelo e o processo, incerteza nas condições iniciais da coluna e a presença de ruídos nas medidas de temperatura, o controlador por inferência desenvolvido nesse trabalho, além de ser flexível, mostrou-se eficaz em aplicações práticas.

**Palavras-chaves:** destilação em batelada; alta pureza; controle por inferência, filtro de Kalman

## ABSTRACT

Batch processing has been widely used in the production of fine chemicals, biochemicals, polymers and pharmaceuticals. Batch configurations present features which are desirable in the called "future plants": flexibility of operation, rapid response to changing market demands, suitability for manufacturing high-quality and high value-added products. Batch distillation is the most frequent separation method in batch processes. Some of the challenges to be faced in the automation of batch plants are: pronounced nonlinearities, process/model mismatch, time varying process gains, presence of measurement noise, on-line sensors are unavailable or give delayed results, state estimation is difficult and computationally expensive. While the control of high-purity continuous distillation column is a subject often addressed in literature, there are very few papers regarding the control of high-purity batch distillation units.

This work aimed to develop an inferential control system for high-purity batch distillation columns, which is able to cope with the automation difficulties commonly encountered in practice. The control algorithm was first tested by simulation and then experimental runs were carried out in a pilot-scale batch distillation column to confirm the practical applicability of the designed inferential control system.

An Extended Kalman Filter (EKF) for batch distillation columns was developed to provide fast and reliable instantaneous composition values from few temperature measurements. The EKF was then combined with a control strategy based on the Globally Linearizing Control (GLC) structure, resulting in an inferential control system for constant distillate operation of high-purity batch distillation columns. The GLC controller was tested in a pilot-scale batch distillation column with 29 sieve trays. The separation of ethanol/1-propanol mixtures were considered in the experimental runs. The interface between the computer and the process was achieved by an AD/DA converter. Thermocouples were used to measure instantaneous temperature values at some column stages.

At each sampling period, the EKF provides instantaneous composition values from the temperature data the computer acquires. In order to keep the product quality at the set-point, the GLC controller updates the reflux ratio using the composition estimates, and the computer controls the position of the reflux magnetic valve to implement the calculated reflux ratio.

The number of sensors and the model integration interval showed to be important variables in the design of the EKF. Faster convergence and more accurate estimates were obtained by increasing the number of sensors and/or reducing the integration interval. However, above a certain number of sensors the improvement in the EKF performance may not be significant. Spiky reflux ratio profiles were observed when sensors were placed next to the top stages, where the temperature variations are small. As the sensors were placed further from the top stages, smoother manipulated and controlled variable profiles were obtained and the distillate product met the specified purity.

The inferential control system achieved tight composition control. The selection of the sensors locations must be a trade-off between obtaining noise reduction and guaranteeing that the EKF will provide acceptable estimate accuracy. Due to its robustness with regards to plant/model mismatch, uncertainty in the initial system state and measurement errors, the proposed inferential control scheme is flexible and demonstrated to be feasible for practical on-line applications.

**Keywords:** batch distillation; high-purity; inferential control, Kalman filter

## SUMÁRIO

<b>AGRADECIMENTOS</b> .....	v
<b>RESUMO</b> .....	vii
<b>ABSTRACT</b> .....	ix
<b>SUMÁRIO</b> .....	xi
<b>LISTA DE FIGURAS</b> .....	xv
<b>LISTA DE TABELAS</b> .....	xx
<b>NOMENCLATURA</b> .....	xxii
<b>1- INTRODUÇÃO</b> .....	1
1.1- Por que um processo em batelada ? .....	2
1.2- Por que destilação em batelada ?.....	5
1.3- Por que alta pureza ?.....	5
1.4- A química fina no Brasil.....	6
1.5- Estimativa do estado de sistemas e controle por inferência.....	7
1.6- Objetivo do trabalho.....	9
<b>2- REVISÃO DA LITERATURA</b> .....	10
2.1- Controle de colunas de destilação em batelada (pureza baixa e moderada).....	11
2.2- Destilação contínua de alta pureza – aspectos dinâmicos e problemas de controle.....	17
2.3- Estratégias de controle de colunas de destilação contínuas de alta pureza.....	22
2.3.1. Estratégias testadas em simuladores.....	22
2.3.2- Estratégias testadas experimentalmente.....	23
2.4- Conclusões da análise da literatura.....	24
<b>3- MATERIAIS E MÉTODOS</b> .....	25
3.1- FILTRO DE KALMAN.....	26
3.1.1- Por que utilizar uma abordagem estocástica ?.....	26
3.1.2. Conceitos básicos de probabilidade e variáveis aleatórias.....	28
3.1.3- Hipóteses do Filtro de Kalman.....	33
3.1.4- Como o Filtro de Kalman funciona.....	37

3.2- FILTRO DE KALMAN ESTENDIDO.....	40
3.3- MODELO DA COLUNA DE DESTILAÇÃO EM BATELADA UTILIZADO NO FILTRO DE KALMAN.....	43
3.3.1- Modelo do sensor.....	45
3.4- FILTRO DE KALMAN ESTENDIDO PARA COLUNAS DE DESTILAÇÃO EM BATELADA.....	45
3.4.1- Implementação do Filtro de Kalman Estendido.....	46
3.5- ESCOLHA DA ESTRATÉGIA DE OPERAÇÃO DA COLUNA DE DESTILAÇÃO EM BATELADA.....	47
3.6- ESTRATÉGIAS DE CONTROLE.....	54
3.6.1- Controle de processos não-lineares.....	54
3.7- LINEARIZAÇÃO “FEEDBACK”.....	56
3.7.1- Abordagens da linearização “feedback”.....	56
3.7.2- Ferramentas matemáticas.....	57
3.7.3- Linearização entrada/saída (“input/output linearization”).....	59
3.8- APLICAÇÃO DO MÉTODO DE LINEARIZAÇÃO ENTRADA/SAÍDA EM COLUNAS DE DESTILAÇÃO EM BATELADA.....	61
3.9- MONTAGEM EXPERIMENTAL.....	63
3.10- PROGRAMA DE AQUISIÇÃO DE DADOS E CONTROLE.....	66
<b>4- RESULTADOS E DISCUSSÕES.....</b>	<b>68</b>
4.1- SIMULAÇÃO E SINTONIA DO FILTRO DE KALMAN ESTENDIDO (FKE).....	69
4.2- SIMULAÇÃO DO CONTROLADOR POR INFERÊNCIA DO TIPO GLC.....	88
4.2.1- Colunas de alta pureza e a necessidade do uso de estimadores de estado.....	88
4.2.2- Análise por decomposição em valores singulares ("singular value decomposition-SVD").....	94
4.2.3- Testes com o controlador por inferência do tipo GLC.....	98
4.3- RESULTADOS EXPERIMENTAIS DO CONTROLADOR POR INFERÊNCIA DO TIPO GLC.....	101

4.3.1- Corridas em malha aberta.....	101
4.3.1.1- Sintonia do parâmetro $Q$ do Filtro de Kalman Estendido.....	102
4.3.1.2- Análise da influência da posição de dois sensores na inferência da composição do destilado.....	104
4.3.1.3- Análise da influência do número de sensores na inferência da composição do destilado.....	106
4.3.1.4- Análise da influência da posição do segundo sensor, sendo a posição do primeiro sensor fixa.....	108
4.3.2- Corridas em malha fechada.....	109
<b>5- CONCLUSÕES.....</b>	<b>115</b>
5.1- Sugestões para trabalhos futuros.....	118
<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....</b>	<b>120</b>
<b>ANEXO I: ELEMENTOS DAS MATRIZES E VETORES DO FILTRO DE KALMAN ESTENDIDO PARA COLUNAS DE DESTILAÇÃO EM BATELADA.....</b>	<b>127</b>
<b>ANEXO II: FLUXOGRAMA DO PROGRAMA DE AQUISIÇÃO DE DADOS E CONTROLE.....</b>	<b>135</b>

## LISTA DE FIGURAS

1.1	Razões para o uso de processos em batelada (HASEBE e HASHIMOTO, 1996).....	3
2.1	Resposta em malha aberta para perturbações em degrau na composição de alimentação (FUENTES e LUYBEN, 1983).....	19
2.2	Resposta em malha aberta para perturbações em degrau na vazão de vapor (FUENTES e LUYBEN, 1983).....	19
3.1	Exemplos de saídas de sistemas determinísticos (a) e aleatórios (b). (BENTLEY, 1995).....	27
3.2	Exemplos de funções de distribuição e densidade de probabilidade. (a) uniforme; (b) Gaussiana. (MAYBECK, 1994).....	30
3.3	Espectro de potências e densidade do espectro de potências. (BENTLEY, 1995).....	34
3.4	Densidade do espectro de potências do sistema e dos ruídos. (MAYBECK, 1994).....	36
3.5	Obtenção da estimativa de X a partir de funções densidade de probabilidade condicionais (adaptado de MAYBECK, 1994).....	38
3.6	Obtenção da estimativa futura de X, propagando-se a função densidade de probabilidade condicional (adaptado de MAYBECK, 1994).....	39
3.7	Regiões em que CQ (pureza constante) e CR (razão de refluxo constante) têm um desempenho 2% inferior a DO (política ótima). As regiões delimitadas por ROBINSON (1971) e KERKHOF e VISSERS (1978) também são apresentadas. (BETLEM <i>et al.</i> , 1998).....	51
3.8	Determinação da quantidade ótima de fração intermediária em função de $\sigma_{\text{fração}}$ . Resultados de 32 simulações. Condições: $1,6 \leq \alpha \leq 4$ ; $x_F = 0,5; 0,6; 0,8$ ; $x_{D,SP} = 0,99; 0,98$ ; $x_{B,SP} = 0,01; 0,05$ ; $\epsilon_{\text{coluna}} = 0,53$ ; $NP = 21$ (BETLEM <i>et al.</i> , 1998).....	52
3.9	Esquema da coluna de destilação em batelada.....	64
3.10	Sistema de automação e controle.....	65

4.1	Estimativas do filtro de Kalman para a corrida B1 da Tabela 4.2. (a) variação das composições do refeedor e do destilado durante a batelada; (b) perfis de composição instantâneos ao longo da coluna.....	74
4.2	Estimativas do filtro de Kalman para a corrida B2 da Tabela 4.2. (a) variação das composições do refeedor e do destilado durante a batelada; (b) perfis de composição instantâneos ao longo da coluna.....	75
4.3	Estimativas do filtro de Kalman para a corrida B3 da Tabela 4.2. (a) variação das composições do refeedor e do destilado durante a batelada; (b) perfis de composição instantâneos ao longo da coluna.....	76
4.4	Estimativas do filtro de Kalman para a corrida B4 da Tabela 4.2. (a) variação das composições do refeedor e do destilado durante a batelada; (b) perfis de composição instantâneos ao longo da coluna.....	77
4.5	Estimativas do filtro de Kalman para a corrida B5 da Tabela 4.2. (a) variação das composições do refeedor e do destilado durante a batelada; (b) perfis de composição instantâneos ao longo da coluna.....	78
4.6	Estimativas do filtro de Kalman para a corrida B6 da Tabela 4.2. (a) variação das composições do refeedor e do destilado durante a batelada; (b) perfis de composição instantâneos ao longo da coluna.....	79
4.7	Estimativas do filtro de Kalman para a corrida B7 da Tabela 4.2. (a) variação das composições do refeedor e do destilado durante a batelada; (b) perfis de composição instantâneos ao longo da coluna.....	80
4.8	Estimativas do filtro de Kalman para a corrida B8 da Tabela 4.2. (a) variação das composições do refeedor e do destilado durante a batelada; (b) perfis de composição instantâneos ao longo da coluna.....	81
4.9	Estimativas do filtro de Kalman para a corrida B9 da Tabela 4.2. (a) variação das composições do refeedor e do destilado durante a batelada; (b) perfis de composição instantâneos ao longo da coluna.....	82
4.10	Corrida com o sistema ternário (Tabela 4.3) e 5 sensores nos estágios 1, 5, 9, 13, 17. (a) variação das composições do refeedor e do destilado durante a batelada; (b) perfis de composição instantâneos ao longo da coluna.....	85

4.11	Corrida com o sistema ternário (Tabela 4.3) e 3 sensores nos estágios 1, 9, 17. (a) variação das composições do refeedor e do destilado durante a batelada; (b) perfis de composição instantâneos ao longo da coluna.....	86
4.12	Corrida com o sistema ternário (Tabela 4.3) e 7 sensores nos estágios 1, 4, 7, 10, 13, 15, 17. (a) variação das composições do refeedor e do destilado durante a batelada; (b) perfis de composição instantâneos ao longo da coluna.....	87
4.13	Controle da composição do destilado por inferência direta utilizando sensores ideais nos estágios 1 e 2. (a) baixa pureza; (b) alta pureza.....	91
4.14	Controle da composição do destilado por inferência direta utilizando sensores com desvio padrão de $\pm 0,1^{\circ}\text{C}$ nos estágios 1 e 2. (a) baixa pureza; (b) alta pureza.....	92
4.15	Perfis instantâneos de temperatura durante a operação com pureza constante. (a) baixa pureza; (b) alta pureza.....	93
4.16	Análise SVD. (a) operação com pureza constante e perturbações com desvio padrão de $\pm 0,1$ em R; (b) melhor posição para o sensor; (c) segunda melhor posição para o sensor.....	97
4.17	Controle da composição do destilado de alta pureza utilizando o filtro de Kalman e sensores nos estágios 4 e 8.....	99
4.18	Controle da composição do destilado de alta pureza utilizando o filtro de Kalman e sensores nos estágios 6 e 8.....	99
4.19	Controle da composição do destilado de alta pureza utilizando o filtro de Kalman e sensores nos estágios 8 e 10.....	100
4.20	Controle da composição do destilado de alta pureza utilizando o filtro de Kalman e sensores nos estágios 10 e 12.....	100
4.21	Sintonia do parâmetro $Q$ ( $p = 2$ nos estágios 1 e 30).....	103
4.22	Sintonia do parâmetro $Q$ ( $p = 2$ nos estágios 4 e 30).....	104
4.23	Influência da posição de dois sensores na inferência da composição do destilado.....	105

4.24	Influência do número de sensores na inferência da composição do destilado. (a) primeiro sensor no estágio 1;(b) primeiro sensor no estágio 4.....	107
4.25	Influência da posição do segundo sensor, sendo a posição do primeiro sensor fixa.....	108
4.26	Controle por inferência com dois sensores posicionados nos estágios 4 e 9 (corrida C1).....	111
4.27	Controle por inferência (GLC apenas com termo proporcional) com dois sensores posicionados nos estágios 4 e 9 (corrida C2).....	111
4.28	Controle por inferência com dois sensores posicionados nos estágios 1 e 4. (corrida C3).....	113
4.29	Controle por inferência com dois sensores posicionados nos estágios 9 e 14 (corrida C4).....	113
4.30	Controle por inferência com dois sensores posicionados nos estágios 14 e 19 (corrida C5).....	114
4.31	Controle por inferência com dois sensores posicionados nos estágios 9 e 14 com um $R_{\min}$ menor (corrida C6).....	114

## LISTA DE TABELAS

1.1 Equipamentos mais utilizados em plantas em batelada (LUCET <i>et al.</i> , 1996).....	5
1.2 Dados estatísticos da química fina no Brasil.....	7
3.1 Cálculo do grau de dificuldade de separação para as condições operacionais a serem adotadas nos experimentos.....	52
4.1 Condições operacionais e parâmetros do Filtro de Kalman adotados nas corridas binárias.....	70
4.2 Parâmetros variados nas corridas binárias.....	71
4.3 Condições operacionais e parâmetros do Filtro de Kalman adotados nas corridas ternárias.....	84
4.4 Condições operacionais e parâmetros do controlador.....	89
4.5 Condições operacionais e parâmetros do Filtro de Kalman adotados nas corridas experimentais em malha aberta.....	101
4.6 Sintonia do parâmetro $Q$ ( $p = 2$ nos estágios 1 e 30).....	102
4.7 Sintonia do parâmetro $Q$ ( $p = 2$ nos estágios 4 e 30).....	102
4.8 Influência da posição de dois sensores na inferência da composição do destilado.....	105
4.9 Influência do número de sensores na inferência da composição do destilado (primeiro sensor no estágio 1).....	107
4.10 Influência do número de sensores na inferência da composição do destilado (primeiro sensor no estágio 4).....	107
4.11 Influência da posição do segundo sensor, sendo a posição do primeiro sensor fixa.....	109
4.12 Condições operacionais, parâmetros do FKE e do controlador GLC para as corridas em malha fechada.....	109
4.13 Resultados das corridas em malha fechada.....	110

## NOMENCLATURA

$A, B, C$  = matrizes

$A_i, B_i, C_i$  = constantes da equação de Antoine para o componente  $i$

$B$  = número de moles do produto de fundo (destilação em batelada) ou vazão molar do produto de fundo (destilação contínua)

$CN$  = número de condição

$D$  = vazão molar de destilado

$Dest$  = número de moles de destilado

$dt$  = tempo gasto na execução de subrotinas com a válvula na posição refluxo

$e$  = vetor erro da estimativa

$F$  = número de moles da alimentação fresca

$\bar{F}$  = matriz

$f$  = vetor de funções contínuas não-lineares

$\bar{f}$  = vetor de funções discretas não-lineares

$F_X$  = função de distribuição de probabilidade

$f_X$  = função densidade de probabilidade

$F_{X,Z}$  = função de distribuição de probabilidade conjunta

$f_{X,Z}$  = função densidade de probabilidade conjunta

$f_{X|Z}$  = função densidade de probabilidade condicional

$g$  = vetor de funções contínuas não-lineares

$\bar{H}$  = matriz

$h$  = vetor de funções contínuas não-lineares

$\bar{h}$  = vetor de funções discretas não-lineares

$(\Delta H_{\text{mist}}^{\text{vap}})_{NP+1}$  = calor latente de vaporização do líquido no refeedor

$K$  = matriz de ganhos

$K_c$  = parâmetro do controlador por linearização entrada/saída

$L$  = vazão molar de líquido

$L$  = matriz de ganhos do filtro de Kalman

$M$  = acúmulo molar de líquido

$M$  = vetor de variáveis manipuladas

$\mathcal{M}$  = modelo matemático

$m$  = média ou valor esperado

$M_{Bo}$  = número de moles da carga inicial

$N$  = número de observações (amostras)

$n$  = dimensão do vetor de variáveis de estado

$NC$  = número de componentes

$nkal$  = número de integrações por período de amostragem ( $nkal \times \Delta t = Ta$ )

$NP$  = número de pratos

$P$  = pressão do sistema

$\mathbf{P}$  = matriz covariância

$p$  = número de sensores

$P(A)$  = probabilidade do evento  $A$

$P_i$  = número de moles do produto mais rico no componente  $i$

$P_i^{\text{sat}}(T)$  = pressão de saturação do componente  $i$  na temperatura  $T$

$\mathbf{P}_o$  = matriz covariância da estimativa inicial do vetor de variáveis de estado

$Pot$  = potência fornecida ao refeedor

$ps\_m$  = estágio da coluna onde está posicionado o  $m$ -ésimo sensor

$\mathbf{Q}$  = matriz covariância dos ruídos do estado

$R$  = razão de refluxo

$\mathbf{R}$  = matriz covariância dos ruídos das medidas

$r$  = grau relativo do sistema

$R_{\text{controle}}$  = razão de refluxo calculada pelo controlador

$r_{ij}$  = coeficiente de correlação de  $X_i$  e  $X_j$

$R_{\text{min}}$  = valor mínimo de razão de refluxo permitido durante a batelada

$SC$  = número de moles da fração intermediária

$T$  = temperatura

$\mathbf{T}$  = vetor de temperaturas dos estágios

$t$  = tempo

$\Delta t$  = passo de integração

$Ta$  = período de amostragem

$t_D$  = tempo que a válvula passa na posição destilado

$t_L$  = tempo que a válvula passa na posição refluxo

$t_{Linha}$  = tempo de espera da válvula na posição refluxo

$T_o$  = período de observação

$t_{TOT}$  = tempo total de batelada

$U$  = matriz de vetores singulares da esquerda

$u$  = vetor de entradas do processo

$V$  = vazão molar de vapor

$V$  = matriz de vetores singulares da direita

$v$  = vetor ruído das medidas

$\nu_r$  = volatilidade relativa

$w$  = vetor ruído do estado

$W_n$  = potência cumulativa

$w_n$  = potência do  $n$ -ésimo harmônico da série de Fourier

$X$  = vetor de variáveis de estado

$x_B$  = fração molar do componente mais volátil no retervedor

$x_{Bo}$  = fração molar do componente mais volátil na carga inicial

$x_{B,SP}$  = especificação da fração molar do componente mais volátil no produto de fundo

$x_D$  = fração molar do componente mais volátil no destilado

$x_{D,médio}$  = fração molar média do componente mais volátil no destilado

$x_{D,SP}$  = especificação da fração molar do componente mais volátil no destilado (“set-point”)

$x_F$  = fração molar do componente mais volátil na alimentação fresca

$x_{i,Bo}$  = fração molar do componente  $i$  na carga inicial

$x_{i,j}$  = fração molar do componente  $i$  na fase líquida no estágio  $j$

$x_j$  = fração molar do componente mais volátil na fase líquida no estágio  $j$

$\hat{X}_{n|k}$  = estimativa do vetor de variáveis de estado no  $n$ -ésimo instante de amostragem obtida a partir das saídas medidas até o  $k$ -ésimo instante de amostragem

$\hat{X}_0$  = estimativa inicial do vetor de variáveis de estado

$x_{Pi,SP}$  = especificação da fração molar do componente  $i$  no produto rico no componente  $i$

$Y$  = vetor de saídas controladas

$y_{i,j}$  = fração molar do componente  $i$  na fase vapor no estágio  $j$

$y_j$  = fração molar do componente mais volátil na fase vapor no estágio  $j$

$\mathbf{Z}$  = vetor de medidas

$\mathbf{z}_F$  = vetor de composições da alimentação de colunas de destilação contínuas

$\alpha$  = volatilidade relativa

$\varepsilon_{coluna}$  = eficiência global da coluna

$\varphi$  = densidade do espectro de potências

$\boldsymbol{\eta}$  = vetor de variáveis de estado transformadas

$v$  = variável de entrada transformada

$\boldsymbol{\Sigma}$  = matriz diagonal de valores singulares

$\sigma$  = desvio padrão do ruído das medidas de temperatura

$\beta$  = parâmetro do controlador GLC

$\sigma_{dif}$  = grau de dificuldade de separação

$\sigma_{esg}$  = grau de esgotamento

$\sigma_{fracção}$  = grandeza para analisar se é vantajoso reciclar a fração intermediária (equação 3.48)

$\sigma_R$  = desvio padrão do ruído na razão de refluxo

$\tau_d$  = constante de tempo dominante

$\tau_I$  = parâmetro do controlador

$\boldsymbol{\omega}$  = vetor de variáveis de saída transformadas

$\omega$  = frequência

$\omega_I$  = frequência fundamental

$\boldsymbol{\xi}$  = vetor de variáveis de estado transformadas

$\boldsymbol{\Psi}$  = matriz correlação

subscritos:  $i$  = componente

$j$  = estágio

$k$  =  $k$ -ésimo instante de amostragem

$NP+1$  = refeededor

$0$  = condensador

sobrescrito:  $\hat{\phantom{x}}$  = valor estimado

## 1- INTRODUÇÃO

Antes de apresentar o objetivo do trabalho desenvolvido no Doutorado, os motivos que levaram à escolha da destilação em batelada de alta pureza como objeto de estudo serão discutidos. Para tanto, as seguintes perguntas devem ser respondidas:

### 1.1- Por que um processo em batelada ?

A década de 90 foi marcada pelo acelerado desenvolvimento tecnológico. Às portas do ano 2000 e da chamada era da “modernidade”, é interessante notar como uma das mais antigas formas de produção - o processo em batelada - tem atraído a atenção de diversos setores industriais.

As plantas em batelada já são um importante segmento das indústrias químicas e a sua participação, tanto econômica quanto em volume de produção, tem crescido mundialmente.

Diversos tipos de indústria utilizam processos em batelada para a produção de, por exemplo, medicamentos, agroquímicos, alimentos, vidros, isolantes, resinas, tintas, corantes e produtos do ramo da química fina (produtos de alta pureza).

Numa pesquisa realizada no Japão, perguntou-se a diversos setores industriais quais os principais motivos para a utilização de processos em batelada. Os resultados apresentados na Figura 1.1 indicam que, exceto nos casos em que o uso de processos contínuos é tecnicamente inviável, todas as demais razões citadas apontam alguma vantagem do processo em batelada em relação ao processo contínuo. Isso significa que, mesmo nos casos em que o processo contínuo é tecnicamente viável, existem bons motivos para que as indústrias optem pelo processo em batelada.

A principal vantagem das plantas em batelada é a sua *flexibilidade*, permitindo o processamento de diversos tipos de produto em diferentes quantidades e especificações. Além disso, o processo em batelada permite a obtenção de produtos de alta qualidade, pequeno volume e elevado valor agregado.

Segundo REKLAITIS (1996), as indústrias “do futuro” deverão:



Figura 1.1. Razões para o uso de processos em batelada (HASEBE e HASHIMOTO, 1996)

1. Processar diversos tipos de produto e acompanhar as variações na demanda de cada um deles (indústrias flexíveis).
2. Atender rapidamente às necessidades e às exigências dos consumidores.
3. Melhorar e manter um padrão de qualidade.
4. Operar com mais segurança.
5. Adotar uma política de proteção ambiental.
6. Ser competitivas e economicamente rentáveis.

Por oferecerem flexibilidade e produtos de alta qualidade, os processos em batelada apresentam pré-requisitos essenciais para fazerem parte das chamadas “indústrias do futuro”. Dessa forma, o interesse por processos em batelada nas indústrias químicas tende a crescer.

Porém, ainda há muito o que fazer para a melhoria do projeto e operação das plantas em batelada. Segundo REKLAITIS (1996), em termos de projeto, é necessário o desenvolvimento de ferramentas para:

- Projeto preliminar de plantas multi-tarefas

#### 4 *Capítulo 1- Introdução*

- Determinação da melhor sequência a ser seguida no processo em batelada, ou seja, a elaboração de receitas ótimas
- Definição do “lay-out” da planta

Numa planta contínua, o tipo de produto, a sua especificação e a sua demanda são bem definidos. O projeto dos equipamentos, a escolha da sequência de operações unitárias e do “lay-out” da planta são feitos para atender especificamente a um objetivo de produção.

Nos processos em batelada, a planta deve ser capaz de processar diversos tipos de produto, com especificação e demanda variáveis. Em comparação com as plantas contínuas, o projeto, seleção de equipamentos e a escolha do “lay-out” são relativamente mais difíceis.

Em relação à operação de plantas em batelada, o autor ressalta a necessidade de avanços nos seguintes itens:

- Monitoramento
- Automação
- Controle (regulatório e supervísório)
- Detecção de falhas
- Otimização
- Programação de produção (“scheduling”)

Devido ao comportamento não-linear e não-estacionário dos processos em batelada, as melhorias acima citadas não são apenas metas, mas verdadeiros desafios.

Segundo HASEBE e HASHIMOTO (1996), outro fato importante a ser considerado é a tendência ao uso do sistema de produção “just-in-time”. A estratégia “just-in-time” visa diminuir os estoques de matéria-prima e produtos. Para minimizar o estoque, a planta produz exatamente a quantidade encomendada e o final da produção deve coincidir com a data de entrega solicitada pelos consumidores. Para atender rapidamente aos diferentes pedidos, a indústria precisa adaptar-se, ou até mesmo reconfigurar-se, para processar o próximo produto.

Para atender (e sobreviver) às exigências cada vez maiores do mercado, a automação e controle de plantas em batelada são essenciais, pois, segundo HASEBE e HASHIMOTO (1996), a introdução de computadores proporciona:

- Redução de mão-de-obra
- Melhoria da qualidade dos produtos
- Redução dos gastos energéticos
- Aumento de produtividade
- Maior segurança

### 1.2- Por que destilação em batelada ?

Segundo LUCET *et al.* (1996), os equipamentos mais comumente encontrados em plantas em batelada são os que estão listados na Tabela 1.1. Os autores também apresentam alguns dados estatísticos a respeito da frequência com que esses equipamentos são utilizados nos processos em batelada. Pela análise da Tabela 1.1, verifica-se que a coluna de destilação é um equipamento bastante utilizado na purificação de produtos em processos em batelada.

Tabela 1.1. Equipamentos mais utilizados em plantas em batelada (LUCET *et al.*, 1996).

<b>equipamento</b>	<b>número de processos em batelada que o utilizam (dos 87 pesquisados)</b>
Reator pressurizado	23
Reator para compostos corrosivos	25
Reator à pressão atmosférica	62
Coluna de destilação acoplada a um reator	74
Coluna de destilação	52
Cristalizador	46
Floculador	35
Coluna de extração líquido-líquido	35

### 1.3- Por que alta pureza ?

A destilação em batelada é largamente empregada na indústria de química fina. Os produtos da química fina são de alta pureza e geralmente são produzidos em pequena escala. Como exemplos desses produtos, têm-se: ampicilina, aspirina, riboflavina (utilizados na indústria de medicamentos), ácido ascórbico, cloreto de cálcio, sulfato ferroso (aditivos de alimentos), acetona, éter etílico anidro, hexano (reagentes), ácido acético glacial, metanol, tolueno (utilizados na indústria eletrônica).

O padrão de pureza é estabelecido de acordo com a aplicação do produto. Por exemplo, de acordo com os padrões dos E.U.A (KIRK-OTHMER, 1983), o hidróxido de sódio empregado como reagente deve ter, no mínimo, 97% (em massa) de pureza; quando utilizado na indústria eletrônica, a pureza mínima exigida é de 98% (em massa).

Dessa forma, para que os diferentes padrões de pureza sejam atendidos, é indispensável o controle da composição dos produtos nas indústrias de química fina.

#### 1.4- A química fina no Brasil

As duas principais vantagens das plantas em batelada em relação às plantas contínuas são a flexibilidade em processar diversos tipos de produtos e a capacidade de obtenção de produtos de alta pureza e alto valor agregado. No entanto, tais vantagens têm o seu preço: devido ao caráter não-linear e não-estacionário dos processos em batelada, a automação e controle dessas plantas são relativamente mais difíceis. Nos casos tecnicamente possíveis, a baixa produtividade e a dificuldade de automação ainda inibem a substituição de processos contínuos por processos em batelada.

No cenário brasileiro, processos em batelada, em especial os processos voltados para a obtenção de produtos do ramo da química fina, têm um papel relevante na economia nacional.

Os produtos da química fina podem ser agrupados em duas categorias: *princípios ativos* e *especialidades da química fina*. Os princípios ativos são produtos químicos intermediários de síntese e de usos e são normalmente comercializados com alto teor de pureza. As chamadas especialidades da química fina abrangem os produtos formulados encontrados nos segmentos industriais de produtos farmacêuticos e veterinários, defensivos agrícolas, catalisadores, produtos aromáticos e fragrâncias.

No Brasil, a maior parte da produção das indústrias do ramo da química fina constitui-se das chamadas especialidades da química fina, ou seja, produtos formulados. Os princípios ativos utilizados na formulação das especialidades químicas são, na sua maioria, importados. Para os produtos da química fina apresentados na Tabela 1.2, as importações (em dólar) sempre superam as exportações.

De uma forma geral, princípios ativos são substâncias de alta pureza e de alto valor agregado, produzidos em plantas em batelada e purificados frequentemente pelo processo de destilação em batelada. Por serem de alto valor agregado, a importação de ativos acaba pesando muito na balança comercial brasileira.

Tabela 1.2. Dados estatísticos da química fina no Brasil.

Fonte: ABIFINA (Associação Brasileira das Indústrias de Química Fina)

Discriminação	Faturamento Total			Importações			Exportações		
	1996	1997	1998	1996	1997	1998	1996	1997	1998
Defensivos animais	828000	855000	861000	ND	ND	ND	ND	ND	ND
Aromas e fragrâncias	308000	320000*	365000*	96300	100800*	109500*	ND	ND	ND
Defensivos agrícolas	1793000	2181000	2560190	821079	997000	1002457*	ND	367420*	357423*
Medicamentos	9690000	10350000	10310000	602336	773220	929347	79509*	98108*	136231*
Corantes e pigmentos	305778*	266418*	286352*	150514*	160035*	148266*	71669*	86860*	92714*
Farmoquímicos	620000	651000	598000	1184000	1260000	1197000	203000	226000	216000
Catalisadores	121000*	108000*	125000*	42250*	58236*	74449	10430*	13623*	14923*
Aditivos	ND	ND	ND	ND	ND	ND	ND	ND	ND
<b>TOTAL</b>	13665459	14731209	15105542	2824477	3332154	3461019	367635	787669	817291

Em US\$1.000

\* Valores estimados pela ABIFINA

ND - não disponível

### 1.5- Estimativa do estado de sistemas e controle por inferência

As variáveis que caracterizam a qualidade do produto final são chamadas de variáveis primárias. Distribuição de pesos moleculares de polímeros, octanagem da gasolina, viscosidade, densidade e composição de produtos finais são exemplos de variáveis primárias.

Variáveis que caracterizam a qualidade do produto são geralmente difíceis de serem medidas em tempo real, dificultando a implementação de controladores automáticos. Para certos índices de qualidade (como o sabor de alimentos), a instrumentação "on-line" é inexistente. Em outros casos, a instrumentação "on-line" existe mas o seu custo é muito alto e/ou o tempo de análise é relativamente grande e introduz atrasos na malha de controle.

Quando as variáveis primárias são difíceis (ou impossíveis) de serem medidas "on-line", muitas plantas acabam optando pelo controle manual. No controle manual, um operador utiliza todas as informações disponíveis (inclusive resultados de análises feitas em laboratório) para tentar prever o comportamento do processo. O próprio operador manipula algumas variáveis de processo com base na sua experiência e em procedimentos operacionais. O sucesso do controle manual depende muito do treinamento e da experiência do operador, bem como do seu estado físico e mental.

Outra forma de solucionar o problema de controle de variáveis primárias difíceis de serem medidas consiste em aplicar uma estratégia conhecida como controle em cascata paralelo. Essa estratégia é frequentemente empregada no controle da composição de produtos de colunas de destilação contínuas. Duas malhas de controle são utilizadas: uma malha secundária que controla a temperatura de um prato da coluna e uma malha primária que opera numa escala de tempo definida pelo tempo de resposta de um analisador de composição (por exemplo, um cromatógrafo a gás). A malha primária é utilizada para corrigir o "set-point" da malha secundária toda vez que um novo resultado de análise de composição está disponível. O controle em cascata paralelo se baseia na hipótese de que se a variável secundária (temperatura de um prato) for mantida constante, então a variável primária (composição) também permanecerá constante. Essa estratégia também assume que variações na variável secundária irão afetar a variável primária. No entanto, há casos em que perturbações afetam a variável secundária mas não afetam a variável primária, e vice-versa. Muitas vezes a relação entre as variáveis primárias e as variáveis secundárias é não-linear e fortemente dependente das condições operacionais, sendo muito difícil sintonizar as duas malhas ao mesmo tempo.

O controle por inferência tem sido uma alternativa viável para o controle de variáveis primárias difíceis de serem medidas. O controle por inferência consiste em estimar (ou inferir) as variáveis primárias a partir de medidas de variáveis secundárias (tais como, temperatura, pressão e vazões) que são mais facilmente medidas. Os valores inferidos são então utilizados no algoritmo de controle.

Na destilação em batelada, a composição é a variável primária que caracteriza a qualidade do produto destilado. No ramo da química fina, os produtos devem atender a rígidos padrões de pureza exigidos pelo mercado, tornando o controle de composição indispensável. Porém, os analisadores de composição "on-line" são, em geral, caros, lentos

e difíceis de serem instalados nas correntes de processo. Como o tempo de uma batelada é limitado, é muitas vezes inviável controlar a operação a partir de medidas de composição obtidas "off-line" em laboratórios. Dessa forma, é necessário inferir valores instantâneos de composição a partir de medidas secundárias que possam ser obtidas em tempo real.

### **1.6- Objetivo do trabalho**

A destilação em batelada tem sido cada vez mais utilizada na indústria para purificação de misturas de pequeno volume e obtenção de produtos de alta pureza. Considerando a importância do processo de destilação em batelada e a necessidade de técnicas que auxiliem a sua automação, o trabalho realizado teve como objetivo o desenvolvimento e implementação de uma estratégia para controle da composição do destilado de colunas de destilação em batelada de alta pureza, através da manipulação da razão de refluxo. Após um estudo por simulação, testes experimentais da estratégia de controle proposta foram feitos numa coluna de destilação em batelada em escala piloto. Um computador foi conectado "on-line" à coluna para monitorar a operação, controlar a razão de refluxo e fazer a leitura de sensores de temperatura posicionados em alguns estágios da coluna. Um estimador de estado foi também desenvolvido para a inferência de valores instantâneos de composição a partir de medidas de temperatura.

## **CAPÍTULO 2- REVISÃO DA LITERATURA**

## 2- ANÁLISE DA LITERATURA

Uma coluna de destilação é dita de alta pureza quando os seus produtos apresentam pureza de, no mínimo, 99%. Muitos trabalhos na literatura tratam da dinâmica e controle de colunas de destilação contínua de alta pureza. No entanto, na chamada "literatura aberta", nada foi encontrado a respeito de colunas em batelada de alta pureza.

Inicialmente, os principais trabalhos na área de controle de colunas de destilação em batelada (pureza baixa e moderada) foram revisados. Considerando a escassez de trabalhos que tratem de colunas em batelada de alta pureza, trabalhos sobre destilação contínua de alta pureza foram estudados, procurando-se buscar os fundamentos que governam a dinâmica de colunas de alta pureza e identificar as diferenças e semelhanças que possam existir entre colunas contínuas de alta pureza e colunas em batelada de alta pureza.

### 2.1- Controle de colunas de destilação em batelada (pureza baixa e moderada)

No controle de colunas de destilação em batelada, o conhecimento de valores instantâneos de composição é essencial, já que importantes decisões a serem tomadas durante um ciclo de batelada (tais como, quando iniciar a coleta de destilado, determinação do início e fim da coleta de produtos e intermediários, término da batelada) dependem do monitoramento da composição. Porém, medidores de composição são, em geral, complexos, caros, exigem frequente manutenção e podem inserir um tempo morto na malha de controle. Devido a essas dificuldades, alguns autores procuraram desenvolver métodos para inferência de composições a partir de medidas secundárias, tais como temperatura, vazões e pressões.

QUINTERO-MARMOL *et al.* (1991) aplicaram a técnica de estimativa do estado de sistemas denominada Observadores Estendidos de Luenberger para a predição de perfis de composição instantâneos de colunas de destilação em batelada a partir de valores de temperatura. O método proposto foi testado por simulação. O projeto de observadores é semelhante ao projeto de controladores "feedback". Os ganhos são obtidos posicionando-se os pólos do observador em malha fechada no lado esquerdo do plano complexo a fim de

que o erro (diferença entre o valor real do processo e o valor estimado pelo modelo usado no observador) tenda a zero.

Considerando o seguinte sistema linear:

$$\begin{aligned}\dot{X} &= AX + Bu \\ Z &= CX\end{aligned}\tag{2.1}$$

onde  $X$  é o vetor de variáveis de estado,  $u$  é o vetor de entradas do processo,  $Z$  é o vetor de saídas mensuráveis e  $A$ ,  $B$  e  $C$  são matrizes. O observador de um sistema linear representado por (2.1) é:

$$\dot{\hat{X}} = (A - KC)\hat{X} + KZ + Bu, \quad \text{ou} \quad \dot{\hat{X}} = A\hat{X} + K(Z - C\hat{X}) + Bu$$

A equação diferencial do erro ( $e$ ) é:

$$\begin{aligned}e &= X - \hat{X} \\ \dot{e} &= (A - KC)e = A_c e\end{aligned}$$

Portanto,  $K$  é escolhido de tal forma que os autovalores de  $A_c = (A - KC)$  se situem no lado esquerdo do plano complexo para que a estimativa do estado do sistema se aproxime do estado real.

Se um modelo não-linear for utilizado, o observador é então denominado *observador estendido*. Se  $f$  e  $h$  são funções não-lineares:

$$\begin{aligned}\dot{X} &= f(X, u) \\ Z &= h(X)\end{aligned}\tag{2.2}$$

as equações do observador são:

$$\begin{aligned}\dot{\hat{X}} &= f(\hat{X}, u) + K[Z - h(\hat{X})] \\ \hat{z} &= h(\hat{X})\end{aligned}$$

$A$  e  $C$  são matrizes cujos elementos são dados, respectivamente, por:

$$a_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial X_j}; \quad c_{ij} = \frac{\partial h_i}{\partial X_j}$$

Para o projeto de observadores de colunas de destilação em batelada, as variáveis de estado escolhidas por QUINTERO-MARMOL *et al.* (1991) foram as composições da

fase líquida em cada estágio (refervedor, pratos e tambor de refluxo). O modelo matemático utilizado foi obtido assumindo-se as seguintes hipóteses: retenção de líquido nos pratos e no tambor de refluxo constante; calores latentes de vaporização aproximadamente iguais; volatilidade relativa constante; vazão de vapor efluente do refervedor constante.

O projeto do observador resume-se nos seguintes passos:

1. Escolher o número de sensores de temperatura (os autores sugerem  $NC+2$  sensores)
2. Linearizar o modelo do sistema para obtenção das matrizes  $A = \left\{ a_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right\}$  e  $C = \left\{ c_{ij} = \frac{\partial h_i}{\partial x_j} \right\}$
3. Utilizar valores médios de composição para calcular as matrizes  $A$  e  $C$ . Por exemplo, para um sistema ternário, calcular  $A$  e  $C$  considerando  $x_1 = x_2 = x_3 = 1/3$ .
4. Obter os autovalores de  $A$  (autovalores do sistema em malha aberta)
5. Selecionar os autovalores da malha fechada trocando os menores autovalores de  $A$  (mais lentos) por valores maiores (mais rápidos). Como uma regra geral, trocar  $(NC-1)$  autovalores para cada sensor de temperatura que exceda  $(NC-2)$  sensores. Por exemplo, para um sistema ternário com 3 medidas, existem 2 sensores a mais do que  $(NC-2) = (3-2) = 1$  e  $2 \times (NC-1) = 2 \times (3-1) = 4$  autovalores devem ser trocados.
6. Obter os ganhos  $K$  que posicionam os autovalores de  $A_c = A - KC$  nos lugares desejados (autovalores da malha fechada determinados no item 5)
7. Usar os ganhos obtidos em (6) com as equações não-lineares do modelo:

$$\dot{\hat{x}} = f(\hat{x}, u) + K[Z - h(\hat{x})]$$

8. Se houver convergência antes do início da coleta do destilado e se a resposta do observador não for muito subamortecida, o projeto do observador está concluído.
9. Se a convergência não for obtida rapidamente, aumentar o número de autovalores de  $A$  a serem trocados por valores maiores e voltar para (6). Se a resposta se tornar instável ou subamortecida demais, aumentar o número de sensores e voltar para (2).

Pelo método proposto, os ganhos do observador são obtidos "off-line". Cada conjunto de ganhos deve ser testado e, caso não haja convergência, novos ganhos devem ser determinados. Em alguns casos, demora-se muito até encontrar um conjunto de ganhos que fornece boas estimativas de composições.

O observador de Luenberger é um método determinístico, ou seja, pressupõe que o modelo do processo é perfeito e que há ausência de ruídos e perturbações. QUINTERO-MARMOL *et al.* (1991) relataram problemas de convergência quando a presença de ruídos nas medidas de temperatura foi considerada.

SHINSKEY (1984) alerta para três limitações básicas ao se utilizar a temperatura para inferir a composição:

1. Variação da composição dos componentes não-chave causará erros.
2. A sensibilidade da medida de temperatura é muito pequena para certas aplicações.
3. Variações na pressão causará erros.

Por exemplo, a diferença entre os pontos de ebulição do isobutano e do n-butano a 60 psig (4 atm) é apenas de 23 °F (12,8 °C). Uma variação de 1% molar de isobutano no produto de fundo n-butano alteraria o ponto de ebulição da mistura em apenas 0,25 °F (0,14 °C). O mesmo desvio de 0,25 °F (0,14 °C) pode ser causado por uma variação de pressão de 0,25 psi (0,017 atm) ou por uma mudança na concentração do componente não-chave isopentano de apenas 0,6% molar.

Um dos poucos trabalhos experimentais na linha de controle de colunas de destilação em batelada por microcomputador foi apresentado por STENZ e KUHN (1995). Um algoritmo que combina lógica "fuzzy" com um controlador integral com "anti-reset wind-up" foi implementado numa coluna de destilação em batelada com 50 mm de diâmetro, 1,50 m de altura, 10 pratos do tipo perfurado com borbulhadores, refeedor com aquecimento elétrico e operação à pressão atmosférica. A separação de uma mistura ternária foi considerada. As variáveis controladas foram a concentração das frações coletadas e a vazão de vapor. As temperaturas do refeedor, dos pratos 2, 4, 6, 8 e 10 e do prato do topo eram medidas durante a operação. A estratégia de operação foi desenvolvida a partir do conhecimento heurístico do operador que, antes da automação, operava a coluna manualmente.

Duas estratégias de controle foram desenvolvidas por FILETI e PEREIRA (1997) para manter constante a pureza dos produtos variando-se a razão de refluxo: controle adaptativo programável do tipo PI e controle preditivo via redes neurais.

Na estratégia de controle adaptativo, os parâmetros do controlador foram ajustados com base na temperatura do refeedor, de acordo com uma equação determinada previamente por simulação da operação.

O controlador adaptativo foi testado numa coluna de destilação em batelada de 75 mm de diâmetro, contendo 12 pratos do tipo perfurado com borbulhadores e um divisor de refluxo com válvula magnética atuada pelo microcomputador. Como sistema destilante utilizou-se uma mistura 33 mol % n-hexano/ 67 mol % n-heptano. As composições da mistura no refeedor e do vapor no topo da coluna foram inferidas a partir de medidas “on-line” de temperaturas, obtidas através de dois termopares localizados no refeedor e no divisor de refluxo. O objetivo do controle era manter a composição do produto destilado em 70 mol % de n-hexano.

OISIOVICI (1998) desenvolveu e testou experimentalmente três estratégias de controle da composição o destilado de colunas de destilação em batelada de pureza baixa/moderada:

1. Controle Adaptativo Auto-Ajustável: um modelo para o processo é proposto e os seus parâmetros são atualizados “on-line” com base nos valores atuais e passados das variáveis de entrada e saída do processo. O Método dos Mínimos Quadrados Recursivo é utilizado para a atualização dos parâmetros a cada período de amostragem. A partir do modelo, a ação do controlador é calculada.
2. Controle por Antecipação Baseado no Balanço de Massa: consiste em fazer um balanço de massa entre a base e o topo da coluna e utiliza as composições inferidas nesses pontos para calcular a razão de refluxo necessária para manter a pureza do destilado no valor desejado.
3. Controle Proporcional Baseado na Simulação da Coluna: a saída do controlador (razão de refluxo) é obtida a partir de uma função proveniente de dados de simulação, juntamente com um fator de correção que considera o desvio entre o comportamento real do sistema e o comportamento predito pelo pelo simulador.

Os testes experimentais com os sistemas etanol/água e etanol/1-propanol foram feitos numa coluna de destilação em batelada com 10 pratos perfurados e 40 mm de diâmetro. Um termopar foi conectado na base e outro no topo da coluna. Para diminuir o nível de ruído da temperatura lida pelo computador, foram feitos testes com alguns filtros digitais (OISIOVICI *et al.*, 1999). Os três controladores apresentaram bom desempenho. Comparando-se os resultados obtidos com as três estratégias de controle, pode-se concluir que, para uma mesma precisão de controle, a diferença entre os tempos de batelada não é significativa. Porém, o perfil de razão de refluxo do controlador por antecipação é mais suave do que os perfis obtidos com os controladores adaptativo e proporcional.

BAROLO e BERTO (1998) propuseram uma estratégia de controle para colunas de destilação em batelada baseada na estrutura NIMC ("Nonlinear Internal Model Control"). O observador estendido de Luenberger previamente desenvolvido por QUINTERO-MARMOL *et al.* (1991) foi utilizado na estimativa de composições. A estratégia foi testada por simulação, considerando a separação do sistema etanol/água ( $x_{D,SP} = 0,84$ ) e de um sistema ternário com volatilidades relativas constantes ( $x_{P1,SP}/x_{P2,SP} = 0,95/0,95$  e  $x_{P1,SP}/x_{P2,SP} = 0,93/0,97$ ). Segundo os autores, o observador estendido de Luenberger torna-se mais difícil de sintonizar à medida que o número de pratos da coluna aumenta. Quando o nível de ruído nas medidas de temperatura é alto, BAROLO e BERTO recomendam o uso de um estimador estocástico (como o Filtro de Kalman) para a inferência de composições.

O filtro de Kalman é um método recursivo para a estimativa do estado de sistemas dinâmicos. Por volta de 1960, Kalman desenvolveu essa técnica para sistemas lineares. Posteriormente, o filtro de Kalman foi estendido para sistemas não-lineares.

Com o surgimento de computadores cada vez mais rápidos, o filtro de Kalman tem sido utilizado em diversas aplicações: determinação de órbitas de naves espaciais e trajetórias de satélites, controle de rotas de navegação, processamento de imagens digitais, previsões econômicas, detecção de falhas e controle de processos. No entanto, observa-se que o filtro de Kalman tem sido muito mais empregado no setor aeroespacial do que em indústrias químicas. Segundo GEORGAKIS (1996), isso ocorre pois os modelos dos sistemas aeroespaciais são sempre aplicados a produtos com pouca variabilidade (aviões, naves espaciais). Nas plantas químicas, a variabilidade e o número de tipos de sistema são muito grandes. Além disso, os processos químicos são normalmente não-lineares e os

modelos não são tão exatos quanto os desenvolvidos no setor aeroespacial. Apesar disso, esse estimador de estado já foi aplicado com sucesso nas seguintes operações unitárias:

- Reatores de polimerização contínuos, em batelada e em semi-batelada (KIPARISSIDES *et al.*, 1981; SCHULER e SUZHEN, 1985; DIMITRATOS *et al.*, 1991; KOZUB e MACGREGOR, 1992).
- Biorreatores contínuos e em batelada (STEPHANOPOULO e SAN, 1984; RAMIREZ, 1987).
- Reatores em batelada com destilação (WILSON e MARTINEZ, 1997).
- Colunas de destilação contínuas (BARATTI *et al.*, 1995, 1998).

Pela pesquisa bibliográfica feita, o filtro de Kalman ainda não foi utilizado na estimativa do estado de colunas de destilação em batelada.

## **2.2- Destilação contínua de alta pureza – aspectos dinâmicos e problemas de controle**

Alguns autores analisaram por que o controle de colunas de alta pureza é mais difícil do que o controle de colunas de pureza baixa ou moderada. As principais conclusões desses estudos serão inicialmente apresentadas. Em seguida, será feita uma revisão das principais estratégias de controle de colunas de destilação contínua de alta pureza encontradas na literatura.

Quanto ao controle de composição em colunas de destilação, são considerados os seguintes casos (SKOGESTAD, 1997):

1. Malha aberta: não há controle de composição; os operadores ajustam manualmente as variáveis escolhidas para serem manipuladas.
2. Controle de composição em um ponto: há uma malha fechada para o controle da composição de apenas um dos produtos.
3. Controle de composição em dois pontos: a composição do destilado e a do produto de fundo são controladas.

O primeiro caso é comum na prática e exige um monitoramento contínuo para que se tenha uma operação estável. Do ponto de vista econômico, o controle de composição em dois pontos é o melhor. Segundo STANLEY e MCAVOY (1985), as indústrias relatam que esse tipo de controle leva a uma economia de energia de 10-30%. No entanto, alguns problemas relacionados ao controle das duas composições limitam a sua aplicação. São eles:

- Comportamento fortemente não-linear
- Resposta muito lenta
- Problemas com medidores, tempo morto para medidas de composição
- Dificuldades na escolha adequada das variáveis manipuladas
- Sistema altamente interativo

Esses fatores não estão presentes em todas as colunas (colunas com produtos de baixa pureza são mais fáceis de serem controladas). Porém, nas colunas de alta pureza tais problemas são mais acentuados.

As dificuldades de controle de colunas de destilação de alta pureza são tão severos que muitos projetistas procuram evitar a retirada simultânea de produtos de alta pureza no topo e na base. É prática comum na indústria construir duas colunas ao invés de uma ou operar uma coluna com pureza maior do que a especificada a fim de absorver possíveis flutuações durante a operação. Tais alternativas levam a um aumento dos investimentos fixos e dos custos energéticos, fazendo com que o estudo e a implementação do controle de colunas de destilação de alta pureza sejam de grande interesse.

Para compreender melhor o comportamento de colunas de destilação contínuas de alta pureza, é conveniente estudar a dinâmica do sistema em malha aberta.

Através de simulação digital de um modelo não-linear, FUENTES E LUYBEN (1983) estudaram a resposta dinâmica em malha aberta para diversos tipos de perturbação. Foram consideradas colunas binárias com produtos de topo e fundo com 5% (mol) a 10 ppm (mol) de impurezas e volatilidades relativas  $v_r = 2$  e  $v_r = 4$ . O modelo considerava: pratos teóricos, contradifusão equimolar, volatilidade relativa constante, alimentação e refluxo de líquido saturado, hidrodinâmica descrita pela fórmula de Francis.

A Figura 2.1 mostra as respostas em malha aberta para perturbações em degrau de 20% na composição da alimentação. As respostas são altamente não-lineares e completamente diferentes para variações positivas e negativas. Há pouca diferença no comportamento dinâmico de sistemas com diferentes volatilidades relativas ( $vr$ ) quando a pureza é baixa. Porém, à medida que a pureza aumenta as respostas dinâmicas começam a diferir muito para diferentes volatilidades. Para sistemas com alta volatilidade relativa, a resposta é rápida e altamente não-linear.

A Figura 2.2 apresenta as respostas em malha aberta para perturbações de diferentes magnitudes em colunas de 1000 ppm e volatilidades relativas  $vr = 2$  e  $vr = 4$ . Esses resultados mostram que o sistema responde mais lentamente à medida que a magnitude da perturbação é reduzida.

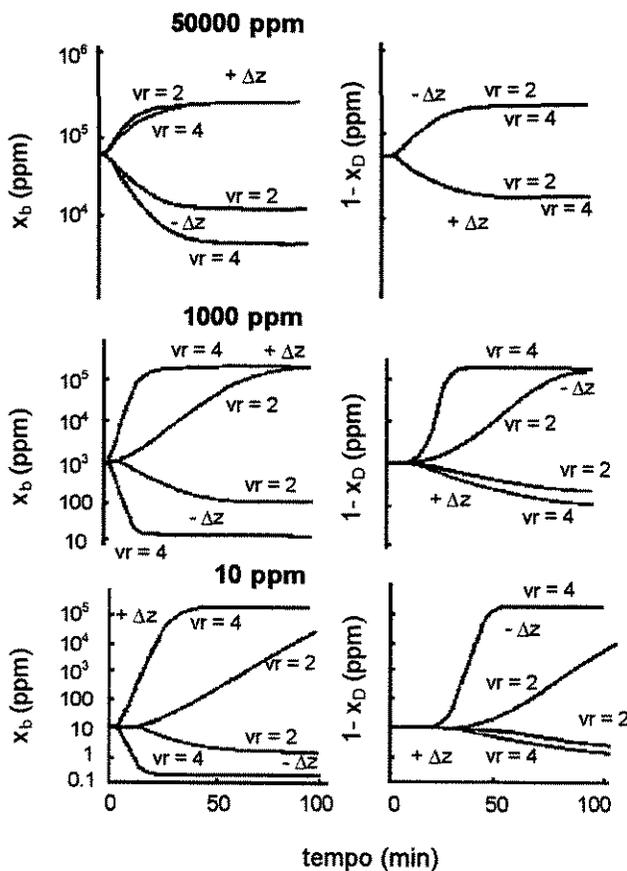


Figura 2.1. Resposta em malha aberta para perturbações em degrau na composição de alimentação (FUENTES e LUYBEN, 1983)

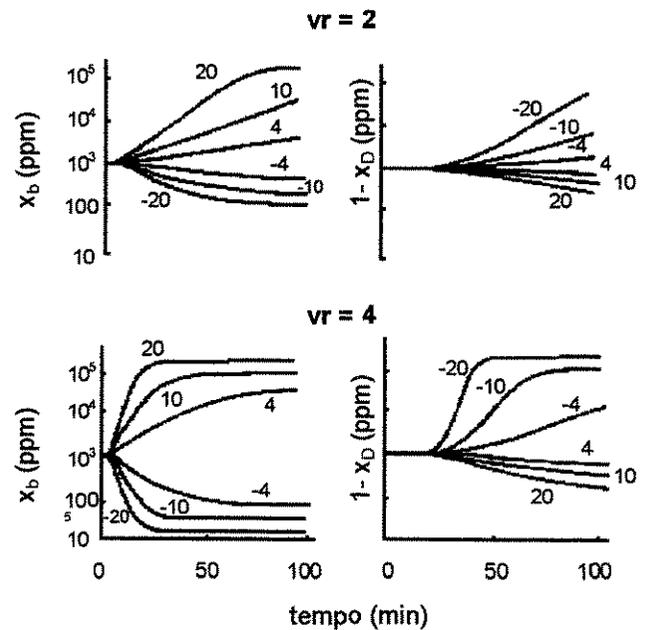


Figura 2.2 Resposta em malha aberta para perturbações em degrau na vazão de vapor (FUENTES e LUYBEN, 1983)

Os autores obtiveram as mesmas conclusões com outros tipos de perturbação (variação da vazão de vapor, variação da vazão de refluxo). As respostas em malha aberta indicam os problemas de controle que podem surgir em colunas de destilação de alta pureza.

Alguns aspectos relacionados ao tempo morto na coluna foram estudados por SKOGESTAD (1997).

Em geral, variações nas vazões externas (variações na razão  $D/B$ ) afetam mais as composições dos produtos do que as variações nas vazões internas (variações em  $L$  e  $V$  com  $D$  e  $B$  constantes). Em termos de resposta dinâmica, existe também uma diferença importante: o tempo de resposta da coluna é maior para perturbações nas vazões externas e menor para perturbações nas vazões internas. Havendo perturbações nas vazões externas, existe uma redistribuição do acúmulo de líquido de cada componente em toda a coluna e isso demora um certo tempo. Dessa forma, a constante de tempo dominante do sistema está relacionada a mudanças nas vazões externas.

SKOGESTAD (1997) desenvolveu uma expressão analítica para a constante de tempo dominante ( $\tau_d$ ), válida para separações binárias de alta pureza e pequenas perturbações:

$$\tau_d = \frac{M_1}{(\ln S)I_s} + \frac{M_D x_D (1 - x_D)}{I_s} + \frac{M_B x_B (1 - x_B)}{I_s}$$

onde  $M$  designa o acúmulo de líquido e:

$$S = \frac{x_D(1 - x_B)}{(1 - x_D)x_B}; \quad I_s = Bx_B(1 - x_B) + Dx_D(1 - x_D)$$

O autor concluiu que a constante de tempo dominante é grande quando os produtos são de alta pureza e pequena quando se tem baixa pureza, já que para produtos de alta pureza,  $I_s$  pode assumir valores muito pequenos.

Processos com atraso de resposta relevante são mais difíceis de serem controlados, sendo necessário inserir na estratégia de controle alguma forma de compensação do tempo morto. Porém, deve-se ter em mente que quando se insere uma estratégia de controle do tipo “feedback”, o tempo de resposta do sistema em malha fechada pode ser diferente do

tempo de resposta do sistema em malha aberta. Dessa forma, é possível que a constante de tempo do sistema em malha fechada seja menor (resposta mais rápida) do que  $\tau_d$ .

Em qualquer processo com mais de uma malha de controle, há possibilidade de interação entre as malhas. No caso do controle da composição em dois pontos em colunas de destilação contínua, isso significa que uma variação em qualquer uma das entradas geralmente afeta ambas as saídas ( $x_D$  e  $x_B$ ). O grau de interação entre as malhas pode ser estimado através do conceito de ganhos relativos, que é bastante útil na escolha da melhor configuração de controle. Por exemplo, para a configuração LV, têm-se:

$$dx_D = \left( \frac{\partial x_D}{\partial L} \right)_V dL + \left( \frac{\partial x_D}{\partial V} \right)_L dV = g_{11}dL + g_{12}dV$$

$$dx_B = \left( \frac{\partial x_B}{\partial L} \right)_V dL + \left( \frac{\partial x_B}{\partial V} \right)_L dV = g_{21}dL + g_{22}dV$$

onde  $g_{ij}$  são os ganhos no estado estacionário. O ganho relativo  $\lambda_{ij}$  expressa como o ganho  $g_{ij}$  varia quando a outra malha é fechada. A matriz de ganhos relativos é dada por:

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_{11} & \lambda_{12} \\ \lambda_{21} & \lambda_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_{11} & 1 - \lambda_{11} \\ 1 - \lambda_{11} & \lambda_{11} \end{pmatrix}$$

Quando  $\lambda_{11} = 1.0$ , não há interação entre as malhas. Altos ganhos relativos (maiores do que 10) indicam sérios problemas de controle.

Sendo  $(NP+1)$  o número de estágios teóricos (incluindo o refeedor), uma forma simplificada de estimar  $\lambda_{11}$  para a configuração LV foi apresentada por SKOGESTAD (1997):

$$\lambda_{11} \approx \frac{(2/(NP+1))L(L+1)}{Bx_B + D(1-x_D)}$$

Pelo denominador dessa expressão, nota-se que quanto maior a pureza dos produtos ( $x_B$  baixo e  $x_D$  alto) maior o valor de  $\lambda_{11}$ , ou seja, maior a interação entre as malhas e mais difícil o controle.

## **2.3 Estratégias de controle de colunas de destilação contínuas de alta pureza**

Várias propostas de algoritmos para controle de composição em dois pontos em colunas de destilação contínuas de alta pureza são encontradas na literatura. Na maioria dos casos, tais estratégias são testadas em simuladores e os analisadores de composição são considerados na simulação inserindo-se um atraso (de 3-5 min) na malha de controle. Os sistemas estudados são binários com comportamento termodinâmico próximo ao ideal (metanol/etanol, metanol/água, etanol/butanol, propileno/propano) e várias hipóteses simplificadoras são utilizadas.

### **2.3.1. Estratégias testadas em simuladores**

O algoritmo preditivo DMC (“Dynamic Matrix Control”) foi testado por vários autores e se baseia num modelo linear do processo. GEORGIU *et al.* (1988) concluíram que, em se tratando de colunas de alta pureza, o desempenho do DMC é pior do que o da estrutura de controle convencional composta de dois controladores PI (proporcional-integral). Através do método de transformações não-lineares da saída, os autores conseguiram melhorar significativamente a performance do DMC. Os efeitos da não-linearidade também foram considerados por MCDONALD e MCAVOY (1987) calculando-se os ganhos de processo e as constantes de tempo como funções das medidas de composição. TRENTACAPILLI *et al.* (1997) melhoraram o algoritmo DMC utilizando uma combinação de dois modelos linearizados: um modelo para uma situação abaixo do “set-point” e outro para uma situação acima do “set-point”.

A configuração LV (mais comumente empregada na indústria) foi estudada por SKOGESTAD e MORARI (1988). Os autores concluíram que o efeito das não-linearidades pode ser reduzido com o uso de composições logarítmicas e que, em certos casos, controladores lineares baseados em modelos linearizados podem ser eficientes no controle de colunas de alta pureza.

Existe uma grande variedade de algoritmos de controle propostos. Entre eles:

- SRINIWAS *et al.* (1995): modelo não-linear autoregressivo com entrada exógena (NARX = “Nonlinear Autoregressive Model with Exogenous Input”) e testes estatísticos para desenvolvimento do controlador.

- CHIEN (1996): modelo empírico não-linear para colunas de alta pureza controladas a partir de medidas de temperatura.
- WONG *et al.* (1995): controle via redes neurais.

### 2.3.2- Estratégias testadas experimentalmente

O número de trabalhos experimentais são poucos em relação aos teóricos.

Uma alternativa ao uso dos caros e relativamente lentos analisadores de composição foi proposta por MEJDELL e SKOGESTAD (1991). A partir de medidas de temperatura em todos os pratos, foram desenvolvidos alguns estimadores para inferência da composição dos produtos. O estimador PLS (“Partial-Least-Square Regression”) apresentou melhor desempenho a nível de simulação e foi implementado numa coluna de destilação em escala piloto para separação da mistura etanol/butanol, juntamente com duas malhas de controle de composição do tipo PI (uma na base e outra no topo) usando a configuração LV. O estimador PLS calibrado com dados experimentais apresentou bom desempenho para diversas condições operacionais, enquanto que o estimador PLS calibrado com dados de simulação precisou ser reajustado para diferentes pontos de operação.

DOUGLAS *et al.* (1994) utilizaram a estrutura de controle denominada GMC (“Generic Model Control”) para o controle de composição em dois pontos de uma coluna de destilação industrial de alta pureza (um deisohexanizador para recuperação de 3-metil-pentano no topo e de metil-ciclo-pentano no fundo). A alimentação era multicomponente (de C<sub>4</sub>'s a C<sub>8</sub>'s) e no meio da coluna. A metodologia GMC permite inserir qualquer modelo do processo (linear ou não-linear) diretamente na estrutura de controle. Melhores resultados foram obtidos com o modelo de Jafarey-Douglas-McAvoy com compensação do tempo morto. As variáveis manipuladas foram a vazão de refluxo e a vazão de vapor (LV) e as composições dos produtos foram medidas por um cromatógrafo.

HWANG *et al.* (1996) estudaram a resposta em malha aberta de uma coluna para separação de misturas binárias de álcoois e mostraram que, na presença de perturbações, o perfil de temperatura nas colunas de destilação de alta pureza se move como uma onda de padrão constante e que a sua velocidade pode ser satisfatoriamente predita a partir da teoria de ondas não-lineares. Os autores sugerem a aplicação desses resultados em projetos de controladores de composição em dois pontos.

## **2.4- Conclusões da análise da literatura**

O observador estendido de Luenberger é um estimador de estado determinístico e, de acordo com os resultados da literatura, não é adequado quando ruídos nas medidas de temperatura são relevantes. Dessa forma, é necessário o desenvolvimento de métodos de inferência de composições robustos aos ruídos das medidas de temperatura.

O controle de colunas de destilação em batelada de pureza baixa e moderada tem sido objeto de diversos estudos experimentais e teóricos. Porém, trabalhos sobre destilação em batelada de alta pureza são escassos.

Os três principais fatores presentes em colunas de destilação contínuas de alta pureza que dificultam o controle da operação são: não-linearidades, presença de tempo morto e interações.

No caso de colunas de destilação em batelada, as não-linearidades estão presentes mesmo que os produtos não sejam de alta pureza. Devido ao seu caráter não-estacionário, o perfil de composição em toda a coluna é variante no tempo e a coluna passa por sucessivos pontos de operação durante a batelada, abrangendo uma larga faixa de composições.

Os trabalhos encontrados na literatura sobre o controle de colunas de destilação de alta pureza apresentam estratégias de controle apenas para colunas contínuas. Na maioria dos casos, os estudos são teóricos e as estratégias desenvolvidas são testadas somente por simulação.

## **CAPÍTULO 3- MATERIAIS E MÉTODOS**

### 3- MATERIAIS E MÉTODOS

Um algoritmo de controle por inferência é composto por um estimador do estado do sistema que se deseja controlar e pela estratégia de controle propriamente dita. Neste capítulo, o método utilizado para a estimativa do estado de colunas de destilação em batelada (filtro de Kalman) será apresentado. A estratégia de controle escolhida e a modelagem utilizada serão detalhadas e, na última seção, será feita uma descrição da montagem experimental e do procedimento seguido na realização dos testes.

#### 3.1- FILTRO DE KALMAN

Antes de apresentar o algoritmo do filtro de Kalman e a sua aplicação a colunas de destilação em batelada, algumas características gerais e conceitos básicos envolvidos serão discutidos.

##### 3.1.1- Por que utilizar uma abordagem estocástica ?

O filtro de Kalman é um estimador de estado estocástico. Neste item, os motivos que levaram à escolha de uma abordagem estocástica para a estimativa do estado de colunas de destilação em batelada serão apresentados.

Um sistema é dito *determinístico* quando a sua saída em qualquer instante de tempo futuro pode ser predita com exatidão. Um sistema é chamado de *aleatório* quando o seu comportamento futuro não pode ser exatamente conhecido. A Figura 3.1 apresenta exemplos de um sistema aleatório e de um sistema determinístico.

A abordagem determinística é inadequada em várias aplicações práticas devido principalmente aos seguintes fatores:

##### 1. Modelos matemáticos não são perfeitos.

É muito difícil que um modelo consiga descrever perfeitamente o comportamento de um sistema e que todos os seus parâmetros sejam conhecidos com absoluta certeza. Além disso, os modelos empregados para processamento de dados em tempo real geralmente procuram captar apenas as características mais essenciais do sistema para que o algoritmo seja implementado com um esforço computacional adequado.

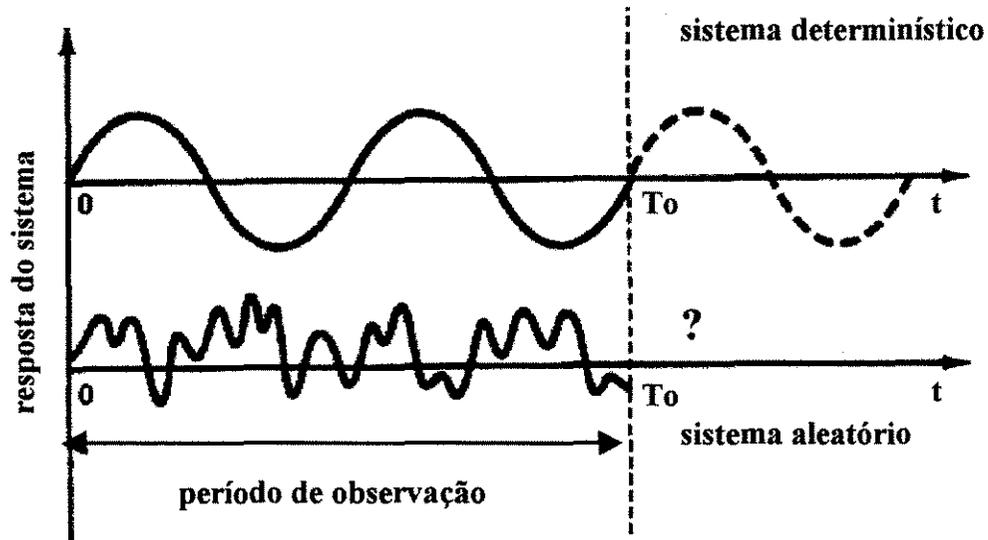


Figura 3.1. Exemplos de saídas de sistemas determinísticos (a) e aleatórios (b).

(BENTLEY, 1995)

2. Presença de perturbações que não podem ser controladas nem modeladas de forma determinística.

3. Sensores não fornecem dados perfeitos nem informações completas sobre o sistema.

As medidas não são exatas e os dados obtidos normalmente contêm ruídos e são afetados pela própria dinâmica do sensor.

O filtro de Kalman utiliza todas as medidas do processo disponíveis para estimar o estado atual das variáveis de interesse a partir de:

1. Modelos dinâmicos do sistema e do elemento de medida.
2. Descrição estatística dos erros das medidas e da incerteza existente nos modelos dinâmicos.
3. Qualquer informação disponível a respeito das condições iniciais das variáveis de interesse.

Dentre os filtros que se baseiam na minimização dos erros quadráticos médios, o filtro de Kalman é o que fornece a estimativa ótima, como será visto posteriormente. Uma outra vantagem importante é que, por ser um método recursivo, o algoritmo de Kalman utiliza apenas as medidas atuais, não sendo necessário armazenar ou reprocessar medidas passadas.

Ao contrário dos filtros digitais comuns (filtros exponenciais, filtros de média) que apenas realizam um alisamento dos dados pela filtragem de ruídos, um dos aspectos mais atraentes do filtro de Kalman é a sua capacidade em estimar variáveis não medidas e parâmetros desconhecidos.

Em plantas químicas, o que normalmente se tem disponível são modelos imperfeitos e medidas "contaminadas" por ruídos. Nesses casos, o filtro de Kalman pode ser uma boa opção para estimativa do estado de sistemas.

### 3.1.2. Conceitos básicos de probabilidade e variáveis aleatórias

O algoritmo do filtro de Kalman se baseia em conceitos da matemática probabilística. Alguns desses conceitos serão, então, brevemente apresentados.

De uma forma intuitiva, probabilidade é a frequência relativa de ocorrência de um evento  $A$ . Se um evento  $A$  ocorre  $N(A)$  vezes num total de  $N$  observações, então a probabilidade de ocorrência do evento  $A$ ,  $P(A)$ , é definida como:

$$P(A) \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N(A)}{N} \quad (3.1)$$

Quanto mais observações forem feitas, a razão acima convergirá para um valor, que é a probabilidade de ocorrência do evento  $A$ .

Se  $X$  é um vetor de variáveis aleatórias,  $X = [X_1, X_2, \dots, X_n]^T$ , e  $A = \{X \leq \xi\} = \{X_1 \leq \xi_1, X_2 \leq \xi_2, \dots, X_n \leq \xi_n\}$ , para  $\forall \xi \in \mathfrak{R}^n$ , a *função de distribuição de probabilidade*  $F_X(\xi)$  é uma função escalar real definida como:

$$F_X(\xi) \equiv F_{X_1, X_2, \dots, X_n}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n) = P(X \leq \xi) = P(X_1 \leq \xi_1, X_2 \leq \xi_2, \dots, X_n \leq \xi_n) \quad (3.2)$$

A função  $F_X$  é uma função monotonicamente não decrescente e apresenta as seguintes propriedades:

$$\begin{aligned}
 F_X(\infty, \infty, \dots, \infty) &= P(X_1 \leq \infty, X_2 \leq \infty, \dots, X_n \leq \infty) = 1 \\
 F_X(\xi_1, \dots, -\infty, \dots, \xi_n) &= P(X_1 \leq \xi_1, \dots, X_i \leq -\infty, \dots, X_n \leq \xi_n) = 0
 \end{aligned}
 \tag{3.3}$$

Ou seja, se todos os seus argumentos tenderem ao infinito positivo,  $F_X$  valerá 1; se pelo menos um dos argumentos tender ao infinito negativo,  $F_X$  valerá zero.

Se existir uma função escalar  $f_X$  tal que:

$$F_X(\xi) = \int_{-\infty}^{\xi} f_X(\rho) d\rho
 \tag{3.4}$$

então  $f_X$  é denominada *função densidade de probabilidade* de  $X$ . Como  $F_X$  é monotonicamente não decrescente,  $f_X(\xi) \geq 0$ . Outra propriedade importante da função densidade de probabilidade é que:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_X(\xi) d\xi = 1
 \tag{3.5}$$

A distribuição Gaussiana (ou normal) e a distribuição uniforme são duas formas comuns de modelagem de variáveis aleatórias. Para o caso escalar ( $n = 1$ ), as suas funções de distribuição e densidade de probabilidade são mostradas na Figura 3.2.

Se  $X$  e  $Z$  são dois vetores de variáveis aleatórias, a *função de distribuição de probabilidade conjunta* é definida como:

$$F_{X,Z}(\xi, \rho) = P(X \leq \xi \text{ e } Z \leq \rho) \quad , \text{ para } \xi \in \mathfrak{R}^n, \rho \in \mathfrak{R}^m
 \tag{3.6}$$

e está associada à *função densidade de probabilidade conjunta*  $f_{X,Z}(\xi, \rho)$ .

A *probabilidade condicional* é definida como a probabilidade de  $X$  ser menor ou igual a  $\xi$ , condicionado ao fato de que o vetor  $Z$  é conhecido. É possível demonstrar (MAYBECK, 1994) que a correspondente *função densidade de probabilidade condicional*  $f_{X|Z}$  é dada por:

$$f_{X|Z}(\xi, \rho) = \frac{f_{X,Z}(\xi, \rho)}{f_Z(\rho)}
 \tag{3.7}$$

O conceito de função densidade de probabilidade condicional é de fundamental importância quando um vetor de variáveis de estado  $X$  deve ser estimado a partir do

conhecimento de um conjunto de medidas  $Z = [Z_1, Z_2, \dots, Z_m]$ . A função  $f_{X|Z_1, \dots, Z_m}(\xi | Z_1, \dots, Z_m)$  contém toda a informação necessária para a estimativa do vetor  $X$ .

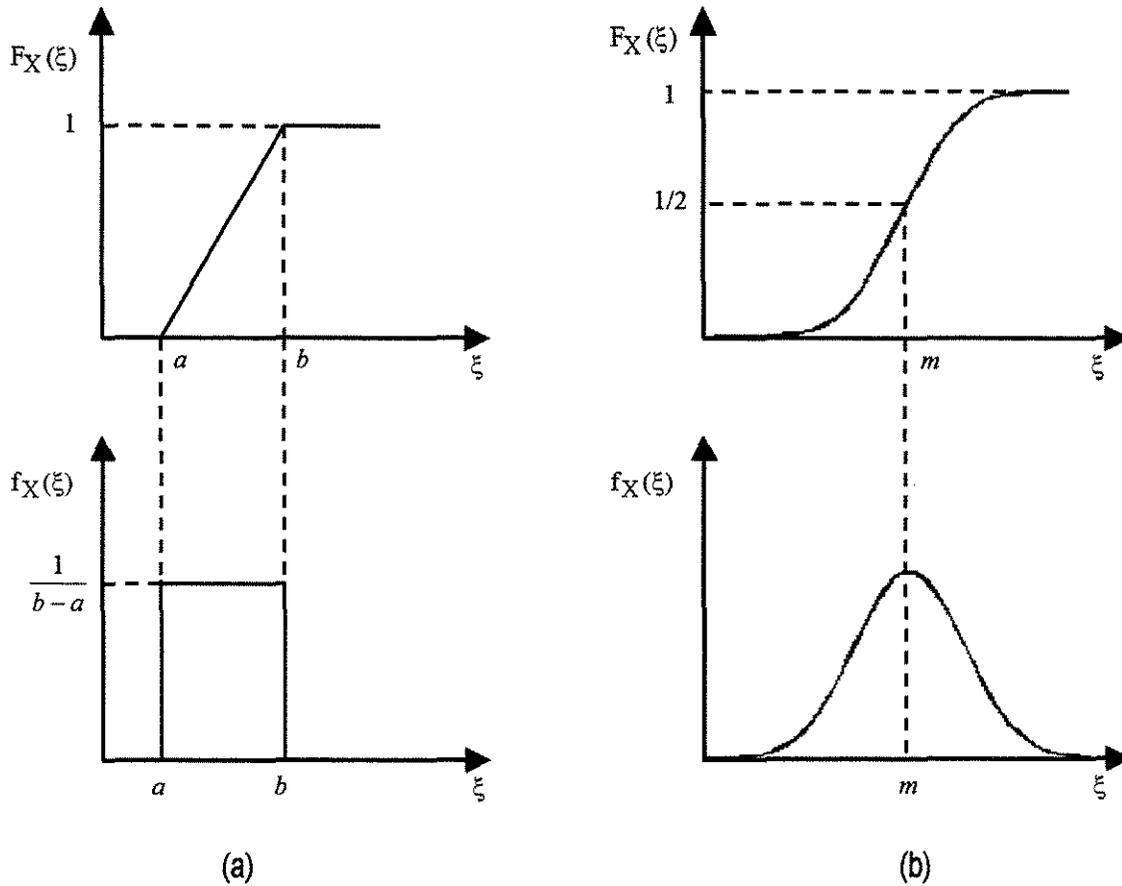


Figura 3.2. Exemplos de funções de distribuição e densidade de probabilidade. (a) uniforme; (b) Gaussiana. (MAYBECK, 1994)

A função densidade de probabilidade pode ser caracterizada por parâmetros estatísticos denominados *momentos*. O primeiro momento do vetor aleatório  $X$  é a *média* ou *valor esperado* definido como:

$$m \equiv E[X] = \int_{-\infty}^{\infty} \xi f_X(\xi) d\xi \quad (3.8)$$

ou  $m_i \equiv E[X_i] = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \xi_i f_X(\xi) d\xi_1 \dots d\xi_n$ , para  $1 \leq i \leq n$ .

O segundo momento é a *matriz autocorrelação* de  $X$ , que pode ser escrita como:

$$\Psi \equiv E[\mathbf{X}\mathbf{X}^T] = \int_{-\infty}^{\infty} \xi\xi^T f_X(\xi)d\xi \quad (3.9)$$

Os chamados *momentos centrais* expressam a variação de  $X$  em relação ao valor médio  $m$ . O primeiro momento central é zero. A matriz covariância  $P$  é o segundo momento central de  $X$ :

$$P \equiv E[(X - m)(X - m)^T] = \int_{-\infty}^{\infty} (\xi - m)(\xi - m)^T f_X(\xi)d\xi \quad (3.10)$$

A matriz  $P$  é simétrica e seus autovalores são não negativos. Dá-se o nome de *variância* aos elementos da diagonal principal de  $P$ :

$$P_{ii} \equiv E[(X_i - m_i)^2] \equiv \sigma_i^2 \quad (3.11)$$

A raiz quadrada da variância ( $\sigma_i$ ) é o desvio padrão de  $X_i$ .

Os elementos  $P_{ij}$  ( $i \neq j$ ) são os coeficientes de correlação ( $r_{ij}$ ) de  $X_i$  e  $X_j$ , definidos como:

$$r_{ij} \equiv \frac{E[(X_i - m_i)(X_j - m_j)]}{\left(E[(X_i - m_i)^2]\right)^{1/2} \left(E[(X_j - m_j)^2]\right)^{1/2}} = \frac{P_{ij}}{\sigma_i \sigma_j} \quad (3.12)$$

Dessa forma, a matriz covariância  $P$  pode ser escrita como:

$$P = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & r_{12}\sigma_1\sigma_2 & \cdots & r_{1n}\sigma_1\sigma_n \\ r_{12}\sigma_1\sigma_2 & \sigma_2^2 & \cdots & r_{2n}\sigma_2\sigma_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ r_{1n}\sigma_1\sigma_n & r_{2n}\sigma_2\sigma_n & \cdots & \sigma_n^2 \end{bmatrix} \quad (3.13)$$

Se o coeficiente de correlação  $r_{ij}$  for nulo, as variáveis  $X_i$  e  $X_j$  não são correlacionadas.

Momentos de ordem superior podem ser utilizados para caracterizar a função densidade (ou de distribuição) de probabilidade. Em geral, um número infinito de momentos seria necessário para especificar  $f_X$  (ou  $F_X$ ) completamente. Porém, no caso particular de variáveis aleatórias Gaussianas, a média e a covariância completamente definem a função densidade de probabilidade. A média indica onde a função densidade está centralizada e a covariância indica o espalhamento dessa função em torno da média.

O valor esperado condicional ou média condicional de  $X$  quando  $Z$  é conhecido ( $Z = Z_o$ ) é:

$$E_X [X | Z = Z_o] = \int_{-\infty}^{\infty} \xi f_{X|Z}(\xi | Z_o) d\xi \quad (3.14)$$

E a covariância condicional:

$$\begin{aligned} P_{X|Z} &\equiv E_X \left[ (X - E_X [X | Z = Z_o]) (X - E_X [X | Z = Z_o])^T | Z = Z_o \right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (\xi - E_X [X | Z = Z_o]) (\xi - E_X [X | Z = Z_o])^T f_{X|Z}(\xi | Z_o) d\xi \end{aligned} \quad (3.15)$$

A matriz correlação cruzada de dois vetores de variáveis aleatórias  $X$  e  $Z$  é definida como:

$$\Psi_{XZ} \equiv E[XZ^T] = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \xi \rho^T f_{X,Z}(\xi, \rho) d\xi d\rho \quad (3.16)$$

E a matriz covariância cruzada de  $X$  e  $Z$  é dada por:

$$P_{XZ} \equiv E[(X - m_X)(Z - m_Z)^T] = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (\xi - m_X)(\rho - m_Z)^T f_{X,Z}(\xi, \rho) d\xi d\rho \quad (3.17)$$

Os vetores  $X$  e  $Z$  não são correlacionados se a matriz correlação cruzada for igual ao produto dos seus primeiros momentos:

$$\Psi_{XZ} \equiv E[XZ^T] = E[X]E[Z^T] = m_X m_Z^T \quad (3.18)$$

Ou, de forma equivalente,  $X$  e  $Z$  não são correlacionados se a matriz covariância cruzada for nula:

$$E[(X_i - m_{X_i})(Z_j - m_{Z_j})^T] = 0, \text{ para } \forall i, j \quad (3.19)$$

Os vetores  $X$  e  $Z$  são independentes se a função densidade de probabilidade conjunta for igual ao produto das funções densidade de probabilidade individuais:

$$f_{X,Z}(\xi, \rho) = f_X(\xi) f_Z(\rho) \quad (3.20)$$

É possível demonstrar (MAYBECK, 1994) que se  $X$  e  $Z$  são independentes, então  $X$  e  $Z$  não são correlacionadas. Porém, o inverso nem sempre é verdadeiro.

As definições e conceitos apresentados também são válidos quando os vetores de variáveis aleatórias são dependentes do tempo.

### 3.1.3- Hipóteses do Filtro de Kalman

O filtro de Kalman utiliza funções densidade de probabilidade condicionais do vetor de variáveis de estado de interesse para obtenção de estimativas ótimas dessas variáveis a partir do conhecimento de dados provenientes de sensores.

A *estimativa ótima* pode ser representada por uma das seguintes grandezas estatísticas: a média, a moda ou a mediana da função densidade de probabilidade condicional  $f_{X|Z}$ .

No algoritmo do filtro de Kalman, são consideradas as seguintes hipóteses:

1. O sistema pode ser descrito por um modelo linear.
2. Os ruídos do sistema e os ruídos das medidas são brancos.
3. Os ruídos do sistema e os ruídos das medidas apresentam distribuição Gaussiana.

Assumindo-se essas hipóteses, é possível demonstrar (MAYBECK, 1994) que o filtro de Kalman é o melhor de todos os filtros e que a média, a moda e a mediana de  $f_{X|Z}$  coincidem. Ou seja, a estimativa do filtro de Kalman é ótima qualquer que seja a grandeza estatística utilizada para representar a estimativa do vetor de variáveis de estado.

Com as hipóteses 1, 2 e 3, a solução do problema de estimativa do estado de sistemas estocásticos torna-se matematicamente mais simples. No entanto, é importante analisar o quão realistas são essas hipóteses quando aplicadas a sistemas reais.

#### Hipótese 1: Modelos lineares

Muitos sistemas podem ser descritos por modelos lineares. Quando as não-linearidades são significativas, um modelo linear é geralmente obtido através da linearização em torno de um ponto de operação. Se o modelo linearizado descrever adequadamente o comportamento do sistema, é possível utilizar o algoritmo do filtro de Kalman estendido para sistemas não-lineares.

#### Hipótese 2: Ruídos brancos

Quando um sinal aleatório estacionário é observado durante vários períodos de tempo  $T_o$  (Figura 3.3), o comportamento em cada período  $T_o$  será diferente. No entanto, a

potência média do sinal será aproximadamente a mesma em todos os períodos de observação. Isso significa que a potência do sinal é uma grandeza estacionária que pode ser utilizada para quantificar sinais aleatórios.

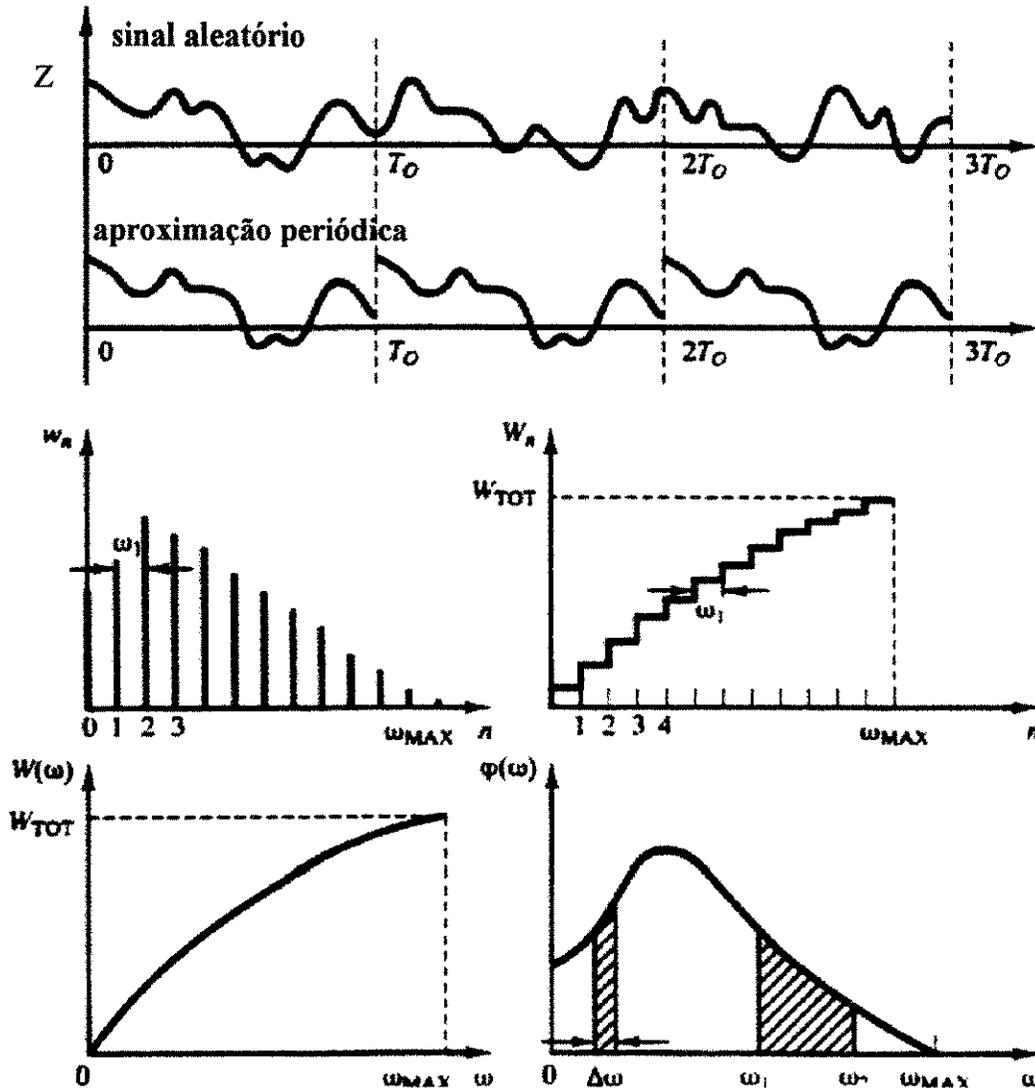


Figura 3.3. Espectro de potências e densidade do espectro de potências. (BENTLEY, 1995)

Um sinal periódico pode ser expresso como uma série de Fourier, ou seja, como uma somatória de funções seno e cosseno com frequências harmônicas da frequência fundamental. A potência de um sinal periódico está, portanto, distribuída entre essas frequências harmônicas. Um sinal aleatório não é periódico, mas contém um grande número de frequências igualmente espaçadas. Nesse caso, a densidade do espectro de

potências mede como a potência de um sinal aleatório está distribuída entre essas frequências.

Quando  $T_o$  é muito grande, um sinal aleatório pode ser aproximado por um sinal periódico (Figura 3.3), podendo ser expresso por uma série de Fourier com período  $T_o$ :

$$Z(t) = a_o + \sum_{n=1}^{n=\infty} a_n \cos(n\omega_1 t) + \sum_{n=1}^{n=\infty} b_n \sen(n\omega_1 t) \quad (3.21)$$

onde  $\omega_1$  é a frequência fundamental ( $\omega_1 = 2\pi/T_o$ ) e  $a_o$  é a média  $m_z$ . Sendo  $Ta$  o período de amostragem ( $Ta = T_o/N$ ), então:

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{2}{N} \sum_{i=1}^{i=N} z_i \cos(n\omega_1 iTa) = \frac{2}{N} \sum_{i=1}^{i=N} z_i \cos\left(2\pi n \frac{i}{N}\right) \\ b_n &= \frac{2}{N} \sum_{i=1}^{i=N} z_i \sen(n\omega_1 iTa) = \frac{2}{N} \sum_{i=1}^{i=N} z_i \sen\left(2\pi n \frac{i}{N}\right) \end{aligned} \quad (3.22)$$

O  $n$ -ésimo harmônico irá contribuir com uma potência ( $w_n$ ) igual a:  $w_n = \frac{1}{2} (a_n^2 + b_n^2)$ .

A função que relaciona  $w_n$  e  $\omega$  é denominada espectro de potências. Para frequências maiores do que a frequência fundamental máxima ( $\omega_{máx}$ ), a potência é desprezível.

A potência cumulativa  $W_n$  é definida como:  $W_n = w_o + w_1 + \dots + w_n$ .

Quando  $\omega = \omega_{máx}$ ,  $W_n = W_{total}$ , ou seja, a potência total do sinal. No limite quando  $T_o \rightarrow \infty$ ,  $\omega_1 \rightarrow 0$ , tem-se, então, a função potência cumulativa:  $W(\omega) = \lim_{\omega_1 \rightarrow 0} W_n$ .

A densidade do espectro de potências  $\varphi(\omega)$  é mais utilizada e corresponde à derivada de  $W(\omega)$ :  $\varphi(\omega) = \frac{dW}{d\omega}$ .

Ruídos de sinais que possuem uma densidade do espectro de potências uniforme (como os ruídos provenientes de circuitos elétricos) são denominados *ruídos brancos* ("white noise"), ou seja:  $\varphi(\omega) = C_1$ ,  $0 \leq \omega \leq \infty$ , onde  $C_1$  é um valor constante.

Ruídos brancos são ruídos independentes do tempo. Ou seja, o conhecimento do valor de um ruído branco num instante  $t_1$  não fornece nenhuma informação a respeito do valor desse ruído num instante de tempo diferente de  $t_1$ .

O espectro de potências de um sistema físico real está limitado a uma banda de frequências, ou seja, o sistema só responde a entradas que se encontram numa certa faixa de frequências. Fora dessa faixa (ou banda) de frequências, as entradas não têm nenhum efeito sobre o sistema ou o seu efeito é atenuado. A Figura 3.4 apresenta um espectro de potências típico de sistemas físicos (sistema passa-banda). Normalmente, um sistema é perturbado por ruídos com ampla faixa de frequências, como o representado na Figura 3.4. Nessa mesma figura, um ruído branco também foi representado. Por apresentarem um espectro de potência infinito, pode-se dizer que ruídos brancos não existem na prática. Porém, dentro da banda de frequências de interesse, o ruído branco é idêntico ao ruído de ampla banda de frequências encontrado na prática. Ou seja, é possível representar um ruído real por um ruído branco, pois o efeito do ruído branco ou do ruído de ampla banda de frequência sobre o sistema é essencialmente o mesmo.

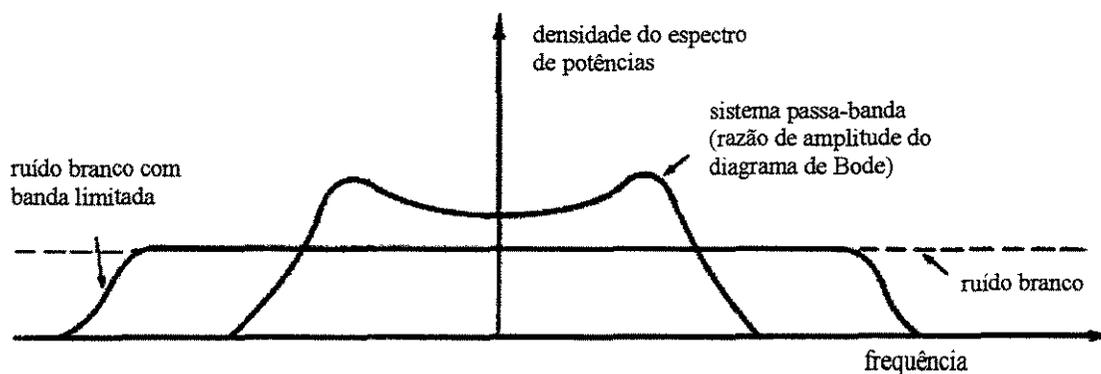


Figura 3.4. Densidade do espectro de potências do sistema e dos ruídos. (MAYBECK, 1994).

### Hipótese 3: Distribuição Gaussiana

Enquanto a hipótese de ruído branco diz respeito à dependência do ruído em relação ao tempo (ou frequência), a hipótese de distribuição Gaussiana está relacionada à amplitude do ruído. Por essa hipótese, a cada instante de tempo, a função densidade de probabilidade da amplitude de um ruído Gaussiano apresenta um comportamento semelhante ao da Figura 3.2 (b).

É possível demonstrar matematicamente pelo Teorema Central do Limite (MAYBECK, 1994) que se um fenômeno aleatório é o resultado da soma de efeitos de  $M$

fenômenos aleatórios independentes, então a distribuição do fenômeno observado se aproxima da distribuição Gaussiana à medida que  $M$  aumenta, independentemente da distribuição individual de cada fenômeno. Portanto, se vários efeitos contribuem para um fenômeno aleatório (o que geralmente ocorre do ponto de vista microscópico), então a distribuição Gaussiana é uma aproximação razoável da distribuição real. Em alguns casos,  $M = 3$  já é suficiente para que se tenha um comportamento próximo ao da distribuição Gaussiana.

Como os ruídos de processo e os ruídos das medidas são, em geral, provenientes de diversas fontes, a hipótese Gaussiana parece ser razoável. Uma variável aleatória  $X$  apresenta distribuição Gaussiana quando a sua função densidade de probabilidade pode ser expressa por:

$$f_X(\xi) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2} |\mathbf{P}|^{1/2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}[\xi - \mathbf{m}]^T \mathbf{P}^{-1} [\xi - \mathbf{m}]\right\} \quad (3.23)$$

Ao contrário da maioria das funções densidade de probabilidade que necessitam de diversos parâmetros estatísticos para serem especificadas, a densidade de probabilidade Gaussiana é completamente caracterizada pela média e pelo desvio padrão (grandezas relativamente fáceis de serem obtidas ou estimadas).

### 3.1.4- Como o Filtro de Kalman funciona

Antes de apresentar as equações do filtro de Kalman, será feita uma introdução informal a respeito do funcionamento desse filtro.

Suponha que uma variável de estado  $X$  deva ser estimada a partir de dois valores  $Z_1$  e  $Z_2$  medidos, com desvios padrões  $\sigma_{Z_1}$  e  $\sigma_{Z_2}$ , respectivamente. O desvio padrão indica a incerteza da medida (quanto maior o desvio padrão, maior a incerteza). Por exemplo,  $X$  pode ser a composição em um estágio de uma coluna e  $Z_1$  e  $Z_2$  podem ser duas medidas de temperatura.

No instante  $t_1$ , o valor  $Z_1$  é medido e a função densidade de probabilidade de  $X(t_1)$  sendo  $Z_1$  conhecido é representada na Figura 3.5. No instante  $t_2$ ,  $Z_2$  é medido e a função densidade de probabilidade condicionada ao conhecimento de  $Z_2$  é mostrada nessa mesma Figura. O filtro de Kalman deve estimar o valor  $X(t_2)$  utilizando todos os dados disponíveis,

ou seja,  $Z_1(t_1)$  e  $Z_2(t_2)$ . Dessa forma, a Figura 3.5 apresenta a função densidade de probabilidade de  $X$  condicionada aos valores  $Z_1$  e  $Z_2$ . A melhor estimativa de  $X$  no instante  $t_2$ ,  $\hat{X}(t_2)$ , é então dada pela média da função densidade de probabilidade condicional  $f_{X(t_2)|Z(t_1),Z(t_2)}(X|Z_1,Z_2)$ , e a incerteza dessa estimativa corresponde ao desvio padrão dessa função. Pelas hipóteses assumidas na formulação do filtro de Kalman, a incerteza na estimativa de  $X$  diminui, ou seja, o desvio padrão da estimativa diminui à medida que mais informações sobre o sistema são combinadas:  $\sigma_X(t_2) < \min(\sigma_{Z_1}, \sigma_{Z_2})$ .

A dinâmica do sistema pode ser incorporada através de uma equação do tipo:

$$\dot{X} = \mathcal{M} + w \quad (3.24)$$

onde  $\mathcal{M}$  é um modelo matemático e  $w$  é um termo de ruído (ruído branco com distribuição Gaussiana) que representa as perturbações do sistema e a incerteza do modelo.

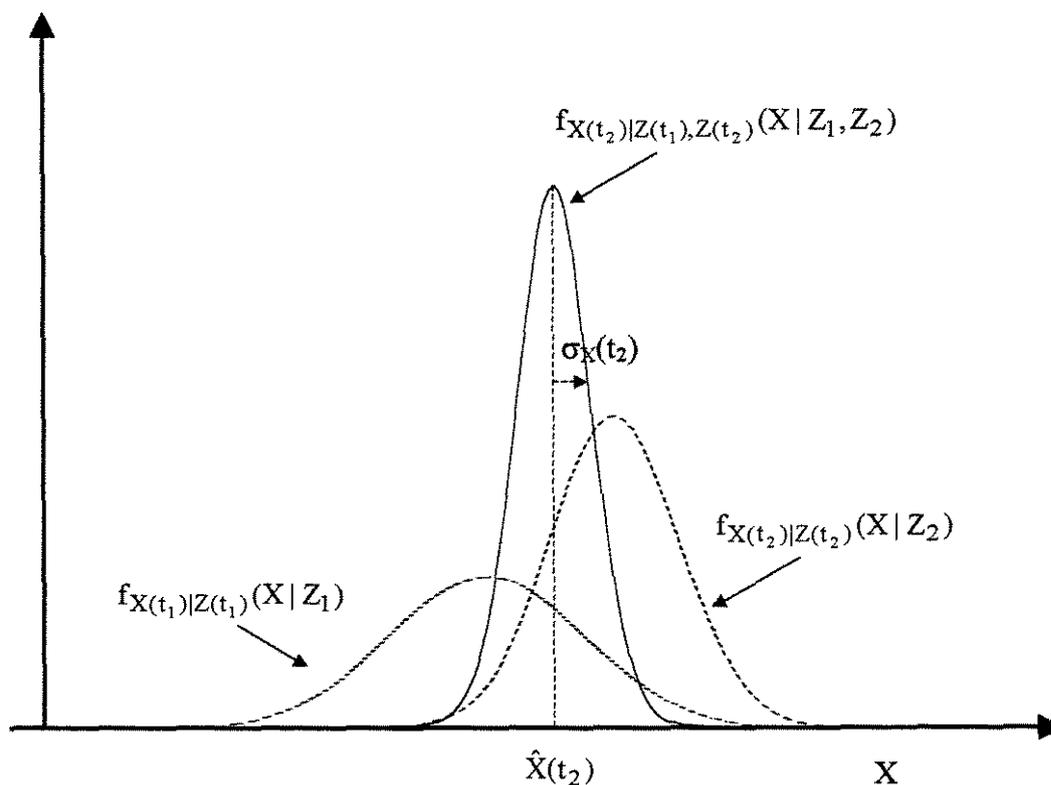


Figura 3.5. Obtenção da estimativa de  $X$  a partir de funções densidade de probabilidade condicionais (adaptado de MAYBECK, 1994).

Com o modelo dinâmico, é possível prever como será a função densidade de probabilidade condicional num instante  $t_3 > t_1, t_2$  (Figura 3.6) e utilizá-la para estimar  $\hat{X}(t_3^-)$ , ou seja, o valor de  $X$  no instante  $t_3^-$  imediatamente anterior à obtenção de uma nova medida. Quando um novo valor é medido no instante  $t_3$ , a estimativa feita a partir do modelo é então corrigida pelo filtro de Kalman.

Resumidamente, o que o filtro de Kalman faz é estimar o estado de sistemas combinando e propagando (no tempo) funções densidade de probabilidade condicionais. Através do algoritmo apresentado a seguir, será visto como isso é feito matematicamente.

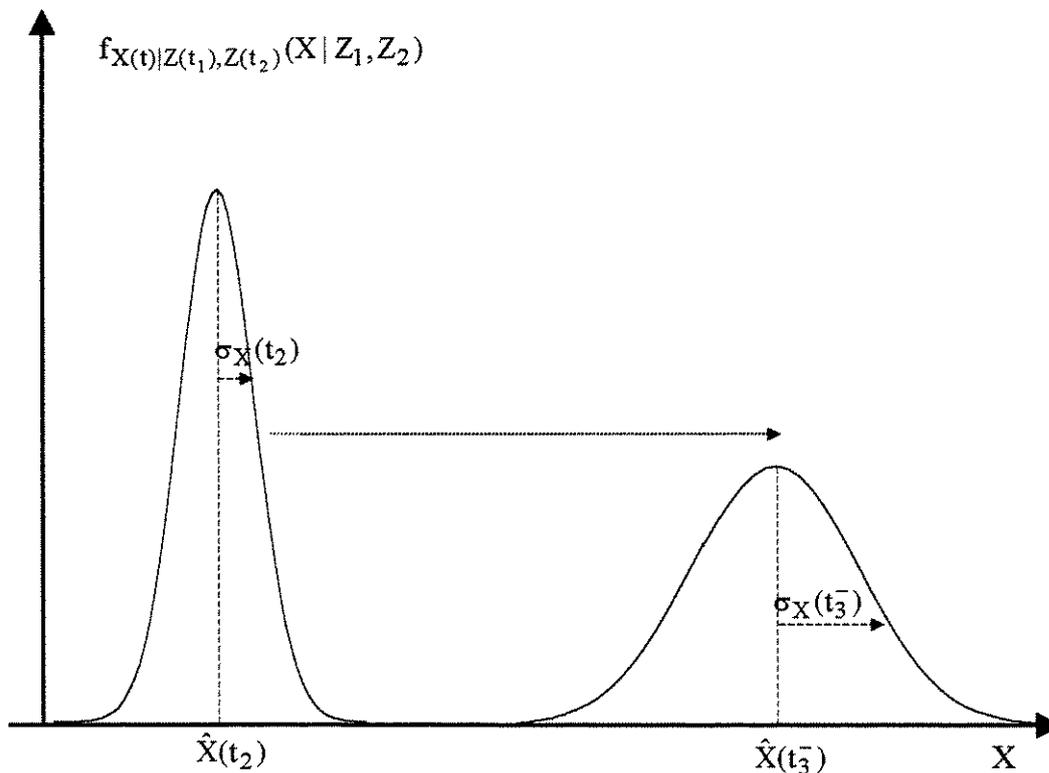


Figura 3.6. Obtenção da estimativa futura de  $X$ , propagando-se a função densidade de probabilidade condicional (adaptado de MAYBECK, 1994).

### 3.2- FILTRO DE KALMAN ESTENDIDO

O algoritmo do filtro de Kalman para sistemas não-lineares (filtro de Kalman estendido) é essencialmente o mesmo algoritmo desenvolvido para sistemas lineares. A diferença básica é que na versão estendida o modelo utilizado é um modelo linearizado em torno da estimativa do ponto de operação mais recente. Como as colunas de destilação em batelada são sistemas não-lineares, o filtro de Kalman estendido foi utilizado nesse trabalho.

Considere um sistema não-linear descrito pelo seguinte modelo contínuo:

$$\dot{X}(t) = f(X(t), u(t)) + w(t) \quad (3.25)$$

onde  $X$  é o vetor de variáveis de estado,  $u$  é o vetor de entradas e  $w$  é o vetor de ruídos do estado do sistema. O vetor  $w$  representa os erros de modelagem, os ruídos das variáveis de entrada e as perturbações do sistema.

Na forma discreta, o modelo (3.25) pode ser expresso por:

$$X_{k+1} = \bar{f}(X_k, u_k) + w_k \quad (3.26)$$

Considera-se que o vetor de ruídos do estado do sistema é um vetor de ruídos brancos com distribuição Gaussiana e covariância  $Q_k$ , e assume-se que  $w_k$  independe do vetor de estado em qualquer instante e independe dos ruídos do estado em instantes anteriores. Ou seja:

$$E[w_k] = \mathbf{0}$$

$$E[w_k w_i^T] = \begin{cases} Q_k, & i = k \\ \mathbf{0}, & i \neq k \end{cases} \quad (3.27)$$

$$E[w_k X_i^T] = \mathbf{0}, \quad \forall i, k$$

Considera-se também que o estado inicial do sistema não é exatamente conhecido e possui distribuição Gaussiana com média  $\hat{X}_0$  e covariância  $P_0$ .

O vetor de medidas  $Z_k$  está relacionado ao estado do sistema por uma equação do tipo:

$$Z_k = \bar{h}(X_k) + v_k \quad (3.28)$$

onde o vetor  $\mathbf{v}$  representa os ruídos das medidas. Assumindo-se que  $\mathbf{v}$  é um vetor de ruídos brancos com distribuição Gaussiana e covariância  $\mathbf{R}_k$ , é independente dos ruídos do estado do sistema em qualquer instante e independente dos ruídos das medidas em instantes anteriores, têm-se:

$$E[\mathbf{v}_k] = \mathbf{0}$$

$$E[\mathbf{v}_k \mathbf{v}_i^T] = \begin{cases} \mathbf{R}_k, & i = k \\ \mathbf{0}, & i \neq k \end{cases} \quad (3.29)$$

$$E[\mathbf{w}_k \mathbf{v}_i^T] = \mathbf{0} \quad \forall i, k$$

Define-se como estimativa *a priori* o valor esperado do estado do sistema no  $k$ -ésimo instante de amostragem obtido a partir de valores medidos até o  $(k-1)$ -ésimo instante de amostragem:  $E[\mathbf{X}_k | \mathbf{Z}_{k-1}] \equiv \hat{\mathbf{X}}_{k|k-1}$ .

A estimativa *a posteriori* é definida como o valor esperado do estado do sistema no  $k$ -ésimo instante de amostragem obtido a partir de valores medidos até o  $k$ -ésimo instante de amostragem:  $E[\mathbf{X}_k | \mathbf{Z}_k] \equiv \hat{\mathbf{X}}_{k|k}$ .

Os erros das estimativas *a priori* e *a posteriori* são definidos, respectivamente, por:

$$\mathbf{e}_{k|k-1} \equiv \mathbf{X}_k - \hat{\mathbf{X}}_{k|k-1} \quad (3.30)$$

$$\mathbf{e}_{k|k} \equiv \mathbf{X}_k - \hat{\mathbf{X}}_{k|k}$$

As correspondentes covariâncias dos erros das estimativas são, então, dadas por:

$$\mathbf{P}_{k|k-1} = E[\mathbf{e}_{k|k-1} \mathbf{e}_{k|k-1}^T] \quad (3.31)$$

$$\mathbf{P}_{k|k} = E[\mathbf{e}_{k|k} \mathbf{e}_{k|k}^T]$$

O desenvolvimento matemático para obtenção das equação do filtro de Kalman é bastante extenso, podendo ser encontrado em MAYBECK (1994), BROWN e HWANG (1992) e JACOBS (1993). Tal desenvolvimento consiste basicamente em encontrar a função densidade de probabilidade de  $\mathbf{X}_k$  condicionada ao conhecimento de  $\mathbf{Z}_k$ , já que a estimativa do estado atual do sistema e o erro da estimativa são dados, respectivamente, pela média e pelo desvio dessa função.

Após ser inicializado com  $\hat{X}_{0|0} = \hat{X}_0$  e  $P_{0|0} = P_0$ , o filtro de Kalman opera recursivamente, realizando uma iteração cada vez que um novo conjunto de medidas está disponível. Cada iteração pode ser dividida em duas etapas: correção e predição.

### Etapa de Correção

Nessa etapa, a estimativa *a priori* ( $\hat{X}_{k|k-1}$ ) é corrigida utilizando-se o conjunto de medidas recentemente obtido ( $Z_k$ ). A estimativa *a posteriori* é calculada pela seguinte equação:

$$\hat{X}_{k|k} = \hat{X}_{k|k-1} + L_k [Z_k - \bar{h}(\hat{X}_{k|k-1})] \quad (3.32)$$

onde  $L_k$  é o ganho que minimiza a covariância do erro *a posteriori*. O ganho do filtro de Kalman é dado por:

$$L_k = P_{k|k-1} \bar{H}_k^T (\bar{H}_k P_{k|k-1} \bar{H}_k^T + R_k)^{-1} \quad (3.33)$$

onde:

$$\bar{H}_k = \left( \frac{\partial \bar{h}(X)}{\partial X} \right)_{X=\hat{X}_{k|k-1}}$$

A matriz covariância é atualizada por:

$$P_{k|k} = (I - L_k \bar{H}_k) P_{k|k-1} \quad (3.34)$$

### Etapa de Predição

Como o nome já indica, nessa etapa o filtro prediz qual será o estado do sistema no instante de amostragem seguinte, fornecendo a estimativa *a priori* e a matriz covariância *a priori* para a próxima iteração. Dito de outra forma, o filtro de Kalman propaga no tempo a função densidade de probabilidade condicional, utilizando o modelo dinâmico do sistema (como mostrado na Figura 3.6). As equações da etapa de predição são as seguintes:

$$\hat{X}_{k+1|k} = \bar{f}(\hat{X}_{k|k}, u_k) \quad (3.35)$$

$$P_{k+1|k} = \bar{F}_k P_{k|k} \bar{F}_k^T + Q_k \quad (3.36)$$

onde:

$$\bar{F}_k = \left( \frac{\partial \bar{f}(X, u)}{\partial X} \right)_{X=\hat{X}_{k|k}, u=u_k}$$

### 3.3- MODELO DA COLUNA DE DESTILAÇÃO EM BATELADA UTILIZADO NO FILTRO DE KALMAN

Neste item, o modelo não-linear da coluna de destilação em batelada empregado no algoritmo do filtro de Kalman será apresentado.

Um modelo dinâmico rigoroso de colunas de destilação em batelada consiste em um grande número de equações diferenciais e exige o conhecimento das seguintes informações a respeito do sistema: valores instantâneos de composição e vazões de líquido e vapor em todos os estágios, equações da hidrodinâmica dos pratos, balanços de energia, dados de equilíbrio líquido-vapor. Devido à complexidade e ao esforço computacional, nem sempre o modelo rigoroso é o mais adequado para aplicações "on-line", tais como inferência de propriedades e estratégias de controle em tempo real.

Uma das principais características dos sistemas de destilação em batelada é a sua flexibilidade, permitindo o processamento de diversos tipos de produto em diferentes quantidades e especificações. Com isso, os componentes do material a ser destilado bem como a sua composição podem variar muito de uma batelada para outra. Seria, portanto, impraticável em termos de tempo e custo desenvolver modelos rigorosos a cada ciclo de batelada. Dessa forma, torna-se necessário utilizar modelos que capturem as características essenciais da dinâmica do processo e que sejam adequados à implementação "on-line".

No modelo utilizado no algoritmo do filtro de Kalman, foram assumidas as seguintes hipóteses:

- Vazões molares constantes ao longo da coluna ( $L_j = L$ ,  $0 \leq j \leq NP$ ;  $V_j = V$ ,  $1 \leq j \leq NP+1$ )
- Estágios ideais
- Acúmulo de vapor desprezível
- Acúmulo de líquido nos pratos constante ( $M_j$ ,  $1 \leq j \leq NP$ )
- Pressão constante
- Acúmulo de líquido no condensador desprezível e condensador total:  $x_{i,0} = y_{i,1}$ ,  $1 \leq i \leq NC$ .

onde "NP+1" refere-se ao refeedor, "1" ao estágio do topo e "0" ao condensador.

As variáveis de estado do sistema são as composições da fase líquida em todos os estágios (refervedor e pratos):

$$\mathbf{X} = [x_{1,1} \cdots x_{1,j} \cdots x_{1,NP+1} \cdots x_{i,1} \cdots x_{i,j} \cdots x_{i,NP+1} \cdots x_{NC-1,1} \cdots x_{NC-1,j} \cdots x_{NC-1,NP+1}]^T$$

$$1 \leq i \leq NC - 1; 1 \leq j \leq NP + 1 \quad (3.37)$$

Para um sistema com  $NC$  componentes, há  $(NC-1)$  variáveis de estado em cada estágio, pois a composição de um dos componente é obtida por diferença:

$$x_{NC,j} = 1,0 - \sum_{i=1}^{NC-1} x_{i,j}, \quad 1 \leq j \leq NP + 1 \quad (3.38)$$

Os elementos do vetor de entradas do sistema são as vazões de líquido e vapor:

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} L \\ V \end{bmatrix} \quad (3.39)$$

Com essas considerações, o modelo não-linear da coluna de destilação em batelada na representação estado-espço é dado por:

$$\begin{bmatrix} \dot{x}_{1,1} \\ \vdots \\ \dot{x}_{i,1} \\ \vdots \\ \dot{x}_{i,j} \\ \vdots \\ \dot{x}_{i,NP+1} \\ \vdots \\ \dot{x}_{NC-1,NP+1} \end{bmatrix} = \mathbf{f}(\mathbf{X}, \mathbf{u}) = \begin{bmatrix} f_{1,1}(\mathbf{X}, \mathbf{u}) \\ \vdots \\ f_{i,1}(\mathbf{X}, \mathbf{u}) \\ \vdots \\ f_{i,j}(\mathbf{X}, \mathbf{u}) \\ \vdots \\ f_{i,NP+1}(\mathbf{X}, \mathbf{u}) \\ \vdots \\ f_{NC-1,NP+1}(\mathbf{X}, \mathbf{u}) \end{bmatrix}, \quad 1 \leq i \leq NC - 1; 1 \leq j \leq NP + 1 \quad (3.40)$$

onde:

$$\begin{aligned} f_{i,1} &= (Lx_{i,0} - Lx_{i,1} + Vy_{i,2} - Vy_{i,1})/M_1 \\ f_{i,j} &= (Lx_{i,j-1} - Lx_{i,j} + Vy_{i,j+1} - Vy_{i,j})/M_j, \quad 2 \leq j \leq NP \\ f_{i,NP+1} &= (Lx_{i,NP} - Lx_{i,NP+1} + Vx_{i,NP+1} - Vy_{i,NP+1})/M_{NP+1} \end{aligned} \quad (3.41)$$

O correspondente modelo discreto pode ser obtido pelo método de Euler:

$$\hat{X}_{k+1} = \hat{X}_k + \Delta t f(\hat{X}_k, u_k) = \bar{f}(\hat{X}_k, u_k) \quad (3.42)$$

onde  $\Delta t$  é o passo de integração e  $(nkal \times \Delta t) = Ta$ . Ou seja, conhecendo-se  $\hat{X}_k$ , a equação (3.40) é integrada  $nkal$  vezes para a obtenção da estimativa do estado do sistema no próximo instante de amostragem ( $\hat{X}_{k+1}$ ).

As simplificações feitas e a integração numérica introduzem erros de modelagem que devem ser compensados pelo estimador estocástico filtro de Kalman.

### 3.3.1- Modelo do sensor

Para a implementação do filtro de Kalman, é necessário que se tenha uma função que relacione as medidas dos sensores às variáveis de estado (equação 3.28).

Neste trabalho, o vetor  $Z$  corresponde às temperaturas em alguns estágios da coluna. Assumindo-se que os estágios são ideais, a relação entre temperatura e composição é dada pelas relações termodinâmicas de equilíbrio líquido-vapor. Porém, dependendo do sistema, nem sempre é possível obter uma equação que relacione de forma explícita a temperatura à composição. No entanto, na etapa de cálculo do vetor  $\bar{h}$  no algoritmo de Kalman, a pressão do sistema e as estimativas de composição *a priori* são conhecidas. Dessa forma, o vetor  $\bar{h}$  pode ser obtido realizando-se o cálculo de ponto de bolha nos estágios onde se localizam os sensores, e a matriz  $\bar{H}$  pode ser calculada numericamente.

No caso de sistemas que possuem comportamento próximo ao ideal, o vetor  $\bar{h}$  e a matriz  $\bar{H}$  podem ser obtidos analiticamente, conforme mostrado no Anexo I.

## 3.4- FILTRO DE KALMAN ESTENDIDO PARA COLUNAS DE DESTILAÇÃO EM BATELADA

Um filtro de Kalman estendido para colunas de destilação em batelada foi desenvolvido utilizando o modelo do item anterior. Os elementos das matrizes e vetores do algoritmo para estimativa do estado de sistemas binários e ternários são apresentados no Anexo I.

O filtro de Kalman apresenta dois parâmetros ajustáveis: a matriz covariância dos ruídos do estado do sistema ( $\mathbf{Q}$ ) e a matriz covariância dos ruídos das medidas ( $\mathbf{R}$ ).

A matriz  $\mathbf{R}$  é relativamente mais fácil de ser estimada, já que seus elementos correspondem à covariância dos erros de medida dos sensores.

A matriz  $\mathbf{Q}$  representa os erros de modelagem (desvios entre o modelo e o processo real) bem como as perturbações que afetam o estado do sistema. Essa matriz é relativamente mais difícil de ser estimada e é normalmente escolhida por tentativa e erro através de simulações ou dados experimentais.

No entanto, compreender o significado físico dos parâmetros  $\mathbf{Q}$  e  $\mathbf{R}$  e qual a sua influência sobre o desempenho do filtro de Kalman podem auxiliar muito na sintonia desses parâmetros.

A equação (3.32) revela que a estimativa *a posteriori* ( $\hat{\mathbf{X}}_{k|k}$ ) do estado do sistema é dada pela combinação linear de dois termos: a estimativa *a priori* ( $\hat{\mathbf{X}}_{k|k-1}$ ) fornecida pelo modelo e um termo que representa a informação do estado do sistema contida nos valores medidos ( $\mathbf{L}_k [\mathbf{Z}_k - \bar{\mathbf{h}}(\hat{\mathbf{X}}_{k|k-1})]$ ). Quando os autovalores de  $\mathbf{Q}$  são grandes em relação aos autovalores de  $\mathbf{R}$  (no caso escalar, isso equivale a dizer que a razão  $Q/R$  é grande), o sistema é muito suscetível a perturbações e/ou existe um alto grau de incerteza no modelo utilizado. Com isso, as covariâncias dos erros das estimativas *a priori* (equação 3.36) aumentam, o ganho do filtro de Kalman aumenta e, no cálculo da estimativa *a posteriori*, o filtro "acredita" mais nos valores medidos do que nos valores estimados pelo modelo. Por outro lado, quando os autovalores de  $\mathbf{Q}$  são pequenos em relação aos autovalores de  $\mathbf{R}$  (no caso escalar,  $Q/R$  é pequeno), as medidas obtidas apresentam muitos ruídos e, no cálculo de  $\hat{\mathbf{X}}_{k|k}$ , maior peso é dado à estimativa do modelo do que à informação fornecida pelos sensores (o ganho  $\mathbf{L}_k$  diminui).

#### 3.4.1- Implementação do Filtro de Kalman Estendido

O filtro de Kalman é inicializado com  $\hat{\mathbf{X}}_0$  e  $\mathbf{P}_0$ . O material a ser destilado é carregado no refeedor e a coluna opera com refluxo total até que os perfis de concentração e temperatura permaneçam inalterados no tempo (equilíbrio). Durante o período de refluxo total, as estimativas do filtro tendem a ficar constantes, ou seja,

$\hat{X}_{k+1|k} \rightarrow \hat{X}_{k|k}$ . Atingido o equilíbrio, inicia-se a coleta do destilado ( $t = 0$ ) de acordo com uma estratégia de refluxo escolhida.

No cálculo de  $\bar{f}(\hat{X}_{k|k}, u_k)$  e  $\bar{F}_k$ , é necessário estimar os valores das seguintes variáveis :

- Vazões molares de líquido e vapor ( $L_k$  e  $V_k$ )

Utilizando a estimativa mais recente da composição do refeedor, calcula-se o calor latente de vaporização do líquido no refeedor. Como a potência de aquecimento é conhecida, a vazão de vapor é obtida por:  $V_k = Pot / (\Delta H_{mist.}^{vap})_{NP+1}$ . A vazão de líquido é,

então, calculada por :  $L_k = \frac{R_k}{R_k + 1} V_k$ , onde  $R_k$  é a razão de refluxo atual.

- Acúmulo molar de líquido nos pratos ( $M_j$ )

O acúmulo molar de líquido nos pratos foi considerado constante ao longo da batelada e um valor previamente estimado (por simulação ou correlações) foi utilizado.

- Acúmulo molar de líquido no refeedor ( $M_{NP+1}$ )

O número de moles no refeedor pode ser estimado pela seguinte equação:

$$(M_{NP+1})_k = M_{Bo} - \sum_{j=1}^{NP} M_j - \sum_{m=1}^k (V - L)_m Ta$$

### 3.5- ESCOLHA DA ESTRATÉGIA DE OPERAÇÃO DA COLUNA DE DESTILAÇÃO EM BATELADA

As principais formas de operação de colunas de destilação em batelada são as seguintes:

- Operação com razão de refluxo constante: nesse caso, a composição do destilado varia ao longo da batelada.
- Operação com pureza constante: a razão de refluxo é variada de tal forma que a composição do destilado seja mantida constante.

- Operação ótima: uma trajetória ótima de razão de refluxo é implementada a fim de otimizar uma certa função objetivo (minimização do tempo de batelada, maximização da quantidade de destilado produzido, maximização do lucro).

Nesse trabalho, optou-se pela operação com pureza constante. Utilizando alguns resultados encontrados na literatura a respeito da otimização de colunas de destilação em batelada, serão apresentados os motivos que levaram à escolha dessa forma de operação.

A forma mais simples e mais comumente empregada é a operação com razão de refluxo constante. A trajetória de refluxo ótima raramente é implementada na prática. BOSLEY e EDGAR (1992) apresentaram alguns fatores que dificultam o uso de uma política de refluxo ótimo. A trajetória ótima é normalmente obtida "off-line" através de modelos simplificados. Após várias simulações, os autores concluíram que a trajetória de refluxo ótimo pode variar significativamente a depender das hipóteses assumidas na modelagem do sistema. Se o modelo utilizado não descrever o processo com boa exatidão, a implementação prática da trajetória ótima obtida "off-line" pode levar a resultados muito diferentes do "ótimo". Outro problema citado por BOSLEY e EDGAR (1992) é que os trabalhos de otimização de colunas de destilação em batelada consideram a implementação da trajetória de refluxo ótimo em malha aberta. No entanto, sistemas em malha aberta não são robustos o suficiente para lidar com perturbações, ruídos, erros de modelagem e variações frequentes das condições operacionais (que são comuns em colunas em batelada). Tais fatores põem em risco o sucesso da política de refluxo ótimo.

Existem diversos trabalhos na literatura que tratam da otimização de colunas de destilação em batelada. Porém, até 1998, a questão se as estratégias ótimas apresentam melhorias significativas em relação às estratégias de razão de refluxo constante ou pureza constante ainda não havia sido esclarecida. A maioria dos trabalhos considerava sistemas binários com volatilidade relativa constante (geralmente próxima de 2,0) e o efeito do acúmulo de líquido na coluna normalmente não era considerado. Problemas específicos eram resolvidos e os resultados dificilmente podiam ser generalizados.

Recentemente, BETLEM *et al.* (1998) sugeriram um procedimento sistemático para determinar qual a melhor estratégia de operação de colunas de destilação em batelada. Duas medidas foram escolhidas para caracterizar um ciclo de batelada: o grau de dificuldade de separação ( $\sigma_{dif}$ ) e o grau de esgotamento ou exaustão ( $\sigma_{esg}$ ).

Um ciclo de batelada consiste em:

- Preencher o refulvedor com a alimentação
- Iniciar a batelada
- Recolher um número sequencial de produtos e frações intermediárias
- Finalizar o ciclo de batelada

Se o produto de fundo não atingir a especificação durante a coleta do último produto, uma fração intermediária de menor pureza deve ser coletada até que o material no refulvedor alcance a composição desejada. Esta fase é denominada fase de esgotamento ou exaustão, pois os componentes mais voláteis são “esgotados” do refulvedor.

As frações intermediárias podem ser adicionadas à alimentação fresca da próxima batelada. Porém, mesmo nos casos em que não há reciclo das frações intermediárias, ainda há possibilidade de otimizar a operação.

As seguintes estratégias foram estudadas pelos autores: razão de refluxo constante (CR); pureza constante (CQ); operação ótima (DO). A maximização do fator de capacidade foi a função objetivo escolhida na resolução do problema de otimização. O fator de capacidade é definido como:

$$\text{fator de capacidade} = \frac{\sum \text{quantidade de produtos}}{t_{\text{TOT}}} \quad (3.43)$$

A vantagem de se escolher o fator de capacidade como função objetivo é que ele independe dos preços de mercado e custos energéticos.

O grau de dificuldade de separação foi inicialmente proposto por KERKHOF e VISSERS (1978) e baseia-se no estado da coluna no início da coleta uma fração de produto:

$$\sigma_{\text{dif}} = \frac{Dest_{\text{potencial}} - Dest_{\text{máxCQ}}}{Dest_{\text{potencial}}} \quad (3.44)$$

$Dest_{\text{potencial}}$  é a produção teórica máxima de destilado se todos os moles do componente mais volátil na alimentação fossem coletados no destilado:

$$Dest_{potencial} = \frac{M_{Bo}x_{Bo}}{x_{D,médio}} = \frac{M_{Bo}x_{Bo}}{x_{D,SP}} \quad (3.45)$$

$Dest_{máxCQ}$  é a produção máxima de destilado (em moles) se a coluna operasse com pureza constante. Esse valor pode ser calculado utilizando a equação de Fenske e balanços materiais.

A partir das definições acima, é possível demonstrar que:

$$\sigma_{dif} = \left[ \frac{x_{D,SP} - x_{Bo}}{x_{Bo}(1 - x_{D,SP})} \times \frac{1}{\alpha^{\varepsilon_{coluna}(NP+1)} - 1} \right] \quad (3.46)$$

onde:  $\alpha$  é a volatilidade relativa média,  $NP$  é o número de pratos e  $\varepsilon_{coluna}$  é a eficiência global da coluna.

A fim de considerar o estado da coluna após a coleta do produto e caracterizar a etapa de esgotamento, BETLEM *et al.* (1998) introduziram o chamado grau de esgotamento:

$$\sigma_{esg} = \frac{Dest}{Dest_{máxCR}} \quad (3.47)$$

onde  $Dest$  é o número de moles de destilado já produzido e  $Dest_{máxCR}$  é o número de moles máximo de destilado que seria obtido se a coluna estivesse operando com razão de refluxo constante (também obtido por balanço material e pela equação de Fenske).

Após várias simulações, BETLEM *et al.* (1998) obtiveram a Figura 3.7.

Os autores concluíram que a produção sempre é maior quando a operação ótima é utilizada. No entanto, a depender dos valores de  $\sigma_{dif}$  e  $\sigma_{esg}$ , a diferença da operação ótima em comparação com as operações com razão de refluxo constante ou pureza constante é pequena. A política de refluxo constante seria indicada se  $\sigma_{esg} < 60\%$ , enquanto que a operação com pureza constante fornece resultados tão bons quanto a operação ótima se  $\sigma_{dif}$  ou  $\sigma_{esg}$  for pequeno.

Colunas de alta pureza normalmente apresentam um número de pratos relativamente grande. Dessa forma, o fator  $\left[ \alpha^{\varepsilon_{coluna}(NP+1)} - 1 \right]$  tende a ser grande, resultando num valor de  $\sigma_{dif}$  pequeno. A Tabela 3.1 apresenta alguns valores de grau de dificuldade de separação calculados para uma coluna com o mesmo número de pratos da

coluna montada no Laboratório de Controle "On-line" (29 pratos) e condições operacionais semelhantes a das corridas experimentais feitas ( $x_{D,SP} = 0,99$  e  $\alpha = 2,07$  para o sistema etanol/1-propanol). Considerou-se eficiência global igual a 1,0 e, no pior dos casos, eficiência global = 0,5. De uma forma geral, o grau de dificuldade de separação é baixo nessas condições, mesmo quando a eficiência global da coluna é baixa. Para  $\sigma_{dif} < 1,6\%$ , a Figura 3.7 indica que a estratégia de pureza constante apresenta um desempenho tão bom quanto a estratégia ótima para quase todos os valores de  $\sigma_{esg}$ .

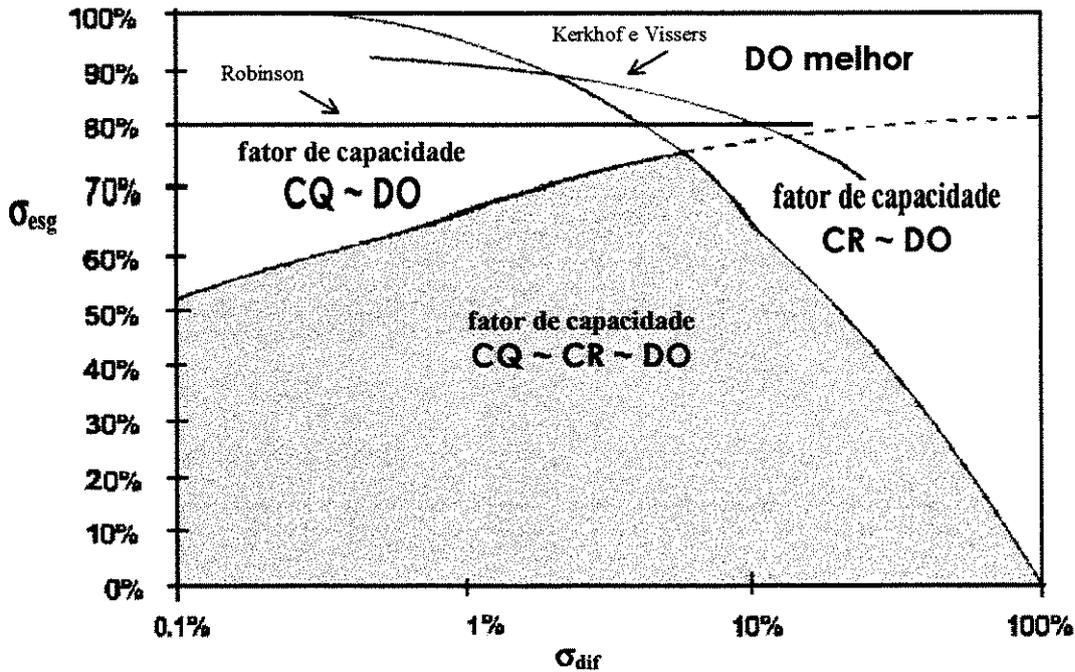


Figura 3.7. Regiões em que CQ (pureza constante) e CR (razão de refluxo constante) têm um desempenho 2% inferior a DO (política ótima). As regiões delimitadas por ROBINSON (1971) e KERKHOF e VISSERS (1978) também são apresentadas. (BETLEM *et al.*, 1998).

BETLEM *et al.* (1998) também analisaram quando é vantajoso reciclar as frações intermediárias. A relação entre a quantidade de produto e a quantidade ótima de fração intermediária pode ser estimada através da medida  $\sigma_{fração}$ , que é uma forma modificada da medida  $q$  definida por CHRISTENSEN e JORGENSEN (1987):

$$\sigma_{fração} = \left[ \frac{I}{x_F - x_{B,SP}} \int_{x_{B,SP}}^{x_F} \frac{NP_{min} + I}{\varepsilon_{coluna} NP + I} dx_B \right] \times 100 \quad (3.48)$$

Tabela 3.1. Cálculo do grau de dificuldade de separação para as condições operacionais adotadas nos experimentos

$x_{Bo}$	$\varepsilon_{coluna} = 1,0$	$\varepsilon_{coluna} = 0,5$
	$\sigma_{dif} (\%)$	$\sigma_{dif} (\%)$
0,10	$3,0 \times 10^{-5}$	1,60
0,20	$1,3 \times 10^{-5}$	0,72
0,30	$7,6 \times 10^{-6}$	0,42
0,40	$4,9 \times 10^{-6}$	0,27
0,50	$3,3 \times 10^{-6}$	0,18
0,60	$2,2 \times 10^{-6}$	0,12
0,70	$1,4 \times 10^{-6}$	0,08

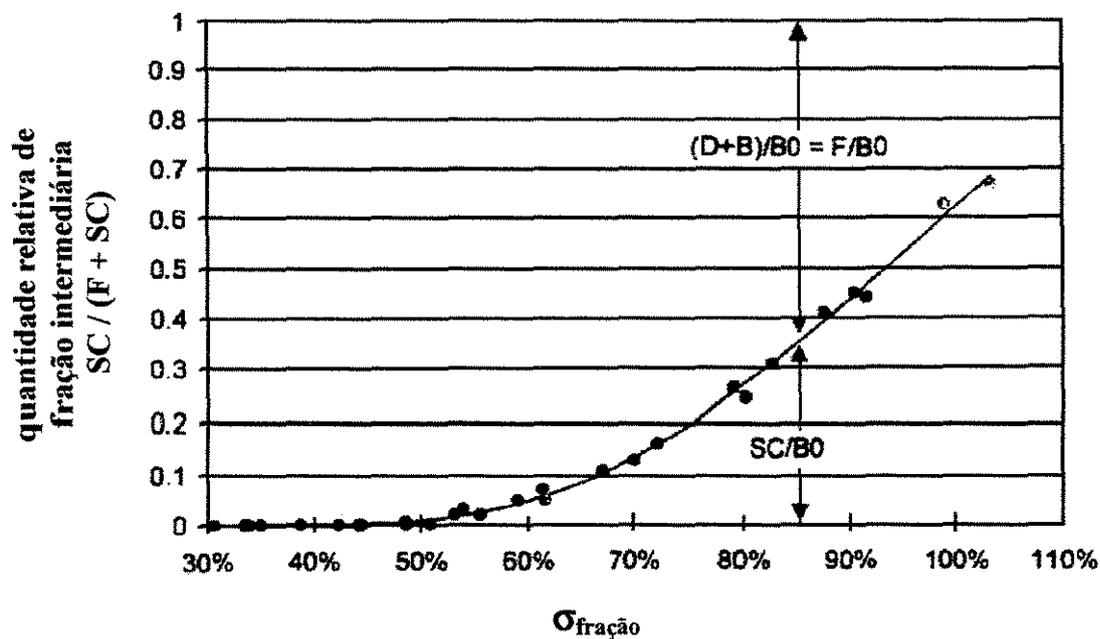


Figura 3.8. Determinação da quantidade ótima de fração intermediária em função de  $\sigma_{fração}$ . Resultados de 32 simulações. Condições:  $1,6 \leq \alpha \leq 4$ ;  $x_F = 0,5; 0,6; 0,8$ ;  $x_{D,SP} = 0,99; 0,98$ ;  $x_{B,SP} = 0,01; 0,05$ ;  $\varepsilon_{coluna} = 0,53$ ;  $NP = 21$  (BETLEM *et al.*, 1998).

Sendo  $F$  o número de moles da alimentação fresca,  $SC$  o número de moles da fração intermediária e  $Bo = F + SC$ , a Figura 3.8 apresenta resultados de simulações feitas por BETLEM *et al.* (1998). A grandeza  $\sigma_{fração}$  baseia-se na composição da alimentação e

pode ser calculada sem o conhecimento da quantidade de fração intermediária (SC). A área de transição onde o reciclo da fração intermediária se torna relevante está localizada por volta de  $\sigma_{\text{fração}} = 60\%$ .

Utilizando o simulador desenvolvido por OISIOVICI (1998), foram feitas algumas corridas utilizando as condições a serem adotadas na parte experimental desse trabalho. Assumindo-se  $x_{B,SP} = 0,01$ , ou seja, recuperação quase completa do etanol alimentado, o valor de  $\sigma_{\text{fração}}$  foi sempre inferior a 35%. Ou seja, não é vantajoso reciclar a fração intermediária.

A metodologia proposta por BETLEM *et al.* (1998) pode também ser utilizada para a escolha da estratégia de operação de destilações em batelada multicomponentes. Para tanto, os autores sugerem a divisão da destilação multicomponente em uma sequência de separações pseudo-binárias.

Estratégias ótimas de refluxo seriam teoricamente a melhor forma de operação da coluna, mas são de difícil implementação prática. Porém, de uma forma geral, colunas de destilação em batelada de alta pureza apresentam um grau de dificuldade de separação baixo, já que possuem um grande número de estágios. Nesses casos, a estratégia de operação com pureza constante pode fornecer resultados tão bons quanto a estratégia de operação ótima.

### 3.6- ESTRATÉGIAS DE CONTROLE

Os métodos que utilizam variáveis de estado (“state-space methods”) são a base da Teoria de Controle Moderno. Ao invés de utilizar funções de transferência para descrever o comportamento do sistema, na abordagem via variáveis de estado o sistema é descrito como um conjunto de equações diferenciais ordinárias e o seu formato é adequado para implementação computacional.

A definição de “estado de um sistema dinâmico” é a seguinte (FRIEDLAND, 1986):

*“O estado de um sistema dinâmico é um conjunto de quantidades físicas e a especificação dessas quantidades físicas completamente determina a evolução do sistema, na ausência de excitação externa.”*

Se  $X_1, X_2, \dots, X_n$  são as variáveis de estado de um processo descrito por  $n$  equações diferenciais ordinárias (processo de ordem  $n$ ) e  $u_1, u_2, \dots, u_m$  são as entradas externas, então:

$$\begin{aligned}\dot{X}_1 &= \frac{dX_1}{dt} = f_1(X_1, X_2, \dots, X_n, u_1, u_2, \dots, u_m, t) \\ \dot{X}_2 &= \frac{dX_2}{dt} = f_2(X_1, X_2, \dots, X_n, u_1, u_2, \dots, u_m, t) \\ &\vdots \\ \dot{X}_n &= \frac{dX_n}{dt} = f_n(X_1, X_2, \dots, X_n, u_1, u_2, \dots, u_m, t)\end{aligned}\tag{3.49}$$

Sendo:  $X = \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_n \end{bmatrix}$  = vetor de estado ;  $u = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_m \end{bmatrix}$  = vetor de entradas, então:

$$\dot{X} = f(X, u, t)\tag{3.50}$$

Se  $f$  não depender explicitamente do tempo :  $\dot{X} = f(X, u)$ .

#### 3.6.1- Controle de processos não-lineares

Vários processos industriais importantes, tais como destilação de alta pureza, reações químicas altamente exotérmicas, neutralizações de pH e sistemas em batelada podem apresentar comportamento altamente não-linear. Esses processos operam numa

ampla faixa de operação e o desempenho dos tradicionais controladores PI e PID, em geral, não é satisfatório nesses casos.

Recentemente, o interesse no desenvolvimento de estratégias de controle e métodos de identificação para sistemas não-lineares tem aumentado e vem sendo estimulado pelos avanços na teoria de sistemas não-lineares e pela viabilidade de implementação de tais métodos através de computadores.

#### Estratégias Convencionais para Controle de Processos Não-Lineares

Tradicionalmente, as estratégias de controle de processos não-lineares têm como base o uso de modelos linearizados em torno de algum ponto de operação. O projeto do controlador é feito, então, utilizando-se essa aproximação linear. Quando o modelo linear é atualizado “on-line”, o controlador pode apresentar bom desempenho numa ampla faixa de condições operacionais.

#### Estratégias Recentes para Controle de Processos Não-Lineares

Segundo HENSON e SEBORG (1997), as estratégias mais recentes para controle de processos não-lineares são:

- Linearização “Feedback” (“Feedback Linearization”)
- Controle Preditivo Baseado num Modelo Não-Linear (“Nonlinear Model Predictive Control”)
- Controle Adaptativo
- Redes Neurais
- Controladores Fuzzy

Dessas estratégias, o controle adaptativo SISO foi utilizado no controle de colunas de destilação em batelada de pureza baixa e moderada (OISIOVICI, 1998).

Nesse trabalho, será desenvolvida uma estratégia de controle baseada na linearização “feedback”.

### 3.7- LINEARIZAÇÃO “FEEDBACK”

A idéia central da linearização “feedback” consiste em transformar algebricamente um sistema de dinâmica não-linear num sistema inteiramente ou parcialmente linear, de tal forma que técnicas de controle lineares possam ser aplicadas.

O modelo de processos não-lineares que será utilizado no desenvolvimento do método de linearização “feedback” apresenta a seguinte representação em variáveis de estado:

$$\begin{aligned}\dot{X} &= f(X) + g(X)u \\ Y &= h(X)\end{aligned}\tag{3.51}$$

onde  $Y$  é um vetor  $m$ -dimensional de saídas controladas.

A diferença entre a tradicional linearização Jacobiana e a linearização “feedback” é que o modelo Jacobiano é uma aproximação do modelo não-linear apenas em torno de um ponto de operação. Através da linearização “feedback” é possível obter um modelo que é a representação exata do modelo não-linear original ao longo de uma ampla faixa de condições operacionais.

Após a linearização “feedback”, o modelo (3.51) torna-se linear:

$$\begin{aligned}\dot{\xi} &= A'\xi + B'v \\ \omega &= C'\xi\end{aligned}\tag{3.52}$$

onde  $\xi$  é um vetor  $r$ -dimensional de variáveis de estado transformadas;  $v$  é um vetor  $m$ -dimensional de variáveis de entrada transformadas;  $A'$ ,  $B'$  e  $C'$  são matrizes na forma normal ou canônica e  $\omega$  é um vetor  $m$ -dimensional de variáveis de saída transformadas.

Se  $r < n$ ,  $(n-r)$  variáveis de estado devem ser introduzidas para completar a transformação de coordenadas. O inteiro  $r$  é chamado de grau relativo e é uma característica fundamental do sistema não-linear.

#### 3.7.1- Abordagens da linearização “feedback”

A maioria das linearizações “feedback” são baseadas em duas abordagens:

- Linearização Estado-Espaço (“State-Space Linearization”)
- Linearização Entrada/Saída (“Input/Output Linearization”)

Na linearização entrada/saída, o objetivo é linearizar a relação entre as entradas transformadas ( $\mathbf{v}$ ) e as saídas ( $\mathbf{Y}$ ). Um controlador linear é então projetado para o modelo entrada/saída linearizado, o qual é representado por (3.52) com  $r \leq n$  e  $\boldsymbol{\omega} = \mathbf{Y}$ . No entanto, há ainda um subsistema que não é linearizado:  $\dot{\boldsymbol{\eta}} = \mathbf{q}(\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\xi})$ , onde  $\boldsymbol{\eta}$  é um vetor de dimensão  $(n-r)$  de variáveis de estado transformadas e  $\mathbf{q}$  é um vetor de dimensão  $(n-r)$  de funções não-lineares.

Na linearização estado-espço, o objetivo é linearizar a relação entre as entradas transformadas e o vetor de variáveis de estado transformadas. Tal objetivo é alcançado definindo-se saídas “artificiais” ( $\boldsymbol{\omega}$ ) que levem à obtenção de um modelo “feedback” linearizado com dimensão de estado  $r = n$ . Um controlador linear é então projetado para esse modelo. Porém, essa abordagem pode não simplificar o projeto do controlador, pois a relação entre as entradas transformadas e as saídas originais ( $\mathbf{Y}$ ) geralmente é não-linear. Além disso, a determinação da saída “artificial” envolve a resolução de equações diferenciais parciais que dificilmente podem ser resolvidas analiticamente.

Na maioria das aplicações em controle de processos, prefere-se utilizar a linearização entrada/saída ao invés da linearização estado-espço. Dessa forma, esse trabalho apresentará e discutirá apenas os controladores SISO ( $m = 1$ ) baseados na linearização entrada/saída.

### 3.7.2- Ferramentas matemáticas

O projeto e análise de controladores obtidos através da linearização “feedback” utilizam vários conceitos da geometria diferencial, tais como campo vetorial, gradiente, Jacobiano, difeomorfismo, derivada de Lie e grau relativo. Esses dois últimos serão brevemente revisados.

#### Derivada de Lie

Definição 3.1: Seja  $h: R^n \rightarrow R$  uma função escalar suave e  $f: R^n \rightarrow R^n$  um campo vetorial suave em  $R^n$ , então a derivada de Lie de  $h$  em relação a  $f$  é uma função escalar definida por:

$$L_f h = \nabla h \cdot f = \frac{\partial h}{\partial \mathbf{X}} \cdot \mathbf{f} = \left( \frac{\partial h}{\partial X_1} \quad \frac{\partial h}{\partial X_2} \quad \dots \quad \frac{\partial h}{\partial X_n} \right) \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{pmatrix} \quad (3.53)$$

Portanto, a derivada de Lie é simplesmente a derivada direcional de  $h$  ao longo da direção do vetor  $f$ . Se  $g$  for outro campo vetorial, então:  $L_g L_f h = \nabla(L_f h)g$ .

### Grau Relativo

Definição 3.2: O grau relativo do sistema não-linear (3.51) é o menor inteiro  $r$  para o qual  $L_g L_f^{r-1} h(X) \neq 0$  e  $L_g L_f^{r-2} h(X) = 0$  para  $\forall X$  em alguma vizinhança de um certo ponto de operação  $X_o$ .

Calculando-se as derivadas da saída:  $\dot{Y} = \frac{dh}{dt} = \frac{\partial h}{\partial X} \frac{dX}{dt} = L_f h(X)$

$$\ddot{Y} = L_f^2 h(X)$$

$$\vdots$$

$$\frac{d^{r-1} Y}{dt^{r-1}} = L_f^{r-1} h(X)$$

$$\frac{d^r Y}{dt^r} = L_f^r h(X) + L_g L_f^{r-1} h(X) u$$

Ou seja, o grau relativo representa a menor ordem da derivada da saída ( $Y$ ) que depende explicitamente da entrada ( $u$ ). Usando a definição de grau relativo, obtém-se a chamada *forma normal de Byrnes-Isidori* através da seguinte transformação de coordenadas:

$$\begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \vdots \\ \xi_r \\ \eta_1 \\ \eta_2 \\ \vdots \\ \eta_{n-r} \end{pmatrix} = \Phi(X) = \begin{pmatrix} h(X) \\ L_f h(X) \\ \vdots \\ L_f^{r-1} h(X) \\ t_1(X) \\ t_2(X) \\ \vdots \\ t_{n-r}(X) \end{pmatrix} \quad (3.54)$$

As funções  $t_i(X)$  são as soluções da seguinte equação diferencial parcial:  $L_g t_i(X) = 0$ . Se o grau relativo for bem definido, a existência de  $t_i(X)$  está garantida. Essa transformação de coordenadas resulta na forma normal de Byrnes-Isidori:

$$\begin{aligned}
 \dot{\xi}_1 &= \xi_2 \\
 \dot{\xi}_2 &= \xi_3 \\
 &\vdots \\
 \dot{\xi}_{r-1} &= \xi_r \\
 \dot{\xi}_r &= b(\xi, \eta) + a(\xi, \eta) u \\
 \dot{\eta}_1 &= q_1(\xi, \eta) \\
 &\vdots \\
 \dot{\eta}_{n-r} &= q_{n-r}(\xi, \eta) \\
 Y &= \xi_1
 \end{aligned} \tag{3.55}$$

onde:

$$b = [L_f^r h(X)]_{X=\Phi^{-1}(\xi, \eta)}, \quad a = [L_g L_f^{r-1} h(X)]_{X=\Phi^{-1}(\xi, \eta)} \quad \text{e} \quad q_i = [L_f^r \Phi_i(X)]_{X=\Phi^{-1}(\xi, \eta)}.$$

### 3.7.3- Linearização entrada/saída (“input/output linearization”)

O sistema não-linear (3.51) pode ser transformado na forma normal de Byrnes-Isidori através do difeomorfismo  $\Phi(X) = [\xi^T, \eta^T]^T$  se o grau relativo  $r$  for bem definido. As coordenadas  $\xi$  são definidas como:

$$\begin{aligned}
 \xi_k &= \Phi_k(X) = L_f^{k-1} h(X), \quad 1 \leq k \leq r, \text{ e} \\
 \eta_k &= \Phi_{k+r}(X), \quad 1 \leq k \leq n-r, \text{ onde } L_g \Phi_k(X) = 0
 \end{aligned}$$

A forma normal é, então, escrita como (3.55) e o controlador “feedback” estático é dado por:

$$u = \frac{v - b(\xi, \eta)}{a(\xi, \eta)} \tag{3.56}$$

Utilizando essa lei de controle, tem-se que  $\dot{\xi}_r = v$  em (3.55).

Dessa forma, a relação entre a entrada transformada  $v$  e a saída  $Y$  é exatamente linear ( $Y^{(r)} = \dot{\xi}_r = v$ ) e um controlador “feedback” linear pode ser projetado para estabilizar o subsistema  $\xi$ . Por exemplo, considerando o seguinte posicionamento de pólos:

$$v = -a_r \xi_r - a_{r-1} \xi_{r-1} - \dots - a_1 \xi_1 \quad (3.57)$$

O polinômio característico para o subsistema linear  $\xi$  é dado, então, por:

$$s^r + a_r s^{r-1} + \dots + a_2 s + a_1 = 0 \quad (3.58)$$

A estabilidade do subsistema  $\xi$  e, portanto, a garantia de que a saída  $Y$  permanecerá limitada, estará assegurada se os parâmetros ajustáveis  $a_i$  forem escolhidos de tal forma que (3.58) seja um polinômio Hurwitz.

Utilizando as coordenadas originais:

$$u = \frac{v - L_f^r h(X)}{L_g L_f^{r-1} h(X)} \quad (3.59)$$

$$v = -a_r L_f^{r-1} h(X) - a_{r-1} L_f^{r-2} h(X) - \dots - a_1 h(X) \quad (3.60)$$

Ou seja:

$$u = \frac{-L_f^r h(X) - a_r L_f^{r-1} h(X) - a_{r-1} L_f^{r-2} h(X) - \dots - a_1 h(X)}{L_g L_f^{r-1} h(X)} \quad (3.61)$$

Na maioria dos problemas de controle, o objetivo é manter a saída em torno de um “set-point” diferente de zero, mesmo na presença de perturbações não mensuráveis e de desvios entre o processo real e o seu modelo matemático. Portanto, o controlador (3.61) deve conter algum termo integral que considere os desvios entre a saída ( $Y$ ) e o “set-point” ( $Y_{SP}$ ).

Inserindo-se um termo integral ao controlador (3.61), tem-se:

$$u = \frac{-L_f^r h(X) - a_r L_f^{r-1} h(X) - \dots + a_1 [Y_{SP} - h(X)] + a_o \int_0^t [Y_{SP} - h(X)] d\tau}{L_g L_f^{r-1} h(X)} \quad (3.62)$$

onde  $a_o$  é um parâmetro do controlador associado ao termo integral.

Quando  $a_o = \frac{K_c}{\tau_I}$ ,  $a_1 = \beta_o + K_c$ ,  $a_k = \beta_{k-1}$  ( $2 \leq k \leq r$ ), tem-se o chamado

controlador GLC (“Globally Linearizing Controller”):

$$u = \frac{v - \beta_r L_f^r h(\mathbf{x}) - \beta_{r-1} L_f^{r-1} h(\mathbf{x}) - \dots - \beta_0 h(\mathbf{x})}{\beta_r L_g L_f^{r-1} h(\mathbf{x})} \quad (3.63)$$

$$e \quad v = K_c \left[ (Y_{SP} - Y) + \frac{I}{\tau_I} \int_0^t (Y_{SP} - Y) d\tau \right] \quad (3.64)$$

Quando  $\beta_r = 1$ , a equação (3.63) é idêntica à equação (3.62).

### 3.8- APLICAÇÃO DO MÉTODO DE LINEARIZAÇÃO ENTRADA/SAÍDA EM COLUNAS DE DESTILAÇÃO EM BATELADA

Assumindo a hipótese de contradifusão equimolar ( $L_j = L$ , para  $0 \leq j \leq NP$ ;  $V_j = V$ , para  $1 \leq j \leq NP+1$ ), o balanço de massa para o componente  $i$  no prato  $j$  é dado por:

$$\dot{x}_{i,j} = \frac{dx_{i,j}}{dt} = \frac{V(y_{i,j+1} - y_{i,j}) + L(x_{i,j-1} - x_{i,j})}{M_j}, i = 1, \dots, NC; j = 1, \dots, NP \quad (3.65)$$

Expressando  $L$  em função da razão de refluxo  $R$ , tem-se:

$$L = \frac{R}{R+1} V \quad (3.66)$$

Substituindo (3.66) em (3.65), e considerando  $u = R/(R+1)$  como sendo a variável manipulada, chega-se a:

$$\dot{x}_{i,j} = \frac{V}{M_j} (y_{i,j+1} - y_{i,j}) + \frac{V}{M_j} (x_{i,j-1} - x_{i,j}) u \quad (3.67)$$

Seguindo-se o mesmo procedimento, o balanço de massa no refeedor é dado por:

$$\dot{x}_{i,NP+1} = \frac{V}{M_{NP+1}} (x_{i,NP+1} - y_{i,NP+1}) + \frac{V}{M_{NP+1}} (x_{i,NP} - x_{i,NP+1}) u \quad (3.68)$$

Para sistemas binários ( $NC = 2$ ), o vetor de variáveis de estado é constituído pelas frações molares do componente mais volátil na fase líquida em cada prato e no refeedor. Expressando o modelo não-linear da coluna na forma (3.51), tem-se:

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \mathbf{g}(\mathbf{x})u$$

$$\begin{pmatrix} \dot{x}_1 \\ \vdots \\ \dot{x}_j \\ \vdots \\ \dot{x}_{NP+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_j \\ \vdots \\ f_{NP+1} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} g_1 \\ \vdots \\ g_j \\ \vdots \\ g_{NP+1} \end{pmatrix} u \quad (3.69)$$

onde:

$$f_j = \frac{V}{M_j}(y_{j+1} - y_j); g_j = \frac{V}{M_j}(x_{j-1} - x_j), j = 1, \dots, NP \quad (3.70)$$

$$f_{NP+1} = \frac{V}{M_{NP+1}}(x_{NP+1} - y_{NP+1}); g_{NP+1} = \frac{V}{M_{NP+1}}(x_{NP} - x_{NP+1})$$

A saída ( $Y$ ) de interesse, ou seja, a variável controlada é a composição instantânea do destilado ( $x_0$ ). Considerando que o condensador é total e que o acúmulo de líquido no condensador é desprezível, a composição instantânea do destilado é igual a composição do vapor efluente do topo da coluna ( $x_0 = y_{topo} = y_1$ ). Dessa forma:

$$Y = h(\mathbf{X}) = y_1 = y_{topo} \quad (3.71)$$

Derivando (3.71):

$$\dot{Y} = \frac{\partial y_1}{\partial x_1} \dot{x}_1 \quad (3.72)$$

Assumindo que as fases líquida e vapor apresentam comportamento próximo ao ideal e expressando a relação de equilíbrio em termos da volatilidade relativa ( $\alpha$ ):

$$y_j = \frac{\alpha_j x_j}{1 + (\alpha_j - 1)x_j} \quad (3.73)$$

$$\frac{\partial y_j}{\partial x_j} = K_{v_j} = \frac{\alpha_j}{[1 + (\alpha_j - 1)x_j]^2} \quad (3.74)$$

Então:

$$\dot{Y} = K_{v_1}(f_1 + g_1 u) \quad (3.75)$$

Com isso, o grau relativo do sistema é  $r = 1$ . Aplicando-se a lei do controlador GLC (equação 3.63) com  $\beta_1 = 1$  e  $\beta_0 = 0$ , chega-se a:

$$\frac{R_{controle}}{R_{controle} + 1} = \frac{\frac{v}{\partial y_1 / \partial x_1} - \left[ \frac{V}{M_1} (y_2 - y_1) \right]}{\frac{V}{M_1} (y_1 - x_1)} \quad (3.76)$$

onde:

$$v = K_c \left[ (x_{D,SP} - y_1) + \frac{1}{\tau_I} \int_0^t (x_{D,SP} - y_1) d\tau \right] \quad (3.77)$$

Para sistemas com comportamento próximo ao ideal, a volatilidade relativa é independente da composição:  $\alpha_j = P_1^{sat}(T_j)/P_2^{sat}(T_j)$ . Nesses casos,  $\partial y_1 / \partial x_1$  para sistemas binários é dado por:

$$\frac{\partial y_1}{\partial x_1} = \frac{\alpha_1}{[1 + (\alpha_1 - 1)x_1]^2} \quad (3.78)$$

A equação (3.76) fornece o valor da razão de refluxo que mantém constante a composição do destilado. Nesse trabalho, os valores de composição instantâneos necessários para o cálculo da ação de controle foram fornecidos pelo Filtro de Kalman Estendido desenvolvido para colunas de destilação em batelada. O controlador combinado ao estimador de estado foi inicialmente testado através de simulações e, posteriormente, foram feitos testes experimentais numa coluna de destilação em batelada em escala piloto. A montagem experimental utilizada será descrita a seguir. Os resultados das simulações e dos experimentos serão apresentados no próximo capítulo.

### 3.9- MONTAGEM EXPERIMENTAL

A coluna a utilizada no trabalho experimental está esquematizada na Figura 3.9 e foi montada no laboratório de Controle do DESQ/ FEQ.

A coluna de destilação em batelada possui 29 pratos perfurados (em Teflon) de 40 mm de diâmetro e perfurações de 2 mm de diâmetro com espaçamento triangular. Um balão de vidro com capacidade de 10 litros imerso numa manta de aquecimento (potência nominal de 1125W) foi utilizado como refervedor, com provisões para retirada de amostras e medida de temperatura. A coluna opera à pressão atmosférica.

Os testes experimentais foram feitos com sistema etanol/1-propanol, sendo  $x_{B_0,EtOH} < 0,30$ . No início da batelada, o volume da mistura alimentada ao refeedor era de 7 litros. A potência de aquecimento real foi estimada em 850 W, o que corresponde a uma vazão de cerca de 75 moles/h.

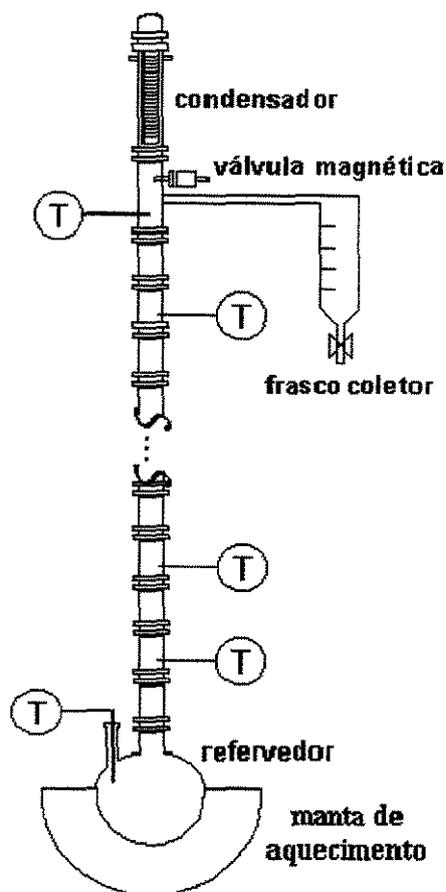


Figura 3.9- Esquema da coluna de destilação em batelada

A coluna possui um condensador vertical e a divisão do refluxo é feita através de uma válvula magnética do tipo liga/desliga. A Figura 3.10 apresenta um esquema do sistema de automação e controle implementado. O sistema é composto por termopares do tipo J, circuito amplificador e condicionador de sinais, seletor de canais, microcomputador, placa conversora AD/DA, programa de aquisição de dados. As funções básicas desse sistema são: leitura das temperaturas no refeedor e em alguns pratos para inferência da composição e monitoramento da operação; controle da razão de refluxo com o objetivo de manter constante a composição do destilado de alta pureza.

Resumidamente, o sistema de automação e controle funciona da seguinte forma:

A cada período de amostragem, o computador envia sinais digitais para selecionar os canais dos sensores de temperatura. O sinal analógico gerado pelo sensor é amplificado, convertido em sinal digital e lido pelo computador. Para cada canal selecionado, o valor lido considerado nos cálculos corresponde à média de 30000 leituras. Os ruídos de medida e processo são reduzidos por filtragem digital e, através de uma curva de calibração, os sinais lidos são convertidos em valores de temperatura. É possível fazer a leitura da temperatura em até 7 pontos da coluna a cada período de amostragem. As medidas de temperatura são utilizadas para inferência de composições. Os dados obtidos são utilizados na estratégia de controle para determinação da razão de refluxo necessária para que o objetivo de controle seja alcançado. A razão de refluxo é, então, implementada através do controle da válvula magnética. Ao final de cada batelada, amostras do destilado recolhido são analisadas através de um refratômetro. O microcomputador utilizado foi um PC Pentium 100 MHz. O tempo de leitura dos 7 sensores (considerando 30000 leituras para cada canal) era de cerca de 7 segundos. Maiores detalhes sobre os equipamentos e circuitos utilizados nos experimentos são descritos na dissertação de OISIOVICI (1998).

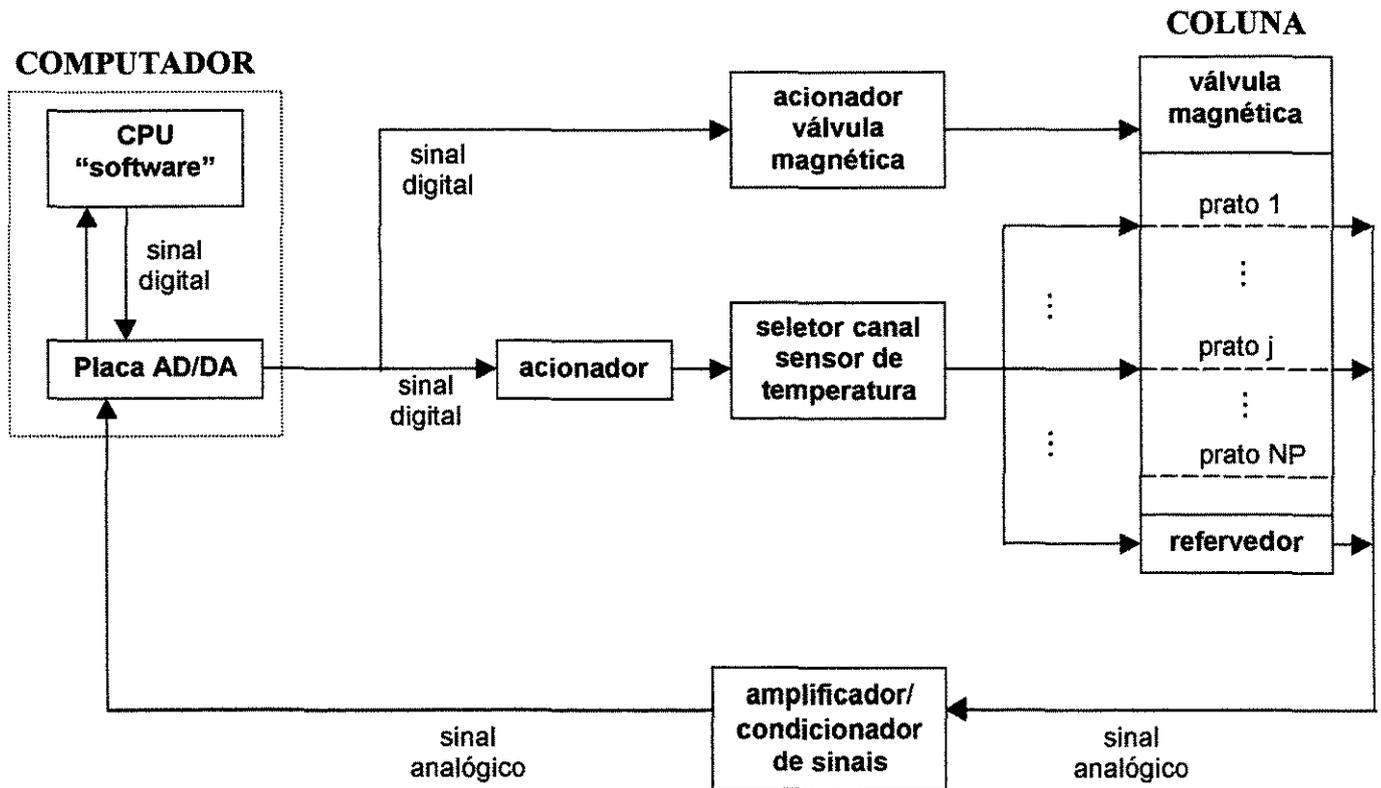


Figura 3.10 - Sistema de automação e controle

### 3.10- PROGRAMA DE AQUISIÇÃO DE DADOS E CONTROLE

O programa para aquisição de dados e controle de colunas de destilação em batelada de alta pureza foi elaborado em linguagem C. A interface entre o computador e o processo é feita através da placa AD/DA constituída de um conversor analógico-digital (12 bits), um conversor digital-analógico (10 bits), um conversor digital-digital (8 bits), 8 canais de saída analógica, 8 canais de entrada analógica, 8 canais de entrada digital e 8 canais de saída digital.

Dos 8 canais de saída digital, 7 são utilizados para a seleção dos canais dos sensores de temperatura e um é utilizado para o acionamento da válvula magnética.

A cada período de amostragem, são feitas as leituras dos 7 sensores. A seleção de cada canal é realizada pela subrotina "write\_dig()". O sinal gerado pelo sensor é convertido para a faixa de leitura da placa AD/DA (0 a 5 V) e a leitura é feita pela subrotina "read\_anl12()".

Através de uma curva de calibração, os sinais recebidos são convertidos em valores de temperatura. Uma pré-filtragem dos dados é feita através de um filtro exponencial duplo (OISIOVICI *et al.*, 1999). Os dados de temperatura são utilizados pelo filtro de Kalman para estimar composições. Com essas estimativas, a ação de controle é calculada e a correspondente razão de refluxo é implementada.

A razão de refluxo desejada é obtida alterando-se em intervalos de tempo adequados a posição da válvula para o destilado ou para o refluxo. Isso é feito através da função "write\_dig()" que permite atuar nas posições "on-off" do relê.

Para que a razão de refluxo na coluna corresponda ao valor calculado no programa, considera-se:

$$R = \frac{t_L}{t_D} \quad (3.79)$$

Para um determinado período de amostragem  $Ta$ , têm-se:  $t_L + t_D = Ta$ . Dessa forma:

$$t_D = \frac{Ta}{R+1} \quad (3.80)$$

A cada novo período de amostragem  $Ta$ , inicia-se um "looping". No início do "looping", a válvula é posta na posição refluxo. Com a válvula nessa posição, são

executadas as subrotinas de leitura de temperaturas, inferências e cálculo da razão de refluxo. O tempo computacional gasto nessas subrotinas é calculado e guardado na variável  $dt$ . O tempo que ainda falta para a válvula ficar na posição refluxo é chamado de  $t_{Llinha}$ , de tal forma que:  $t_L = dt + t_{Llinha}$ .

O programa, então, espera  $t_{Llinha}$  segundos com a válvula ainda na posição refluxo. Completados  $t_L$  segundos, a válvula passa para a posição destilado, fica nessa posição durante o tempo  $t_D$  e retorna ao início do “looping”.

O programa de aquisição de dados e controle pode ser dividido em duas etapas: monitoramento do aquecimento e coleta de destilado.

Na fase de monitoramento do aquecimento, a coluna opera com razão de refluxo total. O programa lê os sensores e permite que o usuário visualize os perfis de temperatura graficamente ou no modo texto. Quando os perfis de temperatura permanecem inalterados no tempo, diz-se que a coluna atingiu o estado de equilíbrio. A partir desse instante, o filtro de Kalman é inicializado e pode-se dar início à coleta do destilado.

Antes de começar a coletar o produto, o usuário escolhe se a operação será em malha aberta ou fechada. No primeiro caso, a razão de refluxo é mantida constante durante a batelada e igual a um valor previamente definido. No caso da malha fechada, o destilado começa a ser recolhido a uma razão de refluxo igual a um valor mínimo ( $R_{min}$ ) e, próximo ao “set-point”, o controlador é acionado. A cada período de amostragem, um novo valor de  $R$  é calculado e implementado através do controle da válvula magnética.

Na etapa de coleta de destilado, perfis de composição e temperatura são mostrados no modo texto e os seguintes gráficos podem ser visualizados:

- Composição do destilado *versus* tempo, razão de refluxo *versus* tempo
- Estágio *versus* temperatura
- Estágio *versus* composição
- Composição de um estágio escolhido *versus* tempo

O fluxograma do programa de aquisição de dados e controle é apresentado no Anexo II.

## **CAPÍTULO 4- RESULTADOS E DISCUSSÕES**

## 4- RESULTADOS E DISCUSSÕES

O controlador por inferência desenvolvido foi testado através de simulações e em testes experimentais realizados na coluna de destilação em batelada descrita anteriormente. Inicialmente, o Filtro de Kalman Estendido foi implementado e testado por simulação, considerando o sistema em malha aberta. O Filtro de Kalman combinado ao controlador GLC (controlador por inferência) foi, então, sintonizado para manter constante a composição do destilado de alta pureza. Alguns fatores relevantes, tais como o posicionamento dos sensores, foram estudados. Finalmente, o controlador por inferência foi testado numa coluna piloto. Esse capítulo discutirá e apresentará os principais resultados dos testes citados.

### 4.1- SIMULAÇÃO E SINTONIA DO FILTRO DE KALMAN ESTENDIDO (FKE)

Utilizando um simulador rigoroso para representar o comportamento da coluna de destilação em batelada, foram feitos testes com o filtro de Kalman desenvolvido. Na maioria das corridas, considerou-se a presença de ruídos brancos com distribuição Gaussiana nas medidas de temperatura. Devido às simplificações feitas no modelo utilizado no algoritmo de Kalman, pode-se dizer que erros de modelagem (desvios entre o processo e o modelo) estiveram presentes em todos os testes. As covariâncias  $R$  e  $Q$  foram consideradas constantes ao longo da batelada. A matriz  $R$  é uma matriz diagonal cujos elementos correspondem à variância dos erros dos sensores ( $\sigma^2$ ). A matriz  $Q$  (também diagonal) foi escolhida por tentativa e erro.

Nos testes apresentados neste item, a política de razão de refluxo constante foi adotada, já que o objetivo nessa etapa do trabalho era sintonizar o estimador de estado, não o controlador GLC. A cada período de amostragem  $T_a$ , a estimativa do perfil de composição ao longo da coluna era atualizada utilizando-se as temperaturas de alguns estágios.

Em colunas de destilação em batelada, o perfil de composição ao longo da coluna é variante no tempo. Na apresentação dos resultados, alguns perfis instantâneos (estágio *versus* composição) foram escolhidos para análise. Por exemplo, nas corridas com o sistema binário, serão mostrados os perfis nos instantes  $t = 0,05t_{TOT}$ ,  $t = 0,25t_{TOT}$ ,  $t =$

$0,50t_{TOT}$  e  $t = 0,75t_{TOT}$ , onde  $t_{TOT}$  é o tempo total de batelada. O tempo total de batelada corresponde ao intervalo de tempo desde o início da coleta do destilado ( $t = 0$ ) até o instante em que a composição do destilado atinge um valor instantâneo pré-definido.

A apresentação dos resultados em termos do tempo total de batelada tem por objetivo analisar o tempo de convergência do filtro de Kalman. Para o controle da coluna, é desejável que esse tempo de convergência seja pequeno em relação ao tempo de batelada, já que as ações de controle serão calculadas a partir das estimativas de composição fornecidas pelo filtro.

O filtro de Kalman foi inicializado com um vetor  $\hat{X}_o$ , cujos elementos são todos iguais. Essa é uma estimativa grosseira do perfil inicial, pois considera que todos os estágios têm a mesma composição. No entanto, escolheu-se  $\hat{X}_o$  constante para testar a capacidade de convergência do filtro de Kalman desenvolvido. Como o perfil de composição ao longo dos pratos no início da batelada normalmente não é conhecido, é importante que o filtro de Kalman seja capaz de convergir para o perfil real mesmo quando  $\hat{X}_o$  for apenas uma estimativa grosseira.

A Tabela 4.1 apresenta as condições operacionais mantidas constantes nas corridas feitas com o sistema binário etanol/1-propanol, enquanto que a Tabela 4.2 mostra os parâmetros variados em cada uma dessas bateladas. As características geométricas da coluna simulada foram as mesmas da coluna piloto montada no Laboratório de Controle "On-line" descrita na seção 3.9.

Tabela 4.1. Condições operacionais e parâmetros do Filtro de Kalman adotados nas corridas binárias.

<i>sistema</i>	etanol (1)/1-propanol (2)
<i>pressão (mmHg)</i>	760
<i>número de estágios</i>	30 (29 pratos + refervedor)
<i>potência (W)</i>	1250
$M_{Bo}$ (mol)	50,0
$x_{1,Bo}/x_{2,Bo}$	0,60/0,40
$M_i$ (mol)	0,2
$R$	1,0
$Q$	<b>diag</b> ( $1 \times 10^{-2}$ , ..., $1 \times 10^{-2}$ )
$P_o$	<b>diag</b> ( $1 \times 10^{-2}$ , ..., $1 \times 10^{-2}$ )
$\hat{X}_o$	0,80
$R$ ( $^{\circ}\text{C}$ ) <sup>2</sup>	<b>diag</b> ( $\sigma^2$ , ..., $\sigma^2$ )

Tabela 4.2. Parâmetros variados nas corridas binárias.

corrida	p	posicionamento dos sensores*	$Ta$ (s)	$nkal$	erro do sensor
B1	7	2, 8, 13,17, 21, 26, 30	10	4	sensores ideais
B2	7	2, 8, 13,17, 21, 26, 30	10	4	$\sigma = \pm 0,5^{\circ}C$
B3	7	2, 8, 13,17, 21, 26, 30	10	4	$\sigma = \pm 0,1^{\circ}C$
B4	7	2, 8, 13,17, 21, 26, 30	10	8	$\sigma = \pm 0,1^{\circ}C$
B5	7	2, 8, 13,17, 21, 26, 30	20	5	$\sigma = \pm 0,1^{\circ}C$
B6	4	1, 10, 20, 30	10	4	$\sigma = \pm 0,1^{\circ}C$
B7	4	1, 10, 20, 30	10	8	$\sigma = \pm 0,1^{\circ}C$
B8	4	1, 10, 20, 30	2	4	$\sigma = \pm 0,1^{\circ}C$
B9	1	15	2	4	$\sigma = \pm 0,1^{\circ}C$

\* "1" corresponde ao prato do topo

Nos testes apresentados a seguir, o filtro de Kalman foi utilizado para estimar os perfis de composição instantâneos ao longo de toda a coluna de destilação. Dessa forma, o posicionamento dos sensores foi escolhido de tal forma que eles ficassem uniformemente distribuídos pela coluna.

Na primeira batelada (denominada B1), considerou-se o uso de 7 sensores ideais (sem ruídos). A Figura 4.1 (a) apresenta a variação das composições do destilado ( $x_o$ ) e do refeedor ( $x_{NP+1}$ ) no tempo e a Figura 4.1 (b) mostra alguns perfis de composição instantâneos ao longo da coluna. As estimativas do filtro de Kalman praticamente coincidem com os resultados do simulador. Além disso, em  $t = 0,05t_{TOT}$ , o filtro já havia convergido.

Como sensores perfeitos não existem na prática, a presença de ruídos nas medidas de temperatura foi considerada em todas as demais corridas. As Figuras 4.2 (a) e (b) apresentam os resultados obtidos com 7 sensores com desvio padrão de  $\pm 0,5^{\circ}C$  e posicionamento idêntico ao da corrida B1. Em  $t = 0,05t_{TOT}$ , o perfil estimado pelo filtro já estava próximo do perfil da coluna. Pela análise dessas Figuras, pode-se dizer que o filtro foi capaz de fornecer boas estimativas de composição ao longo da batelada.

Utilizando-se sensores com desvio padrão de  $\pm 0,1$  °C, observa-se na Figura 4.3 uma melhoria na exatidão das estimativas.

Outro parâmetro importante para um bom desempenho do filtro de Kalman desenvolvido é a escolha do parâmetro  $nkal$ , que está associado ao intervalo de integração adotado na discretização do modelo da coluna ( $\Delta t = Ta/nkal$ , na equação 3.42). Quanto menor  $nkal$ , maior o intervalo de integração. Observou-se que o filtro de Kalman para colunas de destilação em batelada só converge para valores de  $nkal$  maiores do que um valor de  $nkal$  mínimo. Por exemplo, para as condições operacionais da Tabela 4.1 e  $Ta = 10$  s, o filtro de Kalman só convergiu quando  $nkal > 3$ . Nas corridas até agora apresentadas (B1, B2 e B3), foi utilizado  $nkal = 4$ .

Mantendo-se as mesmas condições da corrida B3 e aumentando-se  $nkal$  para 8, a Figura 4.4 mostra que os resultados foram semelhantes aos obtidos com  $nkal = 4$ . Nesse caso, não é vantajoso utilizar um valor de  $nkal$  mais elevado. Quanto maior  $nkal$ , maior o esforço computacional, pois o número de integrações por período de amostragem aumenta. Portanto, valores de  $nkal$  muito maiores que o valor mínimo necessário para a convergência do filtro só devem ser utilizados quando os ganhos em termos de exatidão e/ou convergência forem significativos.

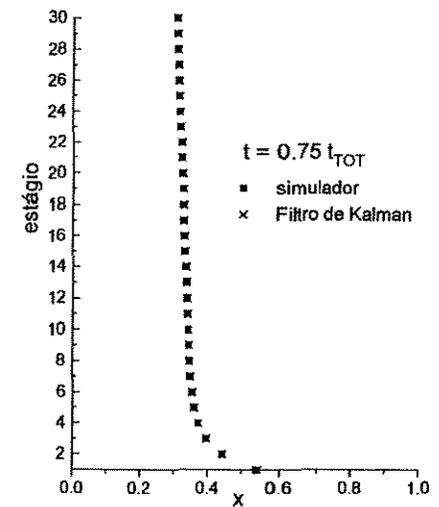
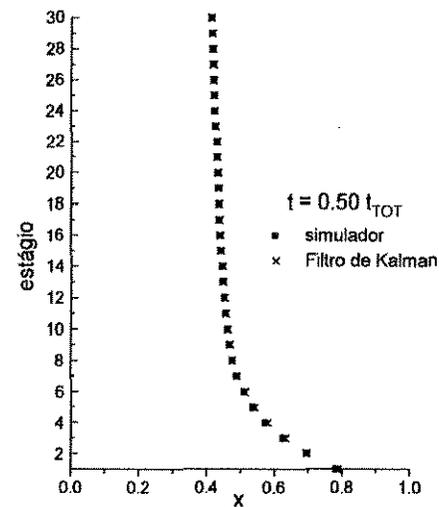
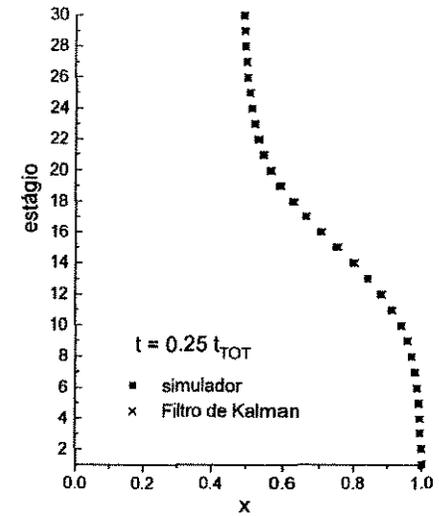
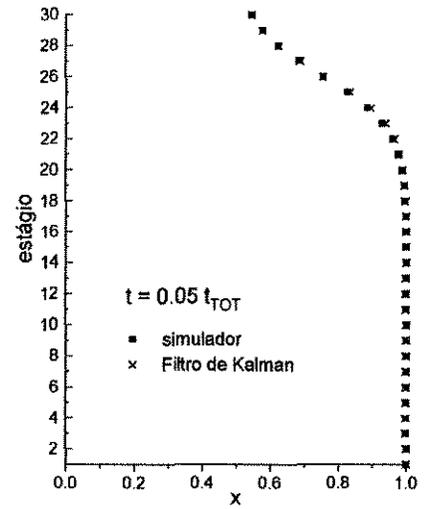
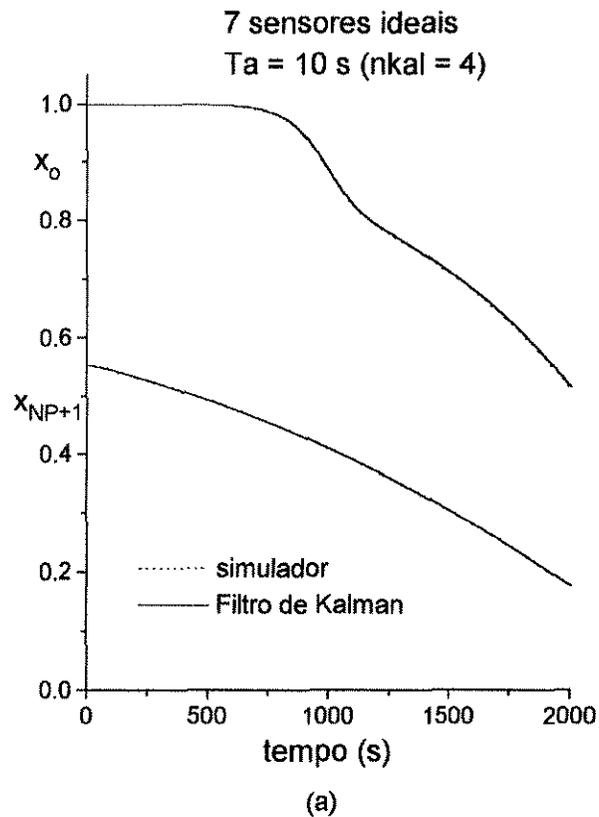
O filtro de Kalman também forneceu boas estimativas de composição quando o período de amostragem foi elevado de 10 s para 20 s, conforme mostram as Figuras 4.5 (a) e (b). Nesse caso, o filtro de Kalman só convergiu para valores de  $nkal$  maiores do que 4.

A influência do número de sensores também foi analisada. Mantendo-se as mesmas condições da corrida B3 e diminuindo-se o número de sensores de 7 para 4, o filtro de Kalman demorou mais para convergir, como pode ser visto comparando-se as Figuras 4.3 e 4.6. Aumentando-se o valor de  $nkal$  para 8 (Figura 4.7), não houve nenhuma melhoria em relação à corrida B6. Reduzindo-se o período de amostragem para 2 s (Figura 4.8), observou-se que as estimativas de composição dos estágios 12-18 em  $t = 0,05t_{TOT}$  foram mais exatas do que na corrida com  $Ta = 10$  s (Figura 4.6), porém não houve redução significativa no tempo de convergência do filtro. Tais resultados indicam que, para uma mesma estimativa inicial  $\hat{X}_o$ , o tempo de convergência do filtro depende mais do número de sensores do que do período de amostragem e do valor de  $nkal$ .

Através de uma análise do número de graus de liberdade, YU e LUYBEN (1987) concluíram que uma coluna de destilação é *observável* se o número de sensores for no mínimo igual a  $(NC-1)$ , onde  $NC$  é o número de componentes. Dessa forma, na destilação de misturas binárias, o estado da coluna poderia ser determinado através de um único sensor de temperatura. QUINTERO-MARMOL *et al.* (1991) aplicaram a sistemas de destilação em batelada o estimador de estado denominado *observador estendido de Luenberger*. O observador de Luenberger é um método determinístico, ou seja, pressupõe que o modelo do processo é perfeito e que há ausência de ruídos e perturbações. Através de simulações, os autores concluíram que, para que se garanta a convergência do observador estendido de Luenberger, são necessários, no mínimo,  $(NC+2)$  sensores de temperatura.

Ao contrário do observador de Luenberger desenvolvido por QUINTERO-MARMOL *et al.* (1991), o filtro de Kalman estendido para colunas de destilação em batelada consegue convergir quando apenas um sensor de temperatura é utilizado. Porém, como está exemplificado na Figura 4.9, verifica-se que o tempo de convergência aumenta significativamente, o que pode tornar inviável o uso de um único sensor para a estimativa de perfis de composição de colunas de destilação em batelada binárias. Na corrida B9, o filtro só convergiu para o perfil da coluna quase no final da batelada ( $t = 0,75t_{TOT}$ ) e as estimativas da composição do destilado não foram tão exatas como nas corridas feitas com mais sensores (Figura 4.9a).

O tempo de convergência também depende da estimativa inicial  $\hat{X}_o$ . Quanto mais próximo  $\hat{X}_o$  for do perfil real da coluna, mais rápido é a convergência. Como já foi discutido, normalmente se tem pouca informação a respeito do perfil inicial de composição ao longo da coluna. No caso da destilação em batelada, as condições operacionais podem variar com frequência, resultando em diferentes perfis iniciais a cada batelada. Ou seja, na prática, é preferível diminuir o tempo de convergência do filtro aumentando-se o número de sensores do que determinando-se, a cada batelada, estimativas  $\hat{X}_o$  mais próximas do perfil real.



(b)

Figura 4.1. Estimativas do filtro de Kalman para a corrida B1 da Tabela 4.2. (a) variação das composições do reboiler e do destilado durante a batelada; (b) perfis de composição instantâneos ao longo da coluna.

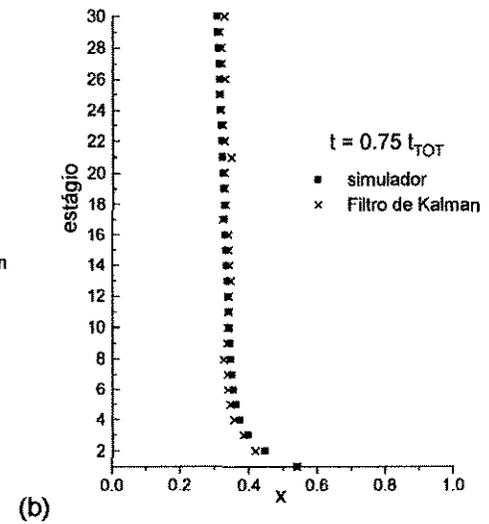
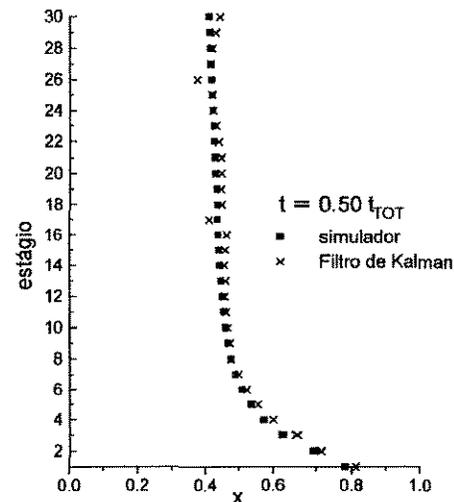
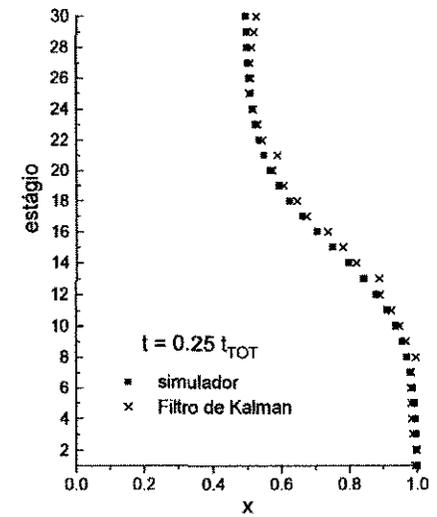
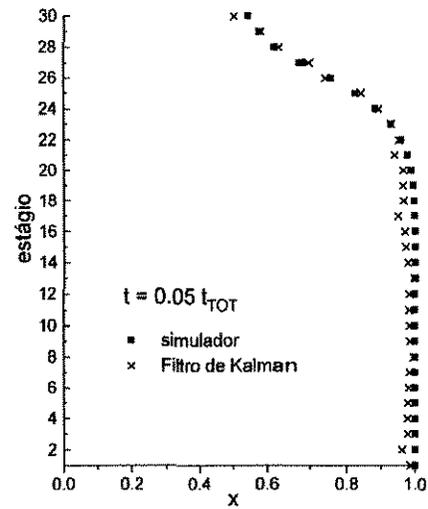
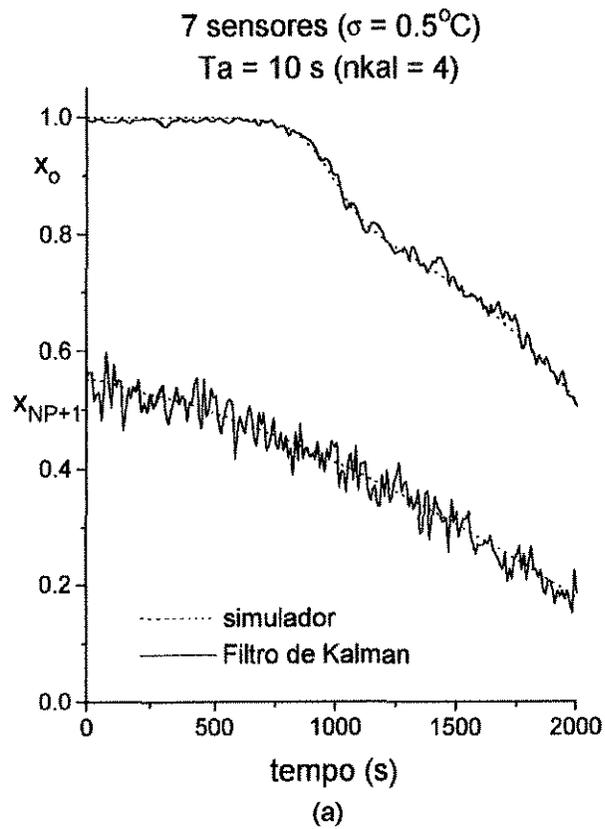


Figura 4.2. Estimativas do filtro de Kalman para a corrida B2 da Tabela 4.2. (a) variação das composições do refeedor e do destilado durante a batelada; (b) perfis de composição instantâneos ao longo da coluna.

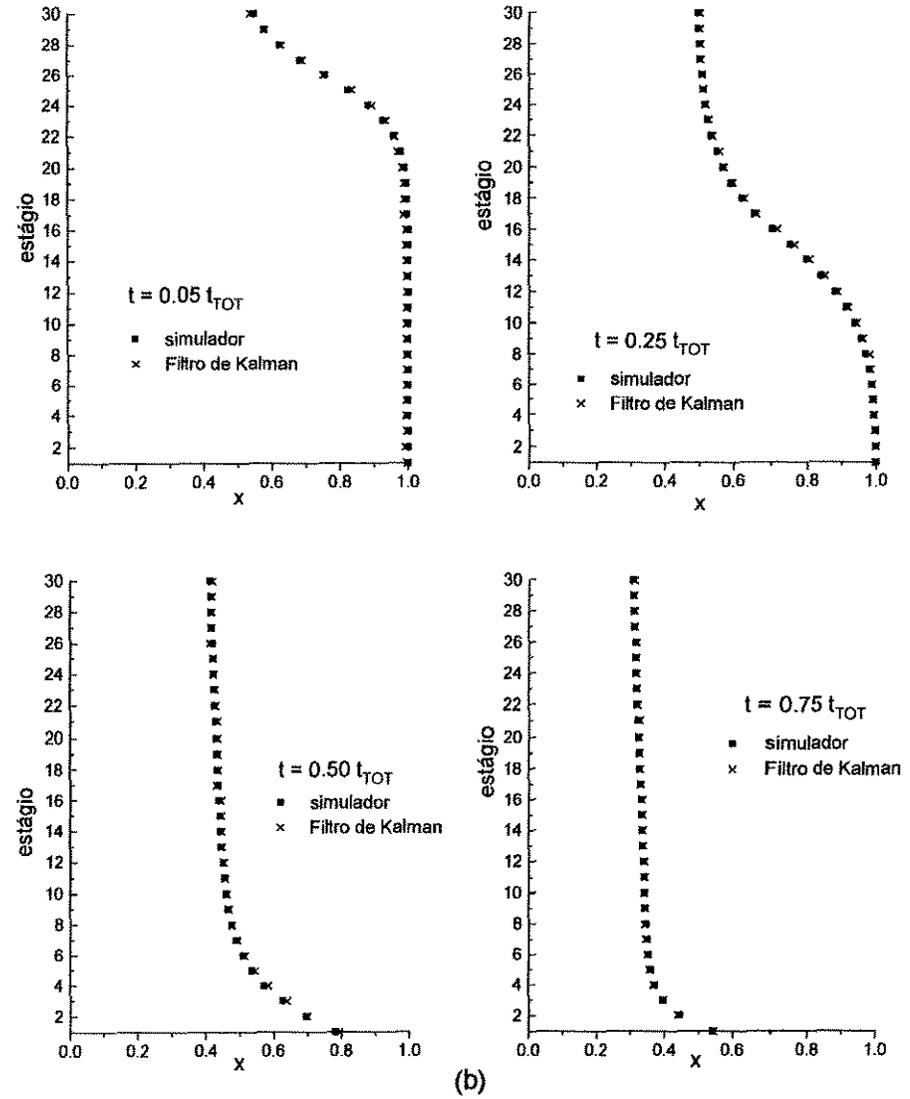
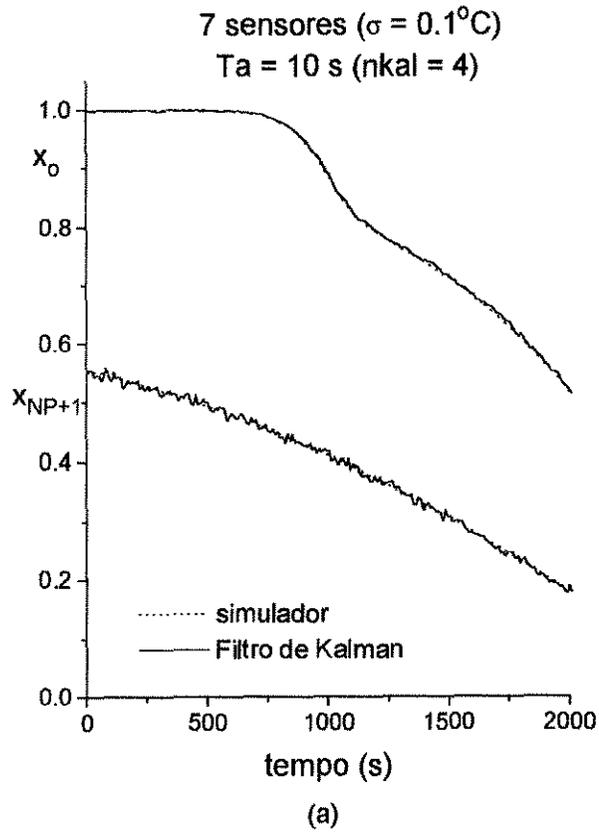


Figura 4.3. Estimativas do filtro de Kalman para a corrida B3 da Tabela 4.2. (a) variação das composições do reboiler e do destilado durante a batelada; (b) perfis de composição instantâneos ao longo da coluna.

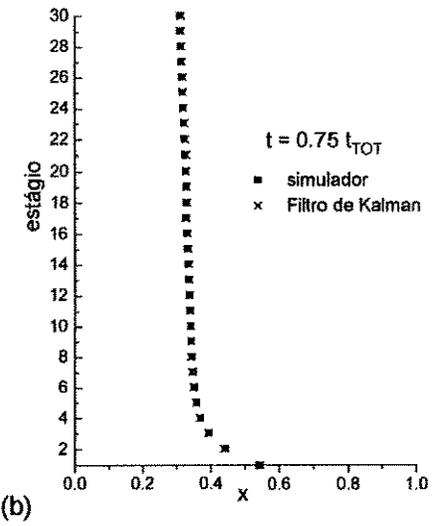
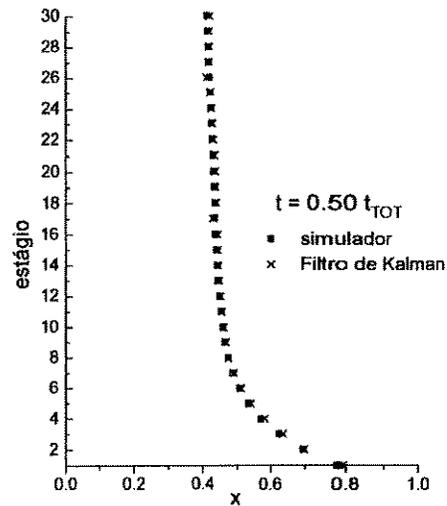
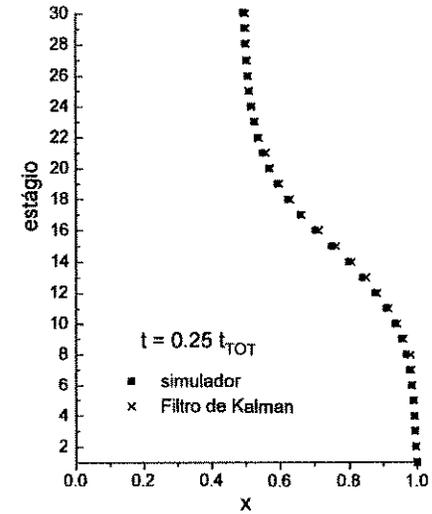
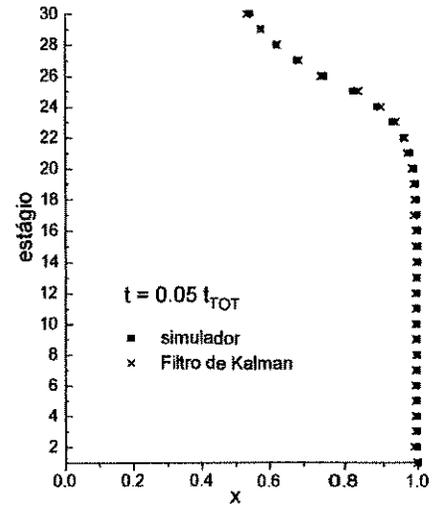
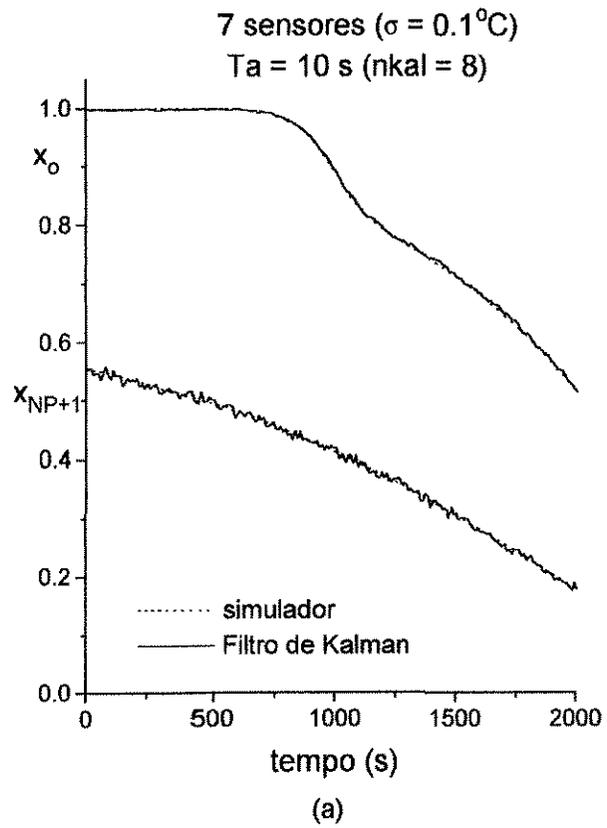


Figura 4.4. Estimativas do filtro de Kalman para a corrida B4 da Tabela 4.2. (a) variação das composições do reboiler e do destilado durante a batelada; (b) perfis de composição instantâneos ao longo da coluna.

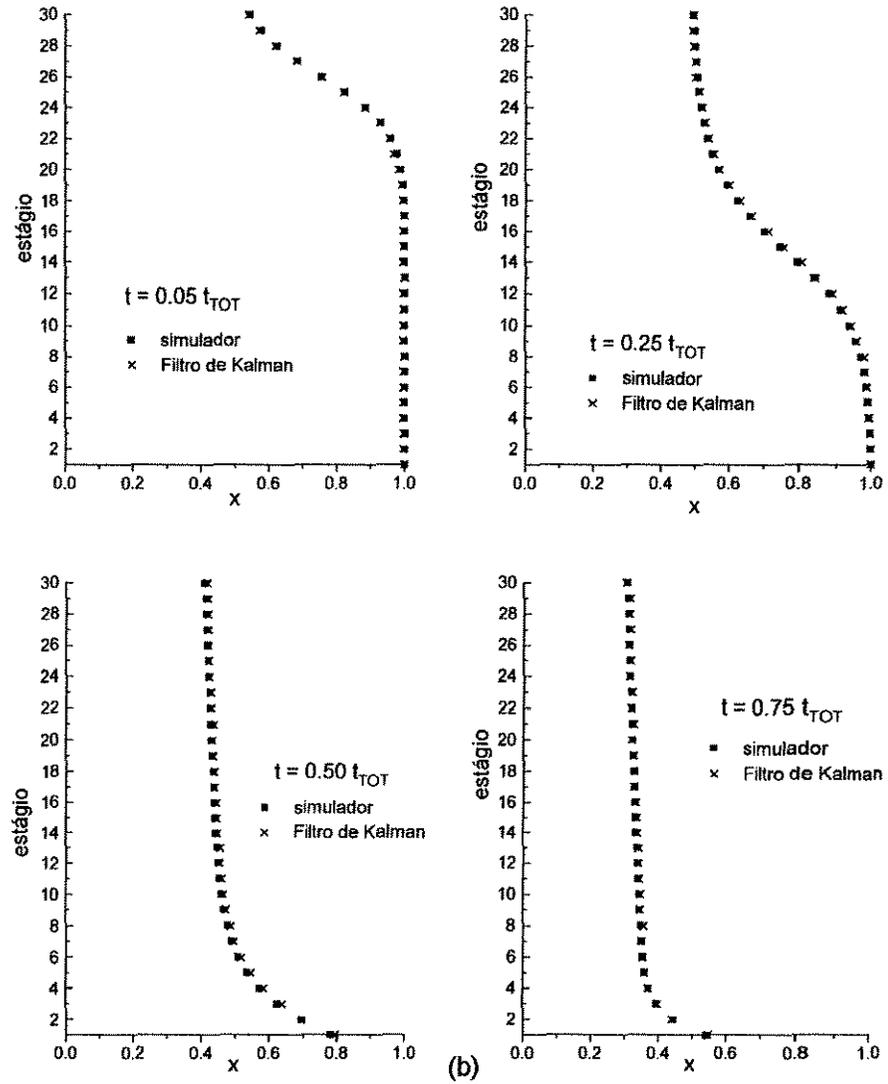
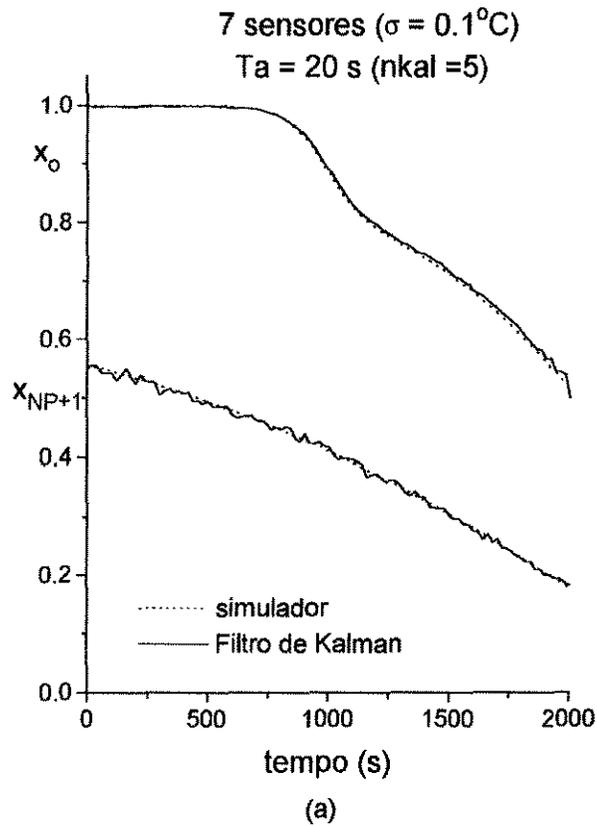


Figura 4.5. Estimativas do filtro de Kalman para a corrida B5 da Tabela 4.2. (a) variação das composições do reboador e do destilado durante a batelada; (b) perfis de composição instantâneos ao longo da coluna.

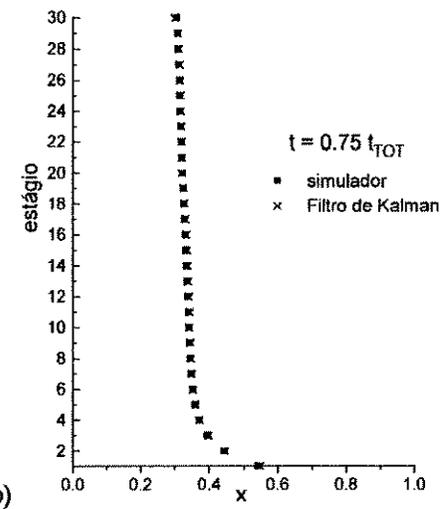
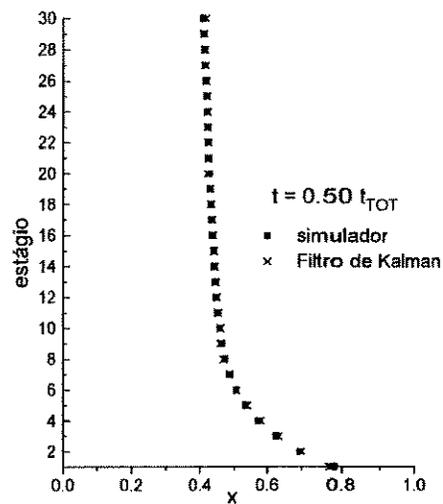
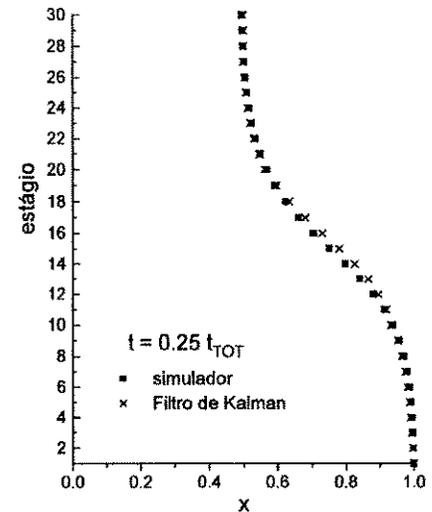
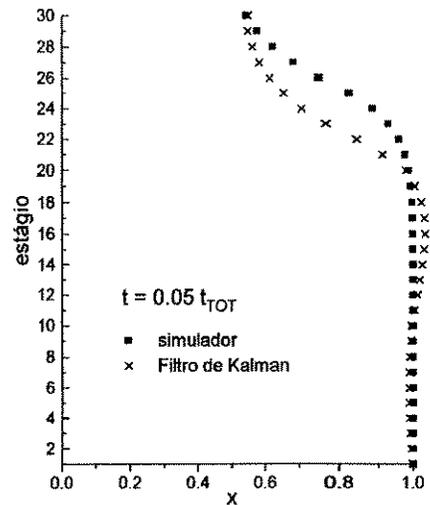
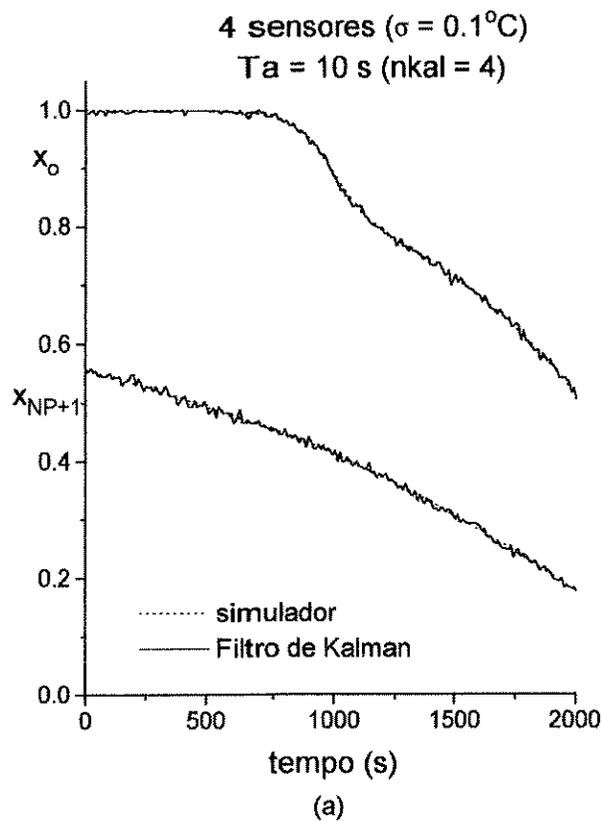


Figura 4.6. Estimativas do filtro de Kalman para a corrida B6 da Tabela 4.2. (a) variação das composições do reboiler e do destilado durante a batelada; (b) perfis de composição instantâneos ao longo da coluna.

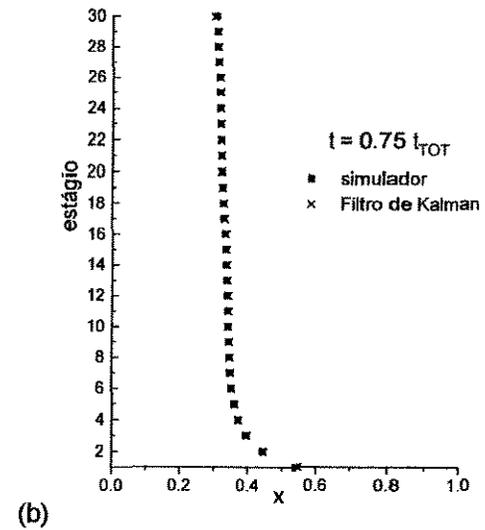
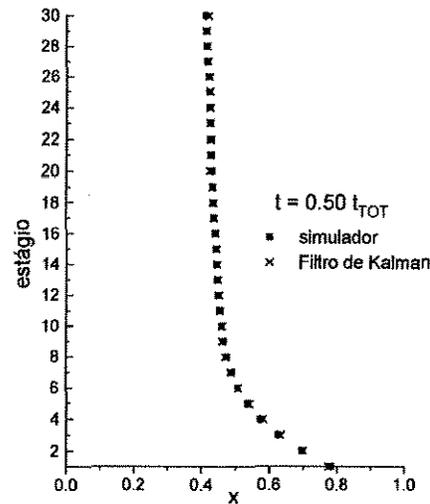
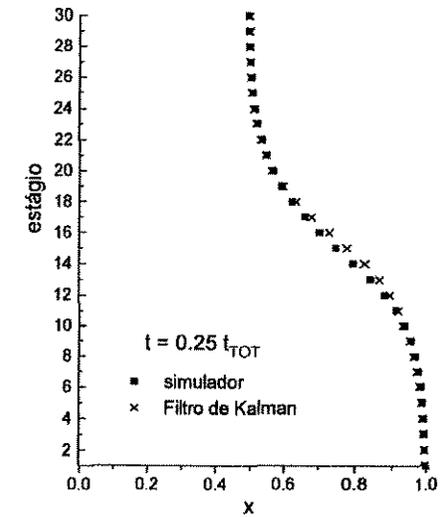
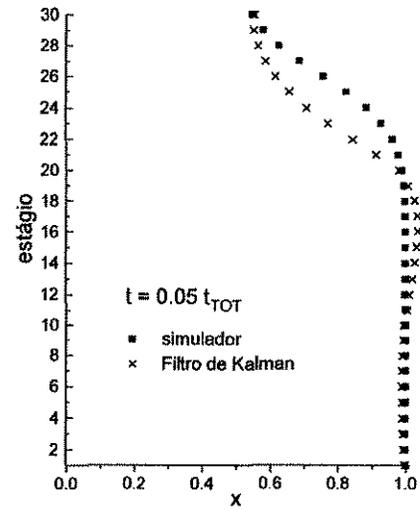
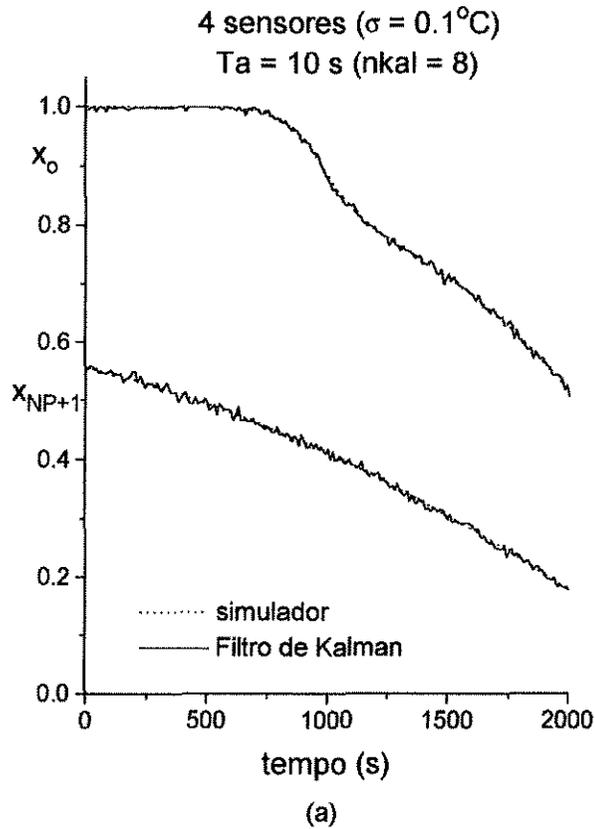


Figura 4.7. Estimativas do filtro de Kalman para a corrida B7 da Tabela 4.2. (a) variação das composições do rebovedor e do destilado durante a batelada; (b) perfis de composição instantâneos ao longo da coluna.

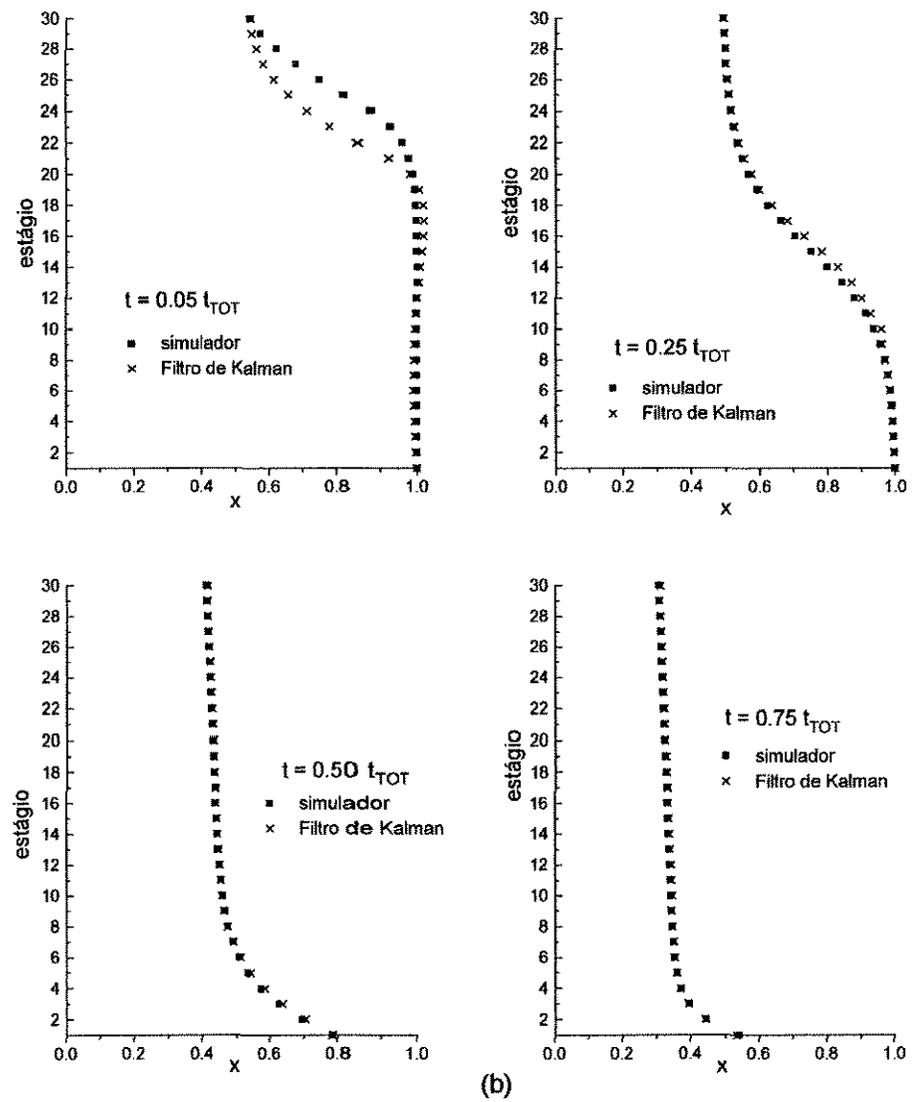
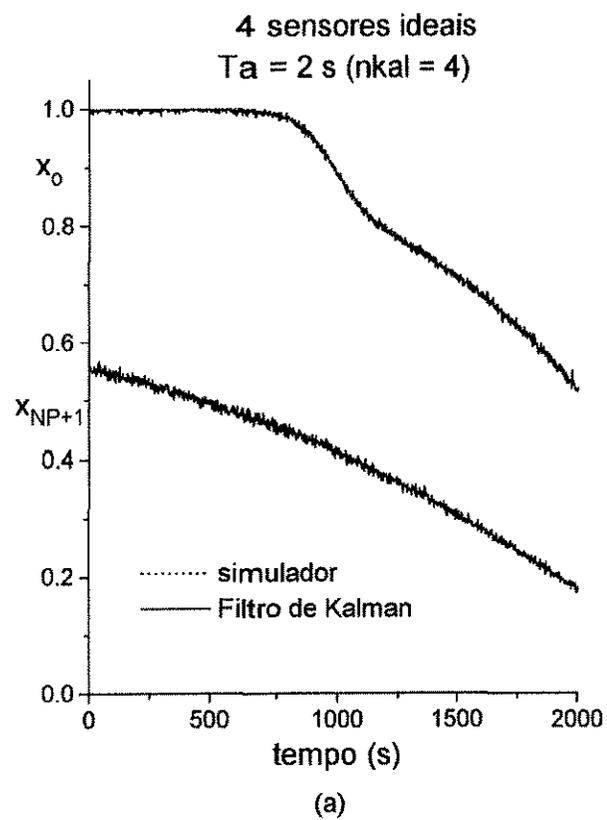


Figura 4.8. Estimativas do filtro de Kalman para a corrida B8 da Tabela 4.2. (a) variação das composições do refervedor e do destilado durante a batelada; (b) perfis de composição instantâneos ao longo da coluna.

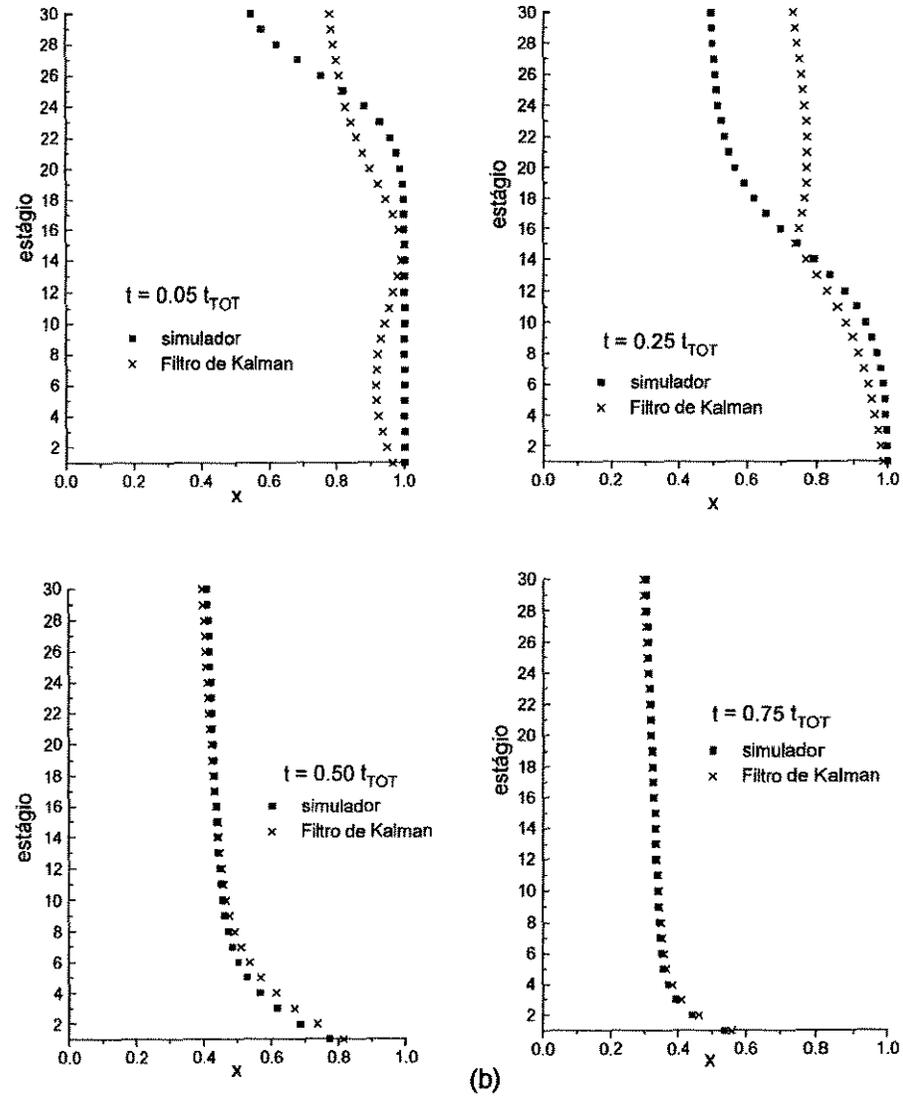
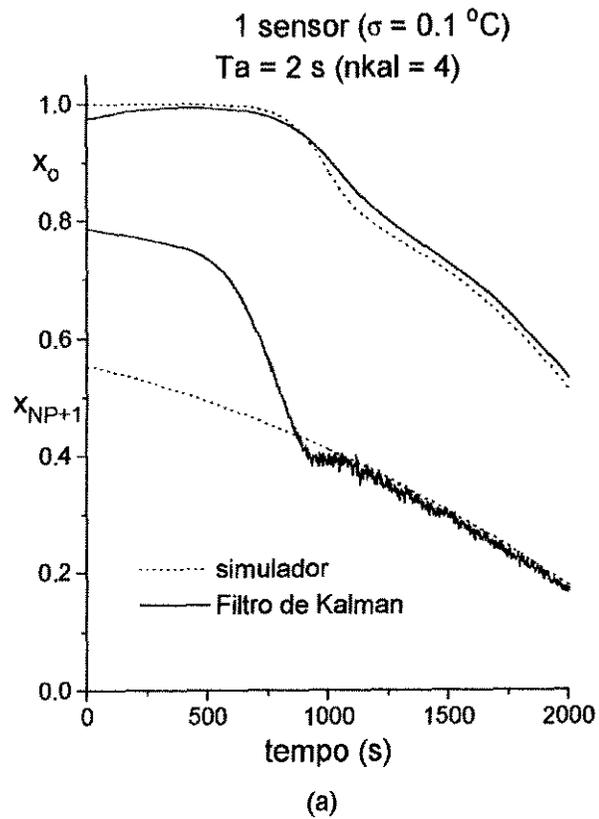


Figura 4.9. Estimativas do filtro de Kalman para a corrida B9 da Tabela 4.2. (a) variação das composições do refeedor e do destilado durante a batelada; (b) perfis de composição instantâneos ao longo da coluna.

O filtro de Kalman estendido para colunas de destilação em batelada pode também ser utilizado para a estimativa do estado de sistemas multicomponentes. Algumas corridas foram feitas com o sistema ternário etanol/1-propanol/1-butanol. As condições operacionais e os parâmetros do filtro adotados nessas corridas são apresentados na Tabela 4.3 e os resultados são mostrados nas Figuras 4.10-4.12.

Nos testes com o sistema ternário, o tempo total de batelada ( $t_{TOT}$ ) foi definido como sendo o intervalo de tempo no qual os três componentes estão presentes na coluna (do início da coleta do destilado até o instante em que o componente mais volátil é totalmente recolhido). Após a coleta do componente mais volátil, o restante da batelada é uma destilação binária (que já foi discutida anteriormente).

A Figura 4.10 compara as estimativas do filtro de Kalman com os resultados do simulador quando 5 sensores uniformemente espalhados pela coluna são utilizados. O filtro convergiu para o perfil da coluna em  $t = 0,20 t_{TOT}$  e, a partir desse instante, os perfis de composição instantâneos foram estimados com boa exatidão.

Como nas corridas feitas com o sistema binário, diminuindo-se o número de sensores (Figura 4.11), houve um aumento do tempo de convergência. Porém, quando mais sensores foram adicionados (Figura 4.12), o tempo de convergência não foi reduzido. Tais resultados indicam que, para uma mesma estimativa inicial  $\hat{X}_o$ , o aumento do número de sensores pode diminuir o tempo de convergência. No entanto, acima de um certo número de sensores essa redução pode ser desprezível ou até mesmo inexistente.

O número  $n$  de variáveis de estado a serem estimadas para determinação do perfil de composição de uma coluna é dado por:  $n = (NC-1)(NP+1)$ , onde  $NC$  é o número de componentes e  $NP$  é o número de pratos. A dimensão do problema de estimativa do estado de sistemas de destilação multicomponentes exige um grande esforço computacional, principalmente quando a coluna possui muitos estágios.

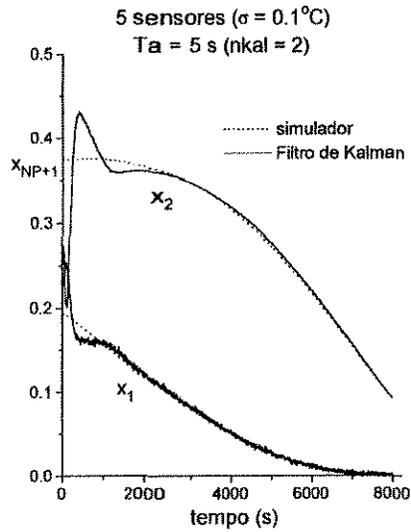
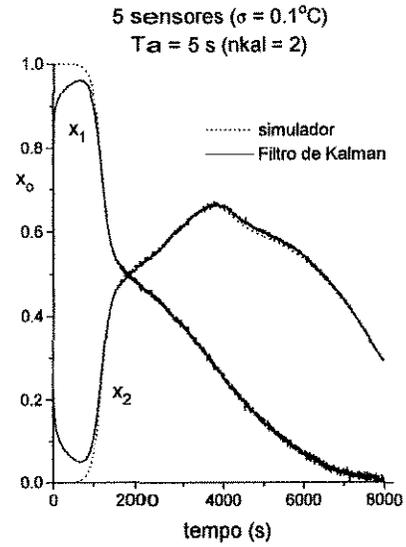
Conhecendo-se a temperatura e pressão de um sistema binário em equilíbrio termodinâmico, é possível determinar a composição desse sistema. Em sistemas multicomponentes, somente o conhecimento da temperatura e pressão não é suficiente para a determinação da composição. Por exemplo, a  $T = 370,15$  K e  $P = 760$  mmHg, a composição de equilíbrio do sistema etanol/1-propanol/1-butanol pode ser

0,0398/0,9000/0,0602, ou 0,1100/0,6977/0,1923, ou 0,2306/0,3500/0,4194. Ou seja, numa mesma temperatura e pressão, o sistema multicomponente pode apresentar composições bem diferentes. Dessa forma, pode-se dizer que dados de temperatura fornecem mais informações a respeito da composição de sistemas binários do que a respeito da composição de sistemas multicomponentes. Talvez seja por isso que, de uma forma geral, o filtro de Kalman demora mais para convergir no caso de sistemas multicomponentes do que no caso de sistemas binários.

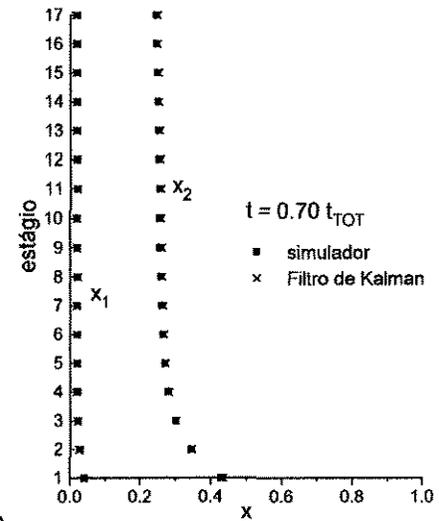
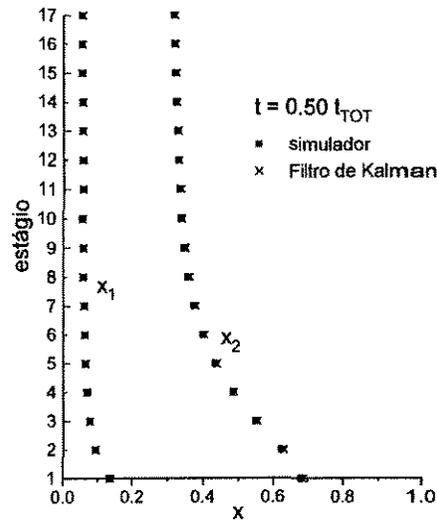
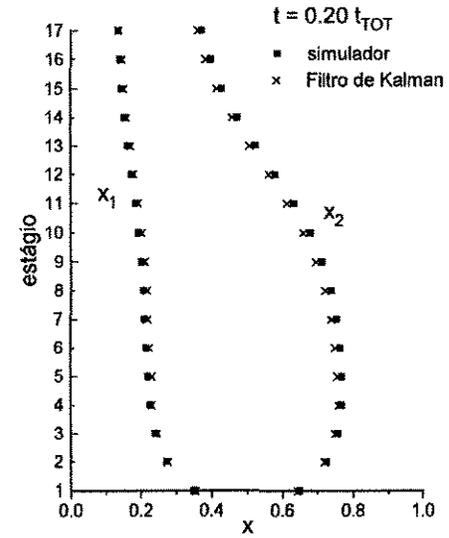
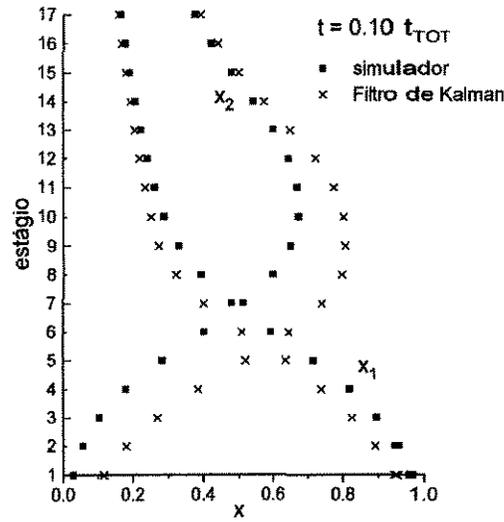
Os resultados discutidos nesta seção foram apresentados no artigo de OISIOVICI e CRUZ (2000).

Tabela 4.3. Condições operacionais e parâmetros do Filtro de Kalman adotados nas corridas ternárias.

<i>sistema</i>	etanol (1)/1-propanol (2)/1-butanol (3)
<i>pressão (mmHg)</i>	760
<i>número de estágios</i>	17 (16 pratos + refeedor)
<i>potência (W)</i>	1500
$x_{1,B0}/x_{2,B0}/x_{3,B0}$	0,25/0,35/0,40
<i>R</i>	1,0
$M_{B0}$ (mol)	200,0
$M_i$ (mol)	0,85
<i>Ta</i> (s)	5
$\sigma$	$\pm 0,1^\circ\text{C}$
<i>Q</i>	$q_{mm} = 1 \times 10^{-4}, 1 \leq m \leq NP+1+NP$ $q_{mm} = 1 \times 10^{-6}, m = NP+1+NP+1$ $q_{mr} = 0, m \neq r$
$P_0$	<b>diag</b> ( $1 \times 10^{-2}, \dots, 1 \times 10^{-2}$ )
$\hat{X}_0$	0,30
$R$ ( $^\circ\text{C}$ ) <sup>2</sup>	<b>diag</b> ( $\sigma^2, \dots, \sigma^2$ )



(a)



(b)

Figura 4.10. Corrida com o sistema ternário (Tabela 4.3) e 5 sensores nos estágios 1, 5, 9, 13, 17. (a) variação das composições do refervedor e do destilado durante a batelada; (b) perfis de composição instantâneos ao longo da coluna.

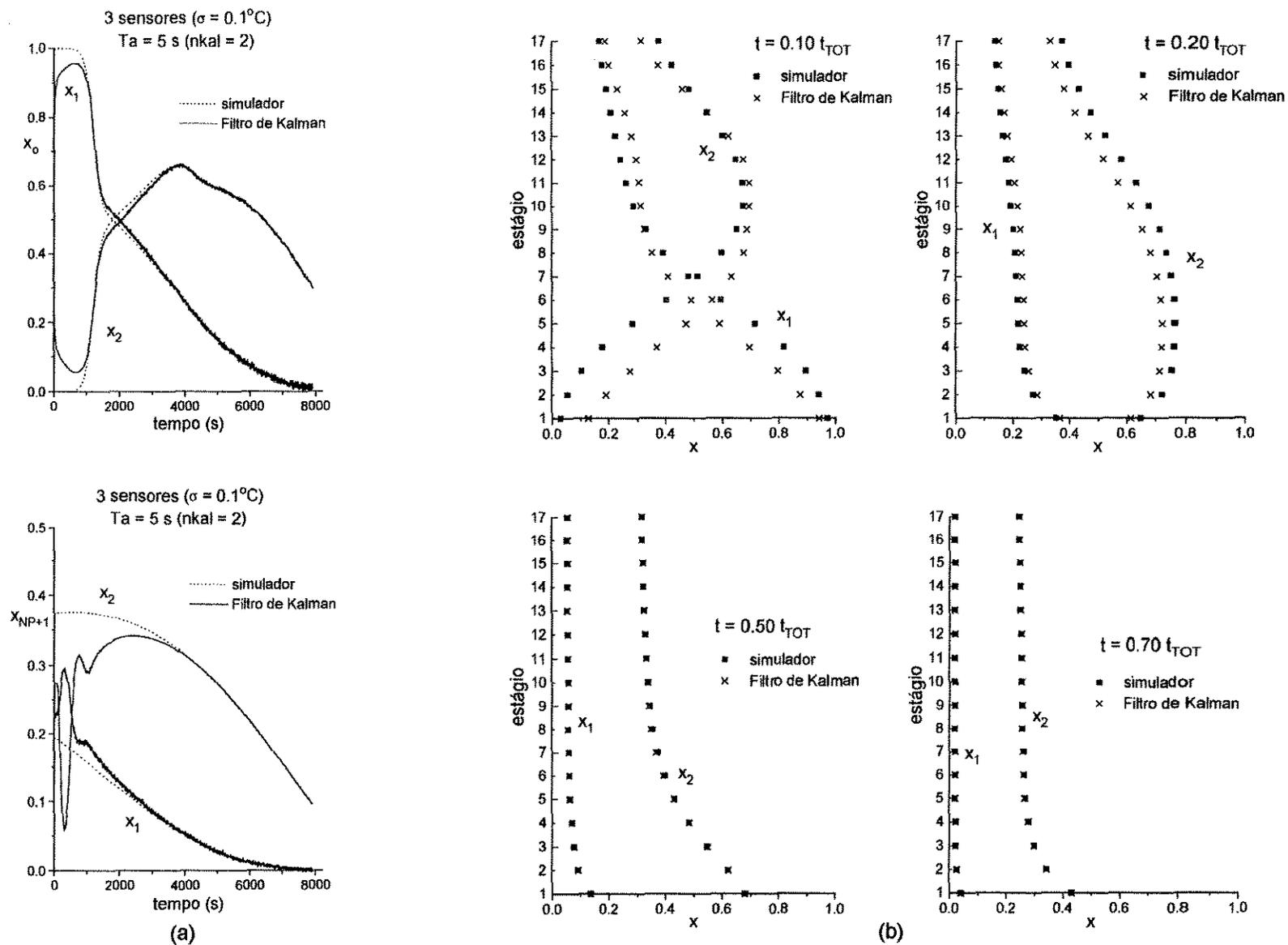


Figura 4.11. Corrida com o sistema ternário (Tabela 4.3) e 3 sensores nos estágios 1, 9, 17. (a) variação das composições do refervedor e do destilado durante a batelada; (b) perfis de composição instantâneos ao longo da coluna.

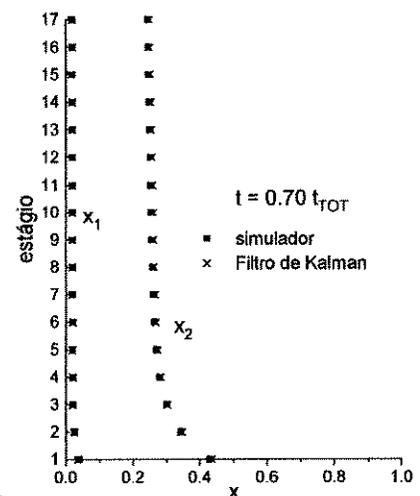
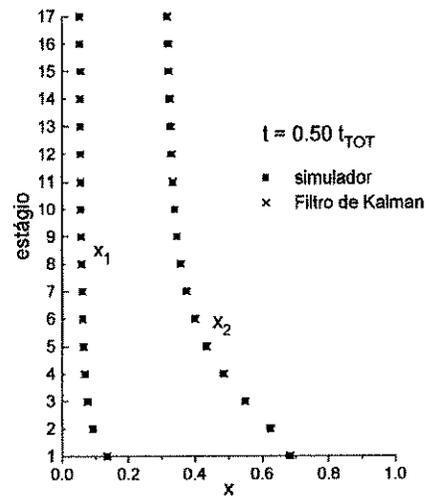
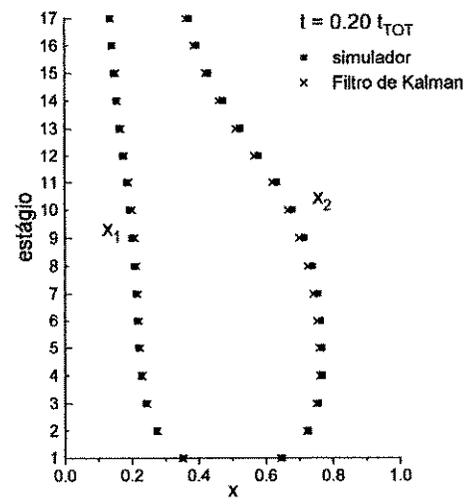
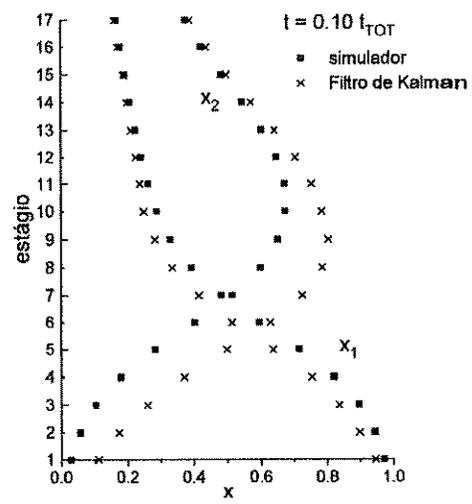
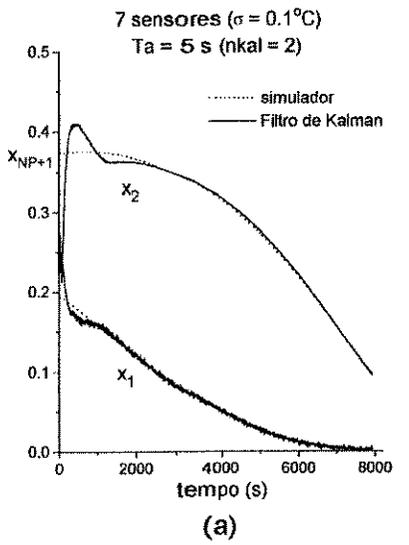
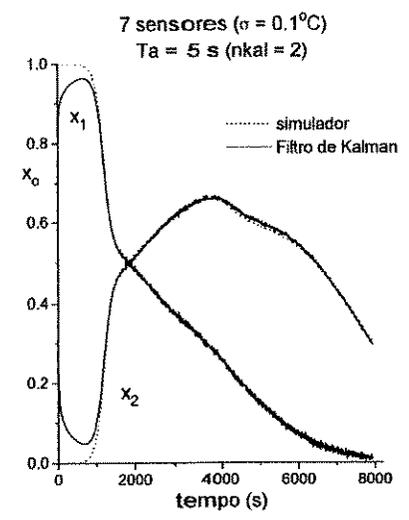


Figura 4.12. Corrida com o sistema ternário (Tabela 4.3) e 7 sensores nos estágios 1, 4, 7, 10, 13, 15, 17. (a) variação das composições do refeedor e do destilado durante a batelada; (b) perfis de composição instantâneos ao longo da coluna.

## 4.2- SIMULAÇÃO DO CONTROLADOR POR INFERÊNCIA DO TIPO GLC

A linearização entrada/saída foi a estratégia escolhida para o controle da coluna de destilação em batelada de alta pureza.

Após mostrar a necessidade do uso de estimadores de estado para o controle por inferência de colunas de destilação em batelada de alta pureza, alguns testes do controlador combinado ao filtro de Kalman serão apresentados e a importância da escolha das posições dos sensores será discutida.

### 4.2.1- Colunas de alta pureza e a necessidade do uso de estimadores de estado

Como a forma de operação escolhida foi a estratégia de pureza constante, o objetivo do controlador é manter constante a pureza do destilado ( $x_o$ ) através da variação da razão de refluxo. Considerando que o condensador é total, isso é equivalente a manter a composição do vapor efluente do estágio do topo ( $y_1$ ) num valor especificado ( $x_{D,SP}$ ). A pureza final do destilado recolhido ( $x_{D,médio}$ ) pode especificada através da igualdade  $x_{D,médio} = x_{D,SP}$ , ou através da desigualdade  $x_{D,médio} \geq x_{D,SP}$  (MACCHIETTO e MUJTABA, 1996). Quando os produtos são de alta pureza, normalmente o critério da desigualdade é adotado.

Sendo  $y_1$  (ou  $x_o$ ) a variável controlada e a razão de refluxo ( $R$ ) a variável manipulada, a aplicação do método de linearização entrada/saída à coluna de destilação em batelada com o controlador do tipo GLC resultou na seguinte estratégia de controle:

$$\frac{R_{controle}}{R_{controle} + 1} = \frac{\frac{v}{\partial y_1 / \partial x_1} - \left[ \frac{V}{M_1} (y_2 - y_1) \right]}{\frac{V}{M_1} (y_1 - x_1)} \quad (3.76)$$

onde:

$$v = K_c \left[ (x_{D,SP} - y_1) + \frac{I}{\tau_I} \int_0^t (x_{D,SP} - y_1) d\tau \right] \quad (3.77)$$

Para que a ação de controle seja calculada a cada período de amostragem, os valores instantâneos das composições nos pratos 1 e 2 são necessários.

De acordo com a regra de fases de Gibbs, a composição de sistemas binários pode ser determinada conhecendo-se a temperatura e a pressão do sistema. Dessa forma, as composições nos pratos 1 e 2 poderiam ser determinadas através das medidas de temperatura desses pratos e da relação de equilíbrio líquido-vapor do sistema. Tal procedimento será aqui denominado *inferência direta de composições*.

A fim mostrar as limitações do método de inferência direta, foram feitas algumas corridas com o sistema etanol/1-propanol, posicionando-se um sensor de temperatura no prato 1 e outro sensor no prato 2. A cada período de amostragem, as composições  $(x_1, y_1)$  e  $(x_2, y_2)$  foram calculadas a partir das temperaturas  $T_1$  e  $T_2$ , respectivamente, e das seguintes equações:

$$x_j = \frac{P - P_2^{sat}(T_j)}{P_1^{sat}(T_j) - P_2^{sat}(T_j)} = \frac{P - \exp\left(A_2 - \frac{B_2}{T_j + C_2}\right)}{\exp\left(A_1 - \frac{B_1}{T_j + C_1}\right) - \exp\left(A_2 - \frac{B_2}{T_j + C_2}\right)} \quad (4.1)$$

$$y_j = \frac{P_1^{sat}(T_j)}{P} x_j \quad (4.2)$$

As condições operacionais e os parâmetros do controlador adotados são apresentados na Tabela 4.4. Testes foram feitos considerando-se produtos de alta pureza ( $x_{D,SP} = 0,99$ ) e baixa pureza ( $x_{D,SP} = 0,80$ ).

Tabela 4.4. Condições operacionais e parâmetros do controlador.

<i>NP</i>	29
<i>sistema</i>	etanol/1-propanol
<i>pressão (mmHg)</i>	760
<i>M<sub>B0</sub> (mol)</i>	50,0
<i>x<sub>B0</sub></i>	0,60
<i>Pot (W)</i>	1250
<i>M<sub>j</sub> (mol)</i>	0,2
<i>R<sub>min</sub></i>	0,5
<b>Parâmetros do Controlador</b>	
<i>x<sub>D,SP</sub> = 0,99</i>	<i>K<sub>c</sub> = 1 x 10<sup>-2</sup> s<sup>-1</sup>; τ<sub>I</sub> = 500 s</i>
<i>x<sub>D,SP</sub> = 0,80</i>	<i>K<sub>c</sub> = 5 x 10<sup>-2</sup> s<sup>-1</sup>; τ<sub>I</sub> = 50 s</i>

A Figura 4.13 apresenta os resultados obtidos quando os sensores de temperatura foram considerados perfeitos (sem ruídos). Como pode ser visto pelas Figuras 4.13 (a) e (b), a composição do destilado foi mantida exatamente no "set-point" em ambos os casos.

Já que, na prática, sensores perfeitos não existem, a Figura 4.14 mostra as corridas feitas com dois sensores com desvio padrão de  $\pm 0,1^{\circ}\text{C}$ . O controlador foi capaz de manter a composição do destilado em 0,80 (Figura 4.14a), mas não conseguiu controlar a composição do produto de alta pureza (Figura 4.14b). Os perfis de razão de refluxo correspondentes indicam que o controlador GLC torna-se bastante sensível à presença de ruídos à medida que a pureza do produto aumenta.

Tal fato pode ser compreendido examinando-se os perfis instantâneos de temperatura ao longo da coluna. Como pode ser visto nas Figuras 4.15 (a) e (b), as variações de temperatura no topo da coluna que opera com alta pureza são pequenas quando comparadas às variações de temperatura no topo da coluna que opera com baixa pureza. Na prática, não é comum encontrar medidores de temperatura que tenham sensibilidade suficiente para detectar variações tão pequenas. Se o ruído das medidas de temperatura for da mesma ordem de grandeza dessas variações, torna-se difícil distinguir entre ruídos e reais variações de temperatura. O ruído não filtrado é, então, transmitido ao controlador, resultando em oscilações na variável manipulada que podem prejudicar o seu desempenho.

Esse problema pode ser solucionado posicionando-se os sensores de temperatura em regiões onde as variações de temperatura são maiores, ou seja, em pratos mais afastados do topo da coluna. Nesses casos, o uso de estimadores de estado (como o filtro de Kalman) torna-se necessário para estimar as composições instantâneas dos pratos 1 e 2 a partir de valores de temperatura de pratos afastados dos estágios 1 e 2.

Feitas essas considerações, é natural que se faça a seguinte pergunta: o quão afastados do topo da coluna os sensores devem ser posicionados ?

Essa questão será tratada nos próximos itens.

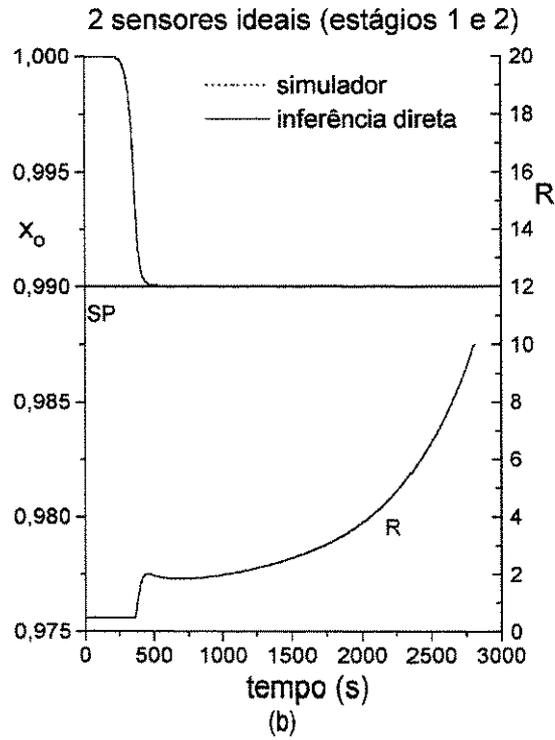
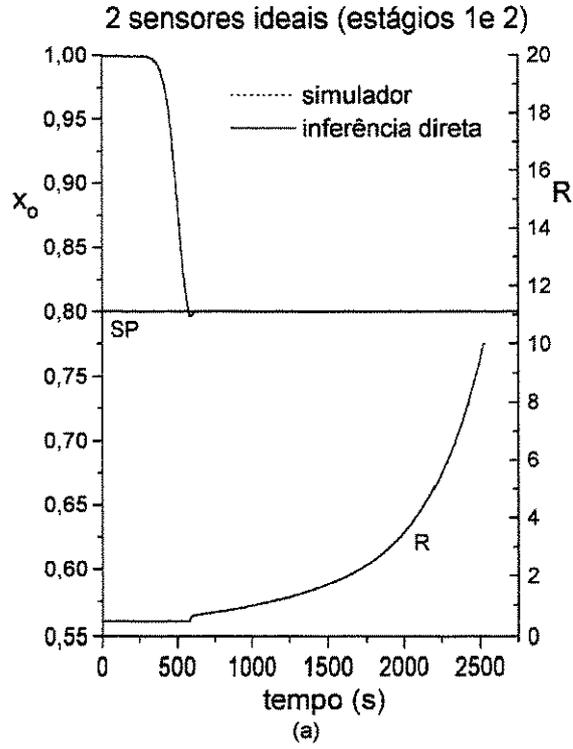


Figura 4.13. Controle da composição do destilado por inferência direta utilizando sensores ideais nos estágios 1 e 2. (a) baixa pureza; (b) alta pureza.

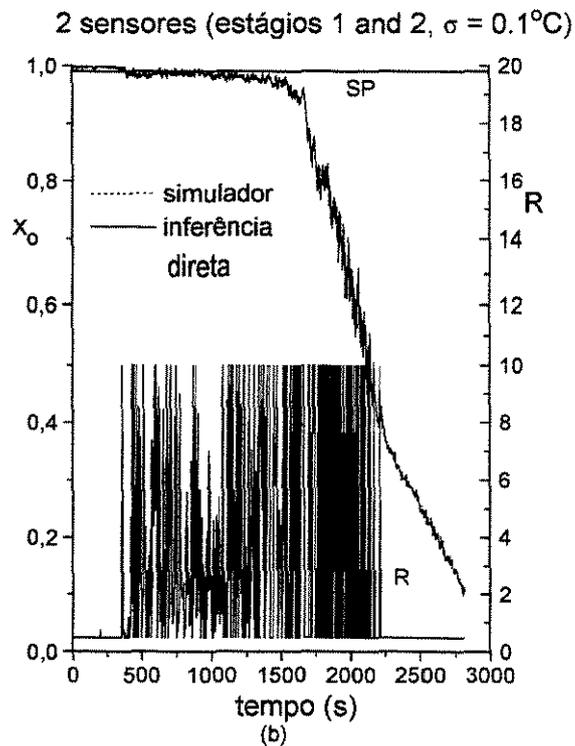
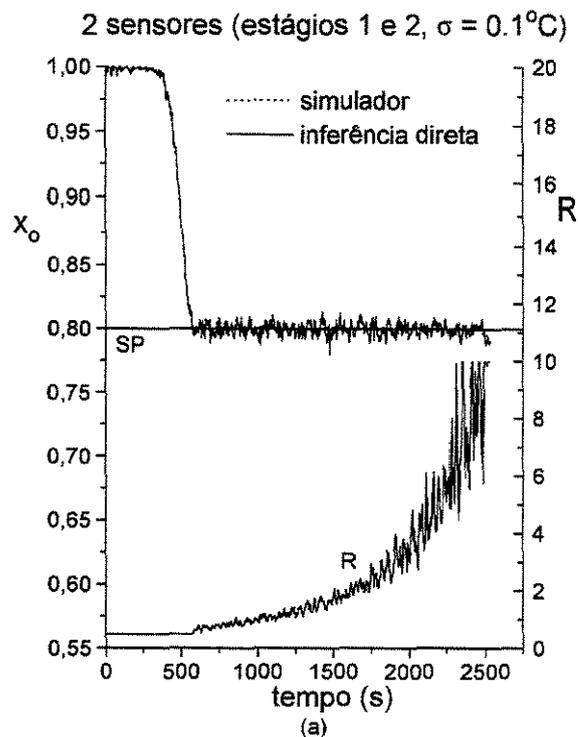


Figura 4.14. Controle da composição do destilado por inferência direta utilizando sensores com desvio padrão de  $\pm 0,1^{\circ}\text{C}$  nos estágios 1 e 2. (a) baixa pureza; (b) alta pureza.

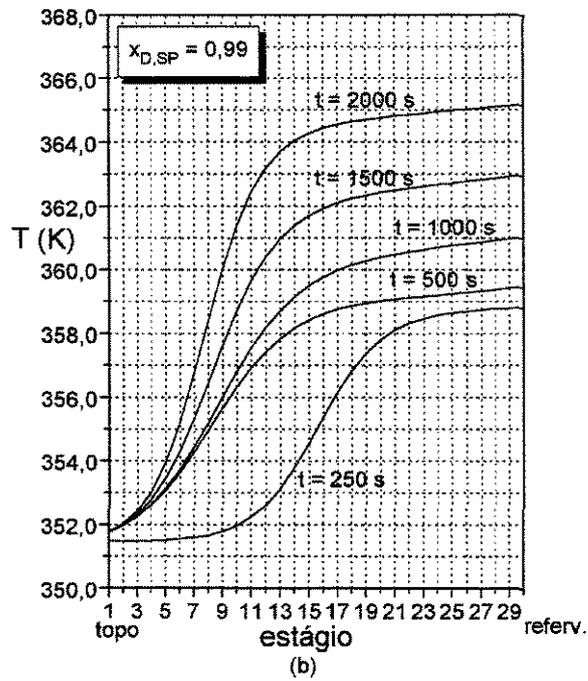
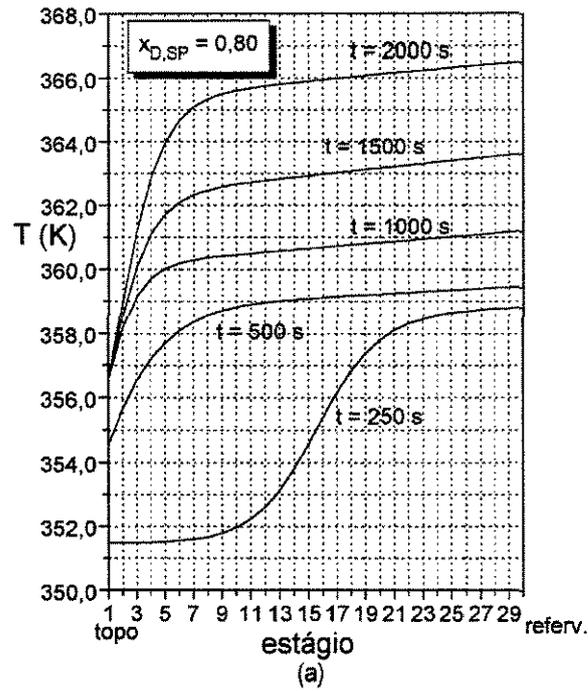


Figura 4.15. Perfis instantâneos de temperatura durante a operação com pureza constante. (a) baixa pureza; (b) alta pureza.

### 4.2.2- Análise por decomposição em valores singulares

#### ("singular value decomposition-SVD")

A técnica de decomposição em valores singulares (mais conhecida como análise SVD, do termo em inglês "Singular Value Decomposition") é um algoritmo matemático da álgebra linear que tem sido aplicado a processos industriais para seleção de variáveis controladas e manipuladas, teste de robustez de controladores, determinação da melhor configuração de controladores multivariáveis (MIMO) e seleção do posicionamento de sensores (DESHPANDE, 1989).

A decomposição em valores singulares foi originalmente desenvolvida para minimizar erros computacionais decorrentes de operações matemáticas com matrizes de grande dimensão. Através dessa técnica, uma matriz  $K$  é decomposta em três matrizes:

$$K = U\Sigma V^T \quad (4.3)$$

onde  $K$  é uma matriz  $n \times m$ ;  $U$  é uma matriz ortogonal  $n \times n$ , cujas colunas são denominadas *vetores singulares da esquerda*;  $V$  é uma matriz ortogonal  $m \times m$ , cujas colunas são denominadas *vetores singulares da direita*;  $\Sigma$  é uma matriz diagonal  $m \times m$ , cujos elementos  $(\Sigma_1, \Sigma_2, \dots, \Sigma_m)$  são denominados *valores singulares* e  $\Sigma_1 \geq \Sigma_2 \geq \dots \geq \Sigma_m \geq 0$ .

No projeto de controladores multivariáveis, se  $Y$  for um vetor de saídas controladas e  $M$  for um vetor de variáveis manipuladas, então:

$$Y = KM \quad (4.4)$$

onde  $K$  é uma matriz de ganhos do estado estacionário cujos elementos são dados por:

$$K_{ij} = \left. \frac{\delta Y_i}{\delta M_j} \right|_{M_q} = 0, \quad q \neq j \quad (4.5)$$

Decompondo  $K$  em valores singulares, os vetores singulares da esquerda,  $U = U_1, U_2, \dots, U_m$ , formam um sistema de coordenadas onde  $U_1$  indica a direção das variáveis controladas na qual o sistema é mais sensível a variações em  $M$ . O vetor singular  $U_2$  representa a segunda direção mais sensível a variações em  $M$ , e assim sucessivamente.

Os vetores singulares da direita,  $V = V_1: V_2: \dots: V_m$ , são tais que  $V_1$  indica qual a combinação de variáveis manipuladas que mais afeta as saídas do sistema. O segundo vetor  $V_2$  representa a segunda combinação de variáveis manipuladas que mais afeta o sistema, e assim sucessivamente.

Os valores singulares de  $\Sigma$  são utilizados no cálculo do número de condição ( $CN$ ) da matriz de ganhos. O número de condição indica o grau de dificuldade em se atingir o objetivo de controle através da manipulação do vetor  $M$ . O número de condição é definido como:

$$CN = \frac{\Sigma_{\max}}{\Sigma_{\min}} = \frac{\Sigma_1}{\Sigma_m} \quad (4.6)$$

Valores elevados de  $CN$  indicam que é difícil atingir o objetivo de controle especificado.

Os vetores singulares da esquerda e da direita e o número de condição auxiliam na seleção das variáveis manipuladas e controladas, bem como na escolha da melhor configuração de controle.

YU e LUYBEN (1987) utilizaram a análise SVD na escolha das posições dos sensores para inferência da composição da alimentação de colunas de destilação contínuas. Pelo critério de seleção adotado pelos autores, o melhor posicionamento seria aquele em que os sensores fossem capazes de detectar pequenas perturbações (da ordem de 0,01%) nas composições da alimentação. Dessa forma:

$$T = K z_F = (U\Sigma V^T) z_F \quad (4.7)$$

onde  $T$  é o vetor de temperaturas dos estágios da coluna,  $z_F$  é o vetor de composições da alimentação. Se forem consideradas perturbações nas composições dos componentes 1 e 2 na alimentação, então  $z_F = [z_{F,1} \ z_{F,2}]^T$ , e:

$$K_{j,1} = \frac{\Delta T_j}{(\Delta z_{F,1} / z_{F,1})} \quad I \leq j \leq NP + 1$$

$$K_{j,2} = \frac{\Delta T_j}{(\Delta z_{F,2} / z_{F,2})} \quad (4.8)$$

Decompondo-se a matriz  $\mathbf{K}$  em valores e vetores singulares, o maior elemento do vetor coluna  $U_1$  indica em qual estágio a temperatura é mais sensível a variações em  $z_{F,1}$ . Analogamente, o maior elemento do vetor coluna  $U_2$  indica em qual estágio a temperatura é mais sensível a variações em  $z_{F,2}$ . Segundo YU e LUYBEN (1987), os sensores devem ser posicionados nesses dois estágios mais sensíveis.

O método de seleção do posicionamento dos sensores proposto por YU e LUYBEN (1987) foi adaptado para colunas de destilação em batelada. Visando o controle da composição do destilado, a análise SVD foi utilizada para determinar em quais estágios os sensores devem ser posicionados a fim de detectar pequenas perturbações na composição do produto. Dessa forma:

$$\mathbf{T} = \mathbf{K}(t) \mathbf{y}_1 \quad (4.9)$$

onde:

$$K_{j,l} = \frac{\Delta T_j}{(\Delta y_l / y_l)}, \quad 1 \leq j \leq NP + 1.$$

Em colunas em batelada, o estado estacionário nunca é atingido. Portanto, a matriz de ganhos  $\mathbf{K}$  é dependente do tempo.

Utilizando os dados da Tabela 4.4, a análise SVD foi aplicada à destilação em batelada com pureza constante ( $x_{D,SP} = 0,99$ ). Para ocasionar pequenas perturbações na composição do produto, injetou-se um ruído branco com distribuição Gaussiana e desvio padrão  $\sigma_R = \pm 0,1$  na razão de refluxo calculada pelo controlador. A matriz de ganhos  $\mathbf{K}$  foi atualizada a cada 10 s e, através da decomposição em valores singulares, foi possível identificar quais os estágios mais sensíveis às variações na composição do destilado, como mostram as Figuras 4.16 (b) e (c). As posições dos sensores mais adequadas para detectar perturbações em  $x_o$  variam durante a batelada. Isso ocorre pois, ao contrário das colunas contínuas, o perfil de temperatura de colunas de destilação em batelada varia com o tempo.

A análise SVD para colunas de destilação em batelada não permite definir um único posicionamento como sendo *o melhor* posicionamento de sensores. Porém, analisando-se as Figuras 4.16 (b) e (c), observa-se que as melhores posições para os sensores se encontram afastadas dos estágios do topo da coluna. Tal resultado está de acordo com a análise feita no item anterior.

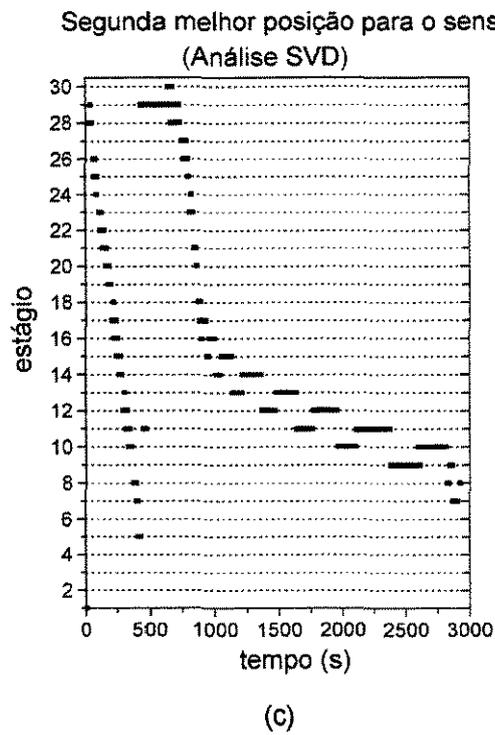
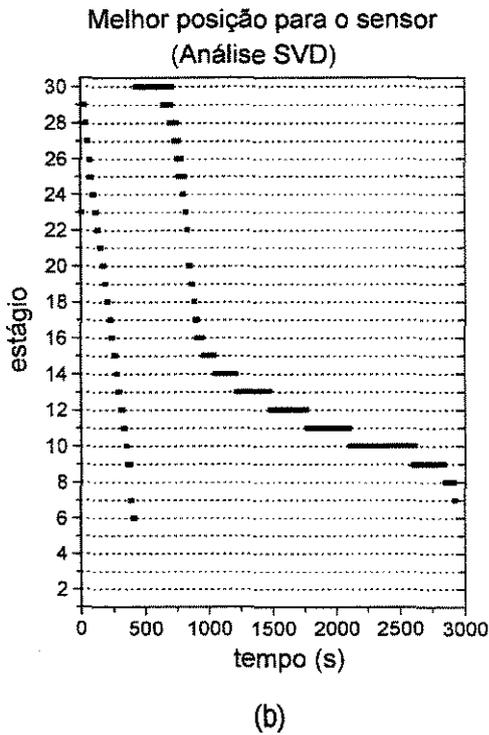
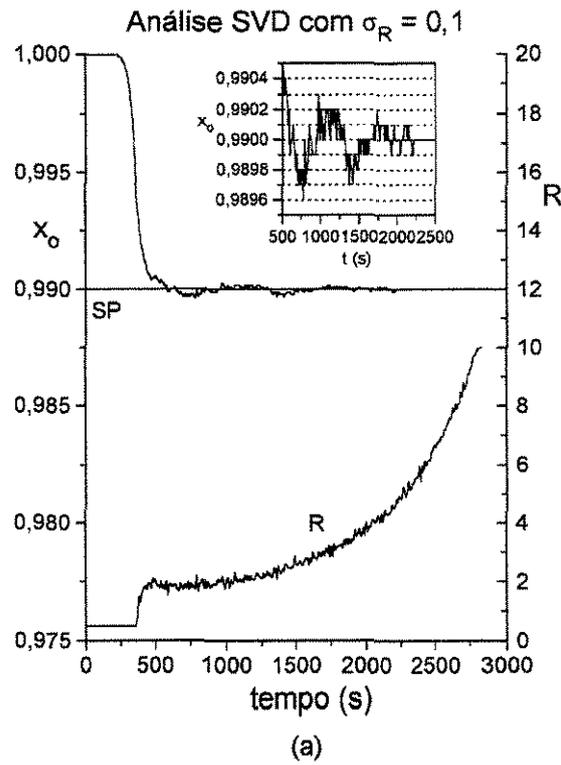


Figura 4.16. Análise SVD. (a) operação com pureza constante e perturbações com desvio padrão de  $\pm 0,1$  em R; (b) melhor posição para o sensor; (c) segunda melhor posição para o sensor.

### **4.2.3- Testes com o controlador por inferência do tipo GLC**

O algoritmo de Kalman foi utilizado para fornecer a cada período de amostragem as estimativas das composições instantâneas dos pratos 1 e 2, que são necessárias para o cálculo da ação de controle. Como foi visto anteriormente, teoricamente um único sensor seria suficiente para fornecer tais estimativas. Porém, a fim de diminuir o tempo de convergência do filtro de Kalman, dois sensores foram utilizados nessa análise. As condições operacionais e parâmetros do controlador da Tabela 4.4 foram mantidos e os parâmetros do filtro de Kalman foram os mesmos da Tabela 4.1.

Quando os sensores foram posicionados nos estágios 4 e 8 (Figura 4.17), as estimativas do filtro foram boas e o controlador manteve a composição do destilado no valor especificado.

Posicionando-se os sensores cada vez mais afastados do topo da coluna (Figuras 4.18-4.20), perfis mais suaves das variáveis controlada e manipulada foram obtidos. No entanto, é possível notar que o erro de inferência aumenta quanto mais afastados dos estágios do topo se encontram os sensores.

Portanto, na escolha das posições dos sensores dois fatores devem ser considerados: a filtragem de ruídos e a exatidão das estimativas de composição fornecidas pelo filtro de Kalman. Os sensores devem estar afastados do topo, mas não tão distantes a ponto de diminuir a exatidão das estimativas de composição.

Os resultados e discussão apresentados nesta seção se encontram no artigo de OISIOVICI e CRUZ (2000).

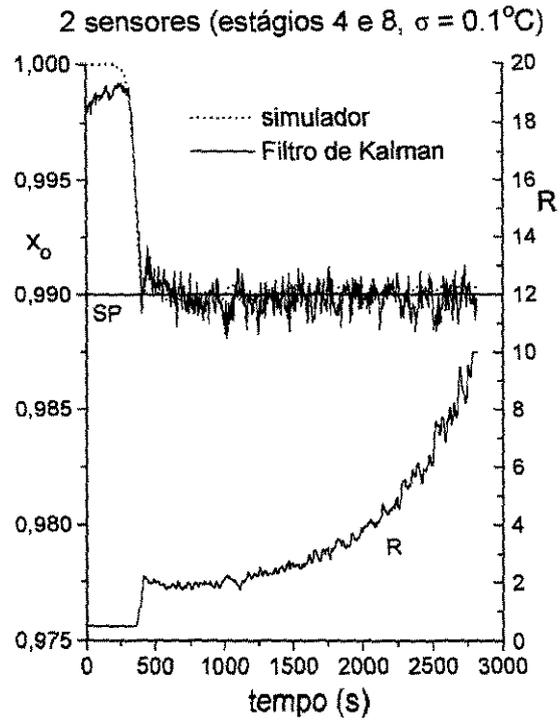


Figura 4.17. Controle da composição do destilado de alta pureza utilizando o filtro de Kalman e sensores nos estágios 4 e 8.

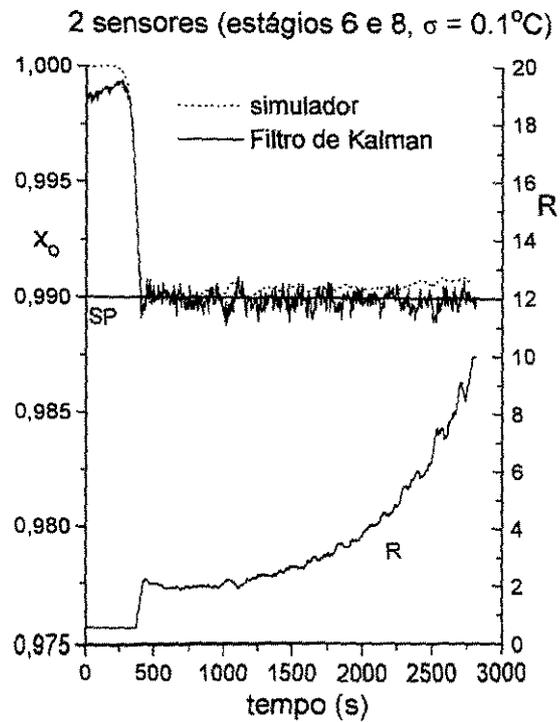


Figura 4.18. Controle da composição do destilado de alta pureza utilizando o filtro de Kalman e sensores nos estágios 6 e 8.

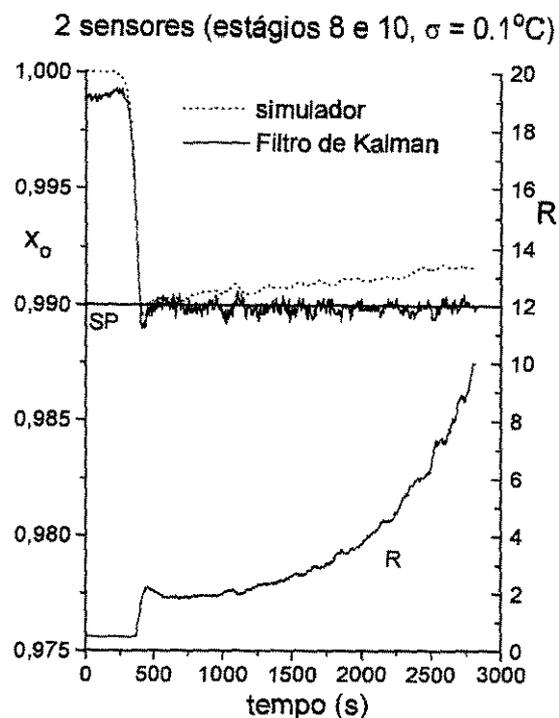


Figura 4.19. Controle da composição do destilado de alta pureza utilizando o filtro de Kalman e sensores nos estágios 8 e 10.

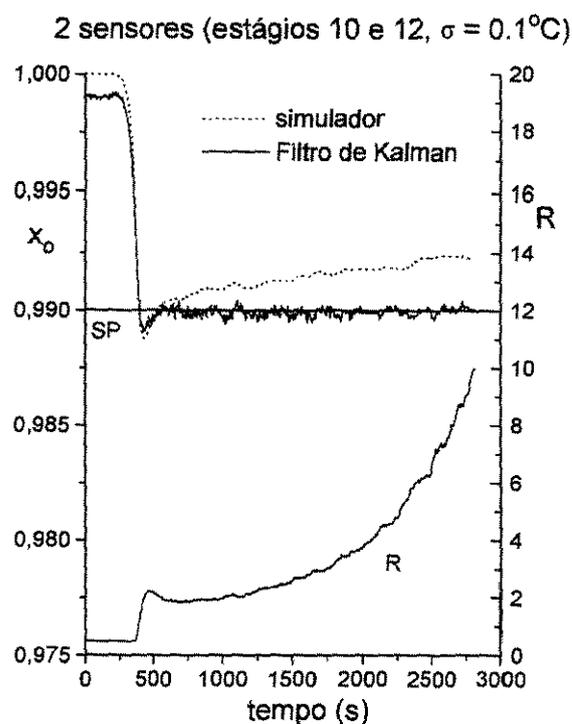


Figura 4.20. Controle da composição do destilado de alta pureza utilizando o filtro de Kalman e sensores nos estágios 10 e 12.

### 4.3- RESULTADOS EXPERIMENTAIS DO CONTROLADOR POR INFERÊNCIA DO TIPO GLC

As corridas experimentais foram realizadas na coluna de destilação em batelada descrita no item 3.9. Os testes experimentais realizados podem ser divididos em duas etapas: corridas em malha aberta e corridas em malha fechada visando o controle da composição do destilado de alta pureza.

#### 4.3.1- Corridas em malha aberta

O objetivo principal da realização de corridas em malha aberta foi a sintonia dos parâmetros do Filtro de Kalman Estendido (FKE). Nas corridas em malha aberta a razão de refluxo é mantida constante ao longo de toda batelada.

As corridas em malha aberta foram feitas considerando-se as condições operacionais da Tabela 4.5. A cada período de amostragem, todos os sete sensores da coluna eram lidos. Os valores lidos e utilizados no Filtro de Kalman dependiam da definição do número de sensores utilizados no filtro ( $p$ ) e do posicionamento escolhido.

Tabela 4.5. Condições operacionais e parâmetros do Filtro de Kalman adotados nas corridas experimentais em malha aberta.

<i>sistema</i>	etanol (1)/1-propanol (2)
<i>pressão (mmHg)</i>	760
<i>número de estágios</i>	30 (29 pratos + refeedor)
<i>potência (W)</i>	850
$M_{Bo}$ (mol)	100,0
$x_{1,Bo}$	0,33
$M_i$ (mol)	0,2
$R$	1,0
$P_0$	<b>diag</b> ( $1 \times 10^{-2}, \dots, 1 \times 10^{-2}$ )
$\hat{X}_o$	0,80
$R$ ( $^{\circ}\text{C}$ ) <sup>2</sup>	<b>diag</b> (0,25; ..., 0,25)
$Ta$ (s)	20
<i>nkal</i>	8

### 4.3.1.1- Sintonia do parâmetro $Q$ do Filtro de Kalman Estendido

A matriz  $Q$  representa o desvio entre o modelo utilizado no filtro de Kalman e os dados reais da coluna ("process/model mismatch"). Rigorosamente, para determinação dos parâmetros  $Q$  seria necessário comparar os valores de composição instantâneos preditos pelo filtro com os valores instantâneos reais, ou seja, medidos, por exemplo, através de um analisador "on-line". Nesse trabalho, a escolha da matriz  $Q$  foi feita de forma aproximada comparando-se os perfis de composição preditos pelo FKE com os perfis inferidos através de dados de temperatura filtrados por um filtro exponencial duplo (inferência direta). A temperatura utilizada na inferência direta é a temperatura do estágio cuja composição se deseja inferir. No caso do FKE, isso nem sempre é verdadeiro, ou seja, a composição de um estágio pode ser inferida a partir da temperatura de outros estágios. A composição média do destilado medida com um refratômetro ao final do experimento também foi comparada com a composição média do destilado predita pelo Filtro de Kalman. As informações advindas dessas comparações foram utilizadas na escolha da matriz  $Q$ .

As Tabelas 4.6 e 4.7 e as Figuras 4.21 e 4.22 apresentam a comparação dos resultados para diferentes valores de  $Q$ .

Tabela 4.6. Sintonia do parâmetro  $Q$  ( $p = 2$  nos estágios 1 e 30).

$Q_{qq} (1 \leq q \leq NP)^*$	$x_{D,médio}$	$\hat{x}_{D,médio}$ (FKE)	desvio (%)
$10^{-5}$	0,9462	0,9659	-2,1
$10^{-4}$	0,9462	0,9414	0,5
$10^{-3}$	0,9462	0,9369	1,0

\*  $Q_{NP+1,NP+1} = 10^{-6}$

Tabela 4.7. Sintonia do parâmetro  $Q$  ( $p = 2$  nos estágios 4 e 30).

$Q_{qq} (1 \leq q \leq NP)^*$	$x_{D,médio}$	$\hat{x}_{D,médio}$ (FKE)	desvio (%)
$10^{-5}$	0,9462	0,9684	-2,3
$10^{-4}$	0,9462	0,9285	1,9
$10^{-3}$	0,9462	0,9186	2,9

\*  $Q_{NP+1,NP+1} = 10^{-6}$

Para o refeedor, bons resultados foram obtidos com  $Q_{NP+1, NP+1} = 10^{-6}$ , e esse valor foi mantido em todas as corridas experimentais (Figuras 4.21b e 4.22b). As Figuras 4.21a e 4.22a mostram que quanto menor o valor de  $Q$ , maior a filtragem dos valores de  $x_0$ . Para  $p = 2$  (1, 30) e  $p = 2$  (4, 30), o menor erro na estimativa da composição média do destilado foi obtido com  $Q_{qq} = 10^{-4}$  ( $1 \leq q \leq NP$ ) e  $Q_{NP+1, NP+1} = 10^{-6}$ . Dessa forma, esses valores foram adotados nos demais experimentos. O parâmetro  $Q$  é menor no refeedor do que nos outros estágios, revelando que o desvio entre o modelo utilizado no FKE é relativamente menor no refeedor do que nos outros estágios.

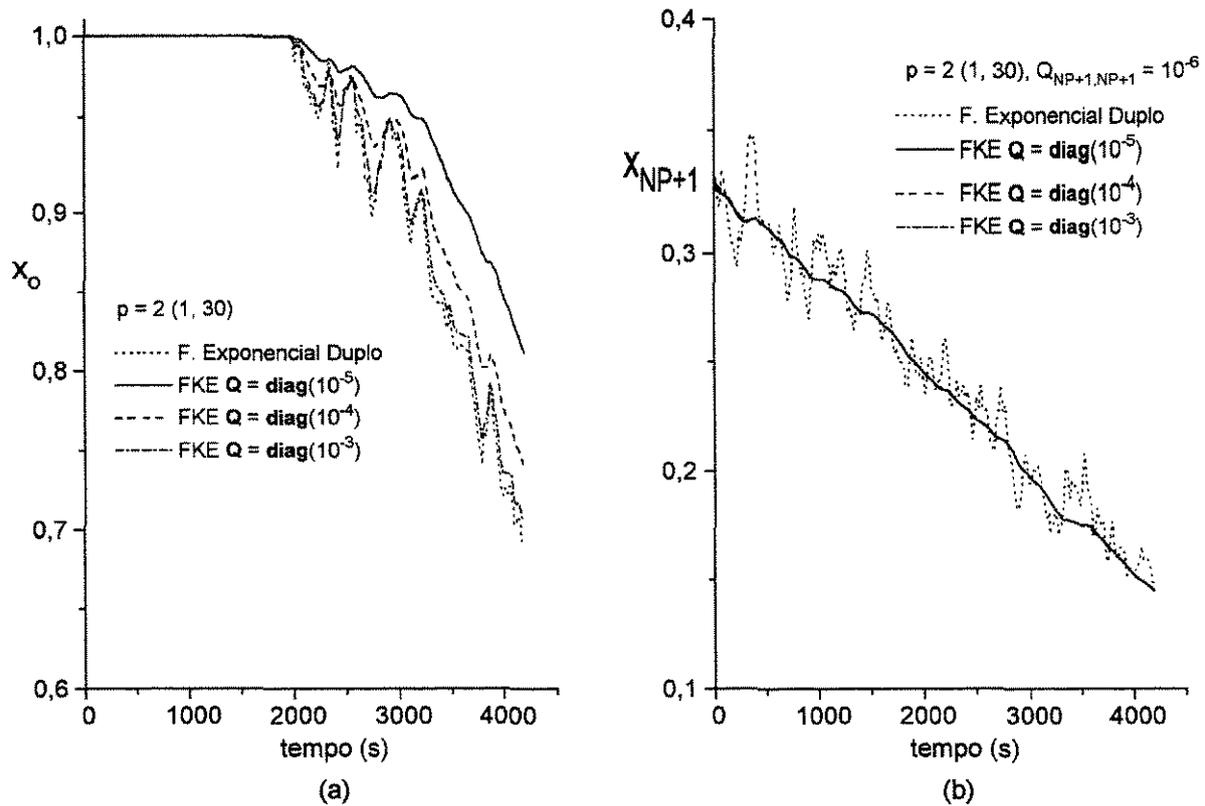


Figura 4.21. Sintonia do parâmetro  $Q$  ( $p = 2$  nos estágios 1 e 30).

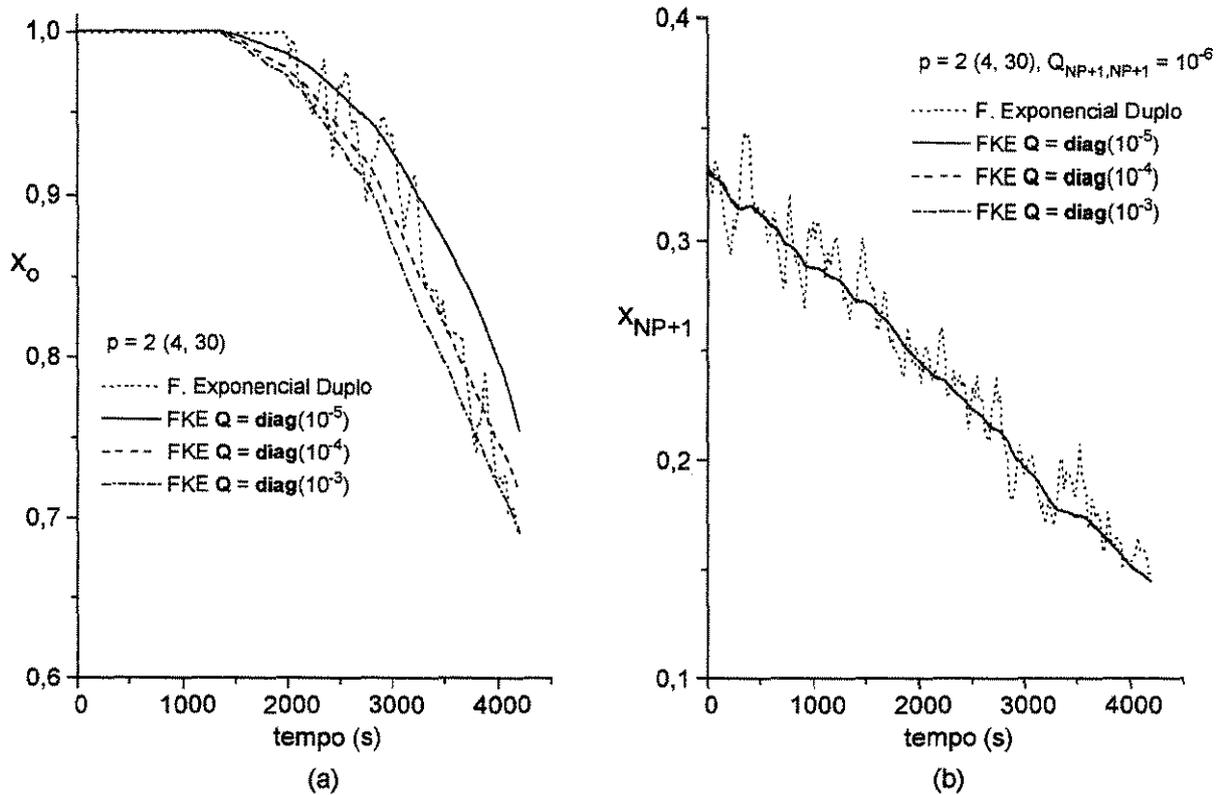


Figura 4.22. Sintonia do parâmetro  $Q$  ( $p = 2$  nos estágios 4 e 30).

#### 4.3.1.2- Análise da influência da posição de dois sensores na inferência da composição do destilado

Fixando-se o número de sensores em  $p = 2$ , a influência da posição dos sensores na inferência da composição do destilado foi estudada. Os resultados apresentados na Tabela 4.8 indicam que quanto mais próximos dos estágios do topo os sensores estiverem, melhores serão as estimativas da composição do destilado. Na Tabela 4.8, as estimativas mais exatas foram obtidas posicionando-se os sensores nos estágios 1 e 4 e nos estágios 4 e 9. Porém, os correspondentes perfis de composição apresentados na Figura 4.23 mostram que o nível de ruído no perfil de  $x_0$  aumenta à medida que os sensores são posicionados mais próximos do topo. Esses resultados concordam com os resultados obtidos nas simulações.

Tabela 4.8. Influência da posição de dois sensores na inferência da composição do destilado.

<i>posicionamento sensores</i>	$x_{D,médio}$	$\hat{x}_{D,médio}$ (FKE)	<i>desvio (%)</i>
1, 4	0,7321	0,7461	-1,9
4, 9	0,7321	0,7474	-2,1
9, 14	0,7321	0,8155	-11,4
14, 19	0,7321	0,9610	-31,3

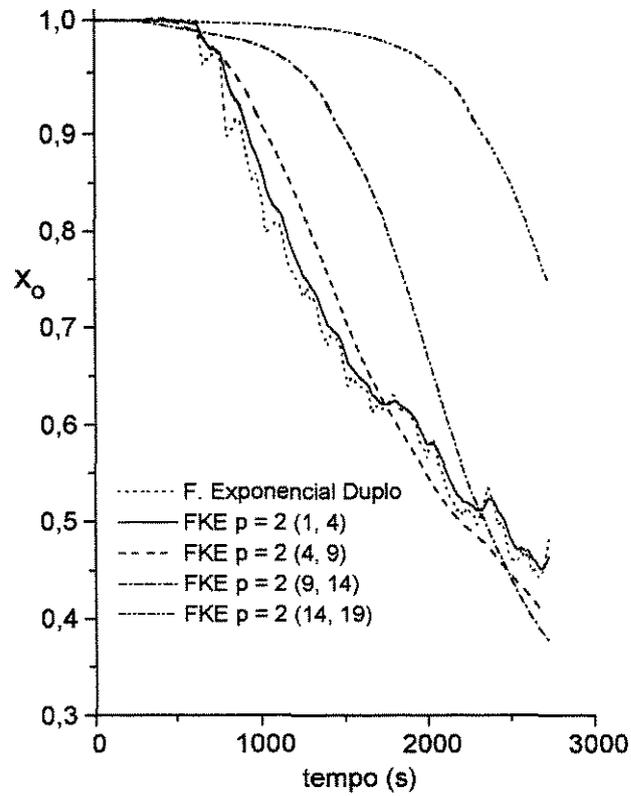


Figura 4.23. Influência da posição de dois sensores na inferência da composição do destilado.

### **4.3.1.3- Análise da influência do número de sensores na inferência da composição do Destilado**

A influência do número de sensores na estimativa de  $x_0$  também foi analisada experimentalmente. As Tabelas 4.9 e 4.10 e a Figura 4.24 apresentam os resultados obtidos quando diferentes números de sensores foram utilizados na estimativa da composição do destilado feita pelo FKE. No primeiro caso (Tabela 4.9 e Figura 4.24a), o primeiro sensor (de cima para baixo da coluna) foi sempre mantido fixo no estágio 1. No segundo caso (Tabela 4.10 e Figura 4.24b), a posição do primeiro sensor foi sempre mantida no estágio 4.

Com um único sensor, a composição média do destilado foi estimada com menor erro. Se este único sensor estiver posicionado no estágio 1, o nível de ruído é maior. Como foi visto no item 4.1, se a estimativa inicial do perfil de composição não for boa, o tempo de convergência do FKE aumenta com a diminuição do número de sensores. Portanto, esse é um fator importante a ser considerado na escolha do número de sensores.

Pela Tabela 4.10, o acréscimo de mais sensores não trouxe melhorias significativas na estimativa da composição do destilado. Na corrida apresentada na Tabela 4.9, o uso de mais sensores até aumentou o erro de inferência.

Considerando a influência do número de sensores no tempo de convergência do FKE e na exatidão da estimativa da composição do destilado, o uso de dois sensores foi considerado o mais adequado para a estimativa de  $x_0$ .

Conforme visto no item 4.1, o aumento do número de sensores melhora a estimativa do perfil de composição prato a prato. Nas corridas em malha fechada visando o controle da composição do destilado, o perfil de composição ao longo de toda a coluna não é necessário no cálculo da estratégia de controle. O controlador por inferência do tipo GLC apenas necessita das composições instantâneas do destilado e dos dois pratos do topo (estágios 1 e 2).

Tabela 4.9. Influência do número de sensores na inferência da composição do destilado (primeiro sensor no estágio 1).

<i>posicionamento sensores</i>	$x_{D,médio}$	$\hat{x}_{D,médio}$ (FKE)	<i>desvio (%)</i>
1	0,8212	0,8332	-1,5
1, 4	0,8212	0,8020	2,3
1, 4, 9, 14	0,8212	0,7975	2,9
1, 4, 9, 14, 19, 24, 30	0,8212	0,7984	2,8

Tabela 4.10. Influência do número de sensores na inferência da composição do destilado (primeiro sensor no estágio 4).

<i>posicionamento sensores</i>	$x_{D,médio}$	$\hat{x}_{D,médio}$ (FKE)	<i>desvio (%)</i>
4	0,8544	0,8492	0,6
4, 9	0,8544	0,8462	1,0
4, 9, 14, 19	0,8544	0,8465	0,9
4, 9, 14, 19, 24, 30	0,8544	0,8471	0,9

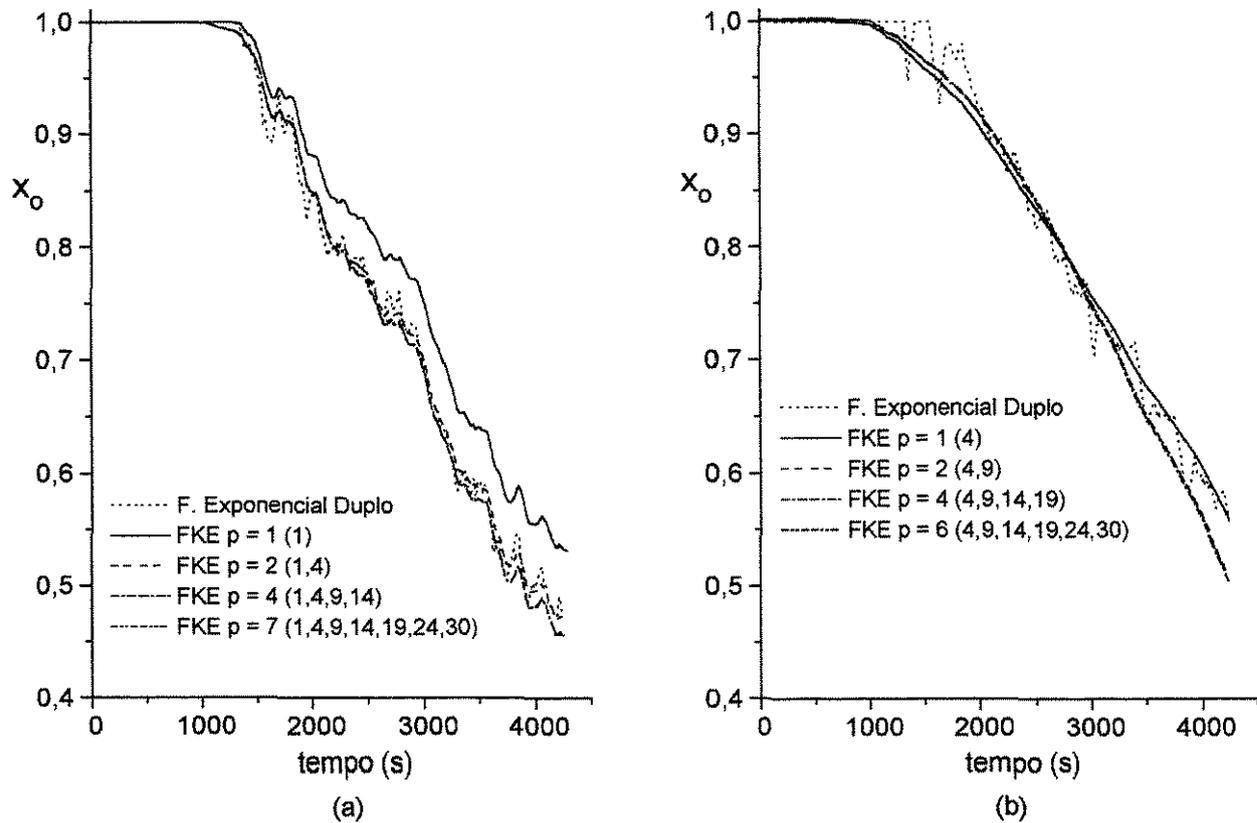


Figura 4.24. Influência do número de sensores na inferência da composição do destilado. (a) primeiro sensor no estágio 1; (b) primeiro sensor no estágio 4.

#### 4.3.1.4- Análise da influência da posição do segundo sensor, sendo a posição do primeiro sensor fixa.

Escolhido  $p = 2$  como o número de sensores a ser utilizado nas corridas em malha fechada, fez-se uma análise da influência da posição do segundo (de cima para baixo da coluna) sensor, mantendo-se fixa a posição do primeiro sensor. Os resultados dessa análise são apresentados na Tabela 4.11 e na Figura 4.25. Os perfis de  $x_o$  foram praticamente coincidentes e as diferenças entre os valores estimados da composição do destilado foram pequenas. Ou seja, a influência da posição do segundo sensor na estimativa da composição do destilado é pouco significativa em relação ao posicionamento do primeiro sensor, o qual se encontra mais próximo do estágio cuja composição se deseja inferir.

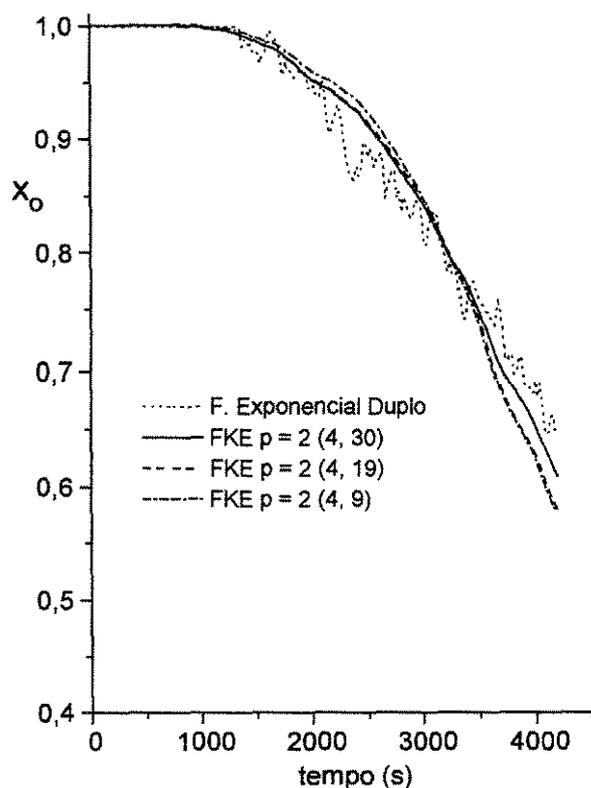


Figura 4.25. Influência da posição do segundo sensor, sendo a posição do primeiro sensor fixa.

Tabela 4.11. Influência da posição do segundo sensor, sendo a posição do primeiro sensor fixa.

<i>posicionamento sensores</i>	$x_{D,médio}$	$\hat{x}_{D,médio}$ (FKE)	<i>desvio (%)</i>
4, 30	0,8934	0,8964	-0,34
4, 19	0,8934	0,8937	-0,03
4, 9	0,8934	0,8944	-0,11

### 4.3.2- Corridas em malha fechada

Após a sintonia dos parâmetros do FKE, foram realizadas corridas experimentais em malha fechada visando o controle da composição do destilado de alta pureza. A sintonia dos parâmetros do controlador GLC ( $K_c$  e  $\tau_I$ ) foi feita por tentativa e erro.

Os principais resultados obtidos nas corridas em malha fechada serão apresentados. As condições operacionais dessas corridas estão resumidas na Tabela 4.12.

Tabela 4.12. Condições operacionais, parâmetros do FKE e do controlador GLC para as corridas em malha fechada.

<i>sistema</i>	etanol (1)/1-propanol (2)
<i>pressão (mmHg)</i>	760
<i>número de estágios</i>	30 (29 pratos + refulvador)
<i>potência (W)</i>	850
$M_{Bo}$ (mol)	90,0
$x_{1,Bo}$	0,20
$M_i$ (mol)	0,2
$R_{min} - R_{max}$	1,5 - 20,0
$P_0$	<b>diag</b> ( $1 \times 10^{-2}, \dots, 1 \times 10^{-2}$ )
$Q$	$Q_{qq} = 10^{-4} (1 \leq q \leq NP)$ e $Q_{NP+1, NP+1} = 10^{-6}$
$\hat{X}_o$	0,80
$R$ (°C) <sup>2</sup>	<b>diag</b> (0,25; ..., 0,25)
$Ta$ (s)	20
<i>nkal</i>	8
$x_{D,SP}$	0,99
$K_c$ (s <sup>-1</sup> )	$1 \times 10^{-2}$
$\tau_I$ (s)	2000

Tabela 4.13. Resultados das corridas em malha fechada.

<i>Corrida</i>	<i>posicionamento sensores</i>	$x_{D,médio}$	$\hat{x}_{D,médio}$ ( <i>FKE</i> )	<i>desvio</i> (%)
C1	4, 9	0,9907	0,9928	-0,2
C2	4, 9 (Proporcional puro)	0,9903	0,9918	-0,2
C3	1, 4	0,9546	0,9584	-0,4
C4	9, 14	0,9917	0,9909	0,1
C5	14, 19	0,9720	0,9923	-2,1
C6	9, 14 ( $R_{\min} = 0,8$ )	0,9895	0,9903	-0,1

A Figura 4.26 mostra os perfis das variáveis controlada e manipulada quando dois sensores posicionados nos estágios 4 e 9 foram utilizados no algoritmo do FKE. Pela Tabela 4.13, verifica-se que o desvio entre a composição média fina do destilado medida no refratômetro e o valor estimado pelo filtro de Kalman é pequeno (0,2%). O perfil da variável manipulada (razão de refluxo) apresenta comportamento crescente, porém muito oscilatório.

Mantendo-se o mesmo posicionamento da corrida C1, foi feita uma batelada retirando-se o termo integral do controlador GLC, ou seja, fazendo  $\tau_I$  tender a infinito. Os resultados dessa corrida são mostrados na Figura 4.27 e na Tabela 4.13. No início da coleta do destilado, as ações do controlador tiveram um comportamento do tipo liga/desliga ("on/off"), gerando oscilações na variável controlada. Após  $t = 2000$  s, as ações do controlador se tornaram relativamente mais suaves, porém o controlador não conseguiu manter a composição do destilado no valor especificado. A estimativa da composição final do destilado foi tão boa quanto na corrida C1. Tal fato era esperado, já que as posições dos sensores foram mantidas inalteradas nas corridas C1 e C2.

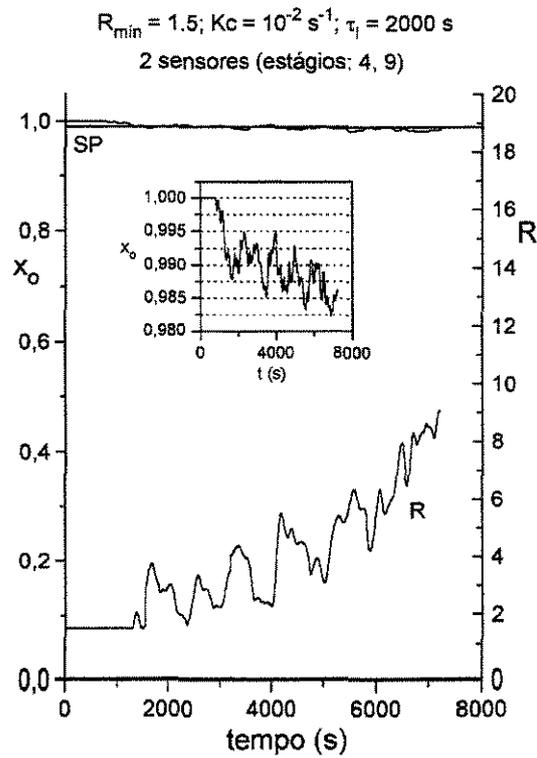


Figura 4.26. Controle por inferência com dois sensores posicionados nos estágios 4 e 9 (corrida C1).

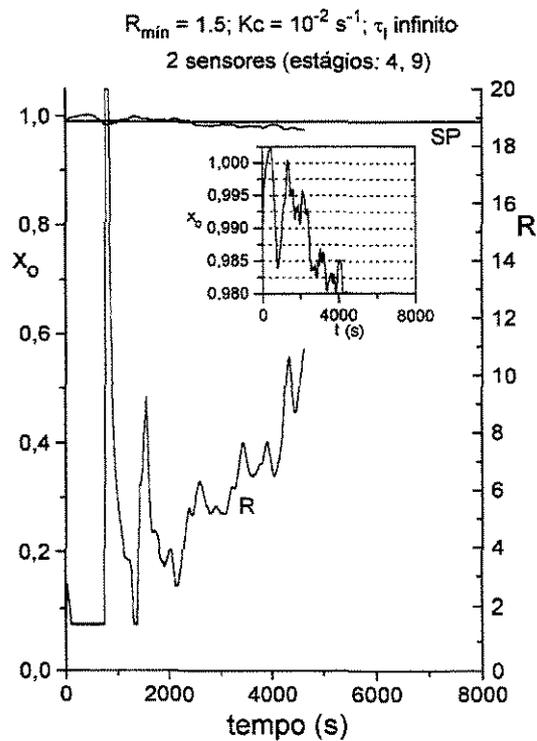


Figura 4.27. Controle por inferência (GLC apenas com termo proporcional) com dois sensores posicionados nos estágios 4 e 9 (corrida C2).

Posicionando-se os sensores nos estágios mais próximos do topo da coluna (estágios 1 e 4), o comportamento do controlador GLC foi do tipo "on/off" durante toda batelada e o objetivo de controle não foi atingido, conforme pode ser visto na Figura 4.28.

O desempenho do controlador por inferência melhorou significativamente quando as temperaturas dos estágios 9 e 14 foram utilizadas na estimativa das composições. Os perfis das variáveis controlada e manipulada (Figura 4.29) foram suaves e a composição instantânea do destilado foi mantida no "set-point". O desvio entre a composição média do destilado medida e a composição média do destilado inferida foi de 0,1%.

Uma outra batelada foi feita afastando-se ainda mais as posições dos sensores para os estágios 14 e 19. Os perfis de  $x_o$  e  $R$  (Figura 4.30) foram ainda mais suaves do que os da corrida C4, mas o erro de inferência aumentou (em valor absoluto) de 0,1% para -2,1%.

Para testar a flexibilidade do controlador por inferência do tipo GLC, foi feita uma batelada mantendo-se as mesmas condições da corrida C4, porém diminuindo a razão de refluxo mínimo de 1,5 para 0,8 (corrida C6). Como pode ser visto na Figura 4.31 e na Tabela 4.13, o desempenho do controlador foi tão bom quanto o desempenho apresentado na corrida C4, comprovando a flexibilidade do controlador desenvolvido.

O efeito observado do posicionamento dos sensores sobre o desempenho do controlador por inferência do tipo GLC nas corridas experimentais está de acordo com os resultados obtidos por simulação no item 4.2.

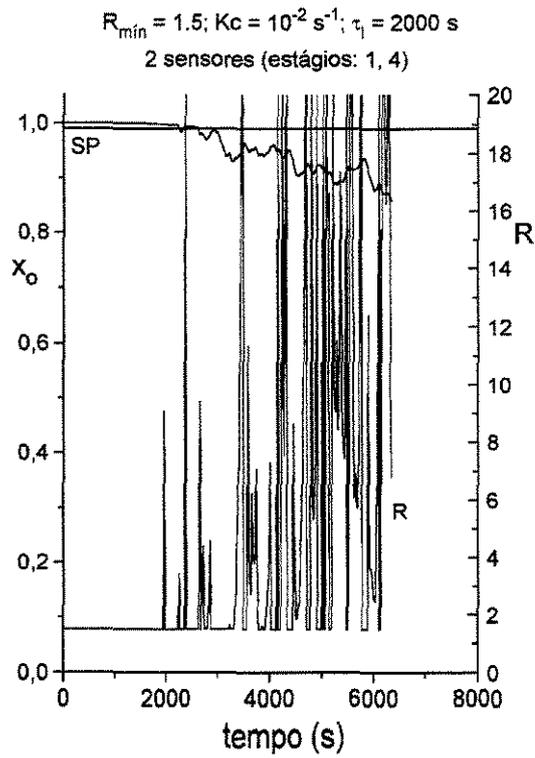


Figura 4.28. Controle por inferência com dois sensores posicionados nos estágios 1 e 4.  
(corrida C3).

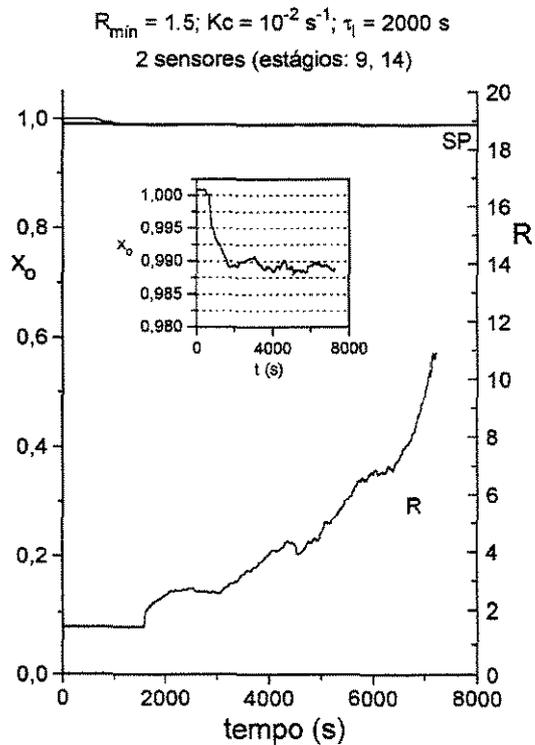


Figura 4.29. Controle por inferência com dois sensores posicionados nos estágios 9 e 14  
(corrida C4).

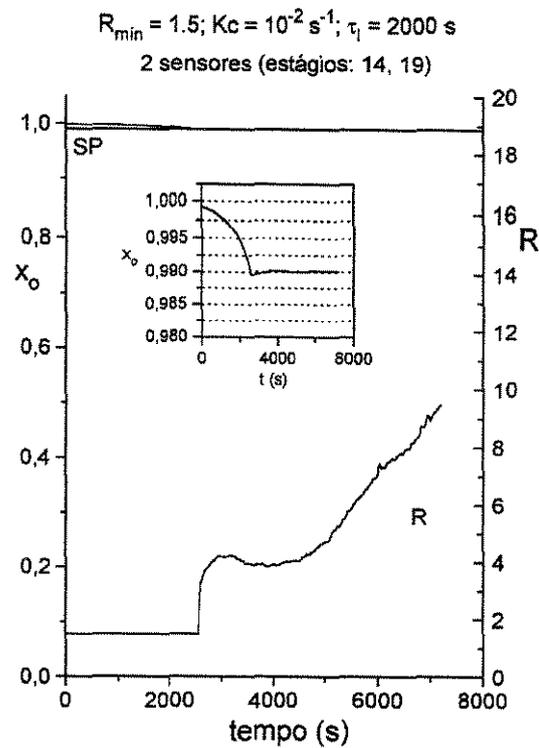


Figura 4.30. Controle por inferência com dois sensores posicionados nos estágios 14 e 19 (corrida C5).

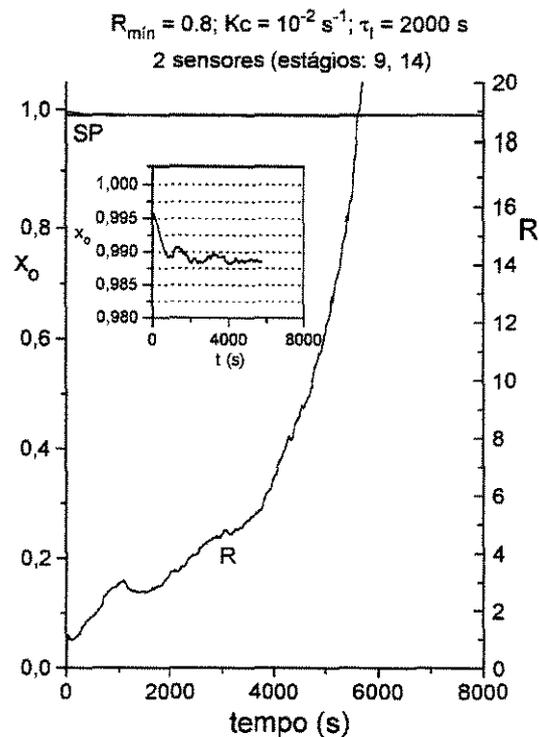


Figura 4.31. Controle por inferência com dois sensores posicionados nos estágios 9 e 14 com um  $R_{\min}$  menor (corrida C6).

## **CAPÍTULO 5- CONCLUSÕES**

## 5- CONCLUSÕES

Um controlador por inferência do tipo GLC para colunas de destilação em batelada de alta pureza foi desenvolvido e testado por simulação e experimentalmente, visando o controle da composição do destilado.

O método de inferência direta de composições binárias, que consiste em estimar a composição num estágio da coluna através da temperatura desse estágio e da relação de equilíbrio líquido/vapor do sistema, pode fornecer bons resultados no controle por inferência de colunas de destilação de baixa pureza. Porém, o uso desse método de inferência em colunas de alta pureza pode resultar em oscilações na variável controlada que prejudicam o desempenho do controlador, mesmo quando o nível de ruído dos sensores é relativamente baixo ( $\pm 0,1^\circ\text{C}$ ). Tal problema foi solucionado com o uso de um Filtro de Kalman Estendido (FKE), o qual é capaz de estimar as composições instantâneas necessárias para o cálculo da ação de controle (composições nos estágios do topo da coluna) a partir das medidas de sensores posicionados em estágios da coluna onde as variações de temperatura são maiores.

Utilizando um simulador rigoroso para representar o comportamento da coluna de destilação em batelada, o filtro de Kalman estendido foi testado com sistemas binários e multicomponentes, e foi capaz de estimar com boa exatidão perfis instantâneos de composição ao longo da coluna .

Os resultados mostraram que o filtro de Kalman converge para o perfil da coluna mesmo quando é inicializado com uma estimativa grosseira do perfil de composição inicial.

De uma forma geral, o filtro de Kalman demora mais para convergir no caso de sistemas multicomponentes do que no caso de sistemas binários. Além disso, a dimensão do problema de estimativa dos perfis de composição de sistemas multicomponentes é relativamente maior, exigindo um grande esforço computacional, principalmente quando a coluna possui muitos estágios.

O número de integrações por período de amostragem ( $nkal$ ) é um parâmetro importante para um bom desempenho do filtro. Observou-se que o filtro de Kalman para colunas de destilação em batelada só converge para valores de  $nkal$  maiores do que um valor de  $nkal$  mínimo. Porém, valores de  $nkal$  muito maiores que o valor mínimo só devem

ser utilizados quando os ganhos em termos de exatidão e/ou convergência forem significativos.

É desejável que o filtro de Kalman convirja antes que a composição do produto atinja o "set-point". Os fatores que mais influenciam no tempo de convergência são o número de sensores e a estimativa inicial do perfil de composição. Como normalmente não se tem informações exatas do perfil inicial de composição, o tempo de convergência pode ser reduzido aumentando-se o número de sensores. Porém, acima de um certo número de sensores, a redução no tempo de convergência pode ser desprezível ou inexistente.

A técnica de decomposição em valores singulares foi utilizada para determinar em quais estágios os sensores devem ser posicionados a fim de detectar pequenas perturbações na composição do produto. Os resultados mostraram que os pontos da coluna mais sensíveis a perturbações na composição do destilado variam durante a batelada e que as melhores posições para os sensores se encontram afastadas dos estágios do topo da coluna.

O controlador por inferência do tipo GLC foi testado experimentalmente numa coluna de destilação em batelada de alta pureza em escala piloto. Os resultados mostraram que o nível de ruído no perfil da composição do destilado aumenta à medida que os sensores são posicionados mais próximos do topo.

Nas corridas em malha fechada visando o controle da composição do destilado, o perfil de composição ao longo de toda a coluna não é necessário no cálculo da estratégia de controle, já que o controlador por inferência do tipo GLC apenas necessita das composições instantâneas do destilado e dos dois pratos do topo (estágios 1 e 2). Nesse caso, o uso de dois sensores foi considerado o mais adequado em termos de exatidão, tempo de convergência e esforço computacional.

Nas corridas em malha fechada, foram obtidos desvios inferiores a 0,2% entre a composição média do destilado estimada e a composição média do destilado medida. Porém, o comportamento das variáveis manipulada e controlada foram diferentes, a depender do posicionamento dos sensores utilizados no FKE.

Posicionando-se os sensores nos estágios mais próximos do topo da coluna, o comportamento do controlador GLC tende a ser do tipo "on/off" e o objetivo de controle pode não ser atingido.

Posicionando-se os sensores cada vez mais afastados do topo da coluna, perfis mais suaves das variáveis controlada e manipulada são obtidos, porém o erro de inferência aumenta. Dessa forma, para o controle da composição do destilado, os sensores devem ficar afastados do topo, mas não tão distantes a ponto de diminuir a exatidão das estimativas de composição. Tais conclusões foram obtidas tanto nas corridas experimentais quanto nas simulações.

Uma grande vantagem do controlador por inferência do tipo GLC é a sua flexibilidade. Com os mesmos parâmetros de controle, o controlador é capaz de atingir o objetivo de controle em diferentes condições operacionais (composição inicial, razão de refluxo mínimo, "set-point"). Tal característica é essencial em sistema de destilação em batelada.

### **5.1- Sugestões para trabalhos futuros**

O controlador por inferência do tipo GLC pode ser diretamente estendido a sistemas multicomponentes (OISIOVICI e CRUZ, 2001). Um dos passos a seguir, seria a implementação prática do controlador GLC para a obtenção de produtos de alta pureza a partir da destilação em batelada de misturas multicomponentes.

No Filtro de Kalman desenvolvido nesse trabalho, a matriz covariância dos ruídos do estado ( $Q$ ) e a matriz covariância dos ruídos das medidas ( $R$ ) foram mantidas constantes ao longo da batelada. Uma alternativa proposta por DIMITRATOS et al. (1991) seria o uso de um Filtro de Kalman Adaptativo, no qual as variáveis de estado bem como as matrizes  $Q$  e  $R$  são estimadas simultaneamente. Um trabalho interessante seria comparar o uso do Filtro de Kalman Estendido com o Filtro de Kalman Adaptativo, identificando quais as vantagens e desvantagens de cada um deles.

O filtro de Kalman pode ser aplicado a outras operações unitárias em batelada, cujas variáveis de estado são difíceis de serem medidas diretamente, como no caso de reatores de polimerização e processos fermentativos.

Novas configurações de colunas de destilação em batelada estão surgindo para aumentar a produtividade da destilação em batelada (por exemplo, colunas invertidas e colunas de destilação em batelada com um vaso intermediário entre duas seções de separação). Os trabalhos teóricos a respeito dessas colunas alternativas apontam algumas

vantagens desses tipos de configuração no que diz respeito ao consumo de energia e obtenção de produtos de alta pureza. Torna-se necessário, então, verificar se é viável a implementação prática das colunas alternativas, comprovar se há realmente vantagem em utilizá-las em substituição às colunas em batelada tradicionais e, finalmente, estudar e desenvolver controladores para essas novas configurações.

## **REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS**

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BARATTI, R., BERTUCCO, A., DA ROLD, A., MORBIDELLI, M.. Development of a composition estimator for binary distillation columns. Application to a pilot plant. *Chem. Engng. Sci.*, v. 50, p. 1541-1550, 1995.

BARATTI, R., BERTUCCO, A., DA ROLD, A., MORBIDELLI, M.. A composition estimator for multicomponent distillation columns - development and experimental test on ternary mixtures. *Chem. Engng. Sci.*, v. 53, p. 3601-3612, 1998.

BAROLO, M., BERTO, F.. Composition control in batch distillation: binary and multicomponent mixtures. *Ind. Engng. Chem. Res.*, v. 37, p. 4689-4698, 1998.

BENTLEY, J. P.. *Principles of measurement systems*. Inglaterra: Longman Group Limited, 3<sup>a</sup> ed., 1995.

BETLEM, B. H. L., KRIJNSEN, H. C., HUIJNEN, H.. Optimal batch distillation control based on specific measures. *Chem. Eng. J.*, v. 71, p. 111-126, 1998.

BOSLEY, J. R., Edgar, T. F.. Application of non-linear model predictive control to optimal batch distillation. In IFAC DYCORN+1992, 1992, MD, EUA, p. 303-308.

BROWN, R. G., HWANG, P. Y. C.. *Introduction to random signals and applied Kalman filtering*. Nova Iorque: John Wiley & Sons, Inc, 2<sup>a</sup> ed., 1992.

CHIEN, I. L.. Simple empirical nonlinear model for temperature-based high-purity distillation columns. *AIChE J.*, v. 42, n. 9, p. 2692-2697, 1996.

CHRISTENSEN, F. M., JORGENSEN, S. B.. Optimal control of binary distillation with recycled waste cut. *Chem. Eng. J.*, v. 34, p. 57-64, 1987.

DESHPANDE, P.B.. *Multivariable process control*. EUA: ISA, 1989.

DIMITRATOS, J., GEORGAKIS, C., EL-AASSER, M., KLEIN, A.. An experimental study of adaptive Kalman filtering in emulsion copolymerization. *Chem. Engng. Sci.*, v. 46, n. 12, p. 3203-3218, 1991.

DOUGLAS, P. L., FOUNTAIN, P. S., SULLIVAN, G. R., ZHOU, W.. Model based control of a high-purity distillation column. *Can. J. Chem. Engng.*, v. 72, n. 6, p. 1055-1065, 1994.

FILETI, A. M., PEREIRA, J. A. F.. Adaptive and predictive control strategies for batch distillation: development and experimental testing. *Computers Chem. Engng*, v. 21, Suppl., p. S1227-S1231, 1997.

FRIEDLAND, B.. *Control system design - an introduction to state-space methods*. McGraw-Hill, Inc., 1986.

FUENTES, C., LUYBEN, W. L.. Control of high-purity distillation columns. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, v. 22, n. 3, p. 361-366, 1983.

GEORGAKIS, C.. *Tendency models for estimation, optimization and control of batch processes*. Berlim: Springer-Verlag, 1996. *Batch Processing Systems Engineering*, p. 259-273.

GEORGIU, A., GEORGAKIS, C., LUYBEN, W. L.. Nonlinear dynamic matrix control for high-purity distillation columns. *AIChE J.*, v.34, n. 8, p. 1287-1298, 1988.

HASEBE, S., HASHIMOTO, I.. *Present status of batch process systems engineering in Japan*. Berlim: Springer-Verlag, 1996. *Batch Processing Systems Engineering*, p. 49-77.

HENSON, M. A., SEBORG, D. E.. *Nonlinear process control*. New Jersey: Prentice-Hall, Inc., 1997.

HWANG, Y. L., GRAHAM, G. K., KELLER II, G. E.. Experimental study of wave propagation dynamics of binary distillation columns. *AIChE J.*, v. 42, n. 10, p. 2743-2760, 1996.

JACOBS, O. L. R.. *Introduction to control theory*. Oxford University Press, 2<sup>a</sup> ed., 1993.

KERKHOF, L. H. J., VISSERS, H. J. M.. On the profit of optimal control in batch distillation. *Chem. Eng. Sci.*, v. 33, p. 961-970 (1978).

KIPARISSIDES, C., MACGREGOR, J. F., HAMIELEC, A. E.. Suboptimal stochastic control of a continuous latex reactor. *AIChE J.*, v. 27, p. 13-20, 1981.

KIRK-OTHMER. *Encyclopedia of chemical technology*. Nova Iorque: John Wiley & Sons, 3<sup>a</sup> ed., v.10, 1983, p. 338-347.

KOZUB, D. J., MACGREGOR, J. F.. State estimation for semi-batch polymerization reactors. *Chem. Engng. Sci.*, v. 47, n. 5, p. 1047-1062, 1992.

LUCET, M., CHARAMEL, A., CHAPUIS, A., GUIDO, G. e LOREAU, J.. *Role of batch processing in the chemical process industry*. Berlim: Springer-Verlag, 1996. Batch Processing Systems Engineering, p. 43-48.

MACCHIETTO, S. e MUJTABA, J. M.. *Design of operation policies for batch distillation*. Berlim: Springer-Verlag, 1996. Batch Processing Systems Engineering, p. 174-215.

MAYBECK, P. S.. *Stochastic models, estimation, and control*. EUA: Navtech Book & Software Store, v. 141-1, 1994.

MCDONALD, K. A., MCAVOY, T. J.. Application of dynamic matrix control to moderate- and high-purity distillation towers. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 26, p. 1011-1018, 1987.

MEJDELL, T., SKOGESTAD, S. Composition estimator in a pilot-plant distillation column using multiple temperatures. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 30, p. 2555-2564, 1991.

OISIOVICI, R. M. *Operação e controle por computador "on-line" de uma coluna de destilação em batelada*. Campinas: Faculdade de Engenharia Química, UNICAMP, 1998. 140p. Dissertação (Mestrado).

OISIOVICI, R. M., CRUZ, S. L., PEREIRA, J. A. F. R.. Digital filtering in the control of a batch distillation column. *ISA Transactions*, v. 38, p. 217-224, 1999.

OISIOVICI, R. M., CRUZ, S. L.. State estimation of batch distillation columns using an extended Kalman filter. *Chem. Engng. Sci.*, v. 55, p. 4667-4680, 2000.

OISIOVICI, R. M., CRUZ, S. L.. Sensor locations and noise reduction in high-purity batch distillation control loops. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, v. 17, p. 671-683, 2000.

OISIOVICI, R. M., CRUZ, S. L.. Inferential control of high-purity multicomponent batch distillation columns using an extended Kalman filter. *Industrial & Engineering Chemistry Research (a ser publicado em Junho 2001)*.

QUINTERO-MARMOL, E., LUYBEN, W. L., GEORGAKIS, C.. Application of an extended Luenberger observer to the control of multicomponent batch distillation. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 30, p. 1870-1880, 1991.

RAMIREZ, W. F.. Optimal state and parameter identification. An application to batch fermentation. *Chem. Engng. Sci.*, v. 42, p. 2749 - 2756, 1987.

REKLAITIS, G. V.. *Future directions for research and development in batch process systems engineering*. Berlim: Springer-Verlag, 1996. Batch Processing Systems Engineering, p. 20-42.

ROBINSON, E. R. Optimum reflux policies for batch distillation. *Chem. Process Eng.*, p. 47-55, May 1971.

SCHULER, H., SUZHEN, Z.. Real-time estimation of the chain length distribution in a polymerization reactor. *Chem. Engng. Sci.*, v. 40, n. 10, p. 1891-1904, 1985.

SHINSKEY, F. G.. *Distillation control*. McGraw-Hill Book Company, 2<sup>a</sup> ed., 1984, p. 168-173.

SKOGESTAD, S., MORARI, M.. LV-control of a high-purity distillation column. *Chem. Engng. Sci.*, v. 43, n. 1, p. 33-48, 1988.

SKOGESTAD, S.. *Dynamics and control of distillation columns. a tutorial introduction*. IChemE Symposium Series, n. 142, 1997, p. 23-58.

SRINIWAS, G. R., ARKUN, Y., CHIEN, I. L., OGUNNAIKE, B. A.. Nonlinear identification and control of a high-purity distillation column: a case study. *J. Proc. Cont.*, v. 5, n. 3, p. 149-162, 1995.

STANLEY, G. T., MCAVOY, T. J.. Dynamic energy conservation aspects of distillation control. *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, v. 24, p. 439-443, 1985.

STENZ, R., KUHN, U.. Automation of a batch distillation column using fuzzy and conventional control. *IEEE Transactions on Control Systems Technology*, v. 3, n. 2, , p. 171-176, 1995.

STEPHANOPOULOS, G., SAN, K. Y. Studies on on-line bioreactor identification. I. Theory. *Biotechnol. Bioengng.*, v. 26, p. 1176- 1188, 1984.

TRENTACAPILLI, M., SEMINO, D., BRAMBILLA, A.. High-purity distillation control: some issues regarding the application of multivariable control. *IChemE Symposium Series*, n. 142, p. 313-322, 1997.

WILSON, J. A., MARTINEZ, C. L. M. State estimation in the control of integrated batch reaction with distillation processes. *Trans. IChemE*, v. 75, Part A, p. 603-608, 1997.

WONG, D. S. H., LIN, J. J. L., YU, S. W.. Optimal multiloop feedback design using simulated annealing and neural network. *AIChE J.*, v. 41, n. 2, p. 430-434, 1995.

YU, C.C., LUYBEN, W. L.. Control of multicomponent distillation columns using rigorous composition estimators. *IChemE Symposium Series*, n. 104, A29-A69, 1987.

**ANEXO I: ELEMENTOS DAS MATRIZES E VETORES  
DO FILTRO DE KALMAN ESTENDIDO PARA COLUNAS  
DE DESTILAÇÃO EM BATELADA**

## ANEXO I: ELEMENTOS DAS MATRIZES E VETORES DO FILTRO DE KALMAN ESTENDIDO PARA COLUNAS DE DESTILAÇÃO EM BATELADA

### Hipóteses do modelo:

Contra-difusão equimolar ( $L_j = L$ ,  $0 \leq j \leq NP$ ;  $V_j = V$ ,  $1 \leq j \leq NP+1$ ); estágios ideais; acúmulo de vapor desprezível; acúmulo de líquido nos pratos constante ( $M_j$ ,  $1 \leq j \leq NP$ ); pressão constante; acúmulo de líquido no condensador desprezível e condensador total:  $x_{i,0} = y_{i,1}$ ,  $1 \leq i \leq NC$ .

O modelo da coluna de destilação em batelada considerando essas hipóteses foi apresentado na seção 3.3.

**Relações de equilíbrio para sistemas com comportamento próximo ao ideal:**

$$y_{i,j} = \frac{\alpha_{i,j} x_{i,j}}{\sum_{k=1}^{NC} \alpha_{k,j} x_{k,j}}, \quad 1 \leq i \leq NC, 1 \leq j \leq NP+1$$

$$\alpha_{i,j} = \frac{P_{i,j}^{sat}(T_j)}{P_{NC,j}^{sat}(T_j)}, \quad NC = \text{componente menos volátil}$$

$$\text{Equação de Antoine: } P_{i,j}^{sat}(T_j) = \exp\left(A_i - \frac{B_i}{T_j + C_i}\right)$$

### Sistemas Binários

$$\mathbf{X} = [x_{1,1} \cdots x_{1,j} \cdots x_{1,NP+1}]^T; \quad \mathbf{u} = [L \ V]^T$$

$$x_{2,j} = 1.0 - x_{1,j}, \quad 1 \leq j \leq NP+1$$

$$\begin{bmatrix} \dot{x}_{1,1} \\ \vdots \\ \dot{x}_{1,j} \\ \vdots \\ \dot{x}_{1,NP+1} \end{bmatrix} = \mathbf{f}(\mathbf{X}, \mathbf{u}) = \begin{bmatrix} f_{1,1}(\mathbf{X}, \mathbf{u}) \\ \vdots \\ f_{1,j}(\mathbf{X}, \mathbf{u}) \\ \vdots \\ f_{1,NP+1}(\mathbf{X}, \mathbf{u}) \end{bmatrix}$$

$$X_{k+1} = X_k + \Delta t f(X_k, u_k) = \bar{f}(X_k, u_k) = \begin{bmatrix} \bar{f}_1 \\ \bar{f}_2 \\ \vdots \\ \bar{f}_j \\ \vdots \\ \bar{f}_{NP+1} \end{bmatrix}$$

$$y_{1,j} = \frac{\alpha_{1,j} x_{1,j}}{1 + (\alpha_{1,j} - 1)x_{1,j}}, \quad 1 \leq j \leq NP + 1$$

$$Kv_{11,j} = \frac{\partial y_{1,j}}{\partial x_{1,j}} = \frac{\alpha_{1,j}}{[1 + (\alpha_{1,j} - 1)x_{1,j}]^2}$$

- Matriz  $\bar{F}$  ( $n \times n$ ,  $n = NP + 1$ )

$$\bar{F} = \frac{\partial \bar{f}(X, u)}{\partial X} = \begin{bmatrix} F_{1,1} & \cdots & F_{1,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ F_{n,1} & \cdots & F_{n,n} \end{bmatrix}$$

$j = 1$ :

$$F_{1,1} = \frac{\partial \bar{f}_1}{\partial x_{1,1}} = 1 + \Delta t \left[ \frac{LKv_{11,1} - L - VKv_{11,1}}{M_1} \right]$$

$$F_{1,2} = \frac{\partial \bar{f}_1}{\partial x_{1,2}} = \Delta t \left[ \frac{VKv_{11,2}}{M_1} \right]$$

$2 \leq j \leq NP$ :

$$F_{j,j-1} = \frac{\partial \bar{f}_j}{\partial x_{1,j-1}} = \Delta t \left( \frac{L}{M_j} \right)$$

$$F_{j,j} = \frac{\partial \bar{f}_j}{\partial x_{1,j}} = 1 + \Delta t \left[ - \left( \frac{L + VKv_{11,j}}{M_j} \right) \right]$$

$$F_{j,j+1} = \frac{\partial \bar{f}_j}{\partial x_{1,j+1}} = \Delta t \left( \frac{VKv_{11,j+1}}{M_j} \right)$$

$j = NP+1:$

$$F_{NP+1,NP} = \frac{\partial \bar{f}_{NP+1}}{\partial x_{1,NP}} = \Delta t \left( \frac{L}{M_{NP+1}} \right)$$

$$F_{NP+1,NP+1} = \frac{\partial \bar{f}_{NP+1}}{\partial x_{1,NP+1}} = 1 + \Delta t \left[ \frac{-L + V - VKv_{11,NP+1}}{M_{NP+1}} \right]$$

Os demais elementos da matriz  $\bar{F}$  são nulos.

- Vetor  $\bar{h}$  ( $p \times 1$ ,  $p =$  número de sensores)

$$\bar{h} = \begin{bmatrix} \bar{h}_1 \\ \vdots \\ \bar{h}_m \\ \vdots \\ \bar{h}_p \end{bmatrix}$$

$$\bar{h}_m = \frac{B_1}{A_1 - \ln\left\{(\alpha_{1,ps\_m}^P)/XX_{ps\_m}\right\}} - C_1, \quad 1 \leq m \leq p$$

$$XX_{ps\_m} = 1 + x_{1,ps\_m}(\alpha_{1,ps\_m} - 1)$$

onde  $ps\_m$  é o estágio da coluna onde o sensor  $m$  está posicionado.

- Matriz  $\bar{H}$  (matriz  $p \times n$ )

$$\bar{H} = \frac{\partial \bar{h}}{\partial X} = \begin{bmatrix} H_{1,1} & \cdots & H_{1,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{p,1} & \cdots & H_{p,n} \end{bmatrix}$$

$$H_{m,ps\_m} = \frac{\partial \bar{h}_m}{\partial x_{1,ps\_m}} = \frac{-B_1(\alpha_{1,ps\_m} - 1)}{XX_{ps\_m} \left\{ A_1 - \ln\left[ (\alpha_{1,ps\_m}^P)/XX_{ps\_m} \right] \right\}^2}, \quad 1 \leq m \leq p$$

Os demais elementos de  $\bar{H}$  são nulos.

### Sistemas Ternários

$$X = [x_{1,1} \cdots x_{1,j} \cdots x_{1,NP+1} \ x_{2,1} \cdots x_{2,j} \cdots x_{2,NP+1}]^T; \quad u = [L \ V]^T$$

$$x_{3,j} = 1.0 - x_{1,j} - x_{2,j}, \quad 1 \leq j \leq NP+1$$

$$\begin{bmatrix} \dot{x}_{1,1} \\ \vdots \\ \dot{x}_{1,j} \\ \vdots \\ \dot{x}_{1,NP+1} \\ \dot{x}_{2,1} \\ \vdots \\ \dot{x}_{2,j} \\ \vdots \\ \dot{x}_{2,NP+1} \end{bmatrix} = f(\mathbf{X}, \mathbf{u}) = \begin{bmatrix} f_{1,1}(\mathbf{X}, \mathbf{u}) \\ \vdots \\ f_{1,j}(\mathbf{X}, \mathbf{u}) \\ \vdots \\ f_{1,NP+1}(\mathbf{X}, \mathbf{u}) \\ f_{2,1}(\mathbf{X}, \mathbf{u}) \\ \vdots \\ f_{2,j}(\mathbf{X}, \mathbf{u}) \\ \vdots \\ f_{2,NP+1}(\mathbf{X}, \mathbf{u}) \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{X}_{k+1} = \mathbf{X}_k + \Delta t f(\mathbf{X}_k, \mathbf{u}_k) = \bar{f}(\mathbf{X}_k, \mathbf{u}_k) = \begin{bmatrix} \bar{f}_1 \\ \bar{f}_2 \\ \vdots \\ \bar{f}_j \\ \vdots \\ \bar{f}_{NP+1} \\ \bar{f}_{1+NP+1} \\ \bar{f}_{2+NP+1} \\ \vdots \\ \bar{f}_{j+NP+1} \\ \vdots \\ \bar{f}_{NP+1+NP+1} \end{bmatrix}$$

$$y_{i,j} = \frac{\alpha_{i,j} x_{i,j}}{1 + (\alpha_{2,j} - 1)x_{2,j} + (\alpha_{1,j} - 1)x_{1,j}}, \quad 1 \leq i \leq NC; 1 \leq j \leq NP + 1$$

$$Kv_{11,j} = \frac{\partial y_{1,j}}{\partial x_{1,j}} = \frac{\alpha_{1,j} [x_{2,j}(\alpha_{2,j} - 1) + 1]}{(XX_j)^2}$$

$$Kv_{22,j} = \frac{\partial y_{2,j}}{\partial x_{2,j}} = \frac{\alpha_{2,j} [x_{1,j}(\alpha_{1,j} - 1) + 1]}{(XX_j)^2}$$

$$Kv_{12,j} = \frac{\partial y_{1,j}}{\partial x_{2,j}} = \frac{-\alpha_{1,j} x_{1,j} (\alpha_{2,j} - 1)}{(XX_j)^2}$$

$$Kv_{21,j} = \frac{\partial y_{2,j}}{\partial x_{1,j}} = \frac{-\alpha_{2,j}x_{2,j}(\alpha_{1,j}-1)}{(XX_j)^2}$$

onde:  $XX_j = 1 + x_{2,j}(\alpha_{2,j} - 1) + x_{1,j}(\alpha_{1,j} - 1)$

- Matriz  $\bar{F}$  ( $n \times n$ ,  $n = 2(NP+1)$ )

$$\bar{F} = \frac{\bar{f}(X, u)}{\partial X} = \begin{bmatrix} F_{1,1} & \cdots & F_{1,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ F_{n,1} & \cdots & F_{n,n} \end{bmatrix}$$

$j = 1$ :

$$F_{1,1} = \frac{\partial \bar{f}_1}{\partial x_{1,1}} = 1 + \Delta t \left[ \frac{(L-V)Kv_{11,1} - L}{M_1} \right]$$

$$F_{1,2} = \frac{\partial \bar{f}_1}{\partial x_{1,2}} = \Delta t \left[ \frac{VKv_{11,2}}{M_1} \right]$$

$$F_{1,1+NP+1} = \frac{\partial \bar{f}_1}{\partial x_{2,1}} = \Delta t \left[ \frac{(L-V)Kv_{12,1}}{M_1} \right]$$

$$F_{1,2+NP+1} = \frac{\partial \bar{f}_1}{\partial x_{2,2}} = \Delta t \left[ \frac{VKv_{12,2}}{M_1} \right]$$

$$F_{1+NP+1,1} = \frac{\partial \bar{f}_{1+NP+1}}{\partial x_{1,1}} = \Delta t \left[ \frac{(L-V)Kv_{21,1}}{M_1} \right]$$

$$F_{1+NP+1,2} = \frac{\partial \bar{f}_{1+NP+1}}{\partial x_{1,2}} = \Delta t \left[ \frac{VKv_{21,2}}{M_1} \right]$$

$$F_{1+NP+1,1+NP+1} = \frac{\partial \bar{f}_{1+NP+1}}{\partial x_{2,1}} = 1 + \Delta t \left[ \frac{(L-V)Kv_{22,1} - L}{M_1} \right]$$

$$F_{1+NP+1,2+NP+1} = \frac{\partial \bar{f}_{1+NP+1}}{\partial x_{2,2}} = \Delta t \left[ \frac{VKv_{22,2}}{M_1} \right]$$

$2 \leq j \leq NP$ :

$$F_{j,j-1} = \frac{\partial \bar{f}_j}{\partial x_{1,j-1}} = \Delta t \left( \frac{L}{M_j} \right)$$

$$F_{j,j} = \frac{\partial \bar{f}_j}{\partial x_{1,j}} = I + \Delta t \left[ - \left( \frac{L + VKv_{11,j}}{M_j} \right) \right]$$

$$F_{j,j+1} = \frac{\partial \bar{f}_j}{\partial x_{1,j+1}} = \Delta t \left( \frac{VKv_{11,j+1}}{M_j} \right)$$

$$F_{j,j+NP+1} = \frac{\partial \bar{f}_j}{\partial x_{2,j}} = \Delta t \left( - \frac{VKv_{12,j}}{M_j} \right)$$

$$F_{j,j+1+NP+1} = \frac{\partial \bar{f}_j}{\partial x_{2,j+1}} = \Delta t \left( \frac{VKv_{12,j+1}}{M_j} \right)$$

$$F_{j+NP+1,j-1+NP+1} = \frac{\partial \bar{f}_{j+NP+1}}{\partial x_{2,j-1}} = \Delta t \left( \frac{L}{M_j} \right)$$

$$F_{j+NP+1,j+NP+1} = \frac{\partial \bar{f}_{j+NP+1}}{\partial x_{2,j}} = I + \Delta t \left[ - \left( \frac{L + VKv_{22,j}}{M_j} \right) \right]$$

$$F_{j+NP+1,j+1+NP+1} = \frac{\partial \bar{f}_{j+NP+1}}{\partial x_{2,j+1}} = \Delta t \left( \frac{VKv_{22,j+1}}{M_j} \right)$$

$$F_{j+NP+1,j} = \frac{\partial \bar{f}_{j+NP+1}}{\partial x_{1,j}} = \Delta t \left( - \frac{VKv_{21,j}}{M_j} \right)$$

$$F_{j+NP+1,j+1} = \frac{\partial \bar{f}_{j+NP+1}}{\partial x_{1,j+1}} = \Delta t \left( \frac{VKv_{21,j+1}}{M_j} \right)$$

$j = NP+1$ :

$$F_{NP+1,NP} = \frac{\partial \bar{f}_{NP+1}}{\partial x_{1,NP}} = \Delta t \left( \frac{L}{M_{NP+1}} \right)$$

$$F_{NP+1,NP+1} = \frac{\partial \bar{f}_{NP+1}}{\partial x_{1,NP+1}} = I + \Delta t \left[ \frac{-L + V - VKv_{11,NP+1}}{M_{NP+1}} \right]$$

$$F_{NP+1,NP+1+NP+1} = \frac{\partial \bar{f}_{NP+1}}{\partial x_{2,NP+1}} = \Delta t \left( - \frac{VKv_{12,NP+1}}{M_{NP+1}} \right)$$

$$F_{NP+I+NP+I, NP+I} = \frac{\partial \bar{f}_{NP+I+NP+I}}{\partial x_{1, NP+I}} = \Delta t \left( -\frac{VKV_{21, NP+I}}{M_{NP+I}} \right)$$

$$F_{NP+I+NP+I, NP+NP+I} = \frac{\partial \bar{f}_{NP+I+NP+I}}{\partial x_{2, NP}} = \Delta t \left( \frac{L}{M_{NP+I}} \right)$$

$$F_{NP+I+NP+I, NP+I+NP+I} = \frac{\partial \bar{f}_{NP+I+NP+I}}{\partial x_{2, NP+I}} = 1 + \Delta t \left[ \frac{-L + V - VKV_{22, NP+I}}{M_{NP+I}} \right]$$

Os demais elementos da matriz  $\bar{F}$  são nulos.

- Vetor  $\bar{h}$  ( $p \times 1$ ,  $p$  = número de sensores)

$$\bar{h} = \begin{bmatrix} \bar{h}_1 \\ \vdots \\ \bar{h}_m \\ \vdots \\ \bar{h}_p \end{bmatrix}$$

$$\bar{h}_m = \frac{B_3}{A_3 - \ln(P/XX_{ps\_m})} - C_3, \quad 1 \leq m \leq p$$

$$XX_{ps\_m} = 1 + x_{2, ps\_m}(\alpha_{2, ps\_m} - 1) + x_{1, ps\_m}(\alpha_{1, ps\_m} - 1)$$

onde  $ps\_m$  é o estágio da coluna onde o sensor  $m$  está posicionado.

- Matriz  $\bar{H}$  (matriz  $p \times n$ )

$$\bar{H} = \frac{\partial \bar{h}}{\partial X} = \begin{bmatrix} H_{1,1} & \cdots & H_{1,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{p,1} & \cdots & H_{p,n} \end{bmatrix}$$

$$H_{m, ps\_m} = \frac{\partial \bar{h}_m}{\partial x_{1, ps\_m}} = \frac{-B_3(\alpha_{1, ps\_m} - 1)}{XX_{ps\_m} \left\{ A_3 - \ln(P/XX_{ps\_m}) \right\}^2}, \quad 1 \leq m \leq p$$

$$H_{m, ps\_m+NP+I} = \frac{\partial \bar{h}_m}{\partial x_{2, ps\_m}} = \frac{-B_3(\alpha_{2, ps\_m} - 1)}{XX_{ps\_m} \left\{ A_3 - \ln(P/XX_{ps\_m}) \right\}^2}, \quad 1 \leq m \leq p$$

Os demais elementos de  $\bar{H}$  são nulos.

**ANEXO II: FLUXOGRAMA DO PROGRAMA DE  
AQUISIÇÃO DE DADOS E CONTROLE**

## ANEXO II: FLUXOGRAMA DO PROGRAMA DE AQUISIÇÃO DE DADOS E CONTROLE

