



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA – FEQ

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO
DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

LABORATÓRIO DE OTIMIZAÇÃO, PROJETO E CONTROLE AVANÇADO
(LOPCA)

CONTROLE E OTIMIZAÇÃO EM TEMPO REAL DE UM REATOR TRIFÁSICO

Autora: **Marcela G. Mota dos Santos**

MSc., UNICAMP, 2000

Orientador: **Prof. Dr. Rubens Maciel Filho**

Co-Orientador: **Dr. Eduardo Coselli Vasco de Toledo**

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

Campinas – São Paulo - Brasil
Fevereiro de 2006.

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

Sa59c Santos, Marcela G. Mota dos
Controle e otimização em tempo real de um reator
trifásico / Marcela G. Mota dos Santos.--Campinas, SP:
[s.n.], 2006.

Orientador: Rubens Maciel Filho.
Tese (Doutorado) - Universidade Estadual de
Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Otimização matemática. 2. Controle de processo.
3. Controle em tempo real. 4. Reatores químicos. 5.
Hidrogenação. 6. Planejamento experimental. I. Maciel
Filho, Rubens. II. Universidade Estadual de Campinas.
Faculdade de Engenharia Química. III. Título.

Titulo em Inglês: Real time optimization and control-three-phase slurry
reactor.

Palavras-chave em Inglês: Optimization mathematical, Process control,
Real-time control, Chemical reactor,
Hydrogenation, Design of experimENTS

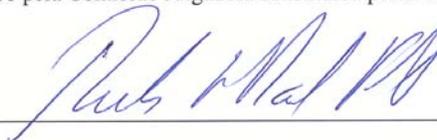
Área de concentração: Desenvolvimento de Processos Químicos

Titulação: Doutora em Engenharia Química

Banca examinadora: Cláudio Augusto Oller do Nascimento, Marlei
Barbosa Pasotto, Edinara Adelaide Boss, Delba Nisi
Cosme Melo

Data da defesa: 23/02/2006

Tese de doutorado defendida por Marcela G. Mota dos Santos e aprovada em 23 de Fevereiro de 2006 pela Comissão Julgadora constituída pelos doutores:



Prof. Dr. Rubens Maciel Filho

(Orientador)



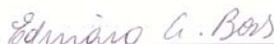
Prof. Dr. Cláudio Augusto Oller do Nascimento

(Titular)



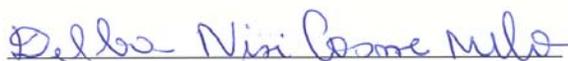
Prof. Dr. Marlei Barbosa Pasotto

(Titular)



Dra. Edinara Adelaide Boss

(Titular)



Dra. Delba Nisi Cosme Melo

(Titular)

Este exemplar corresponde à versão final da Tese de Doutorado em Engenharia
Química.

A handwritten signature in blue ink, appearing to read 'Rub Maciel Filho', is written over a horizontal line.

Prof. Dr. Rubens Maciel Filho

(Orientador)

*Dedico este trabalho aos meus pais,
Marlene e Wilson, meus irmãos,
Michele e Cristian, e a toda minha
família pelo apoio, sempre.*

Agradecimentos

Ao Prof. Dr. Rubens Maciel Filho pela orientação, em todos os aspectos, auxiliando sempre de forma competente e equilibrada no desenvolvimento deste trabalho.

Ao Dr, Eduardo Coselli Vasco de Toledo, amigo corinthiano Urso, que sempre esteve pronto a contribuir, sendo de extrema importância sua co-orientação e companheirismo.

Aos amigos do LOPCA, pelo ambiente agradável e senso de cooperação e união, fatores que, impreterivelmente, foram essenciais na jornada enfrentada para a conclusão deste trabalho.

Em especial, aos amigos, Delba, Edinara, Elenise, Paulinha, Aline, Mario, Vanessa, Martin, entre tantos outros, que seria impossível citar aqui.

Ao Prof. Wolfgang Marquardt e seu grupo de trabalho do LPT, RWTH-Aachen, que contribui muito para o desenvolvimento técnico deste trabalho no período em que me recebeu na Alemanha.

Às minhas amigas, Kelen e Luciana, que sempre estiveram presentes nos momentos em que mais precisei, longe ou perto, desde a época de graduação.

Aos meus amigos, Pastor e Rodrigo, companheiros que, mesmo à distância, sempre farão parte da minha história.

Aos meus companheiros de trabalho da Chemtech, que participaram da fase final de desenvolvimento desta tese.

Resumo

O objetivo principal deste trabalho foi a avaliação de estratégias de controle clássicas e hierárquicas em tempo real. Utilizou-se como estudo de caso a hidrogenação de o-cresol em reator de lama catalítico trifásico com catalisador sólido para validar as propostas de otimização em tempo real, devido à importância inerente deste tipo de processo, uma vez que reatores catalíticos trifásicos estão presentes em muitos processos das indústrias químicas, petroquímicas e afins, havendo uma preferência crescente em comparação com outros tipos de reatores mais convencionais.

Foi investigada neste trabalho a performance de algumas versões do algoritmo de controle avançado DMC (Dynamic Matrix Control) em sua forma quadrática (QDMC - Quadratic Dynamic Matrix Control) e adaptativa (STQDMC - Self Tuning Quadratic Dynamic Matrix Control) sob diferentes estratégias de controle (feedback, feedforward e mista). O processo foi representado através de modelos determinísticos e estatísticos. Foi proposta uma metodologia alternativa para a definição dos parâmetros ótimos do modelo para a faixa de operação válida para este estudo baseada em princípios de análise de superfícies de resposta.

Devido à importância de otimização dos processos para o alcance de objetivos operacionais e econômicos, foram também avaliadas estruturas de otimização em duas camadas, utilizando-se para este fim os algoritmos de otimização baseados nos procedimentos de Levenberg-Marquardt e SQP (Sequential Quadratic Programming). Foram propostas estruturas tradicionais de otimização em duas camadas, na qual o otimizador gera os set-points para o controlador, mas, além disso, foi proposta uma estrutura alternativa, na qual o otimizador, além de gerar os set-points para o controlador, envia também os valores ótimos para a variável manipulada, tornando este procedimento, na maioria dos casos, mais rápido e eficiente. Ainda no campo da otimização em tempo real, são apresentadas as bases matemáticas para a implementação de uma estrutura de otimização em uma camada, na qual os problemas de controle e otimização são resolvidos simultaneamente, sendo este procedimento sugerido como sugestão para trabalhos futuros.

Os estudos realizados neste trabalho permitiram concluir que a estratégia de otimização em duas camadas apresenta resultados satisfatórios. Além disso, sempre deve-se ter em mente os objetivos de controle e otimização para que se possa ponderar a utilização das estratégias de controle feedback ou feedforward, e até mesmo uma combinação entre as duas.

Palavras-Chave: Controle Avançado de Processos, Otimização em Tempo Real, Otimização em Duas Camadas, Hidrogenação.

Abstract

The principal objective of this work was the evaluation of classic and hierarchical control strategies in real time. It was used as case study the o-cresol hydrogenation in a three-phase slurry reactor with solid catalyst to validate the real time optimization approaches, due to the inherent importance of this process, since these reactors are present in many processes of the chemical and petrochemicals industries, with growing preference in comparison with other types of more conventional reactors.

It was investigated the performance of some versions of the advanced control algorithm DMC (Dynamic Matrix Control) in a quadratic (QDMC - Quadratic Dynamic Matrix Control) and adaptive (STQDMC - Self Tuning Quadratic Dynamic Matrix Control) form under different control strategies (feedback, feedforward and mixed). The process was represented through deterministic and statistical models. An alternative methodology was proposed for the definition of the optimal model parameters for the valid operational range based on principles of response surface analysis.

It was evaluated two-layers structure optimization, using optimization algorithms based on Levenberg-Marquardt and SQP (Sequential Quadratic Programming) procedures. Traditional two-layers optimization approaches were proposed. In this approach the optimizer generates the set-points for the controller. Besides, an alternative approach was proposed where the optimizer, besides generating the set-points for the controller, also sends the optimal values for the manipulated variables, becoming this procedure, in most of the cases, faster and efficient. In relation to real time optimization, the mathematical bases are presented for the one-layer optimization approach implementation. Here the control and optimization problems are simultaneously resolved.

According to this work, the two-layers optimization approach presents suitable results. Besides, it should always be considered the control and optimization objectives, in order to weight the feedback or feedforward control strategies and even a mixed one.

Key Words: Advanced Process Control, Real Time Optimization, Two-Layers Optimization, Hydrogenation.

ÍNDICE

1. INTRODUÇÃO E OBJETIVOS	1
1.1 INTRODUÇÃO	1
1.2 OBJETIVOS	6
1.3 ORGANIZAÇÃO DA TESE	7
2. PROCESSO DE HIDROGENAÇÃO DE O-CRESOL	9
2.1 INTRODUÇÃO	9
2.2 MODELO CINÉTICO	10
2.3 MODELO DINÂMICO	11
2.3.1 FASE FLUIDA	11
2.3.2 FASE SÓLIDA	13
2.4 CONCLUSÕES	14
3. ESTUDO DO COMPORTAMENTO DINÂMICO DO REATOR	15
3.1 INTRODUÇÃO	15
3.2 PERTURBAÇÃO DEGRAU NOS PARÂMETROS OPERACIONAIS	16
3.3 DESENVOLVIMENTO DO MODELO ESTATÍSTICO	25
3.4 CONCLUSÕES	34
4. CONTROLE DO PROCESSO	35
4.1 INTRODUÇÃO	35
4.2 PLANEJAMENTO PARA DEFINIÇÃO DOS PARÂMETROS DO CONTROLADOR	37
4.2.1 PLANEJAMENTO FATORIAL	39
4.2.2 AJUSTE DO MODELO	45
4.2.3 DETERMINAÇÃO DA SÉRIE ÓTIMA DOS PARÂMETROS	54
4.2.4 ANÁLISE DO DESEMPENHO DOS PARÂMETROS ÓTIMOS	55
4.3 ESTRATÉGIAS ALTERNATIVAS DE CONTROLE	60
4.3.1 CONTROLE FEEDBACK	60
4.3.2 CONTROLE FEEDFORWARD	63
4.3.3 CONTROLE FEEDBACK-FEEDFORWARD	66
4.3.4 RESULTADOS	67
4.4 CONCLUSÕES	83
5. OTIMIZAÇÃO EM DUAS CAMADAS	85
5.1 INTRODUÇÃO	85
5.2 ESTRATÉGIA TRADICIONAL DE OTIMIZAÇÃO EM DUAS CAMADAS	86

5.2.1	OTIMIZAÇÃO PELO MÉTODO DE LEVENBERG-MARQUARDT	87
5.2.2	OTIMIZAÇÃO PELO MÉTODO SQP	92
5.3	ESTRATÉGIA ALTERNATIVA DE OTIMIZAÇÃO EM DUAS CAMADAS	109
5.4	CONCLUSÕES	116
6.	<u>OTIMIZAÇÃO EM UMA CAMADA</u>	117
6.1	INTRODUÇÃO	117
6.2	FORMULAÇÃO MATEMÁTICA	119
6.3	CONCLUSÃO	123
7.	<u>CONCLUSÕES GERAIS E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS</u>	125
7.1	CONCLUSÕES GERAIS	125
7.2	SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	125
8.	<u>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</u>	127
	<u>APÊNDICE A – CONTROLE DMC</u>	135
A.1	CONTROLADORES PREDITIVOS E ADAPTATIVOS	135
A.1.1	ESTRATÉGIA DE CONTROLE	135
A.1.2	MODELO INTERNO	136
A.1.3	DMC	140
A.1.4	PARÂMETROS ENVOLVIDOS NO CONTROLADOR DMC	145
	<u>APÊNDICE B – ALGORITMO DE OTIMIZAÇÃO SQP</u>	148
B.1	INTRODUÇÃO	148
B.2	APLICAÇÕES	149
B.3	OTIMIZAÇÃO COM VARIÁVEIS CONTÍNUAS	151
B.4	RESOLUÇÃO DE UM PROBLEMA NLP	152
B.4.1	SÉRIE ATIVA VERSUS MÉTODOS DE BARREIRAS	153
B.4.2	INFORMAÇÕES DE SEGUNDA ORDEM	156
B.4.3	LINE SEARCH VERSUS MÉTODOS DE REGIÕES CONFIÁVEIS	157

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 - Sistema típico RTO baseado em modelo.	5
Figura 1.2 - Sistema RTO em malha fechada.	5
Figura 2.1 - Configuração do Reator Trifásico.	9
Figura 3.1 - Influência de $Agfo$ na conversão de o-cresol.	17
Figura 3.2 - Influência de $Agfo$ na temperatura de saída do reator.	18
Figura 3.3 - Influência de $Alfo$ na conversão de o-cresol.	18
Figura 3.4 - Influência de $Alfo$ na temperatura de saída do reator.	19
Figura 3.5 - Influência de $Blfo$ na conversão de o-cresol.	20
Figura 3.6 - Influência de $Blfo$ na temperatura de saída do reator.	20
Figura 3.7 - Influência de Tfo na conversão de o-cresol.	21
Figura 3.8 - Influência de Tfo na temperatura de saída do reator.	22
Figura 3.9 - Influência de Tr na conversão de o-cresol.	23
Figura 3.10 - Influência de Tr na temperatura de saída do reator.	23
Figura 3.11 - Diagrama esquemático da utilização da metodologia de planejamento fatorial.	26
Figura 3.12 – Gráfico de Pareto para conversão de o-cresol.	29
Figura 3.13 – Gráfico de Pareto para temperatura do reator.	29
Figura 3.14 - Comparação entre a predição da temperatura de saída do reator pelos modelos determinístico e estatístico.	33
Figura 4.1 - Diagrama esquemático da metodologia proposta para obtenção da série ótima de parâmetros do controlador.	38
Figura 4.2 - Superfície de resposta: tempo de amostragem \times convolução.	48
Figura 4.3 - Curvas de nível: tempo de amostragem \times convolução.	48
Figura 4.4 - Superfície de resposta: tempo de amostragem $\times \alpha$.	49
Figura 4.5 - Curvas de nível: tempo de amostragem $\times \alpha$.	49
Figura 4.6 - Superfície de resposta: tempo de amostragem $\times \lambda$.	50
Figura 4.7 - Curvas de nível: tempo de amostragem $\times \lambda$.	50
Figura 4.8 - Superfície de resposta: convolução $\times \alpha$.	51
Figura 4.9 - Curvas de nível: convolução $\times \alpha$.	51
Figura 4.10 - Superfície de resposta: convolução $\times \lambda$.	52
Figura 4.11 - Curvas de nível: convolução $\times \lambda$.	52
Figura 4.12 - Superfície de resposta: $\alpha \times \lambda$.	53
Figura 4.13 - Curvas de nível: $\alpha \times \lambda$.	53

Figura 4.14 - Manipulação de T_r para mudança de <i>set-point</i> .	56
Figura 4.15 - Manipulação de T_{fo} para mudança de <i>set-point</i> .	57
Figura 4.16 - Manipulação de T_r – Controle regulatório.	59
Figura 4.17 - Manipulação de T_{fo} – Controle regulatório.	59
Figura 4.18 - Configuração do controle <i>feedback</i> .	61
Figura 4.19 - Configuração do controle <i>feedforward</i> .	64
Figura 4.20 - Configuração do controle <i>feedback-feedforward</i> .	67
Figura 4.21 - Controle servo do reator - perturbação degrau em T_r .	68
Figura 4.22 - Controle regulatório do reator - perturbação degrau em T_{fo} .	69
Figura 4.23 - Análise da Estratégia Mista para o controle servo com T_{fo} como variável manipulada – Perfil de Temperatura.	70
Figura 4.24 - Análise da Estratégia Mista para o controle servo com T_{fo} como variável manipulada – Perfil da variável manipulada.	70
Figura 4.25 - Análise da Estratégia Mista para o controle servo com T_r como variável manipulada – Perfil de Temperatura.	71
Figura 4.26 - Análise da Estratégia Mista para o controle servo com T_r como variável manipulada – Perfil da variável manipulada.	71
Figura 4.27 - Análise da Estratégia Mista para o controle regulatório com T_{fo} como variável manipulada – Perfil de Temperatura.	73
Figura 4.28 - Análise da Estratégia Mista para o controle regulatório com T_{fo} como variável manipulada – Perfil da variável manipulada.	74
Figura 4.29 - Análise da Estratégia Mista para o controle regulatório com T_r como variável manipulada – Perfil de Temperatura.	75
Figura 4.30 - Análise da Estratégia Mista para o controle regulatório com T_r como variável manipulada – Perfil da variável manipulada.	75
Figura 4.31 - Controle servo do reator com T_{fo} como variável manipulada – Perfil da variável controlada.	77
Figura 4.32 - Controle servo do reator com T_{fo} como variável manipulada – Perfil da variável manipulada.	77
Figura 4.33 - Controle servo do reator com T_r como variável manipulada – Perfil da variável controlada.	79
Figura 4.34 - Controle servo do reator com T_r como variável manipulada – Perfil da variável manipulada.	79
Figura 4.35 - Controle regulatório do reator com T_{fo} como variável manipulada – Perfil da variável controlada.	81
Figura 4.36 - Controle regulatório do reator com T_{fo} como variável manipulada – Perfil da variável manipulada.	81
Figura 4.37 - Controle regulatório do reator com T_r como variável manipulada – Perfil da variável controlada.	82

Figura 4.38 - Controle regulatório do reator com T_r como variável manipulada – Perfil da variável manipulada.	82
Figura 5.1 - Estrutura de otimização em duas camadas.	85
Figura 5.2 - Otimização em duas camadas (Levenberg-Marquardt) com T_{fo} como variável manipulada – Perfil de conversão.	88
Figura 5.3 - Otimização em duas camadas (Levenberg-Marquardt) com T_{fo} como variável manipulada – Perfil de temperatura.	89
Figura 5.4 - Otimização em duas camadas (Levenberg-Marquardt) com T_{fo} como variável manipulada – Variável manipulada.	89
Figura 5.5 - Otimização em duas camadas (Levenberg-Marquardt) com T_r como variável manipulada – Perfil de conversão.	90
Figura 5.6 - Otimização em duas camadas (Levenberg-Marquardt) com T_r como variável manipulada – Perfil de temperatura.	91
Figura 5.7 - Otimização em duas camadas (Levenberg-Marquardt) com T_r como variável manipulada – Variável manipulada.	91
Figura 5.8 - Otimização em duas camadas (SQP) com T_{fo} como variável manipulada – Perfil de conversão.	94
Figura 5.9 - Otimização em duas camadas (SQP) com T_{fo} como variável manipulada – Perfil de temperatura.	94
Figura 5.10 - Otimização em duas camadas (SQP) com T_{fo} como variável manipulada – Variável manipulada.	95
Figura 5.11 - Otimização em duas camadas (SQP) com T_r como variável manipulada – Perfil de conversão.	95
Figura 5.12 - Otimização em duas camadas (SQP) com T_r como variável manipulada – Perfil de temperatura.	96
Figura 5.13 - Otimização em duas camadas (SQP) com T_r como variável manipulada – Variável manipulada.	96
Figura 5.14 - Otimização em duas camadas (SQP) com T_{fo} como variável manipulada – Perfil de conversão.	97
Figura 5.15 - Otimização em duas camadas (SQP) com T_{fo} como variável manipulada – Perfil de temperatura.	98
Figura 5.16 - Otimização em duas camadas (SQP) com T_{fo} como variável manipulada – Variável manipulada.	98
Figura 5.17 - Otimização em duas camadas (SQP) com T_r como variável manipulada – Perfil de conversão.	99
Figura 5.18 - Otimização em duas camadas (SQP) com T_r como variável manipulada – Perfil de temperatura.	99
Figura 5.19 - Otimização em duas camadas (SQP) com T_r como variável manipulada – Variável manipulada.	100

Figura 5.20 - Otimização em duas camadas (SQP) com T_{fo} como variável manipulada – Perfil de conversão.	101
Figura 5.21 - Otimização em duas camadas (SQP) com T_{fo} como variável manipulada – Perfil de temperatura.	102
Figura 5.22 - Otimização em duas camadas (SQP) com T_{fo} como variável manipulada – Variável manipulada.	102
Figura 5.23 - Otimização em duas camadas (SQP) com T_r como variável manipulada – Perfil de conversão.	103
Figura 5.24 - Otimização em duas camadas (SQP) com T_r como variável manipulada – Perfil de temperatura.	104
Figura 5.25 - Otimização em duas camadas (SQP) com T_r como variável manipulada – Variável manipulada.	104
Figura 5.26 - Otimização em duas camadas (SQP) com T_{fo} como variável manipulada – Perfil de conversão.	105
Figura 5.27 - Otimização em duas camadas (SQP) com T_{fo} como variável manipulada – Perfil de temperatura.	106
Figura 5.28 - Otimização em duas camadas (SQP) com T_{fo} como variável manipulada – Variável manipulada.	106
Figura 5.29 - Otimização em duas camadas (SQP) com T_r como variável manipulada – Perfil de conversão.	107
Figura 5.30 - Otimização em duas camadas (SQP) com T_r como variável manipulada – Perfil de temperatura.	108
Figura 5.31 - Otimização em duas camadas (SQP) com T_r como variável manipulada – Variável manipulada.	108
Figura 5.32 - Estratégia alternativa de otimização com T_{fo} como variável manipulada – Perfil de conversão.	110
Figura 5.33 - Estratégia alternativa de otimização com T_{fo} como variável manipulada – Perfil de temperatura.	111
Figura 5.34 - Estratégia alternativa de otimização com T_{fo} como variável manipulada – Perfil da variável manipulada.	111
Figura 5.35 - Estratégia alternativa de otimização com T_r como variável manipulada – Perfil de conversão.	112
Figura 5.36 - Estratégia alternativa de otimização com T_r como variável manipulada – Perfil de temperatura.	113
Figura 5.37 - Estratégia alternativa de otimização com T_r como variável manipulada – Perfil da variável manipulada.	113
Figura 5.38 - Estratégia alternativa de otimização com T_r como variável manipulada – Perfil de conversão.	114
Figura 5.39 - Estratégia alternativa de otimização com T_r como variável manipulada – Perfil de temperatura.	115

Figura 5.40 - Estratégia alternativa de otimização com Tr como variável manipulada – Perfil da variável manipulada.	115
Figura 6.1 - Estrutura de otimização em uma camada.	118
Figura A.1 - Estratégia de Predição de Longo Alcance.	140
Figura A.2 - Modelo de Entrada e Saída.	141
Figura A.3 - Modelo CARIMA.	145
Figura A.4 - Modelo CARMA.	145

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 - Parâmetros Cinéticos.	11
Tabela 3.1 - Parâmetros operacionais, de projeto e coeficientes de transferência de calor e massa.	16
Tabela 3.2 – Influência na conversão de o-cresol (efeitos percentuais).	24
Tabela 3.3 – Influência na temperatura de saída do reator (efeitos percentuais).	25
Tabela 3.4 – Parâmetros operacionais e níveis para o planejamento composto central.	27
Tabela 3.5 – Efeitos principais e interações entre os parâmetros operacionais (valores codificados) na conversão e na temperatura de saída do reator.	28
Tabela 3.6 – Análise de variância (ANOVA) ^a .	31
Tabela 3.7 – Coeficientes de regressão para o modelo estatístico (valores reais).	32
Tabela 3.8 - Comparação entre a predição da temperatura de saída do reator entre os modelos determinístico e estatístico.	34
Tabela 4.1 – Níveis utilizados para os parâmetros.	40
Tabela 4.2 – Matriz de coeficientes de contraste para um planejamento em estrela 2^6 (valores codificados).	41
Tabela 4.3 – Respostas observadas	43
Tabela 4.4 – Efeitos principais e aos pares (valores codificados).	45
Tabela 4.5 – Coeficientes de regressão para o modelo completo (valores reais).	46
Tabela 4.6 – Análise de variância (ANOVA).	46
Tabela 4.7 – Limites e estimativas iniciais para as variáveis de decisão.	55
Tabela 4.8 – Valores ótimos obtidos.	55
Tabela 4.9 – Comparação dos valores do critério de desempenho do controlador para situações de controle servo.	58
Tabela 4.10 – Comparação dos valores do critério de desempenho do controlador para situações de controle regulatório.	60
Tabela 4.11 - Comparação dos valores do critério de desempenho do controlador para estratégias de controle mistas – Controle servo.	72
Tabela 4.12 - Comparação dos valores do critério de desempenho do controlador para estratégias de controle mistas – Controle regulatório.	76
Tabela B.1 – Aplicações de programação matemática em engenharia de processos.	159

NOMENCLATURA

a	área interfacial, m^{-1} ;
A	concentração de hidrogênio, $kmol/m^3$;
B	concentração de o-cresol, $kmol/m^3$;
C_s	capacidade térmica, $kJ/kg.K$;
D_e	difusividade, m^2/s ;
D_t	diâmetro do reator, m;
h	coeficiente de transferência de calor, $kJ/m^2.s.K$;
k	constante cinética, $kmol/kg-cat.s$;
K	coeficiente de transferência de massa entre fases, cm/s ;
K_A	constante de equilíbrio de adsorção do hidrogênio, $m^3/kmol$;
K_B	constante de equilíbrio de adsorção do o-cresol, $m^3/kmol$;
L	comprimento do reator, m;
r_p	posição radial da partícula adimensional;
R_A	taxa de reação, $kmol/kg-cat.s$;
R_p	raio da partícula, m;
T	temperatura, K;
u	velocidade linear, m/s ;
U	coeficiente de transferência de calor global do reator, $kJ/m^2.s.K$;
z	posição axial do reator adimensional;
w	concentração de catalisador, $kgcat/m^3$.

Letras gregas

ΔH_R	Calor de reação, kJ/kmol;
λ	condutividade térmica, kJ/m.s.K;
ν	coeficiente estequiométrico;
ρ	densidade, kg/m ³ ;
ε	porosidade.

Subscritos

A	componente A;
B	componente B;
e	efetiva;
fo	alimentação;
g	fase gasosa;
gl	gás-líquido;
l	fase líquida;
ls	líquido-sólido;
i	Valor inicial (entrada do reator);
p	partícula;
r	fluido refrigerante;
s	sólido.

Sobrescrito

s	superfície da partícula;
*	soluto no líquido.

1. INTRODUÇÃO E OBJETIVOS

1.1 INTRODUÇÃO

Hoje em dia é importante levar em conta a necessidade de satisfazer questões relacionadas à qualidade e exigências de demanda mesmo na presença de várias incertezas e perturbações nos processos. Entre estas exigências pode-se citar a segurança, especificações de produto e restrições operacionais e econômicas, que devem ser satisfeitas juntamente com a procura do ponto ótimo de operação. Existe um significativo incentivo para o desenvolvimento de estratégias de otimização, especialmente as relacionadas à integração em tempo real. Na verdade, nos processos de larga escala, nos quais altas taxas de produção são comuns, até mesmo mínimos aumentos no desempenho podem trazer vantagens competitivas consideráveis para as unidades de produção.

Quando a planta está operando em condições satisfatórias de segurança, qualidade e taxa de produção, geralmente o desafio almejado passa a ser o alcance dos objetivos econômicos (lucro) pelo ajuste das variáveis operacionais. Quando as condições externas mudam freqüentemente, a otimização deve ser realizada em tempo real. Algumas vezes as causas das variações ocorrem por ruídos medidos e/ou perturbações estacionárias de alta freqüência. Mas, na maioria das vezes a otimização em tempo real de uma planta química é atrativa devido à redução na variabilidade causada pelas perturbações e mudanças nas condições de operação, ambientais e econômicas (Miletic e Marlin, 1998a).

De qualquer forma, a otimização de uma unidade de processo, seja ela realizada em um sistema *off-line* ou *on-line*, é uma tarefa difícil e complexa. Os procedimentos essenciais são os seguintes, independente do sistema utilizado: os modelos do processo devem ser desenvolvidos e validados; a posição atual do processo deve ser estabelecida para determinar parâmetros do modelo e a relação das variáveis para várias restrições físicas e de processo; o sistema de controle deve implementar a nova série de condições operacionais; e finalmente, a validade das novas condições deve ser estabelecida.

O atual interesse industrial na otimização de processos, particularmente em otimização de plantas em tempo real (RTO), tem sido estimulado pelo aumento da competitividade global, custos operacionais e o fortalecimento das exigências de qualidade de produtos (Cutler e Perry, 1983; Darby e White, 1988). O sistema RTO fornece a ponte entre o *scheduling* da planta (que considera um inventário de longo prazo, a alimentação do processo e a carga de produtos), e o sistema de controle (que considera qualidade de produtos de curto prazo e segurança operacional do processo).

Segundo Pistikopoulos et al. (2000), os benefícios da otimização *on-line*, do ponto de vista de custos e eficiência de operações, vêm sendo considerados pelos engenheiros de processos. Ainda na década de oitenta, Cutler e Perry (1983) já identificavam que estes benefícios atingiam de 6-10% do valor agregado de um determinado processo. A otimização em tempo real, além de fornecer o ponto ótimo para a saída da planta, também leva em conta várias violações de restrições enquanto simultaneamente considera o estado atual e o histórico da planta para prever futuras ações corretivas. Mesmo sendo consideráveis os benefícios de otimização *on-line*, sua aplicação ainda é restrita, considerando seu lucro potencial, principalmente devido à grande exigência computacional em tempo real que envolve uma solução repetitiva de um problema de otimização em intervalos de tempo regulares.

Durante a otimização de uma planta química existente, a otimização em estado estacionário *on-line* periódica e o controle *feedback* avançado devem participar juntamente para melhorar o lucro através dos ajustes nas condições operacionais (Cutler e Perry, 1983; Darby e White, 1988). Os resultados da otimização são usados para melhorar a operação do processo e direcionar as ações de controle, enquanto obedecem a uma série de limites operacionais pré-definidos. Desta forma, as medidas do processo são usadas como *feedback* para atualizar informações necessárias para o próximo ciclo de otimização. As metodologias utilizadas para otimizar operações de processos usualmente diferem na maneira como realizam o cálculo de otimização e como utilizam as informações *feedback* da planta. Diferentes técnicas de otimização *on-line* podem ser classificadas em duas categorias gerais: busca direta e otimização baseada em modelo (Forbes et

al., 1994; Miletic e Marlin, 1998a). Algumas desvantagens, tal como ineficiência, perturbações e sensibilidade a ruídos, têm desencorajado o maior desenvolvimento de métodos de busca direta (Zhang e Roberts, 1990). Para trabalhar com sistemas de otimização em grande escala e tirar vantagem dos progressos alcançados nas técnicas matemáticas e computacionais, utiliza-se a otimização *on-line* baseada em modelo, chamada também de otimização em tempo real (RTO).

A RTO é a camada intermediária de um sistema de controle *feedback* hierárquico que mantém a operação da planta num estado estacionário ótimo eficaz pelo ajuste de variáveis de processo selecionadas. O sistema RTO está sob supervisão da camada de planejamento/*scheduling* que determina o objetivo econômico de longo prazo. Ao mesmo tempo, ele conduz a camada inferior de controle do processo pela geração dos *set-points* modificados em tempo real. Um sistema típico de otimização em tempo real baseado em modelo em malha fechada inclui vários módulos com diferentes funções: (1) validação de dados, (2) atualização do modelo, (3) otimização econômica, e (4) análise de resultados. Todos os componentes são realizados em ciclos sucessivos de operação em estado estacionário, e cada metodologia RTO aplica diferentes tecnologias nestes componentes. A validação de dados, incluindo detecção de mudanças no estado estacionário, detecção de erros grosseiros, e reconciliação de dados (Crowe, 1996; Narasimhan e Jordache, 2000), é usada para validar medidas para a atualização do modelo. Para a atualização bem sucedida do modelo assim como para produzir informações *feedback* essenciais para RTO pela atualização de uma série de parâmetros do modelo é necessário que se tenham medidas confiáveis. Como os modelos em estado estacionário para plantas químicas são compostos geralmente por uma série de equações algébricas não lineares, algoritmos de programação não linear (Edgar e Himmelblau, 1988) são necessários para resolver a otimização baseada em modelo. A análise de resultados envolve avaliações estatísticas adicionais dos resultados da otimização antes que os valores sejam transmitidos para o nível de controle (Miletic e Marlin, 1998a), evitando, com isso, ações desnecessárias.

Não se pode deixar de citar que, na otimização baseada em modelo, erros na planta e/ou modelo são inevitáveis devido aos erros de modelagem, perturbações e mudanças ambientais. A atualização periódica é geralmente usada para melhorar o modelo de modo que melhor represente a planta nas condições operacionais atuais.

Como mostrado na Figura 1.1, os sistemas RTO baseados em modelos são compostos por subsistemas para validação de dados, atualização do modelo do processo, otimização baseada no modelo e condicionamento do comando do otimizador (Darby e White, 1988). O projeto de cada subsistema associa-se a uma série de decisões que afetam o eventual sucesso do sistema RTO global. Algumas das mais importantes decisões de projeto incluem seleção de medidas, parâmetros de particionamento do modelo que serão atualizados *on-line* ou fixados como constantes, estrutura do modelo, métodos de atualização do modelo e métodos de análise da função objetivo.

Em uma hierarquia de controle da planta, perturbações de alta frequência são controladas enquanto o sistema RTO rastreia as mudanças nas condições ótimas de operação causadas por perturbações de baixa frequência (Zhang e Forbes, 2000). Um sistema de RTO em malha fechada é apresentado na Figura 1.2. Quando a operação da planta alcança o estado estacionário, os dados da planta (z) são reunidos e validados para evitar erros grosseiros nas medidas do processo e, ao mesmo tempo, as medidas podem ser reconciliadas usando balanços de massa e energia para garantir que a série de dados usada para a atualização do modelo seja consistente. Estas medidas validadas (z^*) são usadas para estimar os parâmetros do modelo (β) e garantir que a representação da planta seja feita da maneira mais precisa possível. Então, os *set-points* ótimos (x_m^*) são calculados pelo otimizador usando o modelo atualizado, e são transferidos para os controladores avançados depois de checados pelo subsistema de condicionamento de comando.

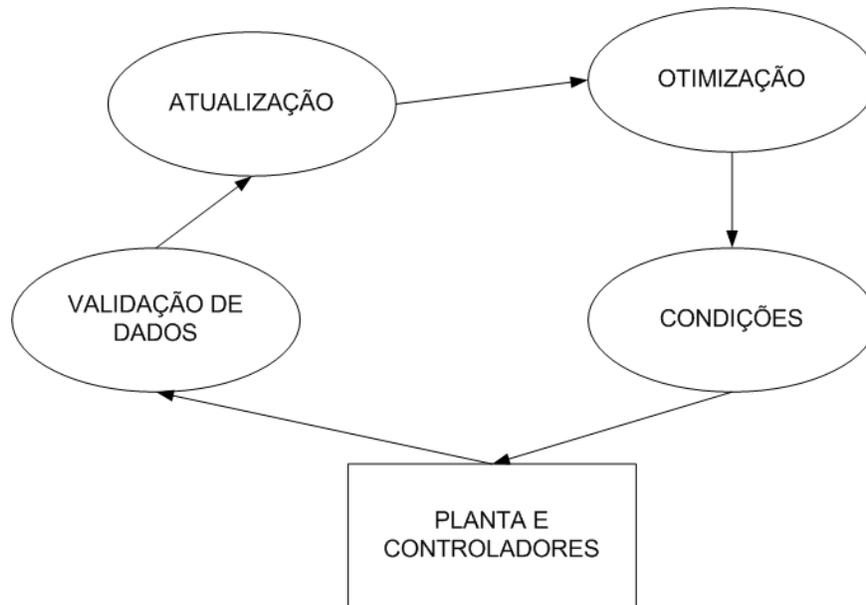


Figura 1.1 - Sistema típico RTO baseado em modelo.

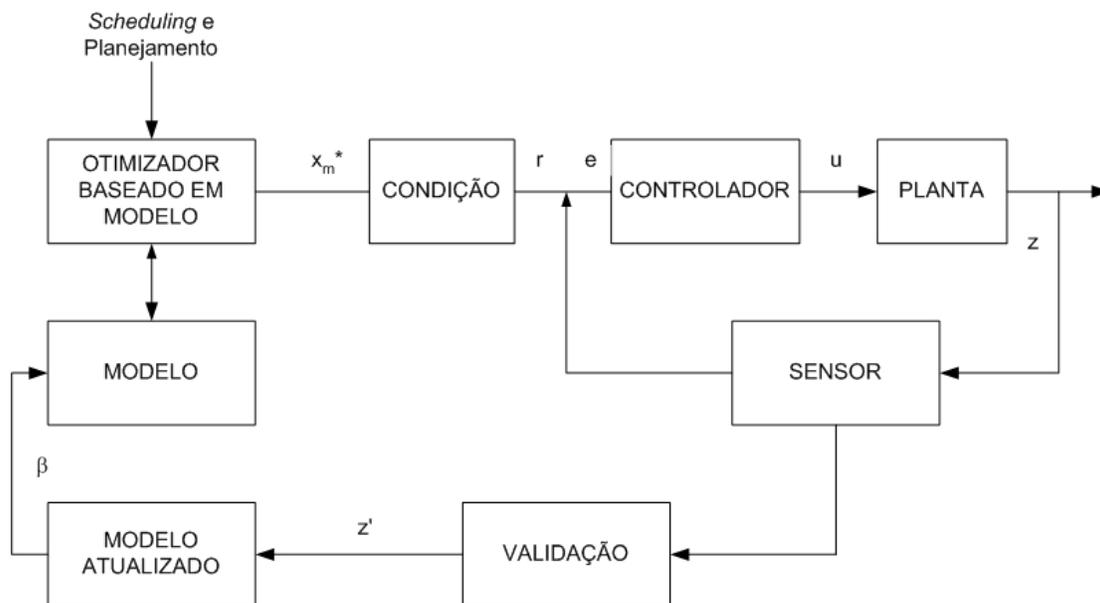


Figura 1.2 - Sistema RTO em malha fechada.

Recentes desenvolvimentos apresentados na literatura têm mantido o foco na maioria dos componentes da malha de um RTO:

- a) seleção de sensores: Krishnan et al, 1992; Fraleigh et al., 1998.
- b) validação das medidas: Tamhane e Mah, 1985; Crowe, 1988; Tjoa e Biegler, 1991; Albuquerque e Biegler, 1996; Tong e Crowe, 1997; e sua integração com estimativa de parâmetros: Kim et al., 1997.

- c) adequação de modelo: Durbeck, 1965; Biegler et al., 1985; Forbes et al., 1994, e compensação de erros no modelo/planta: Golden e Ydstie, 1989; McFarlane e Bacon, 1989; Zhang e Roberts, 1991.
- d) análise de resultados: Nadler e Forbes, 1997; Miletic e Marlin, 1998b.

Dentre as etapas apresentadas acima, esta pesquisa tem por objetivo trabalhar principalmente nas camadas de otimização e controle, realizadas em tempo real em uma e duas camadas.

Inicialmente é realizado o estudo investigativo da estrutura de otimização em duas camadas para um reator de lama catalítico trifásico a fim de determinar as condições ótimas de operação, e avaliar o desempenho de estratégias de controle digital. A idéia é definir a faixa operacional ótima ou os *set-points* na camada de otimização e então usá-los na camada de controle avançado. Outra etapa prevista é usar a estrutura em uma camada, na qual o problema de otimização é resolvido simultaneamente com o de controle.

1.2 OBJETIVOS

O objetivo deste trabalho de doutorado é a avaliação de estratégias de otimização e controle clássicas e hierárquicas em tempo real. Para isso, escolheu-se como estudo de caso a hidrogenação de o-cresol em reator de lama catalítico trifásico, com catalisador sólido. Serão avaliadas as estruturas de otimização em uma e duas camadas, utilizando os algoritmos de otimização baseados nos procedimentos de Levenberg-Marquardt e SQP (*Sequential Quadratic Programming*), e algumas versões do algoritmo de controle DMC (*Dynamic Matrix Control*).

Para que se possa alcançar o objetivo deste trabalho, é necessário que se cumpram alguns objetivos específicos que envolvem, de maneira geral:

- o estudo do comportamento dinâmico do reator de lama catalítico trifásico;
- a implementação do controlador avançado baseado no DMC, definição de seus parâmetros ótimos de ajuste e estudo de diferentes estratégias clássicas de controle (*feedback*, *feedforward* e mista);

- a definição dos problemas de otimização que serão resolvidos pelos métodos de Levenberg-Marquardt e SQP;
- a implementação de estruturas de otimização em uma e duas camadas, nas quais os objetivos de controle e otimização são resolvidos, respectivamente, de maneira simultânea ou seqüencial.

1.3 ORGANIZAÇÃO DA TESE

Depois da apresentação dos objetivos deste trabalho e de um preâmbulo mencionando alguns tópicos sobre otimização, apresentado neste capítulo, no Capítulo 2 será apresentado o estudo de caso escolhido para a implementação das técnicas propostas neste trabalho. Depois disso é realizado o estudo do comportamento dinâmico do reator de hidrogenação de o-cresol, apresentado no Capítulo 3. Este estudo é importante para a definição das melhores estratégias de controle e otimização que serão usadas. Além disso, este capítulo apresenta o desenvolvimento do modelo estatístico do reator em questão, através da metodologia de planejamento fatorial que, além de explicar a influência das variáveis nas respostas analisadas, será usado numa estratégia alternativa de controle aliado à otimização.

Conhecendo-se bem o comportamento dinâmico do reator, o Capítulo 4 apresenta os resultados obtidos a partir da utilização do algoritmo de controle baseado nos conceitos do controlador QDMC (*Quadratic Dynamic Matrix Control*), além de sua forma adaptativa STQDMC (*Self Tuning Quadratic Dynamic Matrix Control*), e com as estratégias de controle *feedback*, *feedforward* e mista, utilizando para isso os modelos determinístico e estatístico. Neste capítulo também é apresentada uma metodologia de ajuste de parâmetros do controlador, o que tornará menos complexa a integração dos procedimentos de controle e otimização, evitando uma camada de estimativa de parâmetros.

No Capítulo 5 é apresentada a estrutura de otimização tradicional em duas camadas, na qual o otimizador gera os *set-points* para o controlador. Para isso são explorados os algoritmos de Levenberg-Marquardt e SQP (*Sequential Quadratic Programming*).

Ainda utilizando a estrutura hierárquica em duas camadas, no Capítulo 5 são apresentados os resultados obtidos com a proposta alternativa, na qual o otimizador gera, além dos *set-points*, a variável manipulada para o controlador, tornando o procedimento mais rápido e eficiente.

No Capítulo 6 são apresentadas as bases teóricas para a implementação da estrutura de otimização em uma camada, na qual os problemas de otimização e controle são resolvidos simultaneamente.

O Apêndice A traz as bases teóricas dos controladores do tipo DMC e no Apêndice B é mostrada uma revisão dos métodos para resolução dos problemas de otimização, dando ênfase ao algoritmo SQP.

2. PROCESSO DE HIDROGENAÇÃO DE O-CRESOL

2.1 INTRODUÇÃO

Os reatores catalíticos trifásicos estão presentes em muitos processos das indústrias químicas, petroquímicas e afins, havendo uma preferência crescente em comparação com outros tipos de reatores mais convencionais. Diante disso, foi escolhido como estudo de caso deste trabalho um processo de hidrogenação trifásica para validar as propostas de otimização em tempo real, devido à importância inerente deste tipo de processo.

Neste capítulo é apresentado o modelo matemático desenvolvido para representar os principais fenômenos que ocorrem no reator de hidrogenação de o-cresol, que é utilizado como estudo de caso neste trabalho. O modelo consiste de equações de balanços de massa e energia para os reagentes e o fluido refrigerante, cujo esquema da configuração do reator é apresentado na Figura 2.1.

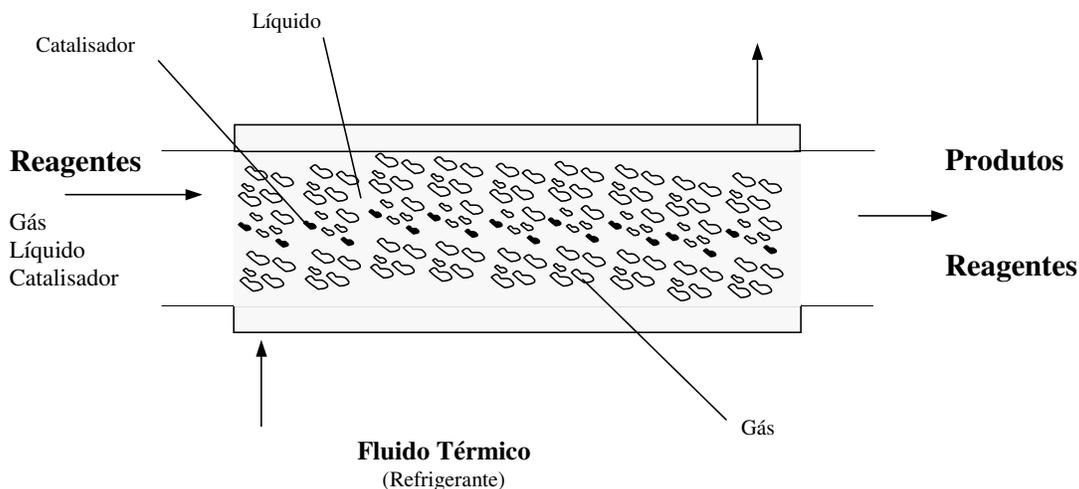
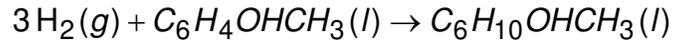


Figura 2.1 - Configuração do Reator Trifásico.

Embora seja usual na modelagem de reatores trifásicos desconsiderar as equações para a partícula devido às suas dimensões reduzidas, tipicamente encontradas na prática, neste trabalho elas são consideradas explicitamente, visando introduzir o comportamento dinâmico do reator de forma mais precisa.

2.2 MODELO CINÉTICO

O modelo cinético utilizado como caso de estudo foi o da reação de hidrogenação do o-cresol produzindo 2-metil-ciclohexanol, realizada em um reator de lama agitado e utilizando catalisador à base de níquel (Ni/SO₂) proposto por Hichri et al. (1991). A estequiometria da reação pode ser representada por:



ou



que é a representação genérica de uma reação de hidrogenação trifásica. Neste caso, *A* representa o hidrogênio, *B* representa o-cresol e *C* o 2-metil-ciclohexanol; ν é o coeficiente estequiométrico (igual a 1/3).

O modelo cinético proposto por Hichri et al. (1991) considera que hidrogênio e o-cresol são adsorvidos em sítios ativos diferentes, sem dissociação de hidrogênio, e sendo a reação superficial o passo limitante da taxa de reação (Santana, 1995). Obteve-se, então, a seguinte expressão para a taxa de reação:

$$R_A = k \frac{K_A K_B C_A C_B}{(1 + K_A C_A)(1 + K_B C_B)} \quad (2.1)$$

sendo C_A a concentração de hidrogênio (kmol/m³), C_B a concentração de o-cresol (kmol/m³), k a constante cinética (kmol/kg-cat.s), K_A a constante do equilíbrio de adsorção do hidrogênio (m³/kmol), K_B a constante do equilíbrio de adsorção do o-cresol (m³/kmol) e R_A a taxa de reação (kmol/kg-cat.s).

As constantes são funções de temperatura, conforme as seguintes relações (do tipo lei de Arrhenius), Hichri et al. (1991):

$$k = A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (2.2)$$

$$K_A = A_1 \exp\left(-\frac{E_1}{RT}\right) \quad (2.3)$$

$$K_B = A_2 \exp\left(-\frac{E_2}{RT}\right) \quad (2.4)$$

Nas expressões acima A é o fator pré-exponencial, E é a energia de ativação, T é a temperatura absoluta e R é a constante universal dos gases perfeitos. Os valores das constantes são apresentados na Tabela 2.1.

Tabela 2.1 - Parâmetros Cinéticos.

$A = 5.4 \times 10^5$	$E = 82220$
$A_1 = 10.55$	$E_1 = 5003$
$A_2 = 7.54 \times 10^{-3}$	$E_2 = 16325$

2.3 MODELO DINÂMICO

As seguintes hipóteses foram adotadas no desenvolvimento do modelo estudado para representar o comportamento dinâmico do reator, Vasco de Toledo et al. (2001):

- escoamento empistonado (*plug flow*) para o fluido reagente e térmico;
- variações de pressão desprezíveis;
- reação do tipo $A(g) + \nu B(l) \rightarrow \nu C(l)$, acontecendo no catalisador e com uma cinética dependente das concentrações de A e B;
- não acontece mudança de fase no sistema.

A formulação do modelo consiste em escrever as equações que descrevem os balanços de massa e energia respectivamente para a fase fluida e sólida, Vasco de Toledo (2000).

2.3.1 FASE FLUIDA

Balanço de massa do reagente A na fase gasosa:

$$\varepsilon_g \frac{\partial A_g}{\partial t} = \frac{D_{eg}}{L^2} \frac{\partial^2 A_g}{\partial z^2} - \frac{u_g}{L} \frac{\partial A_g}{\partial z} - (K_{gl})_A a_{gl} (A^* - A_l) \quad (2.5)$$

$$\left. \frac{D_{eg}}{L} \frac{\partial A_g}{\partial z} \right|_{z=0} = u_g (A_g - A_{gfo}) \quad (2.6)$$

$$\left. \frac{\partial A_g}{\partial z} \right|_{z=1} = 0 \quad (2.7)$$

Balanco de massa do reagente A na fase líquida:

$$\varepsilon_l \frac{\partial A_l}{\partial t} = \frac{D_{el}}{L^2} \frac{\partial^2 A_l}{\partial z^2} - \frac{u_l}{L} \frac{\partial A_l}{\partial z} + (K_{gl})_A a_{gl} (A^* - A_l) - (K_{ls})_A a_{ls} (A_l - A_s^s) \quad (2.8)$$

$$\left. \frac{D_{el}}{L} \frac{\partial A_l}{\partial z} \right|_{z=0} = u_l (A_l - A_{lfo}) \quad (2.9)$$

$$\left. \frac{\partial A_l}{\partial z} \right|_{z=1} = 0 \quad (2.10)$$

Balanco de massa do reagente B na fase líquida:

$$\varepsilon_l \frac{\partial B_l}{\partial t} = \frac{D_{el}}{L^2} \frac{\partial^2 B_l}{\partial z^2} - \frac{u_l}{L} \frac{\partial B_l}{\partial z} - (K_{ls})_B a_{ls} (B_l - B_s^s) \quad (2.11)$$

$$\left. \frac{D_{el}}{L} \frac{\partial B_l}{\partial z} \right|_{z=0} = u_l (B_l - B_{lfo}) \quad (2.12)$$

$$\left. \frac{\partial B_l}{\partial z} \right|_{z=1} = 0 \quad (2.13)$$

Balanco de energia na fase fluida:

$$\begin{aligned} (\varepsilon_g \rho_g C_{pg} + \varepsilon_l \rho_l C_{pl}) \frac{\partial T}{\partial t} &= \frac{(\varepsilon_g \lambda_g + \varepsilon_l \lambda_l)}{L^2} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} - \\ &- \frac{(\varepsilon_g \rho_g C_{pg} u_g + \varepsilon_l \rho_l C_{pl} u_l)}{L} \frac{\partial T}{\partial z} + h_s a_{ls} (T_s^s - T) - \frac{4U}{D_t} (T - T_r) \end{aligned} \quad (2.14)$$

$$\left. \frac{(\varepsilon_g \lambda_g + \varepsilon_l \lambda_l)}{L} \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=0} = (\varepsilon_g \rho_g C_{pg} u_g + \varepsilon_l \rho_l C_{pl} u_l) (T - T_{fo}) \quad (2.15)$$

$$\left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=1} = 0 \quad (2.16)$$

2.3.2 FASE SÓLIDA

Balanco de massa do reagente A na fase sólida:

$$\varepsilon_S \frac{\partial A_S}{\partial t} = \frac{D_{ea}}{R_p^2} \frac{1}{r_p^2} \frac{\partial}{\partial r_p} \left(r_p^2 \frac{\partial A_S}{\partial r_p} \right) - \rho_S R_W(A_S, B_S, T_S) \quad (2.17)$$

$$\left. \frac{D_{ea}}{R_p} \frac{\partial A_S}{\partial r_p} \right|_{r_p=1} = (K_{IS})_A \left(A_I - A_S^S(r_p=1) \right) \quad (2.18)$$

$$\left. \frac{\partial A_S}{\partial r_p} \right|_{r_p=0} = 0 \quad (2.19)$$

Balanco de massa do reagente B na fase sólida:

$$\varepsilon_S \frac{\partial B_S}{\partial t} = \frac{D_{eb}}{R_p^2} \frac{1}{r_p^2} \frac{\partial}{\partial r_p} \left(r_p^2 \frac{\partial B_S}{\partial r_p} \right) - \nu \rho_S u_I R_W(A_S, B_S, T_S) \quad (2.20)$$

$$\left. \frac{D_{eb}}{R_p} \frac{\partial B_S}{\partial r_p} \right|_{r_p=1} = (K_{IS})_B \left(B_I - B_S^S(r_p=1) \right) \quad (2.21)$$

$$\left. \frac{\partial B_S}{\partial r_p} \right|_{r_p=0} = 0 \quad (2.22)$$

Balanco de energia da fase sólida:

$$\rho_S C_{PS} \frac{\partial T_S}{\partial t} = \frac{\lambda_S}{R_p^2} \frac{1}{r_p^2} \frac{\partial}{\partial r_p} \left(r_p^2 \frac{\partial T_S}{\partial r_p} \right) + \rho_S (-\Delta H_R) R_W(A_S, B_S, T_S) \quad (2.23)$$

$$\left. \frac{\lambda_S}{R_p} \frac{\partial T_S}{\partial r_p} \right|_{r_p=1} = h_S \left(T - T_S^S(r_p=1) \right) \quad (2.24)$$

$$\left. \frac{\partial T_S}{\partial r_p} \right|_{r_p=0} = 0 \quad (2.25)$$

2.4 CONCLUSÕES

Neste capítulo foram apresentados os modelos dinâmico e cinético do processo de hidrogenação de o-cresol em reator de lama trifásico.

A literatura indica que a predição destes modelos é satisfatória, representando de maneira fiel o comportamento dos reatores de hidrogenação.

No entanto, no próximo capítulo será realizado o estudo do comportamento dinâmico deste reator, e também será desenvolvido o modelo estatístico a partir da metodologia de planejamento fatorial.

3. ESTUDO DO COMPORTAMENTO DINÂMICO DO REATOR

3.1 INTRODUÇÃO

Neste capítulo é apresentado o estudo do comportamento dinâmico do reator de hidrogenação de o-cresol, assim como o desenvolvimento do modelo estatístico que será utilizado na estratégia alternativa de otimização em duas camadas. Vale lembrar que a descrição detalhada do modelo dinâmico encontra-se no Capítulo 2.

Foram realizadas perturbações degrau nos parâmetros operacionais a fim de verificar suas influências nas variáveis de saída que serão utilizadas nos objetivos relacionados ao controle. As variáveis independentes consideradas foram as concentrações e temperatura de alimentação dos reagentes e a temperatura do fluido refrigerante. As variáveis de saída analisadas foram a conversão de o-cresol e a temperatura de saída do reator.

Os valores-base dos parâmetros operacionais, de projeto e coeficientes de transferência de calor e massa para o modelo utilizado são mostrados na Tabela 3.1 (Santana, 1995 e 1999; Deckwer, 1992).

Também foi desenvolvido o modelo estatístico do processo através da metodologia de planejamento fatorial que, além de explicar a influência das variáveis nas respostas analisadas, será usado numa estratégia alternativa de controle aliado à otimização.

Tabela 3.1 - Parâmetros operacionais, de projeto e coeficientes de transferência de calor e massa.

$u_g = 1,8 \text{ m/s}$	$(K_{ls})_A a_{ls} = 5,6 \text{ s}^{-1}$
$u_l = 0,008 \text{ m/s}$	$(K_{ls})_B a_{ls} = 3,0 \text{ s}^{-1}$
$L = 2,0 \text{ m}$	$h_s a_{ls} = 40 \text{ kJ/m}^3 \text{ K}$
$D_t = 0,154 \text{ m}$	$D_{eA} = 5,16 \times 10^{-8} \text{ m}^2 / \text{s}$
$A^* = 1,5 \times 10^{-2} \text{ kmol/m}^3$	$D_{eB} = 9,7 \times 10^{-8} \text{ m}^2 / \text{s}$
$A_{gfo} = 1,5 \times 10^{-2} \text{ kmol/m}^3$	$\lambda_s = 3,47 \times 10^{-4} \text{ kJ/m s K}$
$A_{lfo} = 1,1 \times 10^{-2} \text{ kmol/m}^3$	$\Delta H_R = -66700 \text{ kJ/kmol}$
$B_{lfo} = 2,4 \times 10^{-1} \text{ kmol/m}^3$	$R_p = 2 \times 10^{-5} \text{ m}$
$Tfo = 540 \text{ K}$	$C_{ps} = 0,15 \text{ kJ/kg K}$
$w = 150 \text{ kg/m}^3$	$\rho_s = 3400 \text{ kg/m}^3$
$C_{pl} = 2,4 \text{ kJ/kg K}$	$u_r = 3 \text{ m/s}$
$C_{pg} = 14 \text{ kJ/kg K}$	$C_{pr} = 3,4 \text{ kJ/kg K}$
$\rho_l = 400 \text{ kg/m}^3$	$Tr = 500 \text{ K}$
$\rho_g = 0,04 \text{ kg/m}^3$	$U = 0,08 \text{ kJ/m}^2 \text{ s K}$
$(K_{gl})_A a_{gl} = 0,8 \text{ s}^{-1}$	$\varepsilon = 0,95588$

3.2 PERTURBAÇÃO DEGRAU NOS PARÂMETROS OPERACIONAIS

Para que as estratégias de controle e otimização sejam definidas deve-se compreender adequadamente o comportamento dinâmico do reator. Por isso foram realizadas perturbações degrau em alguns parâmetros operacionais e observadas as influências dessas perturbações nas variáveis dependentes do reator trifásico que estão intimamente ligadas aos objetivos de controle e otimização. Esse procedimento também permite a identificação das variáveis

independentes que apresentam melhor potencial para serem usadas como variáveis manipuladas nas estratégias de controle.

A Figura 3.1 e a Figura 3.2 mostram, respectivamente, os perfis da conversão de o-cresol (X) e da temperatura de saída do reator (T) frente a perturbações degrau na concentração de hidrogênio na fase gasosa (Agfo). O que se pode observar é que as perturbações nesta variável exercem relativa influência na conversão de o-cresol, mas nenhuma influência na temperatura de saída do reator. Outro fato que se observa é o comportamento de 2ª ordem na temperatura, mostrando também a não linearidade do processo, evidenciada pelo comportamento não simétrico quando se perturba o parâmetro operacional positiva e negativamente.

Um fato a se ressaltar é a precisão da instrumentação utilizada para as medições. Como este trabalho é baseado em simulações, este fator não é considerado. No entanto, existem limitações com relação aos instrumentos utilizados na prática. No caso da temperatura, por exemplo, Figura 3.2, é provável que o indicador não apresente precisão suficiente para detectar os perfis apresentados.

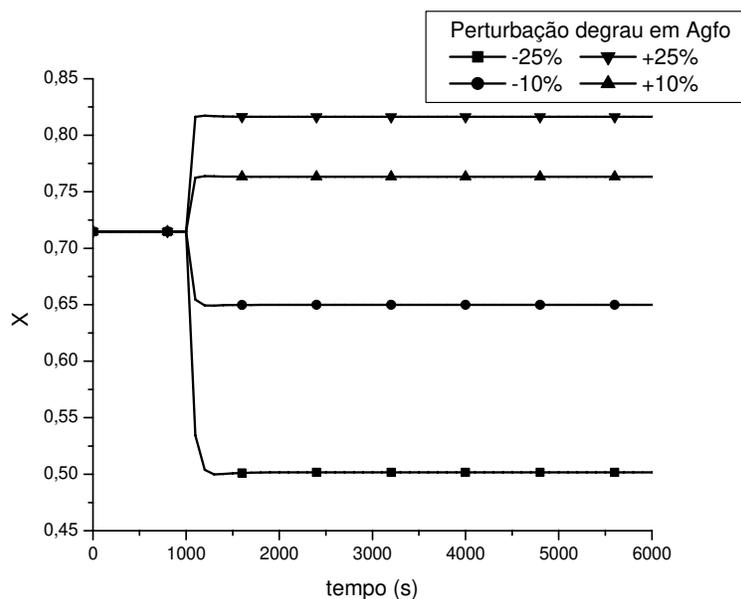


Figura 3.1 - Influência de Agfo na conversão de o-cresol.

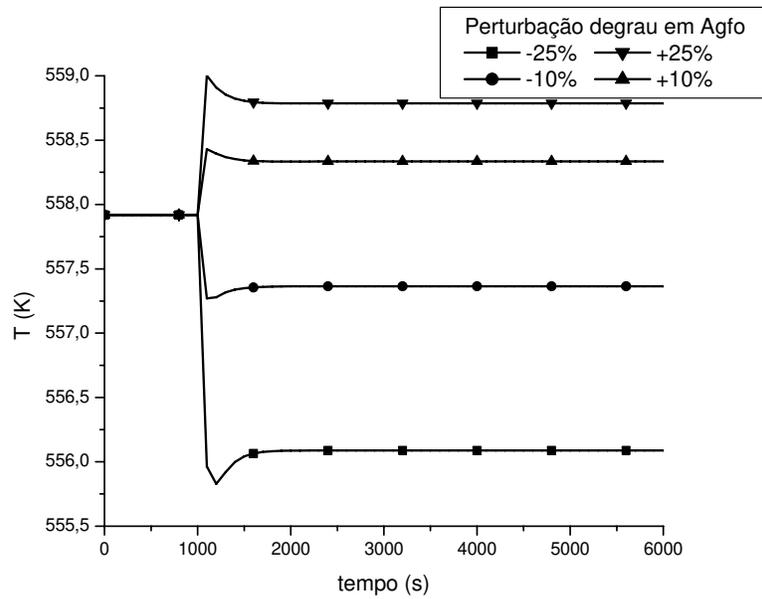


Figura 3.2 - Influência de Agfo na temperatura de saída do reator.

Já na Figura 3.3 e na Figura 3.4, observa-se que tanto a conversão de o-cresol quanto a temperatura de saída do reator não sofrem influência da perturbação na concentração de hidrogênio na fase líquida (Alfo).

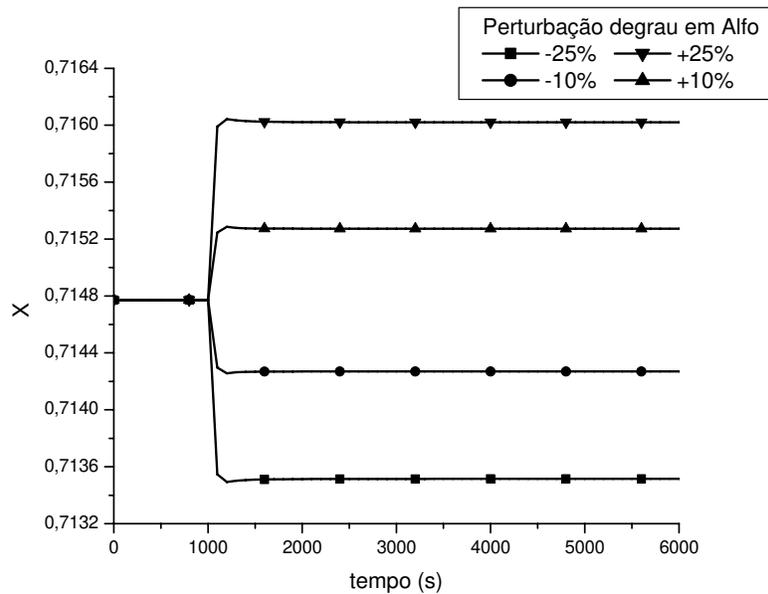


Figura 3.3 - Influência de Alfo na conversão de o-cresol.

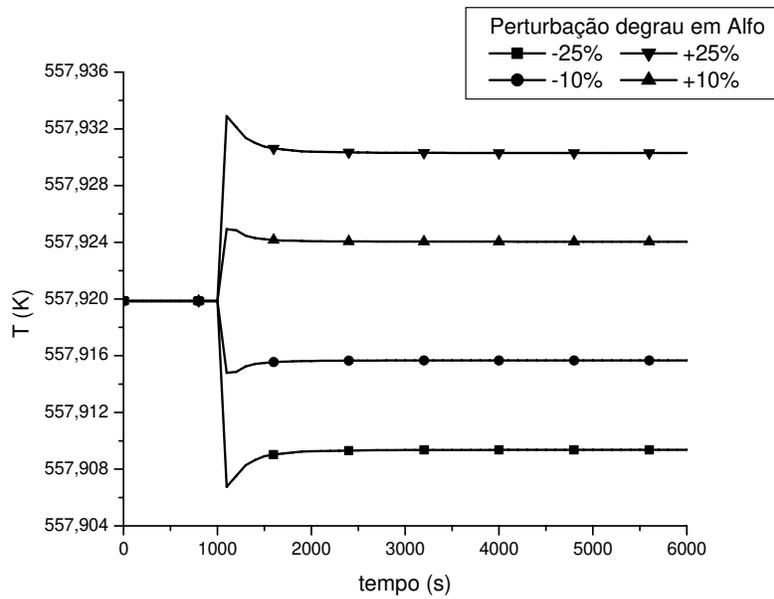


Figura 3.4 - Influência de Alfa na temperatura de saída do reator.

Perturbando-se a concentração de alimentação de o-cresol (B_{lfo}) observa-se que tanto a conversão de o-cresol quanto a temperatura de saída do reator são significativamente influenciadas, como pode ser visto pela Figura 3.5 e Figura 3.6, respectivamente.

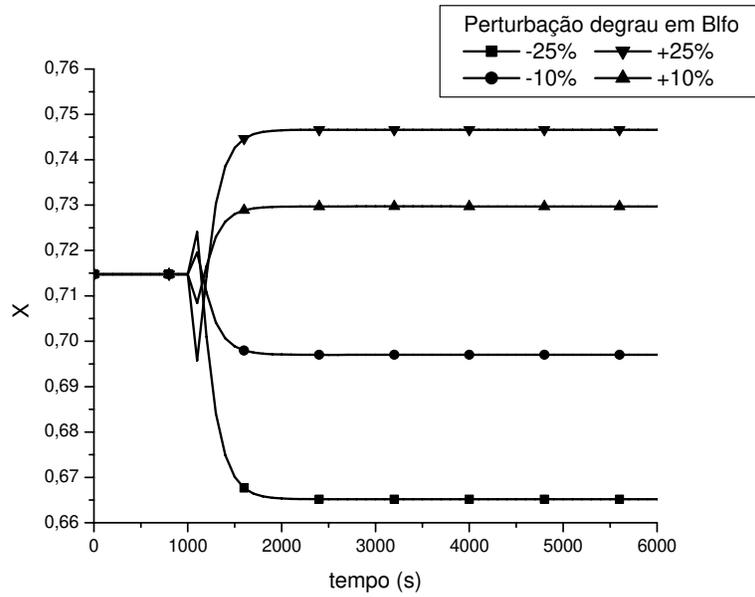


Figura 3.5 - Influência de Bf0 na conversão de o-cresol.

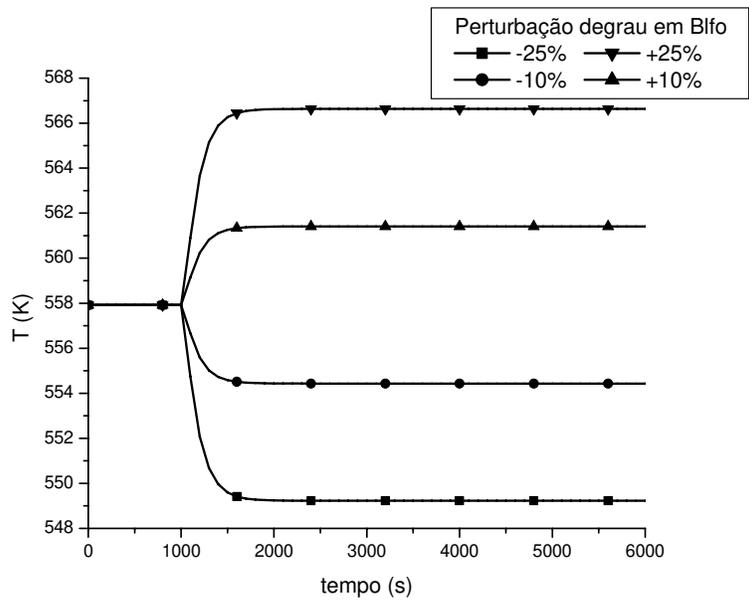


Figura 3.6 - Influência de Bf0 na temperatura de saída do reator.

A Figura 3.7 mostra o perfil da conversão de o-cresol diante de perturbações na temperatura de alimentação dos reagentes (T_{fo}). Observa-se que a conversão aumenta com o aumento da temperatura, uma vez que a reação é exotérmica.

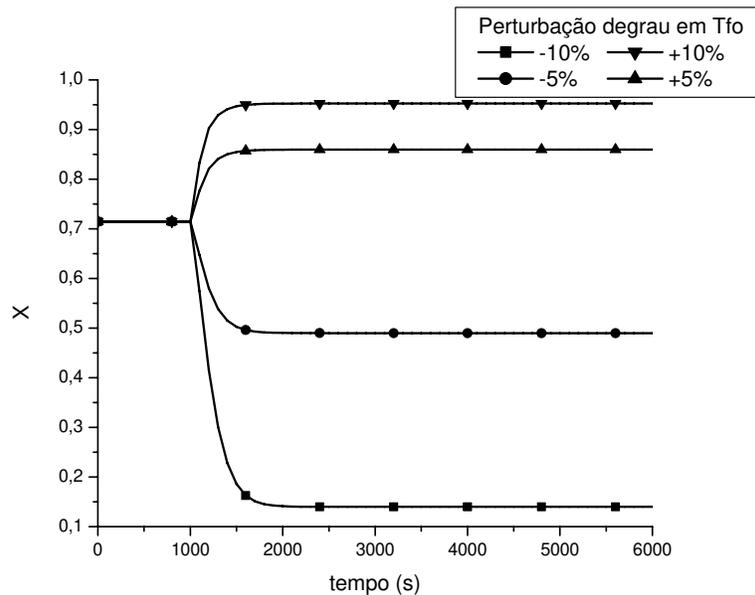


Figura 3.7 - Influência de T_{fo} na conversão de o-cresol.

Outro fato que evidencia a reação exotérmica são os perfis de temperatura de saída do reator que são apresentados na Figura 3.8, para perturbações de degrau na temperatura de alimentação dos reagentes (T_{fo}). Perturbações positivas na temperatura de alimentação geram aumento na temperatura de saída e vice-versa. Observa-se também o comportamento linear do reator.

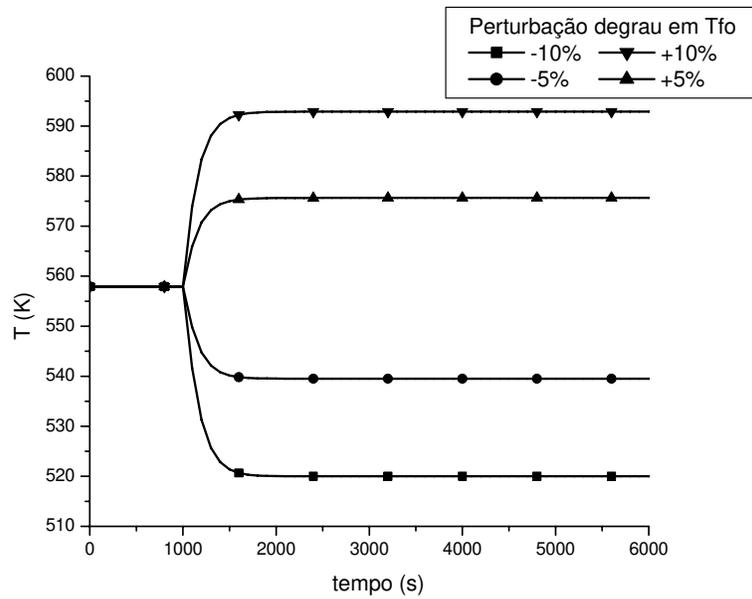


Figura 3.8 - Influência de T_{fo} na temperatura de saída do reator.

A Figura 3.9 e a Figura 3.10 mostram o comportamento da conversão de o-cresol e temperatura de saída do reator, respectivamente, para perturbações degrau na temperatura do fluido refrigerante (T_r), que é semelhante ao apresentado pela temperatura de alimentação dos reagentes (T_{fo}).

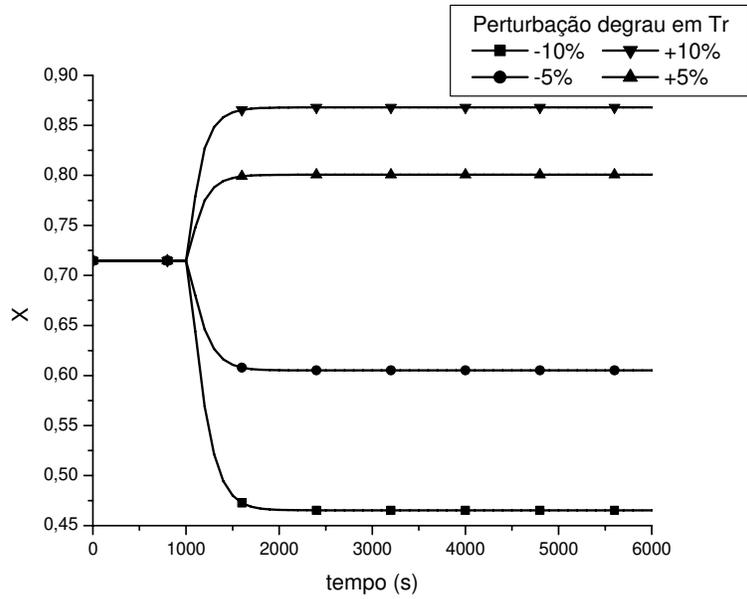


Figura 3.9 - Influência de Tr na conversão de o-cresol.

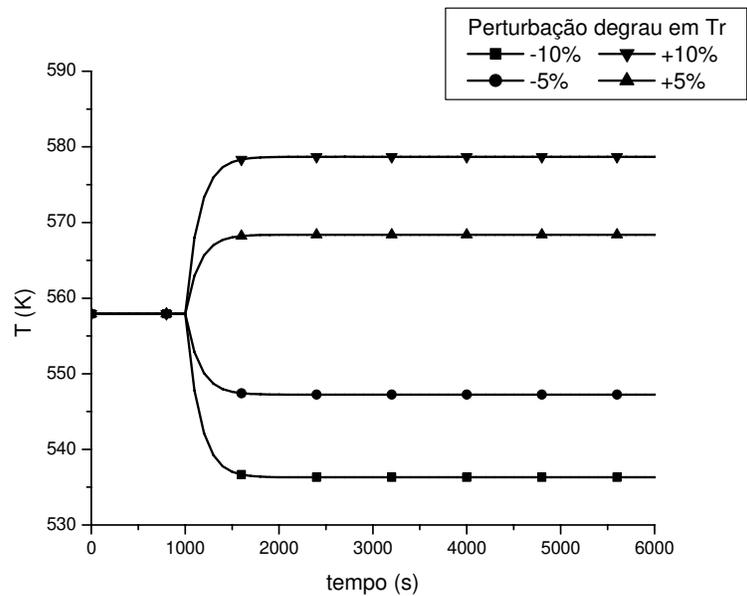


Figura 3.10 - Influência de Tr na temperatura de saída do reator.

Para que fique mais claro qual é a real influência da perturbação dos parâmetros operacionais nas variáveis dependentes analisadas, a Tabela 3.2 mostra os efeitos percentuais sofridos pela conversão de o-cresol ocasionados pelas perturbações nos parâmetros operacionais. De acordo com os percentuais obtidos observa-se claramente que as variáveis independentes que exercem maior influência sobre a conversão são a concentração de hidrogênio na fase gasosa (Agfo) e de o-cresol na fase líquida (Blfo), além das temperaturas de alimentação dos reagentes (Tfo) e do fluido refrigerante (Tr). A concentração de hidrogênio na fase líquida (Alfo) apresenta mudanças praticamente imperceptíveis. O que se observa é que decréscimos nas concentrações de hidrogênio na fase gasosa (Agfo) e o-cresol na fase líquida (Blfo) e na temperatura de alimentação dos reagentes geram efeitos absolutos mais significativos do que quando estes parâmetros operacionais são elevados, o que evidencia a característica não linear do processo.

Tabela 3.2 – Influência na conversão de o-cresol (efeitos percentuais).

	-25%	-10%	+10%	+25%
Agfo	-29,82	-9,07	6,79	14,21
Alfo	-0,18	-0,07	0,07	0,17
Blfo	-6,94	-2,48	2,09	4,46
	-10%	-5%	+5%	+10%
Tfo	-80,41	-31,45	20,25	33,26
Tr	-6,79	-3,30	3,18	6,27

Já na Tabela 3.3 são apresentados os efeitos percentuais na temperatura de saída do reator. Conforme já foi identificado através da análise das figuras dos perfis dinâmicos, observa-se que os parâmetros operacionais que mais influenciam a temperatura são a concentração de o-cresol (Blfo) e as temperaturas de alimentação dos reagentes (Tfo) e do fluido refrigerante (Tr).

Tabela 3.3 – Influência na temperatura de saída do reator (efeitos percentuais).

	-25%	-10%	+10%	+25%
Agfo	-0,33	-0,10	0,07	0,16
Alfo	0,00	0,00	0,00	0,00
Blfo	-1,56	-0,62	0,63	1,56
	-10%	-5%	+5%	+10%
Tfo	-6,79	-3,30	3,18	6,27
Tr	-3,87	-1,91	1,88	3,72

Desta forma conclui-se que para o controle da conversão de o-cresol, poderiam ser manipuladas as concentrações de hidrogênio na fase gasosa (Agfo) ou de o-cresol (Blfo) ou as temperaturas de alimentação dos reagentes (Tfo) ou do fluido refrigerante (Tr). Para o caso de uma estratégia de controle da temperatura de saída do reator, poderiam ser usadas como variáveis manipuladas a concentração de o-cresol (Blfo) ou as temperaturas de alimentação dos reagentes (Tfo) ou do fluido refrigerante (Tr).

3.3 DESENVOLVIMENTO DO MODELO ESTATÍSTICO

Foi desenvolvido o modelo estatístico do reator de hidrogenação de o-cresol através da metodologia de planejamento fatorial com o propósito de avaliar as influências das variáveis independentes nas variáveis dependentes ligadas aos objetivos de controle e otimização e também de gerar equações empíricas para as variáveis manipuladas que serão utilizadas na estratégia de controle *feedforward*, como pode ser visto esquematicamente na Figura 3.11.

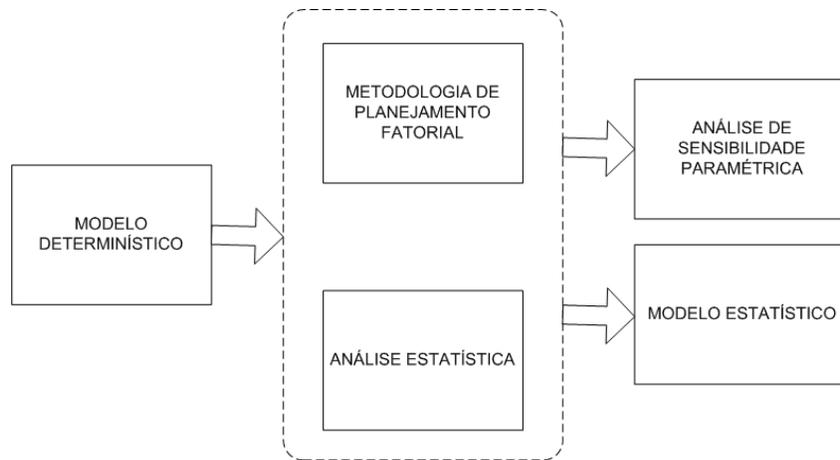


Figura 3.11 - Diagrama esquemático da utilização da metodologia de planejamento fatorial.

O planejamento fatorial foi realizado para estudar os efeitos de alguns parâmetros operacionais do modelo matemático e também para desenvolver o modelo estatístico para a conversão de o-cresol e temperatura de saída do reator, que não é um modelo dinâmico, mas representa um novo estado estacionário a ser alcançado pelo processo.

Os ensaios foram planejados para obter um modelo quadrático, consistindo de 32 (2^5) pontos fatoriais, 1 ponto central e 10 pontos axiais, totalizando assim 43 ensaios. As respostas analisadas foram a conversão de o-cresol e a temperatura de saída do reator.

Os pontos centrais fornecem graus adicionais de liberdade para a estimativa do erro puro, mas nesse caso não é possível calcular o erro porque as respostas foram determinadas por simulação. A distância dos pontos axiais de $\pm 2,38$ foi calculada a partir da equação (3.1) (Khuri and Cornell, 1987), onde α é a distância dos pontos axiais e n é o número de variáveis independentes. As variáveis independentes analisadas foram as concentrações de alimentação de hidrogênio (Agfo e Alfo, nas fases gasosa e líquida, respectivamente), de o-cresol (Blfo), a temperatura de alimentação dos reagentes (Tfo) e do fluido refrigerante (Tr). Estes parâmetros operacionais e seus níveis são apresentados na Tabela 3.4. O

software Statistica (Statsoft, v. 7) foi usado para analisar e gerar os resultados apresentados a seguir.

$$\alpha = (2^n)^{1/4} \quad (3.1)$$

Tabela 3.4 – Parâmetros operacionais e níveis para o planejamento composto central.

	-2,38 ^a	-1	0	+1	+2,38 ^a
Agfo (± 10%)	1,14E-02	1,35E-02	1,50E-02	1,65E-02	1,86E-02
Alfo (± 10%)	8,38E-03	9,90E-03	1,10E-02	1,21E-02	1,36E-02
Blfo (± 10%)	1,83E-01	2,16E-01	2,40E-01	2,64E-01	2,97E-01
Tfo (± 5%)	476,00	513,00	540,00	567,00	604,00
Tr (± 10%)	381,00	450,00	500,00	550,00	619,00

^a ±2,38 = (2⁵)^{1/4} (ponto axial)

Os efeitos estimados das variáveis, assim como as interações entre elas em cada resposta foram determinados e estão reportados na Tabela 3.5, para um intervalo de confiança de 95%. Nos resultados apresentados neste trabalho obtidos através da metodologia de planejamento fatorial, *L* representa os termos lineares e *Q* os quadráticos. Para melhor visualização a Figura 3.12 e a Figura 3.13 mostram os gráficos de pareto para os efeitos estimados.

Tabela 3.5 – Efeitos principais e interações entre os parâmetros operacionais (valores codificados) na conversão e na temperatura de saída do reator.

	Conversão		Temperatura	
	Efeito	p	Efeito	P
Média	0,9323	0,0000 ^a	557,9506	0,0000 ^a
(1)AGFO (L)	0,0299	0,0000 ^a	1,0694	0,0000 ^a
AGFO (Q)	-0,0044	0,0047 ^a	-0,1584	0,0129 ^a
(2)ALFO (L)	0,0003	0,7916	0,0092	0,8254
ALFO (Q)	-0,0001	0,9629	-0,0026	0,9647
(3)BLFO (L)	0,0091	0,0000 ^a	6,8843	0,0000 ^a
BLFO (Q)	-0,0007	0,5990	0,0007	0,9909
(4)TFO (L)	0,1008	0,0000 ^a	36,5210	0,0000 ^a
TFO (Q)	-0,0207	0,0000 ^a	-0,7495	0,0000 ^a
(5)TR (L)	0,1095	0,0000 ^a	42,8453	0,0000 ^a
TR (Q)	-0,0255	0,0000 ^a	-0,9234	0,0000 ^a
1L x 2L	-0,0001	0,9546	-0,0024	0,9611
1L x 3L	0,0014	0,2220	0,1569	0,0034 ^a
1L x 4L	-0,0090	0,0000 ^a	-0,3287	0,0000 ^a
1L x 5L	-0,0099	0,0000 ^a	-0,3608	0,0000 ^a
2L x 3L	0,0000	0,9908	0,0014	0,9770
2L x 4L	-0,0001	0,9555	-0,0024	0,9604
2L x 5L	-0,0001	0,9475	-0,0028	0,9535
3L x 4L	-0,0046	0,0005 ^a	0,1899	0,0007 ^a
3L x 5L	-0,0050	0,0002 ^a	0,2018	0,0004 ^a
4L x 5L	-0,0447	0,0000 ^a	-1,6103	0,0000 ^a

^a Fatores significativos ($p < 0,05$) para um intervalo de confiança de 95%.

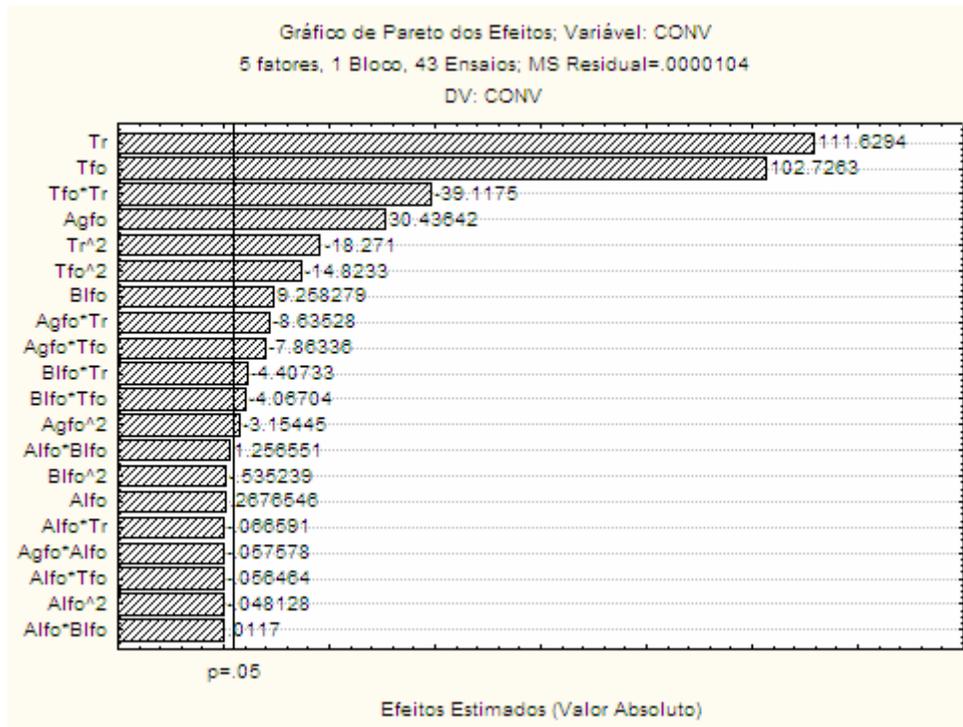


Figura 3.12 – Gráfico de Pareto para conversão de o-cresol.

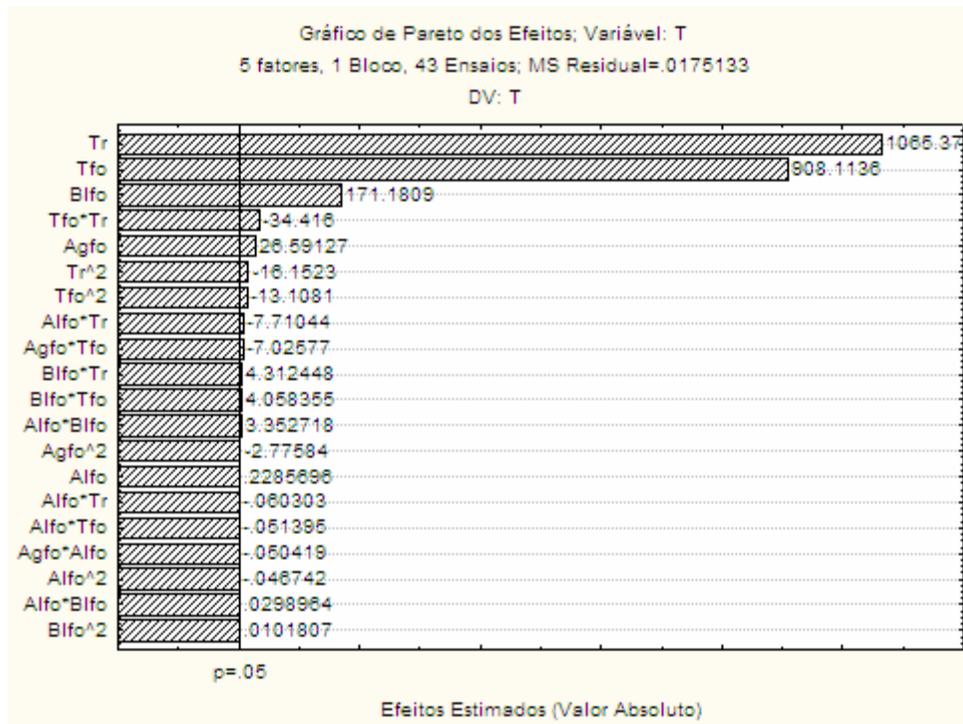


Figura 3.13 – Gráfico de Pareto para temperatura do reator.

Na Tabela 3.5 pode ser observado que as variáveis que apresentam efeitos estatisticamente significativos na conversão e na temperatura dos reagentes na saída do reator são as concentrações de hidrogênio na fase gasosa (A_{gfo}) e o-cresol na fase líquida (B_{lfo}), e ambas as temperaturas (T_{fo} e T_r). Também se observa que alguns termos quadráticos são relevantes, assim como alguns termos de interação entre esses parâmetros operacionais. Para ambas as respostas, os parâmetros operacionais mais significativos foram as temperaturas (T_{fo} e T_r). No entanto, observa-se que a temperatura de alimentação dos reagentes foi perturbada em $\pm 5\%$ e a temperatura do fluido refrigerante, assim como as demais variáveis independentes, em $\pm 10\%$. Então, quando os efeitos principais na Tabela 3.5 são analisados, inicialmente presume-se que a temperatura do refrigerante é a que tem maior impacto tanto na conversão quanto na temperatura de saída. Na verdade, a variável que apresenta maior impacto é a temperatura de alimentação dos reagentes devido à sua menor perturbação. Portanto, como foi visto anteriormente, esta variável (T_{fo}) demonstra grande potencial para ser usada como variável manipulada para o controle da temperatura dos reagentes na saída do reator, embora a temperatura do refrigerante (T_r) também possa ser usada sem restrições, gerando resultados também muito bons.

Foi realizado o ajuste de um modelo paramétrico para a conversão de o-cresol e temperatura dos reagentes na saída do reator em função das concentrações de alimentação dos reagentes e das temperaturas de alimentação dos reagentes e do fluido refrigerante. As variáveis dependentes e independentes foram ajustadas para um modelo de segunda ordem e avaliadas em termos de sua reprodutibilidade. A ANOVA (análise de variância) é apresentada na Tabela 3.6 e foi usada para avaliar o desempenho do modelo ajustado. O valor do coeficiente de regressão (R^2) fornece a medida de quanto a variabilidade nos valores das respostas observadas pode ser explicada pelos fatores e suas interações. Um bom modelo (valores acima de 0,9 são considerados bons) explica a maior parte da variação nas respostas. Quanto mais R^2 se aproximar da unidade, mais preditivo será o modelo. O erro, chamado de resíduo, foi muito pequeno porque neste trabalho os ensaios foram realizados através de dados de simulação do modelo determinístico, os quais geram erro nulo nas medidas. Baseado no teste f

(teste da falta de ajuste), o modelo é preditivo, já que o valor de f calculado é muito maior que o tabelado e o coeficiente de regressão é muito próximo de 1, tanto para a conversão como para a temperatura na saída do reator (Tabela 3.6).

Tabela 3.6 – Análise de variância (ANOVA)^a.

Fonte da variação	Soma dos quadrados		Média Quadrática		Graus de liberdade	Teste f (calculado)	
	X	T	X	T		X	T
Regressão	0,2781	34883,06	0,01390	1744,153	20	1333,9	99589,9
Erro	0,0002	0,385294	1,042E-05	0,017513	22		
Total	0,2783	34883,44			42	f _{calc} / f _{0,95;20;22}	
R ²	0,9992	0,9999				644,39	48111,07

$$^a F_{0,95;20;22} = 2,07.$$

A Tabela 3.7 apresenta os coeficientes de regressão para a conversão e a temperatura (equações 3.2 e 3.3). O comportamento observado para os efeitos (Tabela 3.5) é também apresentado pelos coeficientes de regressão. Este modelo paramétrico foi usado nas estratégias de controle clássicas (*feedforward* e mista) e hierárquica em duas camadas.

Tabela 3.7 – Coeficientes de regressão para o modelo estatístico (valores reais).

	Conversão		Temperatura	
	Coeficiente	<i>p</i>	Coeficiente	<i>p</i>
Média	-13,0263	0,0000 ^a	-441,9664	0,0000 ^a
(1)AGFO (L)	126,8726	0,0000 ^a	4273,4820	0,0000 ^a
AGFO (Q)	-960,0961	0,0046 ^a	-34628,4537	0,0110 ^a
(2)ALFO (L)	1,9023	0,9200	67,6443	0,9306
ALFO (Q)	-27,8760	0,9620	-1109,6616	0,9631
(3)BLFO (L)	3,1823	0,0012 ^a	-10,8944	0,7596
BLFO (Q)	-0,6500	0,5979	0,5068	0,9920
(4)TFO (L)	0,0281	0,0000 ^a	1,5602	0,0000 ^a
TFO (Q)	0,0000	0,0000 ^a	-0,0005	0,0000 ^a
(5)TR (L)	0,0166	0,0000 ^a	0,9511	0,0000 ^a
TR (Q)	0,0000	0,0000 ^a	-0,0002	0,0000 ^a
1L x 2L	-19,9174	0,9546	-714,8642	0,9602
1L x 3L	19,9223	0,2221	2178,7334	0,0029 ^a
1L x 4L	-0,1108	0,0000 ^a	-4,0583	0,0000 ^a
1L x 5L	-0,0657	0,0000 ^a	-2,4051	0,0000 ^a
2L x 3L	0,2530	0,9908	26,4926	0,9764
2L x 4L	-0,0011	0,9555	-0,0405	0,9595
2L x 5L	-0,0007	0,9475	-0,0256	0,9525
3L x 4L	-0,0036	0,0005 ^a	0,1465	0,0005 ^a
3L x 5L	-0,0021	0,0002 ^a	0,0841	0,0003 ^a
4L x 5L	0,0000	0,0000 ^a	-0,0006	0,0000 ^a

^a Fatores significativos ($p < 0,05$) para um intervalo de confiança de 95%.

$$\begin{aligned}
 X = & -13,0263 + 126,8726 * Agfo - 960,0961 * Agfo^2 + 1,9023 * Alfo - \\
 & - 27,8760 * Alfo^2 + 3,1823 * Blfo - 0,6500 * Blfo^2 + 0,0281 * Tfo + 0,0166 * Tr - \\
 & - 19,9174 * Agfo * Alfo + 19,9223 * Agfo * Blfo - 0,1108 * Agfo * Tfo - \\
 & - 0,0657 * Agfo * Tr + 0,2530 * Alfo * Blfo - 0,0011 * Alfo * Tfo - \\
 & - 0,0007 * Alfo * Tr - 0,0036 * Blfo * Tfo - 0,0021 * Blfo * Tr
 \end{aligned}
 \tag{3.2}$$

$$\begin{aligned}
 T = & -441,9664 + 4273,4820 * Agfo - 34628,4537 * Agfo^2 + 67,6443 * Alfo - \\
 & - 1109,6616 * Alfo^2 - 10,8944 * Blfo + 0,5068 * Blfo^2 + 1,5602 * Tfo - \\
 & - 0,0005 * Tfo^2 + 0,9511 * Tr - 0,0002 * Tr^2 - 714,8642 * Agfo * Alfo + \\
 & + 2178,7334 * Agfo * Blfo - 4,0583 * Agfo * Tfo - 2,4051 * Agfo * Tr + \\
 & + 26,4926 * Alfo * Blfo - 0,0405 * Alfo * Tfo - 0,0256 * Alfo * Tr + \\
 & + 0,1465 * Blfo * Tfo + 0,0841 * Blfo * Tr - 0,0006 * Tfo * Tr
 \end{aligned}
 \tag{3.3}$$

Para confirmar a capacidade de predição do modelo obtido, a Figura 3.14 e a Tabela 3.8 mostram a comparação entre as predições da temperatura na saída do reator realizada com os modelos determinístico e estatístico. Como se pode observar, o modelo estatístico pode ser usado sem qualquer restrição na faixa para o qual ele foi desenvolvido porque as respostas são praticamente as mesmas obtidas com o determinístico. No caso da conversão de o-cresol, testes também foram realizados e se mostraram altamente preditivos e, por isso, os gráficos e tabelas comparativos entre os modelos determinístico e estatístico não são apresentados aqui.

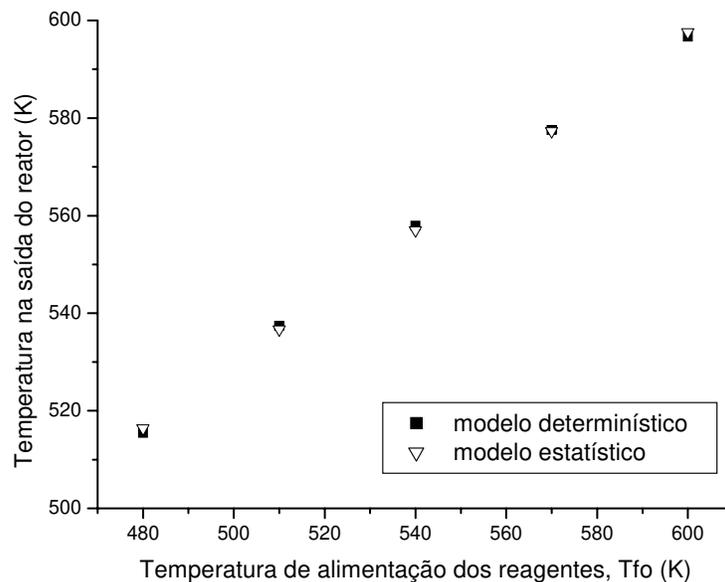


Figura 3.14 - Comparação entre a predição da temperatura de saída do reator pelos modelos determinístico e estatístico.

Tabela 3.8 - Comparação entre a predição da temperatura de saída do reator entre os modelos determinístico e estatístico.

Tfo (K)	Temperatura de saída do reator (K)	
	Modelo determinístico	Modelo estatístico
480	515,48	515,47
510	537,40	537,18
540	557,92	557,95
570	577,57	577,78
600	596,69	596,70

3.4 CONCLUSÕES

Neste capítulo foi analisado o comportamento do reator. Com isto foi possível determinar quais os parâmetros operacionais têm maior influência nos perfis dinâmicos das variáveis dependentes na saída do reator e, conseqüentemente, quais parâmetros são mais indicados como variáveis manipuladas numa estratégia de controle.

Além disso, o modelo estatístico do processo foi desenvolvido através da metodologia de planejamento fatorial, e se mostrou bastante preditivo, sendo perfeitamente possível utilizá-lo nas camadas de controle e otimização, lembrando-se sempre de respeitar as faixas operacionais para o qual ele foi validado, o que viabiliza estudos de controle e otimização em tempo real necessitando de um menor tempo computacional para a sua execução.

Com o entendimento do comportamento dinâmico do processo adquirido neste capítulo e a determinação das melhores variáveis manipuladas, a seguir serão avaliados os algoritmos e estratégias de controle propostos, e também será apresentada uma metodologia para a determinação dos parâmetros ótimos do controlador, visando o melhor desempenho da estratégia de controle.

4. CONTROLE DO PROCESSO

4.1 INTRODUÇÃO

O uso de controladores é importante em qualquer processo, uma vez que possibilita operar o mesmo com alto desempenho, além de minimizar efluentes, aumentar a produtividade e operar em níveis satisfatórios de segurança.

Os algoritmos de controle MPC (*Model Predictive Control*) têm sido bem aceitos para aplicações industriais nos últimos anos (Dechechi, 1998; Morari e Lee, 1999; Mariano, 2003; Vasco de Toledo, 1999; Mattedi, 2003; Meleiro, 2002). Segundo Qin e Badgwell (1997) e Piché et al. (2000), estes algoritmos têm sido usados em diversas aplicações nas indústrias de refino, petroquímica, química, de papel e de alimentos. Entre as vantagens destes algoritmos está o fato de que eles permitem tratar de forma direta com interações entre entradas e saídas, sendo facilmente aplicáveis a processos multivariáveis (MIMO - *Multiple Input Multiple Output*) (Santos e Biegler, 1999). Além disso, as restrições nas entradas e saídas devido a limitações físicas e de segurança, comuns nas indústrias de processo, podem ser diretamente integradas no algoritmo MPC.

De acordo com Fonseca (1998), as versões destes controladores podem ser diferenciadas em função do modelo interno, que pode ser linear ou não linear. Além disso, a inclusão ou não de restrições nas variáveis manipuladas e controladas definirá a estratégia de otimização mais adequada para a resolução do problema, variando desde uma abordagem analítica para o GPC (*Generalized Predictive Control*) de Clarke et al. (1987a e b) ou o DMC de Cutler e Ramaker (1979) até o método numérico de Programação Quadrática Sucessiva (SQP) adotado para controladores não lineares (Bequette, 1991). Uma revisão dos algoritmos de controle preditivo foi publicada por Morari e Lee (1999).

O controlador a ser utilizado neste trabalho tem como base o algoritmo DMC (*Dynamic Matrix Control*), um controlador baseado no modelo de convolução do processo. A formulação matemática deste controlador está apresentada no Apêndice A.

Neste capítulo são apresentados os resultados obtidos com a utilização desta técnica de controle, mas antes disso é apresentada uma metodologia para a obtenção de parâmetros ótimos do controlador para várias situações que por ventura venham a ocorrer na planta, de modo a simplificar o problema de integração, eliminando desta forma a necessidade de ter-se uma etapa de estimativa de parâmetros, o que poderia impossibilitar, em relação ao tempo computacional requerido, a implementação de uma estrutura em uma única camada, que é o objetivo final deste trabalho.

Quanto ao estudo de caso utilizado neste trabalho, sabe-se que estes reatores são altamente não lineares, multivariáveis, e podem ser exotérmicos. O desenvolvimento de modelos têm sido, na maioria das vezes, reportado para reações simples, ou para reações que obedecem a leis cinéticas simplificadas sob condições isotérmicas. No entanto, reações exotérmicas em multietapas com cinéticas complexas são industrialmente de grande interesse e ferramentas rigorosas de comparação do desempenho de vários reatores multifásicos têm se tornado uma área de estudos em ascensão (Bergault et al., 1997). Com os avanços computacionais, a simulação de processos tem se tornado uma importante técnica de estudo, e permite a implementação de otimização de processos complexos que normalmente envolvem um grande número de variáveis.

O controle de muitos processos químicos como os reatores tubulares, com ou sem leitos catalíticos, é complexo devido a problemas associados com as medidas *on-line* dos objetivos desejados de controle, especialmente com relação às concentrações dos reagentes. Para os reatores tubulares, o principal objetivo é geralmente regular a concentração de saída em níveis ótimos, não se esquecendo de uma operação segura e temperaturas do reator que não excedam valores máximos pré-estabelecidos. As concentrações de saída não são facilmente medidas *on-line*, então elas podem ser inferidas (estimadas) a partir de medidas disponíveis de temperatura e pressão ao longo do comprimento axial do reator. Por essa razão, para estabelecer uma estratégia de controle de um reator químico, é necessário definir seu objetivo operacional assim como desenvolver modelos que predizem as principais características do comportamento dinâmico

deste reator. Neste trabalho, a prioridade do controle não está diretamente relacionada à concentração de saída, mas ao problema térmico do reator, controlando indiretamente esta concentração. Então, os controladores foram avaliados para absorver perturbações que alteram o perfil térmico do reator. Esta tarefa não é trivial, e na verdade, é uma das mais difíceis e perigosas operações na indústria química, especialmente quando reatores industriais de larga escala são considerados. Outro importante objetivo na implementação da malha de controle é conhecer as limitações físicas e químicas das variáveis manipuladas e controladas do reator. Esta informação é essencial para se desenvolver uma estratégia de controle adequada às condições industriais do processo.

4.2 PLANEJAMENTO PARA DEFINIÇÃO DOS PARÂMETROS DO CONTROLADOR

Para a sintonia dos parâmetros do controlador DMC são conhecidas poucas técnicas. Vale a pena mencionar a metodologia sugerida por Maurath *et al.* (1988) e descrita por Seborg *et al.* (1989), válida para problemas SISO sem restrições. Primeiramente são definidos o horizonte de predição, o de controle e o fator de supressão de movimento. Como esta metodologia não se refere ao ajuste fino dos parâmetros do controlador, são necessárias diversas simulações variando-se estes parâmetros de forma a localizar o conjunto que melhor se comporte, analisando-se, para isso, as variáveis manipuladas e controladas através de gráficos e dos chamados critérios de desempenho do controlador, que serão apresentados a seguir. Além disso, pode-se ainda implementar procedimentos de estimativa de parâmetros, cujo problema de otimização resultante pode ser resolvido por alguns dos algoritmos apresentados na literatura (Himmelblau, 1972).

No entanto encontra-se uma dificuldade neste trabalho para uma sintonia adequada deste controlador devido à integração dos procedimentos de controle e otimização. Como o controlador apresenta uma quantidade considerável de parâmetros, seria muito difícil incluí-los todos numa estratégia de integração do processo, devido à enorme complexidade que isso traria ao problema, tanto em

termos de variáveis de decisão como em termos de tempo computacional requerido. Diante disso, foi proposto um método alternativo para a definição de parâmetros que tenham um bom desempenho para várias situações que poderão ser encontradas na prática, esquematizado na Figura 4.1. A idéia da metodologia é gerar um modelo para o critério de desempenho em função dos parâmetros do controlador a partir da metodologia de planejamento fatorial. A análise das superfícies de resposta possibilita identificar a faixa ótima dos valores dos parâmetros. No entanto, pode-se utilizar o modelo obtido como função objetivo de um problema de otimização, resolvido pelo algoritmo de otimização SQP, por exemplo, e desta forma definir os valores ótimos dos parâmetros, que são considerados como variáveis de decisão do problema. Rodrigues et al. (2002) apresentam uma metodologia semelhante.

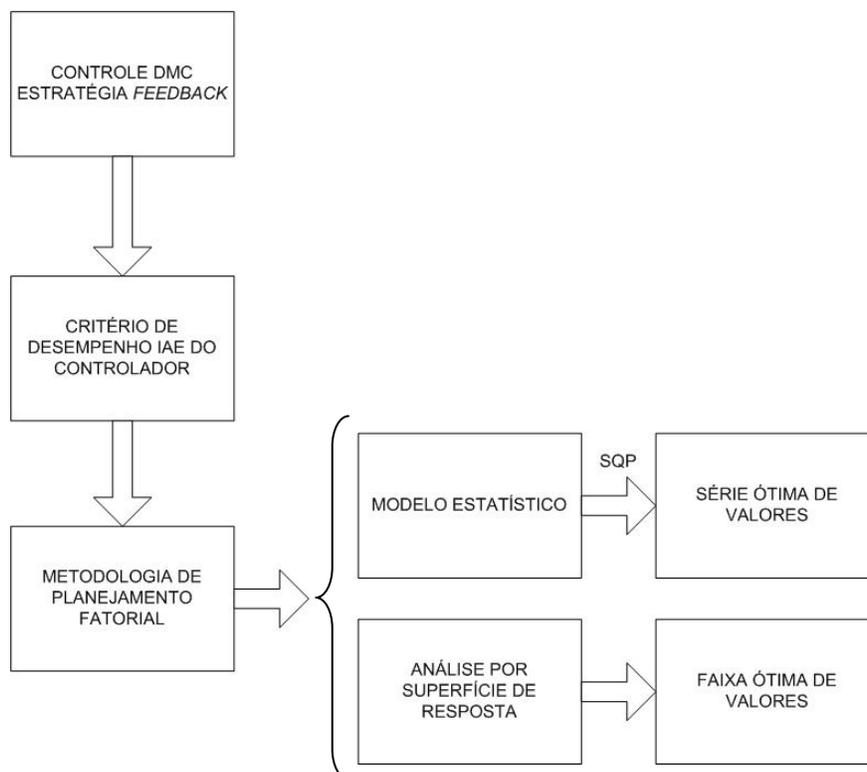


Figura 4.1 - Diagrama esquemático da metodologia proposta para obtenção da série ótima de parâmetros do controlador.

A influência dos parâmetros do controlador DMC em uma configuração preditiva foi verificada usando um planejamento fatorial composto central com dois níveis das combinações das variáveis independentes. As variáveis independentes foram o tempo de amostragem (tempo - s), o horizonte de convolução (conv - s), o horizonte máximo de predição (pred - s), o horizonte de controle (controle - s) e os parâmetros da trajetória de referência (α) e do fator de supressão de movimento (λ).

4.2.1 PLANEJAMENTO FATORIAL

O planejamento fatorial foi realizado para definir a série ótima dos parâmetros do controlador. Os ensaios foram planejados para obter um modelo, consistindo de 77 ensaios, que incluíam 64 (2^6) pontos fatoriais, 12 pontos axiais e 1 ponto central. Os pontos centrais fornecem graus adicionais de liberdade para a estimativa do erro puro, mas neste caso não é possível calcular o erro porque as respostas são determinadas por simulação. A distância dos pontos axiais foi de $\pm 2,83$, calculada a partir da equação (3.1).

Superfícies de resposta foram obtidas usando um modelo quadrático para as variáveis estatisticamente significativas. Análise de variância foi usada para detectar efeitos significativos para um intervalo de confiança de 95%. O software Statística (Statsoft, v.7) foi usado para analisar os resultados.

Os níveis utilizados para as variáveis independentes encontram-se na Tabela 4.1. A escolha destes níveis levou em conta a solução numérica do modelo de forma a manter a conversão em níveis possíveis e desejados.

Tabela 4.1 – Níveis utilizados para os parâmetros.

	-2,83	-1	0	+1	+2,83
tempo	15	70	100	130	185
conv	15	70	100	130	185
pred	6	15	20	25	34
controle	1	5	7	9	13
α (alfa)	0,317	0,5	0,6	0,7	0,883
λ (lambda)	0,151	0,7	1	1,3	1,849

A matriz de coeficientes de contraste para o referido planejamento está representada na Tabela 4.2.

Tabela 4.2 – Matriz de coeficientes de contraste para um planejamento em estrela 2^6 (valores codificados).

ensaio	tempo	conv	pred	controle	alfa	lambda
1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
2	-1	-1	-1	-1	-1	1
3	-1	-1	-1	-1	1	-1
4	-1	-1	-1	-1	1	1
5	-1	-1	-1	1	-1	-1
6	-1	-1	-1	1	-1	1
7	-1	-1	-1	1	1	-1
8	-1	-1	-1	1	1	1
9	-1	-1	1	-1	-1	-1
10	-1	-1	1	-1	-1	1
11	-1	-1	1	-1	1	-1
12	-1	-1	1	-1	1	1
13	-1	-1	1	1	-1	-1
14	-1	-1	1	1	-1	1
15	-1	-1	1	1	1	-1
16	-1	-1	1	1	1	1
17	-1	1	-1	-1	-1	-1
18	-1	1	-1	-1	-1	1
19	-1	1	-1	-1	1	-1
20	-1	1	-1	-1	1	1
21	-1	1	-1	1	-1	-1
22	-1	1	-1	1	-1	1
23	-1	1	-1	1	1	-1
24	-1	1	-1	1	1	1
25	-1	1	1	-1	-1	-1
26	-1	1	1	-1	-1	1
27	-1	1	1	-1	1	-1
28	-1	1	1	-1	1	1
29	-1	1	1	1	-1	-1
30	-1	1	1	1	-1	1
31	-1	1	1	1	1	-1
32	-1	1	1	1	1	1
33	1	-1	-1	-1	-1	-1
34	1	-1	-1	-1	-1	1
35	1	-1	-1	-1	1	-1
36	1	-1	-1	-1	1	1
37	1	-1	-1	1	-1	-1
38	1	-1	-1	1	-1	1
39	1	-1	-1	1	1	-1

ensaio	tempo	conv	pred	controle	alfa	lambda
40	1	-1	-1	1	1	1
41	1	-1	1	-1	-1	-1
42	1	-1	1	-1	-1	1
43	1	-1	1	-1	1	-1
44	1	-1	1	-1	1	1
45	1	-1	1	1	-1	-1
46	1	-1	1	1	-1	1
47	1	-1	1	1	1	-1
48	1	-1	1	1	1	1
49	1	1	-1	-1	-1	-1
50	1	1	-1	-1	-1	1
51	1	1	-1	-1	1	-1
52	1	1	-1	-1	1	1
53	1	1	-1	1	-1	-1
54	1	1	-1	1	-1	1
55	1	1	-1	1	1	-1
56	1	1	-1	1	1	1
57	1	1	1	-1	-1	-1
58	1	1	1	-1	-1	1
59	1	1	1	-1	1	-1
60	1	1	1	-1	1	1
61	1	1	1	1	-1	-1
62	1	1	1	1	-1	1
63	1	1	1	1	1	-1
64	1	1	1	1	1	1
65	-2,83	0	0	0	0	0
66	+2,83	0	0	0	0	0
67	0	-2,83	0	0	0	0
68	0	+2,83	0	0	0	0
69	0	0	-2,83	0	0	0
70	0	0	+2,83	0	0	0
71	0	0	0	-2,83	0	0
72	0	0	0	+2,83	0	0
73	0	0	0	0	-2,83	0
74	0	0	0	0	+2,83	0
75	0	0	0	0	0	-2,83
76	0	0	0	0	0	+2,83
77	0	0	0	0	0	0

Diferentemente dos critérios simples que usam somente características isoladas da resposta dinâmica (razão de declínio, tempo de assentamento, etc.), os critérios apresentados abaixo são baseados na resposta do processo como um todo, os quais são gerados do tempo $t = 0$ até que o estado estacionário é atingido pelo reator. Os mais usados são:

1- Integral do erro ao quadrado (ISE - *Integral of the Square Error*)

$$ISE = \int_0^{\infty} \varepsilon^2(t) dt \quad (4.1)$$

2-Integral do valor absoluto do erro (IAE - *Integral of the Absolute value of the Error*)

$$IAE = \int_0^{\infty} |\varepsilon(t)| dt \quad (4.2)$$

3- Integral do tempo vezes o erro absoluto (ITAE - *Integral of the Time-weighted Absolute Error*)

$$ITAE = \int_0^{\infty} t |\varepsilon(t)| dt \quad (4.3)$$

onde $\varepsilon(t) = y_{sp}(t) - y(t)$ é o desvio da resposta em relação ao *set-point* desejado.

Caso seja importante evitar grandes erros, ISE é melhor do que IAE porque os erros estão elevados ao quadrado e assim contribuem mais para o valor da integral. Para evitar pequenos erros, IAE é melhor do que ISE porque quando elevam-se números pequenos ao quadrado (menores que um) eles se tornam menores ainda. Para evitar erros que persistem por longos tempos, o critério ITAE é o melhor porque grandes tempos amplificam o efeito de erros mesmo pequenos no valor da integral. Dessa forma, para definir a melhor série de parâmetros do controlador considerou-se o critério de desempenho IAE (equação (4.2)). Este critério foi escolhido porque o objetivo foi evitar erros de magnitude não muito grande no processo.

Os resultados observados para os ensaios são apresentados na Tabela 4.3, para uma mudança de *set-point* de +10K (controle servo) e manipulando-se a temperatura do fluido refrigerante Tr.

Tabela 4.3 – Respostas observadas

ensaio	IAE	ensaio	IAE
1	4966,44	39	15386,24
2	5921,03	40	18783,04
3	8277,40	41	9232,39
4	9868,39	42	10950,53
5	4970,95	43	15387,27
6	6068,56	44	18250,44
7	8284,92	45	9232,58
8	10114,27	46	11266,32
9	4971,29	47	15387,59
10	5896,44	48	18776,61
11	8285,48	49	9223,38
12	9827,40	50	10996,20
13	4971,39	51	15372,26
14	6066,48	52	18326,55
15	8285,65	53	9231,77
16	10110,80	54	11270,18
17	4966,44	55	15386,24
18	5921,03	56	18783,04
19	8277,40	57	9232,39
20	9868,39	58	10950,53
21	4970,95	59	15387,27
22	6068,56	60	18250,44
23	8284,92	61	9232,58
24	10114,27	62	11266,32
25	4971,29	63	15387,59
26	5896,44	64	18776,61
27	8285,48	65	2432,59
28	9827,40	66	18365,29
29	4971,39	67	12352,01
30	6066,48	68	9927,59
31	8285,65	69	9993,75
32	10110,80	70	9928,54
33	9223,38	71	6774,04
34	10996,20	72	9953,63
35	15372,26	73	5814,11
36	18326,55	74	33831,18
37	9231,77	75	5701,92
38	11270,18	76	11949,03
		77	9927,59

Com isto foi possível, através da metodologia de superfícies de resposta apresentada em Barros Neto et al. (1995), fazer a análise dos efeitos obtidos, além da análise de variância do modelo obtido.

Inicialmente foram considerados todos os efeitos principais e aos pares e analisados os valores de p com o qual se pode saber se este efeito é ou não estatisticamente significativo. Para ser estatisticamente significativo, o valor deste parâmetro deve ser menor ou igual a 0,05, para um intervalo de confiança de 95%.

A Tabela 4.4 contém os efeitos principais e as interações das variáveis independentes (tempo, conv, pred, controle, α e λ) na variável dependente (IAE), para um intervalo de confiança de 95%. O *set-point* foi perturbado em +10K e a temperatura do fluido refrigerante foi manipulada, uma vez que apresenta influência significativa no comportamento do reator, que é apresentado e discutido em Vasco de Toledo et al. (2001). Esta situação ocorre nas estruturas de otimização em duas camadas, onde uma mudança no *set-point* ocorre quando o processo é perturbado.

Desta forma foi possível analisar os efeitos principais, assim como a análise de variância do modelo obtido. A Tabela 4.4 permite concluir que os parâmetros mais significativos do controlador na resposta do sistema são o tempo de amostragem (tempo), o parâmetro de trajetória de referência (α) e o fator de supressão de movimento (λ), uma vez que os valores dos seus efeitos são bem maiores que os dos outros (no mínimo 3 vezes). As outras variáveis independentes também apresentam determinada influência, mas com menos significância. Os parâmetros lineares do horizonte de convolução (conv) e máximo de predição (pred) apresentam uma relação inversa e os outros uma relação direta com o IAE, ou seja, um aumento nestes dois horizontes gera uma diminuição em IAE. Os efeitos de interação são muito menores que os principais, com exceção à interação entre o tempo de amostragem (tempo) e o parâmetro de trajetória de referência (α), e esta é uma característica importante do controlador DMC aplicado neste caso de estudo porque a ausência de interação entre os parâmetros do controlador facilita o procedimento de ajuste.

Tabela 4.4 – Efeitos principais e aos pares (valores codificados).

	Efeito	P
Média	8708,353	0,000000 ^a
(1) tempo (L)	6135,935	0,000000 ^a
tempo (Q)	346,444	0,332368
(2) conv (L)	-171,432	0,552620
Conv (Q)	531,659	0,139397
(3) pred (L)	-12,756	0,964691
Pred (Q)	236,996	0,506164
(4) controle (L)	347,555	0,231217
Controle (Q)	-162,332	0,648445
(5) alfa (L)	6155,523	0,000000 ^a
alfa (Q)	2702,370	0,000000 ^a
(6) lambda (L)	1993,048	0,000000 ^a
lambda (Q)	-46,922	0,895051
1L x 2L	0,000	1,000000
1L x 3L	-3,053	0,992438
1L x 4L	46,009	0,886454
1L x 5L	1565,306	0,000012 ^a
1L x 6L	581,659	0,075701
2L x 3L	0,000	1,000000
2L x 4L	0,000	1,000000
2L x 5L	0,000	1,000000
2L x 6L	0,000	1,000000
3L x 4L	8,619	0,978657
3L x 5L	-2,544	0,993699
3L x 6L	-15,219	0,962325
4L x 5L	38,337	0,905285
4L x 6L	149,007	0,644082
5L x 6L	484,696	0,136919

^a Fatores significativos ($p < 0.05$) para um intervalo de confiança de 95%.

4.2.2 AJUSTE DO MODELO

Um modelo foi ajustado para este planejamento fatorial utilizando os coeficientes estatisticamente significativos. Neste caso, além dos coeficientes para os parâmetros tempo, α e λ , o coeficiente para o horizonte de convolução (conv) também apresentou significância estatística e por isso foi incluído no modelo. Os coeficientes de regressão obtidos para o modelo quadrático, com o índice de desempenho como função das variáveis mais significativas estão reportados na Tabela 4.5. As variáveis independentes e dependentes foram ajustadas para um modelo de segunda ordem e avaliadas em termos da qualidade de ajuste. A

Tabela 4.6 representa a análise de covariância (ANOVA) usada para esta avaliação. A expressão que representa este modelo é apresentada na equação 4.4.

Tabela 4.5 – Coeficientes de regressão para o modelo completo (valores reais).

	Coeficiente	<i>p</i>
Média	53050,390	2,29098E-08 ^a
(1) tempo (L)	-121,941	0,010695227 ^a
tempo (Q)	0,177	0,195048583
(2) conv (L)	-58,692	0,209942436
conv (Q)	0,279	0,042578357 ^a
(5) alfa (L)	-163697,182	5,4979E-14 ^a
alfa (Q)	133588,965	3,52794E-16 ^a
(6) lambda (L)	-3929,664	0,399965548
lambda (Q)	-413,656	0,7605861
1L x 2L	3,19223E-16	1
1L x 5L	260,884	1,51039E-06 ^a
1L x 6L	32,314	0,052493439
2L x 5L	-3,63234E-11	1
2L x 6L	9,06832E-13	1
5L x 6L	8078,262	0,104529367

^a Fatores significativos ($p < 0.05$) para um intervalo de confiança de 95%.

$$\begin{aligned}
 IAE = & 53050,390 - 121,941 * tempo + 0,177 * tempo^2 - 58,692 * conv + \\
 & + 0,279 * conv^2 - 163697,182 * \alpha + 133588,965 * \alpha^2 - 3929,664 * \lambda - \\
 & - 413,656 * \lambda^2 + 260,884 * tempo * \alpha + 32,314 * tempo * \lambda + 8078,262 * \alpha * \lambda
 \end{aligned}
 \tag{4.4}$$

Tabela 4.6 – Análise de variância (ANOVA).

Fonte da variação	Soma quadrática	Graus de liberdade	Média quadrática	fcalculado	ftabelado($f_{14,62}$) valor aprox.	fcalc/ftab
regressão	1,823794E+09	14	130270989,3	94,05955651	1,86	50,56965
resíduo	85869013,58	62	1384984,09			
Total SQ	1,909663E+09	76				
R^2	0,99054					

Para que um modelo seja estatisticamente significativo, a soma quadrática da regressão deve ser muito maior que a soma quadrática em relação aos resíduos. Outra forma de se avaliar a eficácia do modelo é analisar o valor de f calculado em relação ao tabelado. Quanto maior for esta relação, melhor será o modelo. Uma regra prática mostra que um modelo é estatisticamente significativo se o valor de f calculado é no mínimo de 3-5 vezes maior que o valor crítico.

Baseado no teste f , o modelo é preditivo, uma vez que o valor calculado é 50 vezes maior que o valor crítico e o coeficiente de regressão está bem próximo da unidade. Então, o modelo quadrático obtido pode ser usado sem nenhuma restrição dentro da faixa operacional para o qual ele foi desenvolvido.

O modelo real foi usado para gerar as superfícies de resposta e curvas de nível apresentadas na Figura 4.2 a Figura 4.13. Estas figuras mostram os efeitos das variáveis no índice de desempenho para as variáveis estatisticamente significativas.

De acordo com a Figura 4.2 a Figura 4.7, observa-se que o critério de desempenho do controlador é minimizado para tempos de amostragem menores.

A Figura 4.2, Figura 4.3 e Figura 4.8 a Figura 4.11 indicam que para valores intermediários do horizonte de convolução, consegue-se alcançar um melhor desempenho do controlador.

Analisando-se o parâmetro α , observa-se pela Figura 4.4, Figura 4.5, Figura 4.8, Figura 4.9, Figura 4.12 e Figura 4.13, que valores de aproximadamente 0,5 minimizam o critério de desempenho do controlador.

O parâmetro λ deve apresentar valores baixos, de acordo com a Figura 4.6 e Figura 4.7, e Figura 4.10 a Figura 4.13.

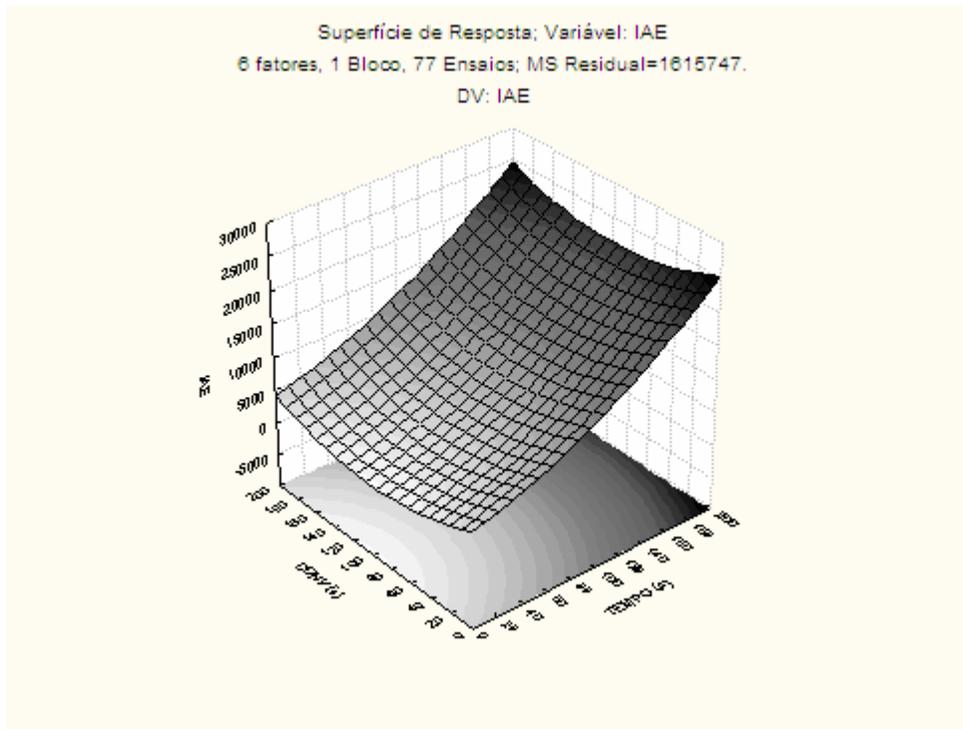


Figura 4.2 - Superfície de resposta: tempo de amostragem × convolução.

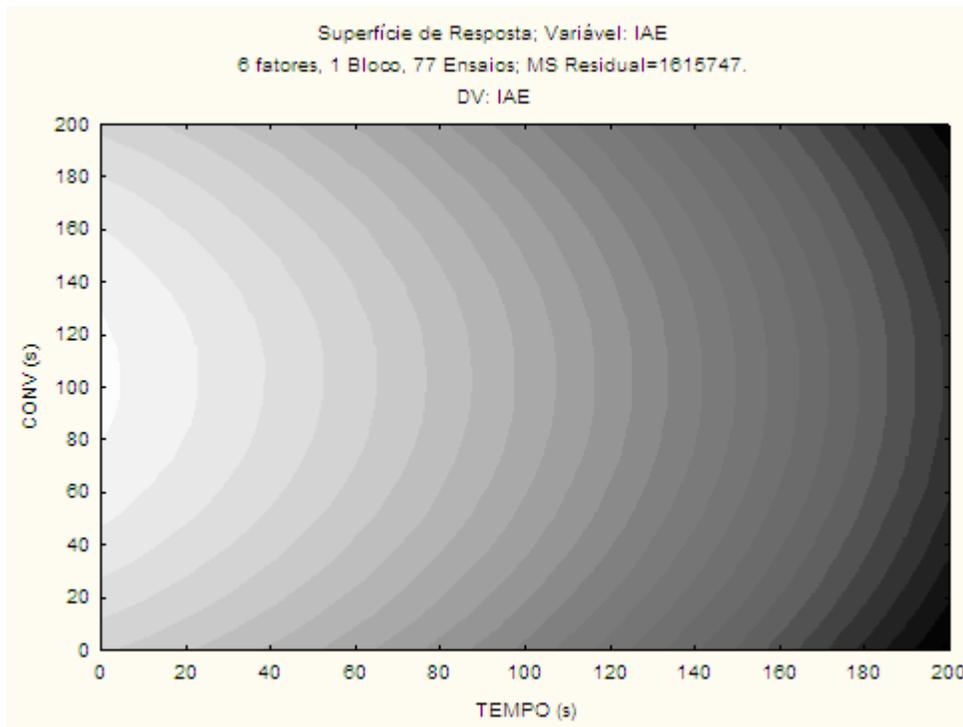


Figura 4.3 - Curvas de nível: tempo de amostragem × convolução.

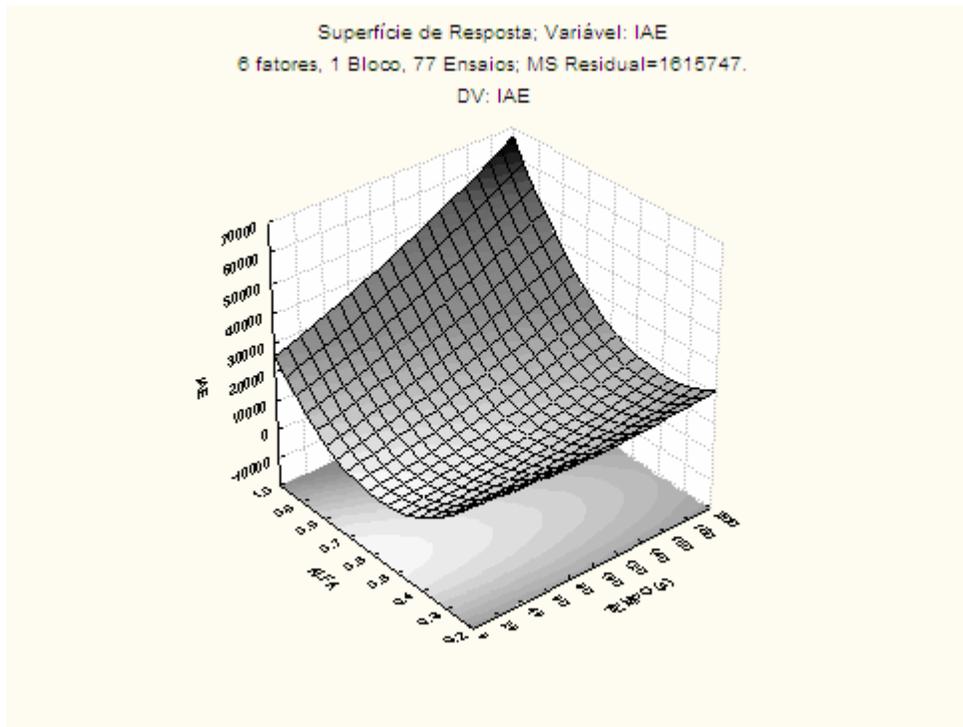


Figura 4.4 - Superfície de resposta: tempo de amostragem \times α .

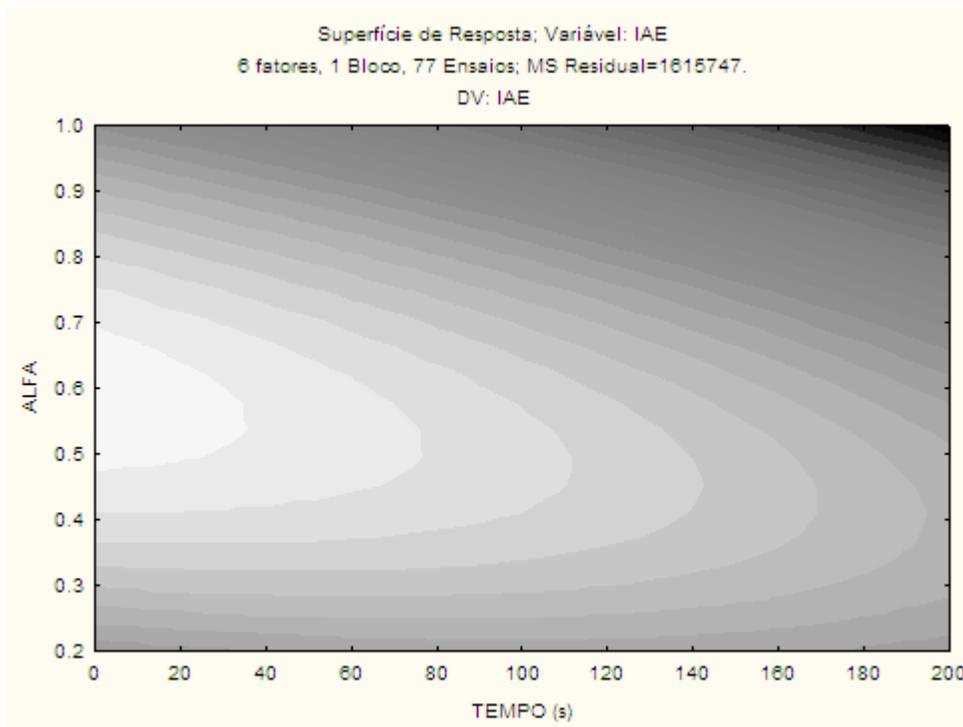


Figura 4.5 - Curvas de nível: tempo de amostragem \times α .

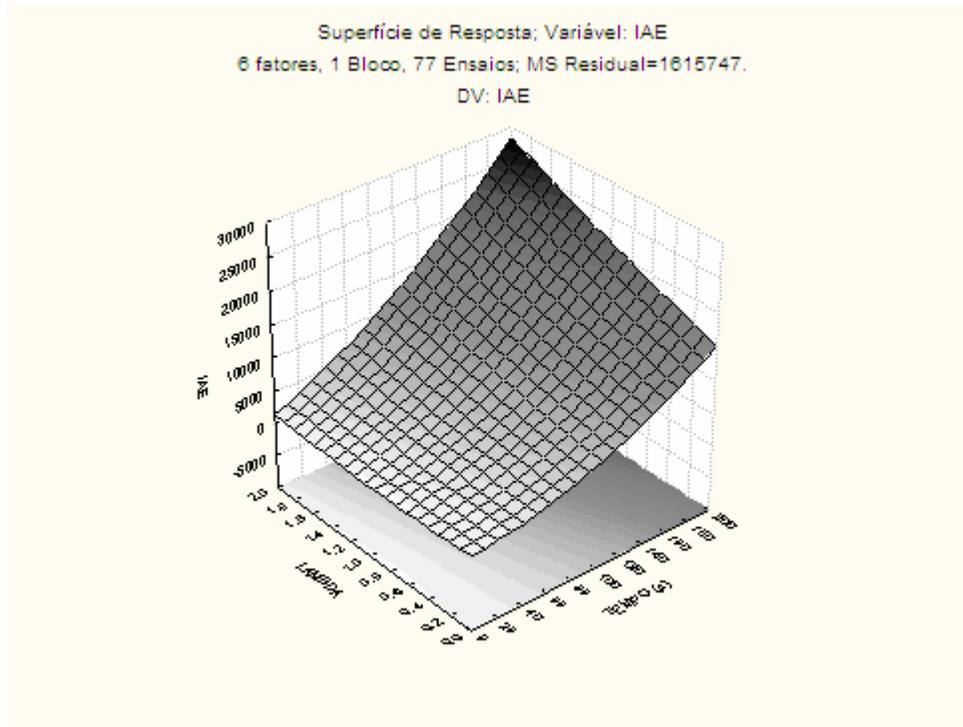


Figura 4.6 - Superfície de resposta: tempo de amostragem \times λ .

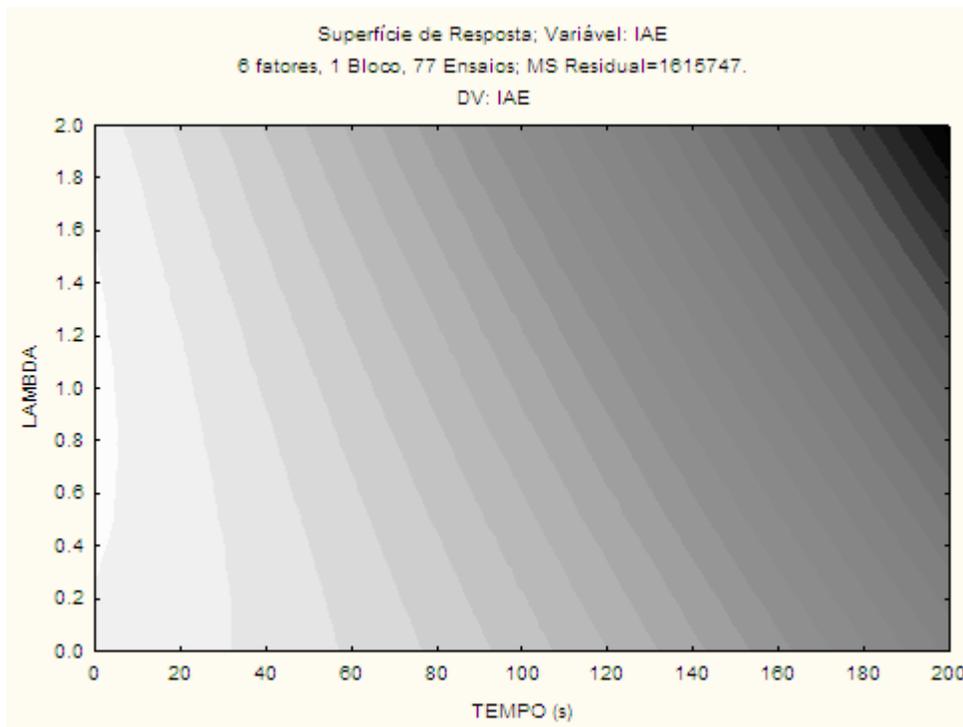


Figura 4.7 - Curvas de nível: tempo de amostragem \times λ .

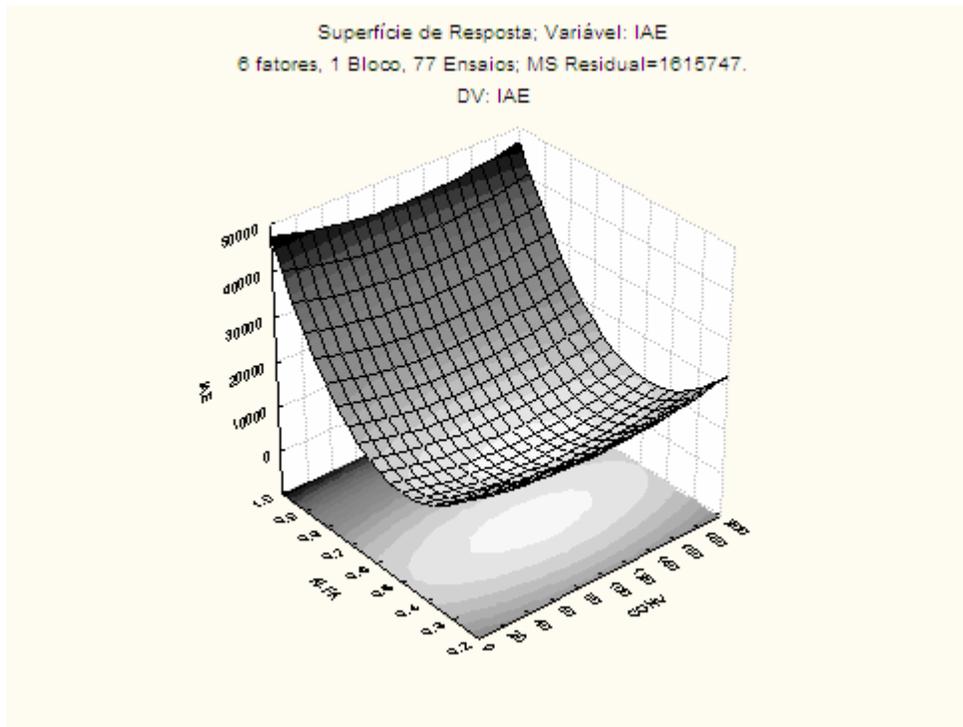


Figura 4.8 - Superfície de resposta: convolução \times α .

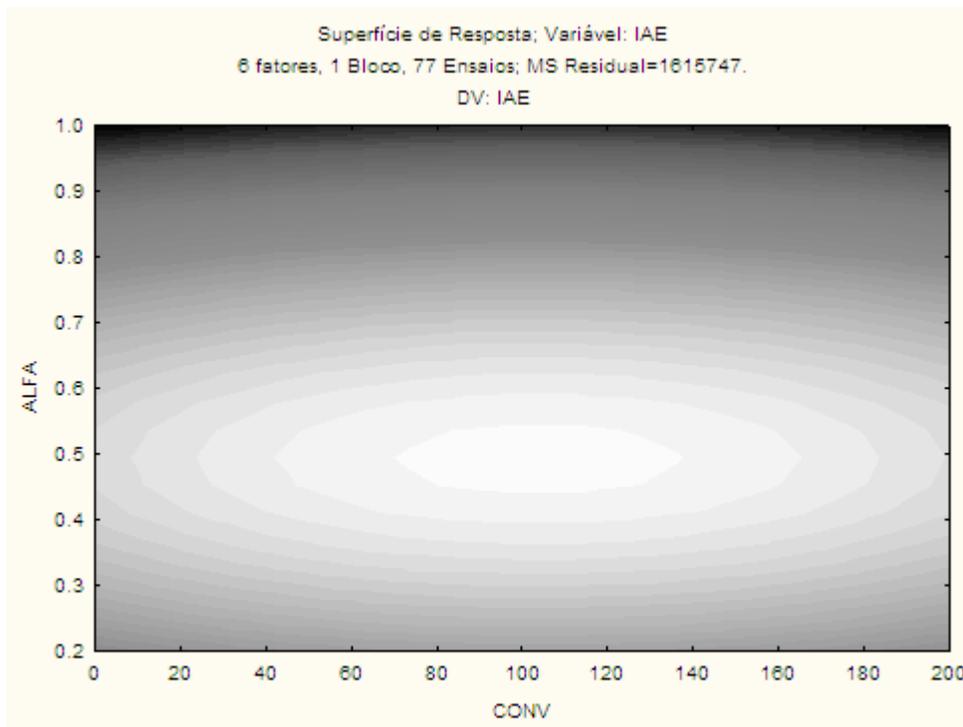


Figura 4.9 - Curvas de nível: convolução \times α .

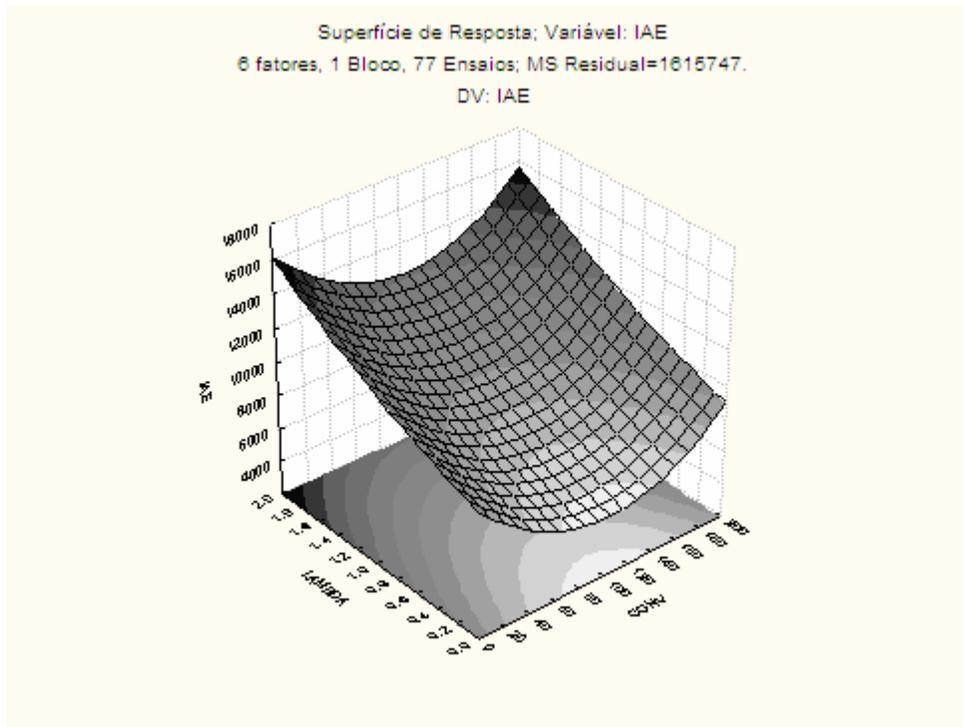


Figura 4.10 - Superfície de resposta: convolução \times λ .

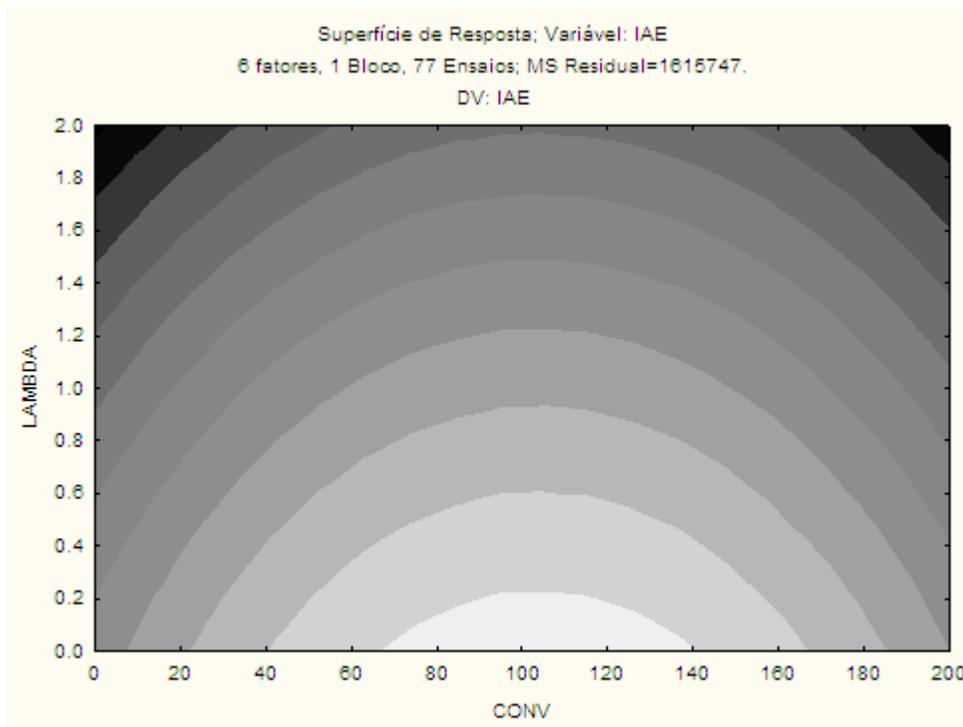


Figura 4.11 - Curvas de nível: convolução \times λ .

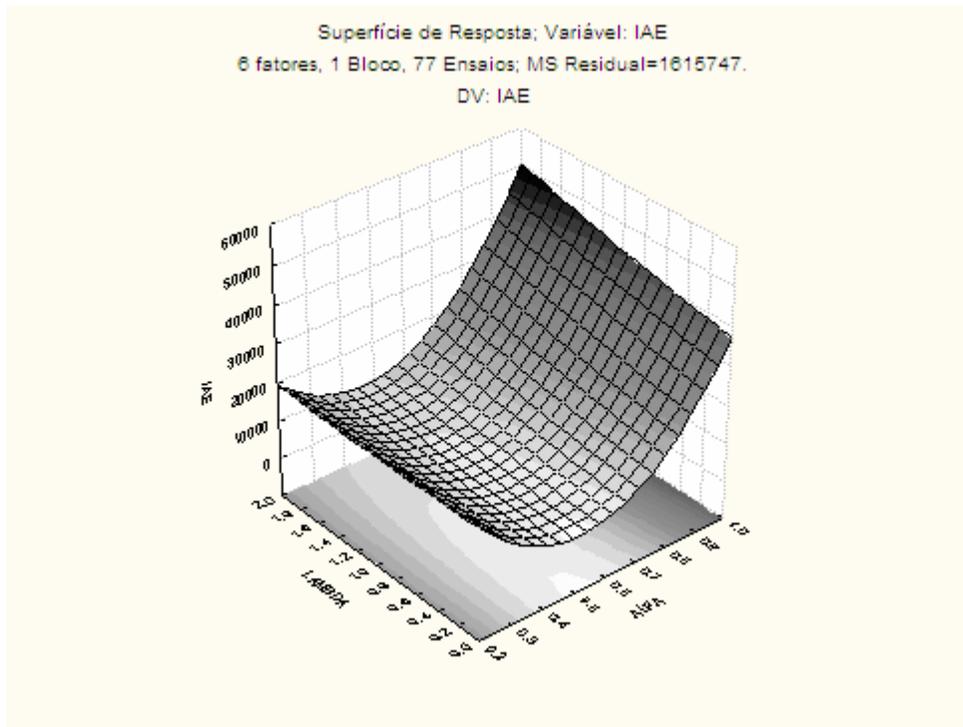


Figura 4.12 - Superfície de resposta: $\alpha \times \lambda$.

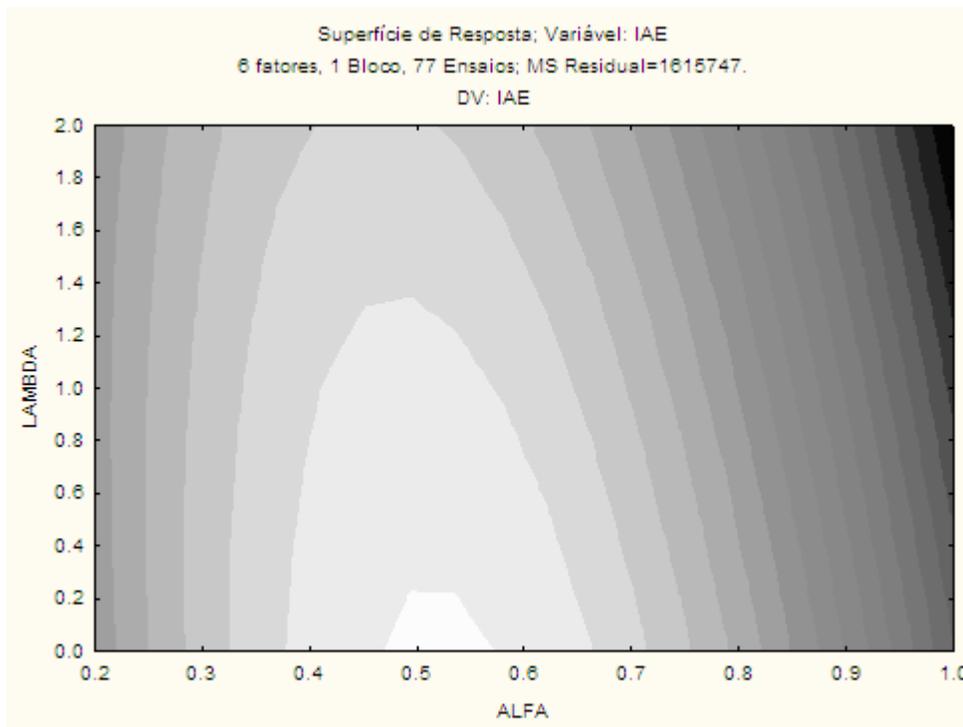


Figura 4.13 - Curvas de nível: $\alpha \times \lambda$.

Resumindo, pode-se fazer uma conclusão preliminar: para minimizar o índice de desempenho: o tempo de amostragem (tempo) e o fator de supressão de movimento (λ) devem assumir valores pequenos (níveis inferiores), enquanto que o horizonte de convolução (conv) deve apresentar valores próximos de 100 e o parâmetro de trajetória de referência (α) valores próximos de 0,5. De qualquer forma, como esta conclusão não apresenta valores exatos, na próxima seção será apresentada a solução tradicional deste problema de otimização.

4.2.3 DETERMINAÇÃO DA SÉRIE ÓTIMA DOS PARÂMETROS

A determinação dos melhores valores para os parâmetros do controlador é realizada neste trabalho através da minimização do índice de desempenho IAE. Para realizar este procedimento, um algoritmo de otimização é utilizado no modelo obtido com a metodologia de planejamento fatorial (Tabela 4.5). O algoritmo SQP (*Sequential Quadratic Programming*) foi usado para resolver o seguinte problema de otimização:

$$\begin{aligned}
 & \min_{\text{tempo}, \text{conv}, \alpha, \lambda} \text{IAE} \\
 & \text{s.t. } \text{tempo}^{\min} \leq \text{tempo} \leq \text{tempo}^{\max} \\
 & \quad \text{conv}^{\min} \leq \text{conv} \leq \text{conv}^{\max} \\
 & \quad \alpha^{\min} \leq \alpha \leq \alpha^{\max} \\
 & \quad \lambda^{\min} \leq \lambda \leq \lambda^{\max}
 \end{aligned} \tag{4.5}$$

Os limites superiores e inferiores para as variáveis de decisão são mostrados na Tabela 4.7, assim como suas estimativas iniciais. Nota-se que os limites estão dentro dos valores utilizados no planejamento para obtenção do modelo, ou seja, não permite a extrapolação dos valores.

Observa-se na Tabela 4.7 que o limite inferior para o tempo de amostragem foi de 100s. Observando a Figura 4.2 a Figura 4.7 vê-se que os valores que minimizam o índice de desempenho do controlador se apresentam justamente para valores pequenos do tempo de amostragem. Mas não se pode esquecer que este procedimento está sendo realizado para a determinação de uma série de parâmetros do controlador que será integrado à camada de otimização numa

estrutura em uma e duas camadas. Para valores muito baixos de tempo de amostragem o tempo computacional requerido é alto e pode prejudicar o desempenho da integração do processo, além de eventualmente gerar oscilações no controle do reator. Diante disso resolveu-se não trabalhar com tempos inferiores a 100s.

Tabela 4.7 – Limites e estimativas iniciais para as variáveis de decisão.

Variável	Limite inferior	Limite superior	Estimativa inicial
tempo	100	200	100
conv	30	180	100
α	0,3	1	0,5
λ	0,2	2	0,7

Aplicando o procedimento de otimização, os valores ótimos obtidos para este problema podem ser vistos na Tabela 4.8.

Tabela 4.8 – Valores ótimos obtidos.

Variável	Valores ótimos
Tempo	100
Conv	105
α	0,509
λ	0,2

De acordo com a Figura 4.2 a Figura 4.13 pode-se certificar que realmente esta série de valores dos parâmetros está dentro das regiões de menor índice IAE para o controlador, o que mais uma vez mostra que o modelo é adequado para a análise. Outro ponto a ser ressaltado é o fato dos valores dos parâmetros α e λ estarem mais próximos de seus níveis inferiores. Valores menores destes parâmetros geram ações de controle mais enérgicas, minimizando desta forma o critério de desempenho do controlador.

No entanto, deve-se analisar o desempenho desta série de parâmetros para outras situações que podem acontecer no processo e que precisam ser controladas.

4.2.4 ANÁLISE DO DESEMPENHO DOS PARÂMETROS ÓTIMOS

Na estrutura de integração em duas camadas, a camada de otimização gera novos *set-points* para a camada de controle. A princípio, as variáveis manipuladas estão limitadas em $\pm 30\%$ de suas estimativas iniciais. Diante disso, decidiu-se

analisar o comportamento das ações de controle para uma mudança de $\pm 10\text{K}$ e $\pm 30\text{K}$ no *set-point* (controle servo). Estes perfis são mostrados na Figura 4.14 e Figura 4.15 onde a temperatura do fluido refrigerante e de alimentação dos reagentes, respectivamente, são utilizadas como variáveis manipuladas.

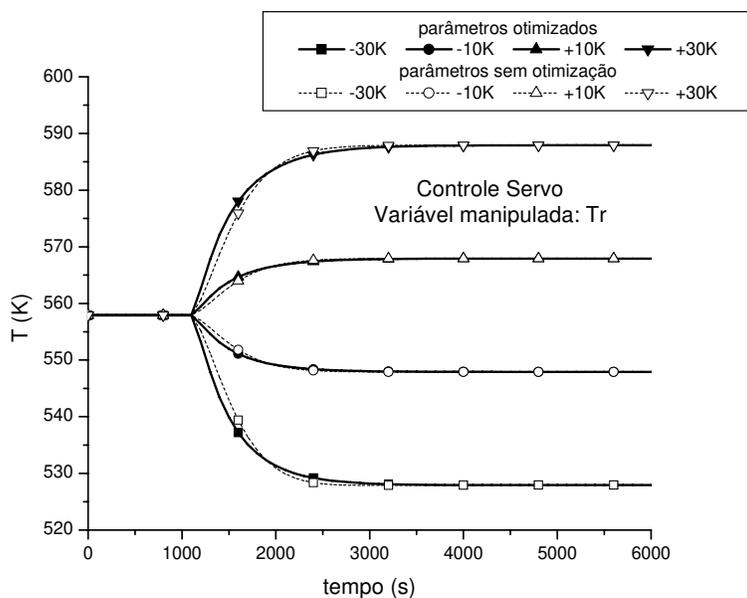


Figura 4.14 - Manipulação de T_r para mudança de *set-point*.

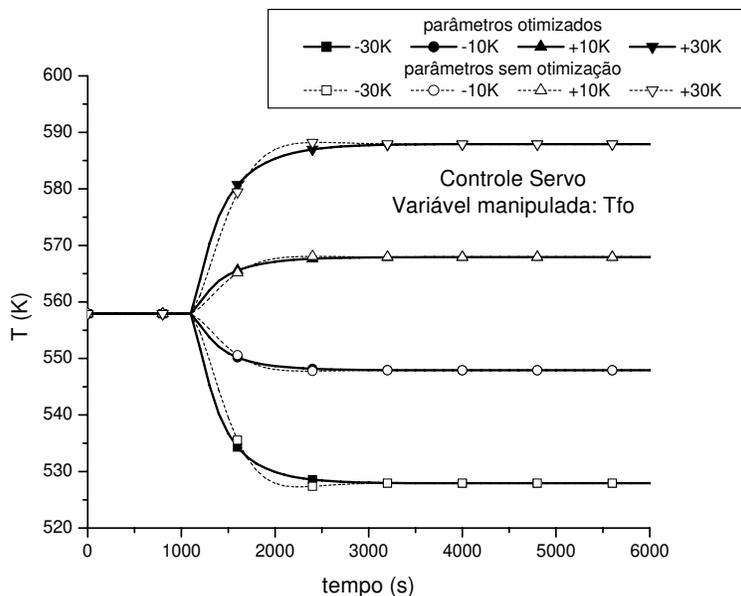


Figura 4.15 - Manipulação de Tfo para mudança de *set-point*.

De acordo com estas figuras, observa-se que estes valores para os parâmetros do controlador monitoram eficientemente o reator. A Tabela 4.9 mostra os valores obtidos para o critério de desempenho IAE do controlador para as simulações apresentadas na Figura 4.14 e Figura 4.15. Desta forma fica evidenciada a melhora obtida com a série ótima de parâmetros do controlador definida pela metodologia proposta neste trabalho, uma vez que para todas as situações avaliadas, o critério de desempenho é menor quando os valores ótimos são utilizados.

Tabela 4.9 – Comparação dos valores do critério de desempenho do controlador para situações de controle servo.

Perturbação	Critério de desempenho IAE			
	Tfo sem otimização	Tfo com otimização	Tr sem otimização	Tr com otimização
-30K	12546,97	9240,71	15333,87	8882,00
-10K	4248,28	3019,81	5227,10	2941,17
+10K	4303,15	3020,96	5317,77	2937,26
+30K	13022,08	9061,11	16167,16	8804,87

Apesar do procedimento ter sido realizado para o caso do controle servo, foram realizadas simulações também para o controle regulatório, a fim de verificar o desempenho dos parâmetros ótimos do controlador. A Figura 4.16 e Figura 4.17 mostram os perfis obtidos para a temperatura de saída do reator manipulando-se, respectivamente, a temperatura do fluido refrigerante (Tr) e a temperatura de alimentação dos reagentes (Tfo). Neste caso é confirmada visivelmente a melhoria obtida com a série de parâmetros ótimos. Embora as simulações utilizando os valores ótimos apresentem também *overshoot* da variável controlada, sua intensidade é muito menor quando comparada às simulações onde os parâmetros do controlador não estão otimizados.

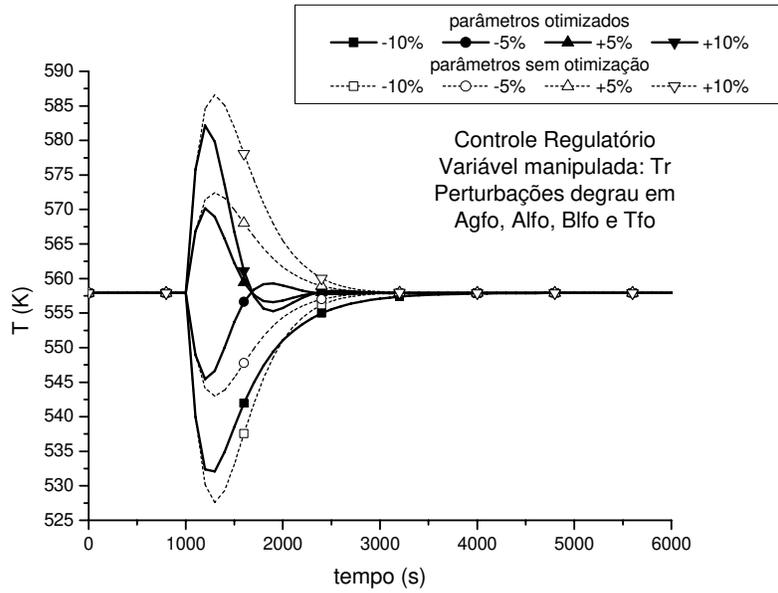


Figura 4.16 - Manipulação de T_r – Controle regulatório.

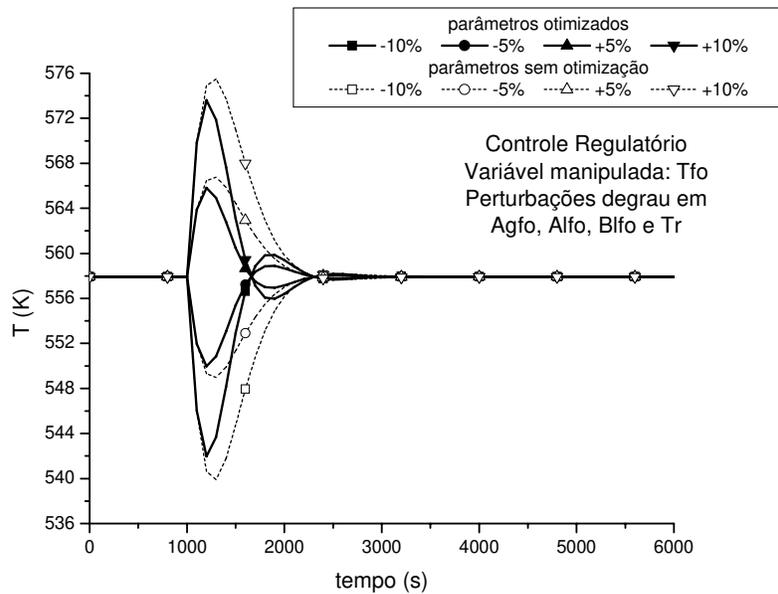


Figura 4.17 - Manipulação de T_{fo} – Controle regulatório.

A Tabela 4.10 traz os valores obtidos para o critério de desempenho IAE do controlador, e mais uma vez fica evidenciada a eficácia do procedimento realizado para a obtenção dos parâmetros ótimos.

Tabela 4.10 – Comparação dos valores do critério de desempenho do controlador para situações de controle regulatório.

Perturbação	Critério de desempenho IAE			
	Tfo sem otimização	Tfo com otimização	Tr sem otimização	Tr com otimização
-10%	10592,20	6690,07	21066,65	10478,09
-5%	5302,80	3350,54	10538,29	5219,44
+5%	5305,32	3342,45	10541,35	5173,07
+10%	10591,16	6659,99	21077,16	10289,21

Diante da constatação de melhorias com a série ótima de parâmetros do controlador, estes serão utilizados na apresentação dos resultados das estratégias de controle e otimização em uma e duas camadas.

4.3 ESTRATÉGIAS ALTERNATIVAS DE CONTROLE

Além da utilização do algoritmo DMC, utilizado nos resultados apresentados na seção 4.2, algumas variações desse algoritmo também foram analisadas. Dentre elas, a versão deste controlador com restrições, o QDMC (*Quadratic Dynamic Matrix Control*), além de sua forma adaptativa STQDMC (*Self Tuning Quadratic Dynamic Matrix Control*). As estratégias de controle *feedback*, *feedforward* e uma combinação das duas também são avaliadas. O objetivo de se estudar estas estratégias é propor uma estrutura de otimização em duas camadas alternativa (ou híbrida), uma vez que, com o uso do controlador *feedforward*, as ações corretivas são antecipadas.

4.3.1 CONTROLE FEEDBACK

O controle *feedback* é uma técnica importante, muito usada nas indústrias de processo. Entre suas principais vantagens pode-se citar que a ação corretiva é tomada assim que a variável controlada se desvia do *set-point*, como pode ser observado na Figura 4.18 (adaptado de Stephanopoulos, 1984), não importando o

tipo de perturbação, uma vez que o sistema de controle não requer nenhum conhecimento da fonte ou natureza da perturbação. Nesta figura y representa a saída do processo (variável controlada), d é a perturbação, u corresponde à variável manipulada, y_m é o valor indicado pelo sensor de medida e y_{SP} é o valor desejado (set-point), e ε é o erro entre y_{SP} e y_m .

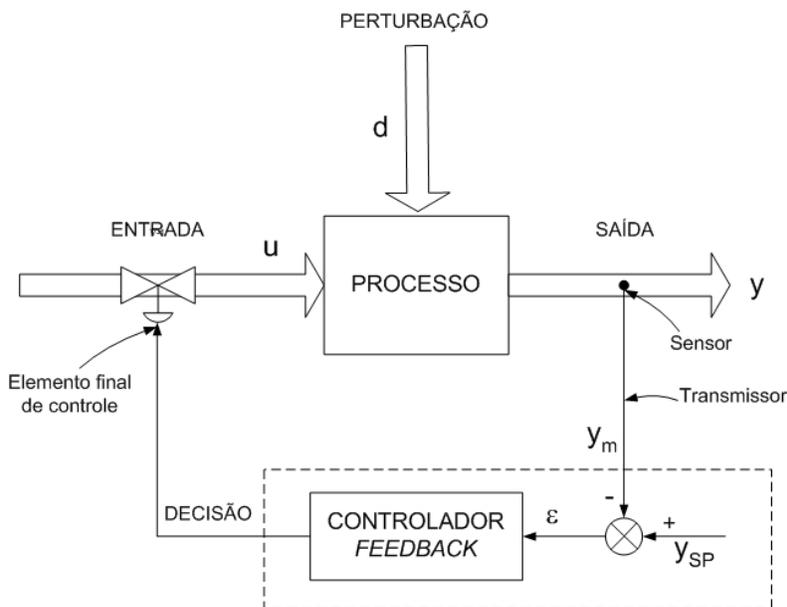


Figura 4.18 - Configuração do controle *feedback*.

No entanto, o controle *feedback* apresenta algumas desvantagens. A principal delas é que nenhuma ação corretiva é tomada até que um desvio na variável controlada ocorra, ou seja, a perturbação atinge o processo e somente depois que a saída controlada se afasta do *set-point* é que o sistema de controle toma alguma ação. Logo, o controle perfeito, no qual a variável controlada nunca se desvia do *set-point* durante perturbações ou mudanças de *set-point*, é teoricamente impossível. Embora a maioria dos processos permita alguma flutuação da variável controlada dentro de certa faixa, existem particularmente duas condições que fazem com que o controle *feedback* não funcione bem. Uma delas é a ocorrência de perturbações de grande magnitude que sejam fortes o suficiente para afetar seriamente ou mesmo danificar o processo. Além disso, ele pode não ser satisfatório para processos com constantes de tempo grandes e/ou grandes

atrasos. Quando ocorrem perturbações intensas e freqüentes, o processo acaba operando continuamente num estado transiente e nunca atinge o estado estacionário desejado.

No contexto da estratégia *feedback*, foi usado o controle QDMC (*Quadratic Dynamic Matrix Control*) e sua forma adaptativa STQDMC (*Self Tuning Quadratic Dynamic Matrix Control*), Garcia e Morshedi (1986), Zafiriou e Marchal (1991), Vasco de Toledo et al. (2004). Entre os controladores digitais, o QDMC e STQDMC foram escolhidos por sua robustez e flexibilidade de ajuste devido à presença de vários parâmetros. Eles também são algoritmos preditivos implementados com sucesso em muitos processos químicos industriais, e, ainda hoje, são controladores extensamente usados nas indústrias.

O algoritmo QDMC é um controle preditivo baseado em modelo (MPC) com restrições e prediz o desempenho das variáveis controladas sobre um horizonte de predição resolvendo um problema de otimização usando programação quadrática (QP) para encontrar as ações do controlador para um determinado horizonte de controle (menor ou igual ao horizonte de predição) (Mayne et al., 2000). O comportamento predito é calculado usando um modelo do processo (modelo de convolução). Os erros projetados entre a trajetória desejada e a resposta predita são usados para determinar ações de controle futuras. Somente a primeira ação de controle é implementada. No próximo instante de amostragem, as medidas reais são usadas para corrigir erros na planta ou modelo e a otimização é repetida para encontrar a próxima solução de controle ótima.

Quando se propõem critérios de alto nível de complexidade para obter a ação de controle, considerando restrições nas variáveis controladas e manipuladas, é necessário usar algoritmos de otimização, porque, neste caso, não existe a possibilidade de soluções analíticas. Neste trabalho, o critério de performance, otimizado via algoritmo SQP, é expresso como:

$$J = \min_{\Delta u} \phi = \frac{1}{2} \Delta u^T H \Delta u + c^T \Delta u$$

onde :

$$H = A^T W^T W A$$

$$c^T = -E'^T W^T W A \quad (4.6)$$

sujeito às seguintes restrições operacionais :

$$\hat{y}_{\min} \leq y \leq y_{\max}$$

$$u_{\min} \leq u \leq u_{\max}$$

$$\Delta u_{\min} \leq \Delta u \leq \Delta u_{\max}$$

Nesta equação W é a matriz de fatores de peso (parâmetros ajustáveis que permitem penalizar as ações de controle); A é a matriz dinâmica do sistema; E' é o vetor que armazena as diferenças entre as predições passadas e os valores de referência; Δu é o vetor com os incrementos das variáveis manipuladas.

Embora estes controladores, associados aos algoritmos de otimização, sejam capazes de considerar problemas de controle mais sofisticados, os benefícios obtidos nesta estratégia devem justificar o aumento inerente da complexidade (esforços computacionais, por exemplo) quando eles são comparados aos métodos analíticos de solução (DMC clássico).

4.3.2 CONTROLE FEEDFORWARD

No entanto, para situações nas quais o controle *feedback* não é satisfatório, podem-se alcançar melhoras significativas no controle através da inclusão do controle *feedforward*. Mas, para usar este tipo de controle, as perturbações devem ser detectadas assim que elas ocorrem (Figura 4.19, adaptado de Stephanopoulos, 1984).

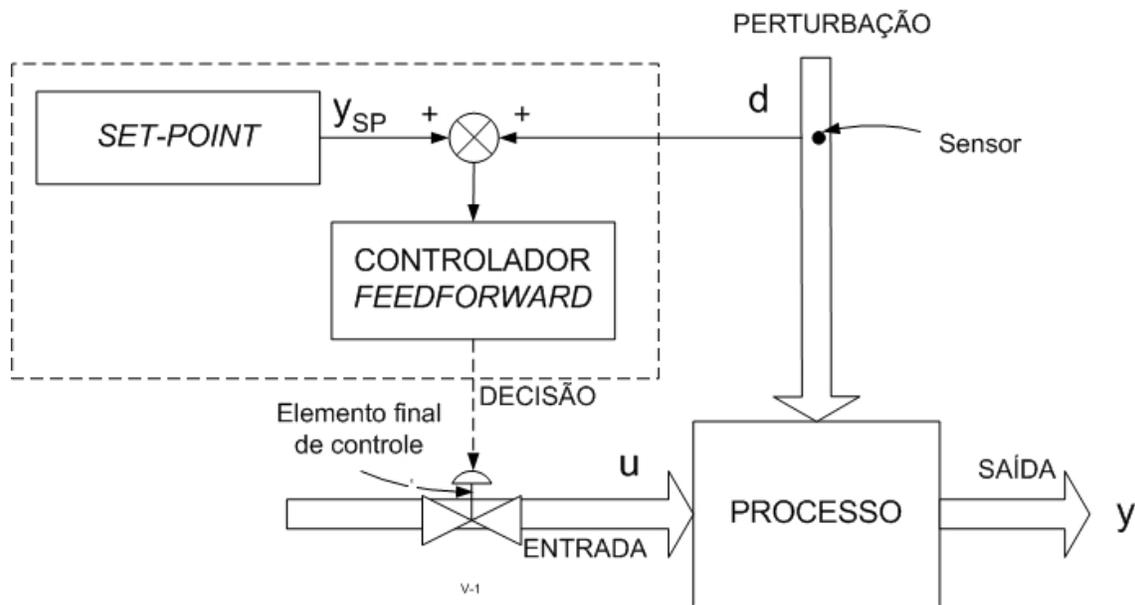


Figura 4.19 - Configuração do controle *feedforward*.

A idéia básica do controle *feedforward* é medir as principais perturbações e tomar as ações corretivas antes que elas perturbem o processo. Primeiramente a perturbação é medida diretamente e então o efeito que ela terá na saída do processo é antecipado. Em seguida, a variável manipulada é alterada de forma a eliminar completamente o impacto da perturbação na saída do processo. A ação de controle tem início imediatamente depois que a perturbação foi detectada. Desta forma, conclui-se que o controle *feedback* apresenta uma ação compensatória, enquanto que o *feedforward* age de uma forma antecipatória.

Uma característica muito importante do controle *feedforward* é que seu projeto está diretamente relacionado ao modelo do processo, ou seja, quanto melhor o modelo representar o comportamento do processo, melhor será o controle *feedforward* resultante.

Neste trabalho, os modelos utilizados pelo controle *feedforward* foram o próprio modelo determinístico do processo e o modelo paramétrico das variáveis controladas e manipuladas, apresentado na seção 3.3 do Capítulo 3. A metodologia proposta para a obtenção do modelo estatístico, a partir do planejamento fatorial, é um novo procedimento introduzido neste trabalho e, como será visto posteriormente, apresenta grande potencial devido à sua simplicidade e

à sua boa capacidade de predição, o que minimiza o tempo computacional para a solução do problema. A utilização do modelo estatístico na estratégia de controle puramente *feedforward* gera sempre *off-sets*, mas a inclusão da estratégia *feedback*, como será evidenciado mais tarde, elimina esta característica indesejada.

Na primeira proposta para a estratégia *feedforward*, o modelo determinístico foi utilizado no problema de otimização, no qual a variável manipulada foi usada como parâmetro de otimização com o intuito de resolver o seguinte problema de minimização:

$$\begin{array}{ll} \min_{Tfo} \left((T - T_{set\ point})^2 \right) & \min_{Tr} \left((T - T_{set\ point})^2 \right) \\ \text{s.t. } Tfo^{\min} \leq Tfo \leq Tfo^{\max} & \text{s.t. } Tr^{\min} \leq Tr \leq Tr^{\max} \end{array} \quad \text{ou} \quad (4.7)$$

Na segunda metodologia, a estratégia *feedforward* foi desenvolvida usando o modelo estatístico. A análise estatística foi usada para a obtenção da equação empírica que descreve a temperatura de alimentação dos reagentes (T_{fo}) e a temperatura do fluido refrigerante (Tr) como variáveis manipuladas. As equações empíricas são apresentadas como função da temperatura de saída do reator ($T_{set\ point}$), a temperatura de alimentação dos reagentes (quando a variável manipulada é Tr), a temperatura do fluido refrigerante (quando T_{fo} é a variável manipulada), as concentrações de alimentação do o-cresol (B_{lfo}) e do hidrogênio (A_{gfo} e A_{lfo} , nas fases gasosa e líquida, respectivamente). As equações empíricas lineares são dadas pelas equações (4.8) e (4.9).

$$\begin{aligned} T_{fo} = & T_{set\ point} - (-62,50498252 + 355,6215012 * A_{gfo} + \\ & 3,836649024 * A_{lfo} + 143,4758567 * B_{lfo} + \\ & 0,428379079 * Tr) / 0,67691109 \end{aligned} \quad (4.8)$$

$$Tr = Tset\ point - (-62,50498252 + 355,6215012 * Agfo + 3,836649024 * Aifo + 143,4758567 * Bifo + 0,67691109 * Tfo) / 0,428379079 \quad (4.9)$$

4.3.3 CONTROLE FEEDBACK-FEEDFORWARD

Apesar das vantagens citadas, o controle *feedforward* apresenta muitas desvantagens. Como ele não reconhece perturbações não medidas, são necessárias a identificação e medida de todas as possíveis perturbações. Além disso, qualquer mudança nos parâmetros de um processo (desativação do catalisador com o tempo, redução de coeficientes de transferência de calor devido a depósitos etc.) não pode ser compensada por um controlador *feedforward*, pois o seu impacto não é detectado. Por outro lado, o controle *feedback* é bastante insensível a todas estas desvantagens, mas não tem um bom desempenho em alguns casos.

Assim, é de se esperar que um sistema de controle *feedforward-feedback* funcione bem, já que vários desvios causados pelos pontos fracos do controle *feedforward* serão corrigidos pelo controle *feedback*, que monitora diretamente o comportamento da variável controlada, como pode ser visto na Figura 4.20, adaptada de Stephanopoulos (1984), onde u_1 corresponde à ação de controle *feedback* e u_2 à ação *feedforward*.

Esta estratégia mista é representada pela equação (4.10).

$$u_{\text{feedback + feedforward}} = \beta u_{\text{feedforward}} + (1 - \beta) u_{\text{feedback}} \quad (4.10)$$

onde $0 \leq \beta \leq 1$. Na verdade esta equação expressa a porcentagem de ação *feedback* e *feedforward* que será utilizada para os objetivos de controle. Quando β é nulo, a ação é puramente *feedback*; β igual a 1 gera uma ação puramente *feedforward*.

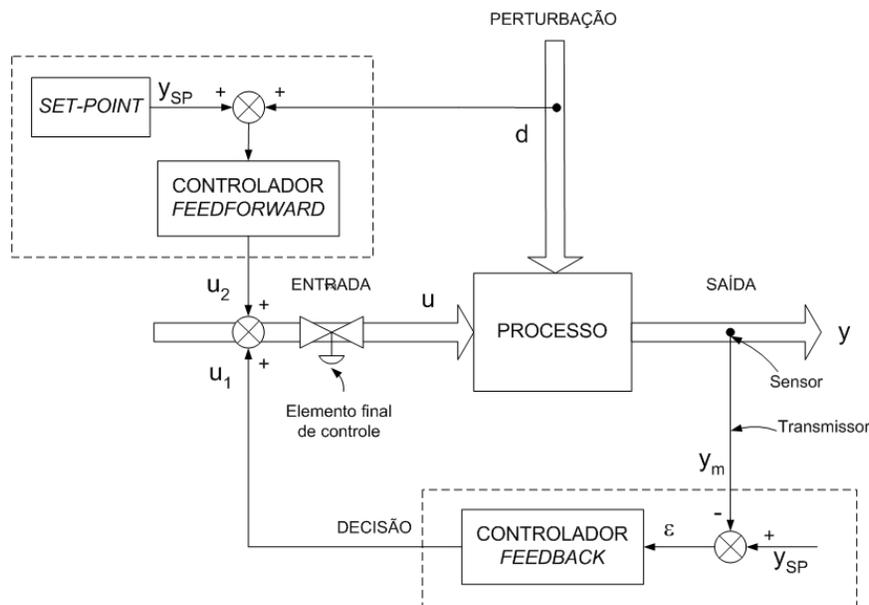


Figura 4.20 - Configuração do controle *feedback-feedforward*.

Desta forma o desempenho de cinco diferentes estratégias de controle foram analisadas: controle *feedback* (FB), controle *feedforward* baseado no modelo determinístico (FFD) e no modelo estatístico (FFS), estratégia mista (*feedback* e *feedforward* combinados), onde o controle *feedforward* pode ser baseado no modelo determinístico (FB+FFD) ou estatístico (FB+FFS).

Assim, alguns algoritmos e estratégias de controle foram avaliados, o que permitiu um bom entendimento de sua natureza, assim como das principais características do reator em malha fechada. Além disso, foi possível também identificar quais controladores e estratégias foram mais apropriados para operar o reator de uma maneira eficiente e segura.

4.3.4 RESULTADOS

Para o controle do reator, dependendo do problema considerado, T_{fo} foi usada como variável manipulada e T_r como variável perturbada, e vice-versa.

Existem duas situações nas quais um sistema de controle pode ser requerido. Na primeira, a perturbação, também chamada de carga, muda de maneira imprevisível e o objetivo do controle é manter a saída num valor desejado. Este é

o chamado problema de controle regulatório. Na segunda, é feita uma mudança no valor do estado estacionário desejado (*set-point*) e o objetivo do controle é levar a saída ao novo estado estacionário. Este é o chamado problema de controle servo.

A análise de desempenho da estratégia *feedback* para os controladores QDMC e STQDMC foi considerada para condições operacionais típicas. O controle servo com T_{fo} como variável manipulada e o controle regulatório com T_r como variável manipulada são mostrados, respectivamente, na Figura 4.21 e Figura 4.22. Elas ilustram o bom desempenho de ambos os controladores, mas como, para as condições estudadas, o STQDMC requer um tempo computacional maior em função de seu mecanismo adaptativo, o algoritmo QDMC é preferível para propostas de integração em tempo real e, portanto será usado para as análises seguintes.

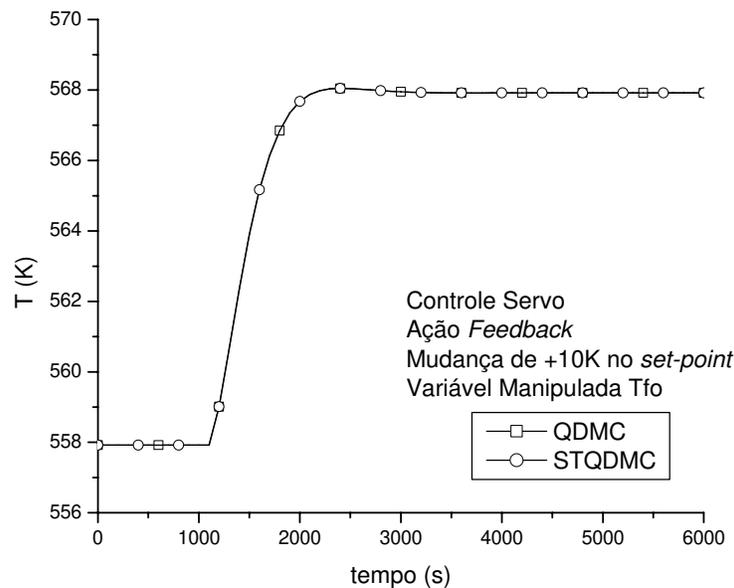


Figura 4.21 - Controle servo do reator - perturbação degrau em T_r .

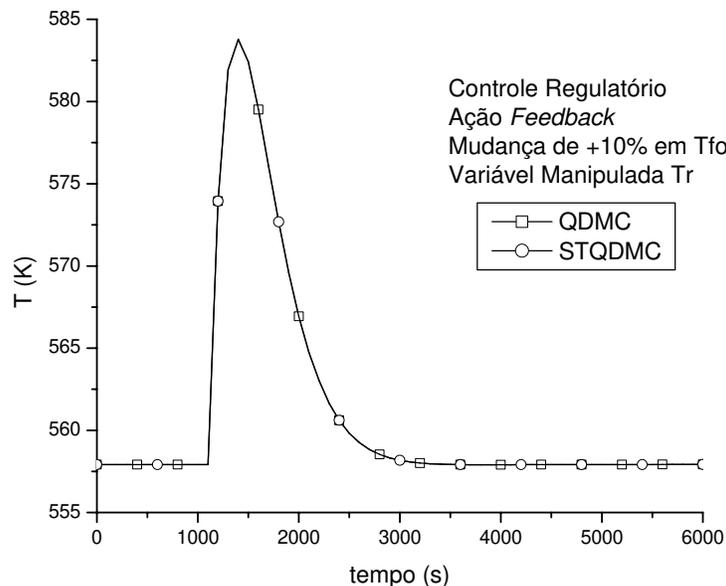


Figura 4.22 - Controle regulatório do reator - perturbação degrau em T_{fo} .

Para avaliar a estratégia de controle mista (FF e FB) foram realizados testes para vários valores de β da equação (4.10). Para isso, o controle *feedforward* foi baseado no modelo determinístico, que não apresenta *off-sets*. A Figura 4.23 a Figura 4.30 mostram os perfis obtidos para as estratégias que serão estudadas.

A primeira estratégia avaliada refere-se ao controle servo do reator, manipulando-se a temperatura de alimentação dos reagentes. Neste caso a mudança de *set-point* foi de +10K. Os perfis obtidos são mostrados na Figura 4.23 e Figura 4.24.

Analisando a Figura 4.23 que mostra o perfil dinâmico da temperatura de saída do reator (variável controlada) observa-se que a estratégia de controle *feedforward* é a que alcança mais rapidamente o *set-point* desejado. Na seqüência tem-se a estratégia *feedback*. Como esperado, a variável manipulada (Figura 4.24) sofre uma mudança brusca quando a ação de controle é puramente *feedforward*. Para a ação *feedback* a variação na variável manipulada é mais suave. Dentre as estratégias mistas observa-se que a que alcança o *set-point* desejado mais rapidamente com menor *overshoot* na variável controlada é a obtida com $\beta = 0,7$.

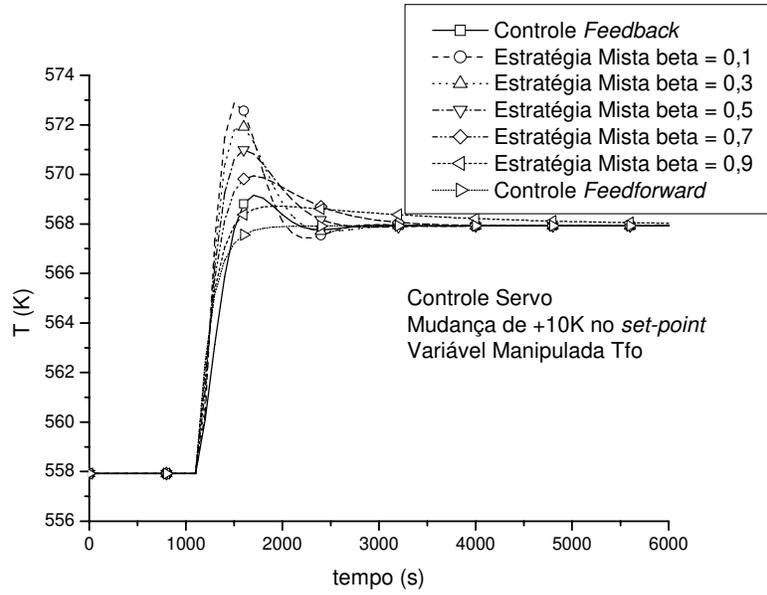


Figura 4.23 - Análise da Estratégia Mista para o controle servo com T_{fo} como variável manipulada – Perfil de Temperatura.

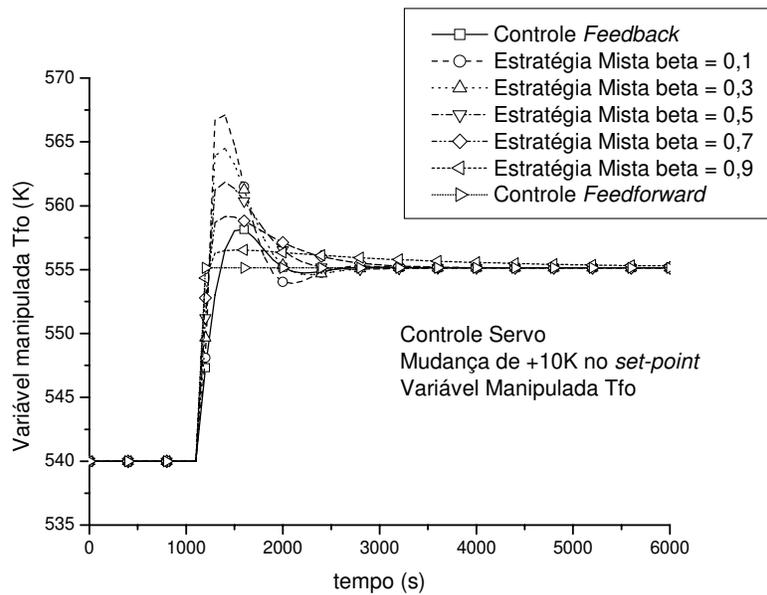


Figura 4.24 - Análise da Estratégia Mista para o controle servo com T_{fo} como variável manipulada – Perfil da variável manipulada.

Para o controle servo manipulando-se a temperatura do fluido refrigerante (Figura 4.25 e Figura 4.26), observa-se um comportamento semelhante.

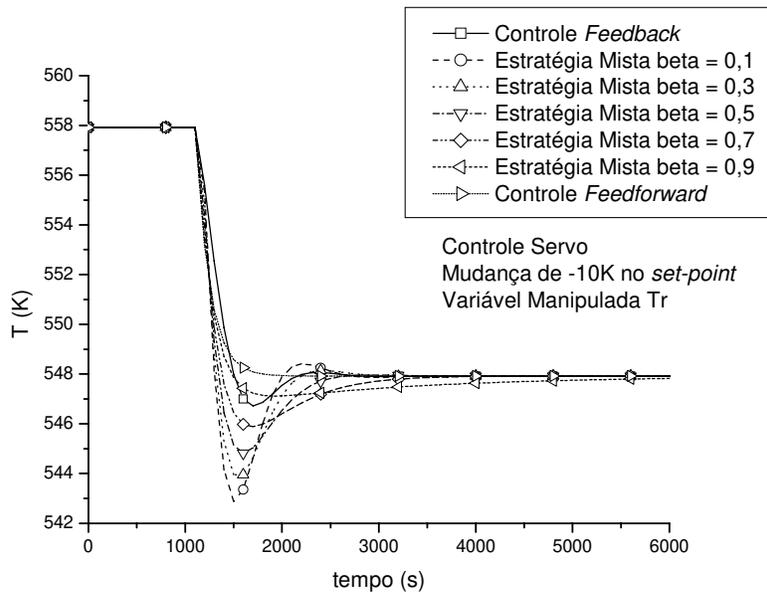


Figura 4.25 - Análise da Estratégia Mista para o controle servo com Tr como variável manipulada – Perfil de Temperatura.

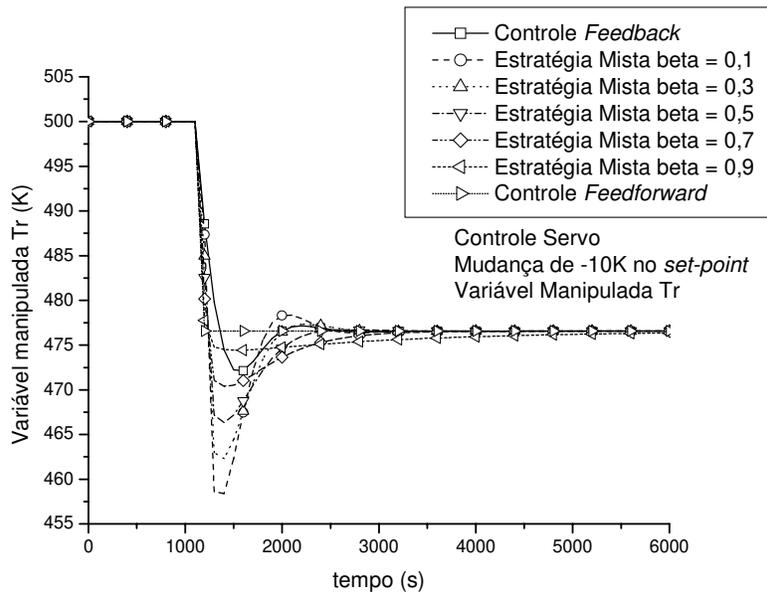


Figura 4.26 - Análise da Estratégia Mista para o controle servo com Tr como variável manipulada – Perfil da variável manipulada.

A Tabela 4.11 mostra os valores de critério de desempenho IAE do controlador para a situação de controle servo. Pode-se observar que são confirmadas as conclusões que foram obtidas pela simples visualização dos perfis dinâmicos das variáveis controladas e manipuladas. Portanto, no caso particular do controle servo deste reator não foram alcançadas melhorias com a combinação das ações de controle *feedback* e *feedforward*.

Tabela 4.11 - Comparação dos valores do critério de desempenho do controlador para estratégias de controle mistas – Controle servo.

	Variável manipulada	
	Tfo	Tr
Feedback ($\beta=0$)	3020,58	2941,17
$\beta = 0,1$	4050,91	3917,09
$\beta = 0,3$	3872,72	3759,41
$\beta = 0,5$	3717,65	3629,90
$\beta = 0,7$	3661,58	3584,78
$\beta = 0,9$	3829,54	3745,88
Feedforward ($\beta=1$)	2108,93	2061,33

No caso do controle regulatório a associação das estratégias de controle *feedback* e *feedforward* traz avanços significativos no desempenho do controlador. Primeiramente manipulou-se a temperatura de alimentação dos reagentes e perturbou-se os outros parâmetros operacionais. Os perfis dinâmicos das variáveis controlada e manipulada são mostrados, respectivamente, na Figura 4.27 e Figura 4.28. Novamente a estratégia puramente *feedforward* alcança o *set-point* desejado mais rapidamente, mas em detrimento de uma mudança brusca na variável manipulada. Na estratégia *feedback* ocorre *overshoot* bastante acentuado na variável controlada, o que prejudica a eficiência e segurança do controle do reator.

Analisando agora as estratégias de controle mistas, observa-se que a que alcança mais rapidamente o *set-point* desejado é quando utiliza-se $\beta = 0,9$. Com relação à variável manipulada (Figura 4.27), com exceção da estratégia puramente *feedback*, em todas as outras ocorrem mudanças relativamente bruscas.

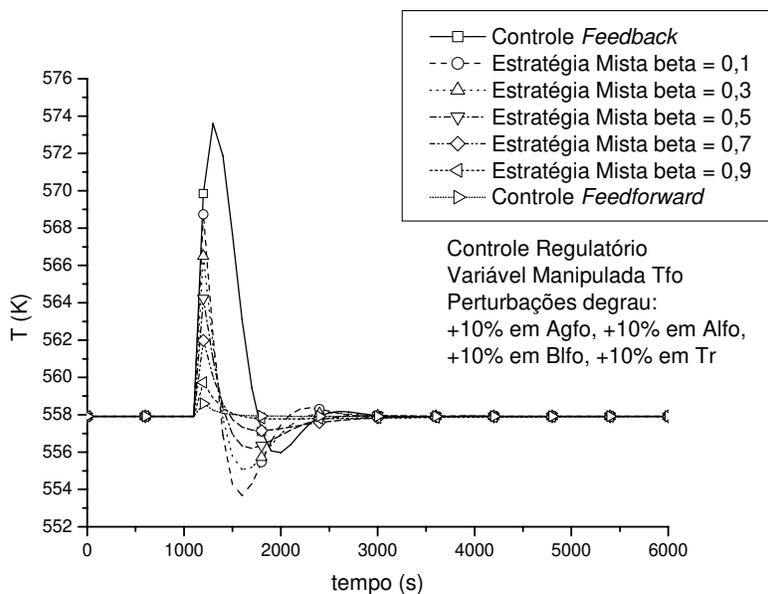


Figura 4.27 - Análise da Estratégia Mista para o controle regulatório com T_{fo} como variável manipulada – Perfil de Temperatura.

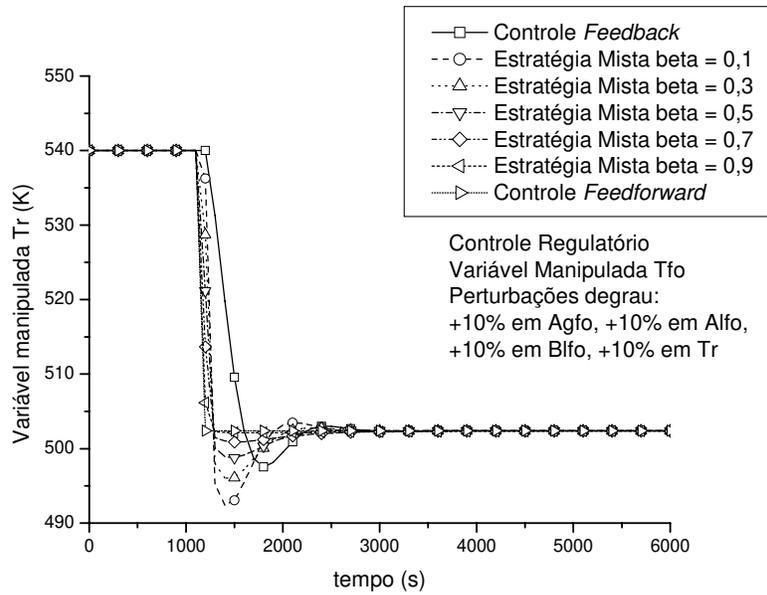


Figura 4.28 - Análise da Estratégia Mista para o controle regulatório com Tfo como variável manipulada – Perfil da variável manipulada.

Quando manipula-se a temperatura do fluido refrigerante, o comportamento apresentado tanto pela variável controlada (Figura 4.29) quanto pela manipulada (Figura 4.30) é bastante semelhante ao apresentado para a última situação analisada, o que pode ser visto também através dos valores do critério de desempenho IAE do controlador, apresentados na Tabela 4.12.

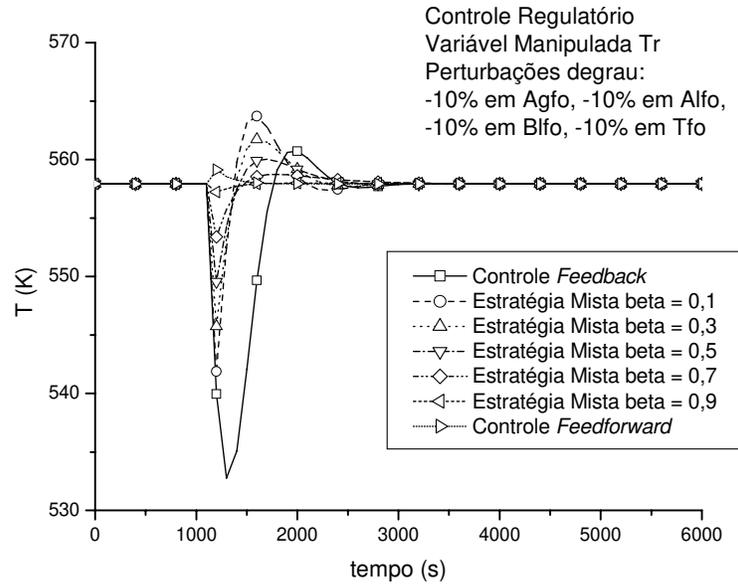


Figura 4.29 - Análise da Estratégia Mista para o controle regulatório com Tr como variável manipulada – Perfil de Temperatura.

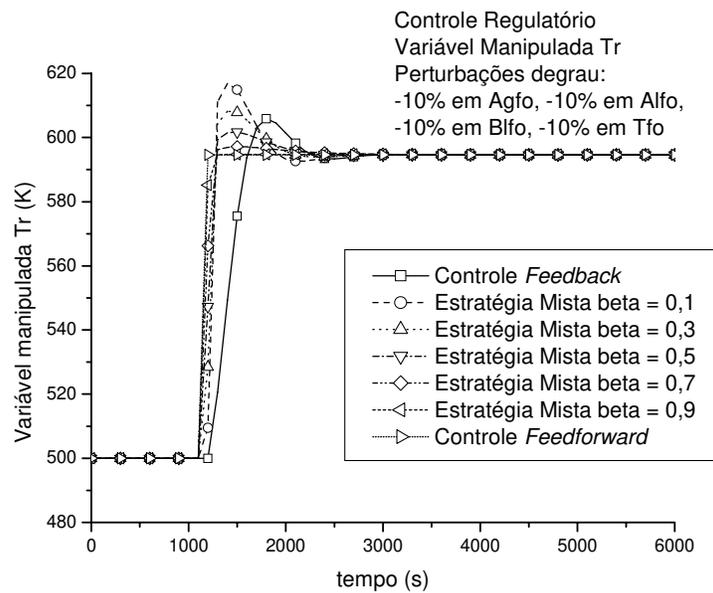


Figura 4.30 - Análise da Estratégia Mista para o controle regulatório com Tr como variável manipulada – Perfil da variável manipulada.

Tabela 4.12 - Comparação dos valores do critério de desempenho do controlador para estratégias de controle mistas – Controle regulatório.

	Variável manipulada	
	Tfo	Tr
Feedback ($\beta=0$)	6660,00	10478,08
$\beta = 0,1$	3400,84	4746,41
$\beta = 0,3$	2641,52	3576,52
$\beta = 0,5$	2010,38	2527,39
$\beta = 0,7$	1368,31	1475,12
$\beta = 0,9$	675,67	280,48
Feedforward ($\beta=1$)	137,27	246,52

Utilizando os valores de β que tiveram melhor desempenho, mesmo para o controle servo onde a estratégia mista não forneceu melhorias no controle da temperatura de saída do reator, faz-se a comparação do desempenho das estratégias estudadas (*feedback*, *feedforward* e mista), que é mostrada na Figura 4.31 a Figura 4.38.

Na Figura 4.31 e Figura 4.32 são mostrados os perfis da temperatura de saída do reator e da variável manipulada para o controle servo do reator, com manipulação da temperatura de alimentação dos reagentes, Tfo.

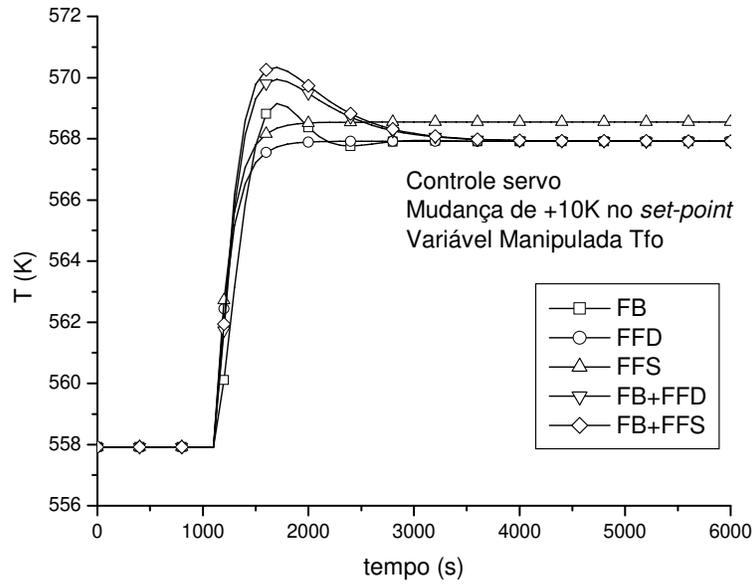


Figura 4.31 - Controle servo do reator com Tfo como variável manipulada – Perfil da variável controlada.

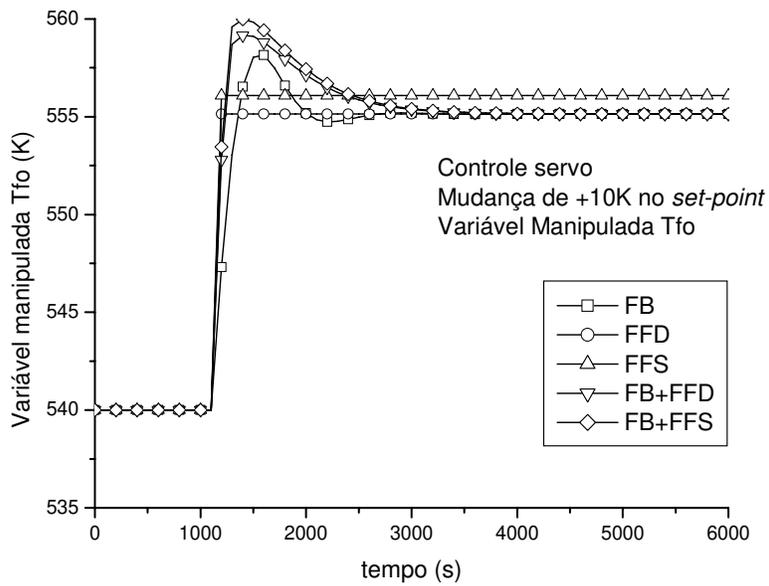


Figura 4.32 - Controle servo do reator com Tfo como variável manipulada – Perfil da variável manipulada.

Primeiramente resalta-se que a estratégia *feedforward*, usando o modelo estatístico, sempre gera um *off-set* em relação ao valor de referência, embora de intensidade praticamente desprezível (aproximadamente 1K, menor que a precisão da instrumentação para medição de temperatura). Este comportamento ocorre devido às limitações do modelo para reproduzir o comportamento do sistema para todas as condições quando comparado ao modelo determinístico. Por outro lado, o modelo estatístico é resolvido e implementado de maneira mais simples, característica importante para os procedimentos em tempo real. Outro ponto interessante é a eliminação de *off-set* pela inclusão do controle *feedback* ao controle *feedforward* baseado no modelo estatístico. É necessário verificar que, devido à melhor capacidade de predição do modelo determinístico, a estratégia de controle *feedforward* com este modelo conduz o sistema rapidamente ao *set-point* desejado, mas em detrimento do comportamento da variável manipulada, que dá um salto repentino, o que pode não ser desejável do ponto de vista operacional.

De uma forma geral, para o caso do controle servo, a estratégia que concilia rapidez para alcançar os *set-points* desejados com mudanças suaves na variável manipulada é a estratégia *feedback* (Figura 4.31 e Figura 4.32), o que também é evidenciado quando a variável manipulada é a temperatura do fluido refrigerante (Figura 4.33 e Figura 4.34).

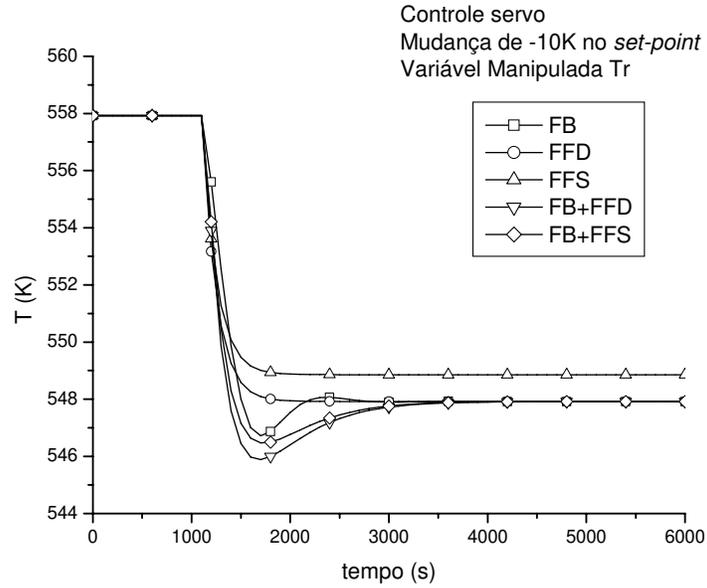


Figura 4.33 - Controle servo do reator com Tr como variável manipulada – Perfil da variável controlada.

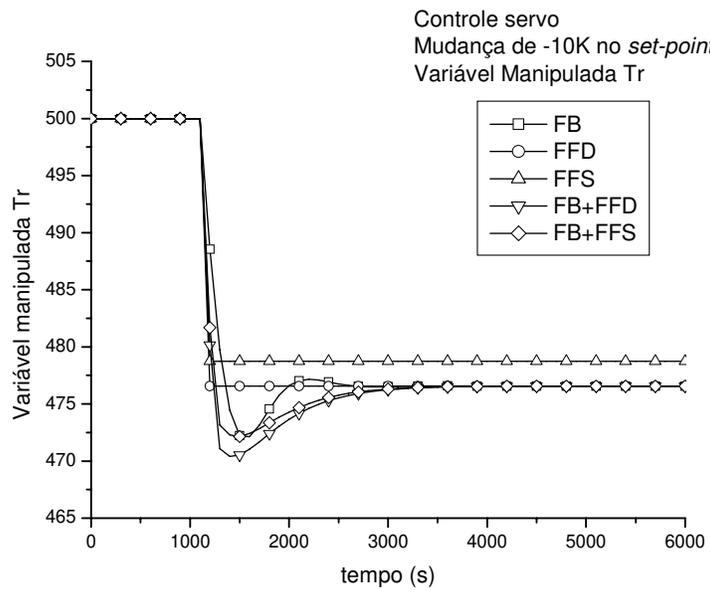


Figura 4.34 - Controle servo do reator com Tr como variável manipulada – Perfil da variável manipulada.

Já para o caso do controle regulatório, o cenário é diferente. A estratégia *feedback* apresenta um *overshoot* bastante acentuado na variável controlada, tanto para o caso onde a temperatura de alimentação dos reagentes é manipulada (Figura 4.35), quanto para o caso onde a variável manipulada é a temperatura do fluido refrigerante (Figura 4.37). A estratégia *feedforward* baseada no modelo estatístico gera *off-sets*, que são eliminados quando se adiciona a ação *feedback* (FB+FFS). Ocorre uma mudança brusca na variável manipulada quando a estratégia é puramente *feedforward*, mas com rapidez no alcance do *set-point* desejado. Deve-se ressaltar que a Figura 4.36 e Figura 4.38 mostram que, com exceção da estratégia *feedback*, a variável manipulada sofre mudanças bruscas em todas elas.

Desta forma observa-se que cada situação deve ser analisada de forma bastante criteriosa para que se defina qual seria a melhor estratégia. Se o processo permitir mudanças bruscas na variável manipulada, é preferível a utilização da estratégia de controle *feedforward*. Por outro lado, se estas mudanças trouxerem instabilidade ou falta de segurança, o ideal seria optar por outras estratégias de controle.

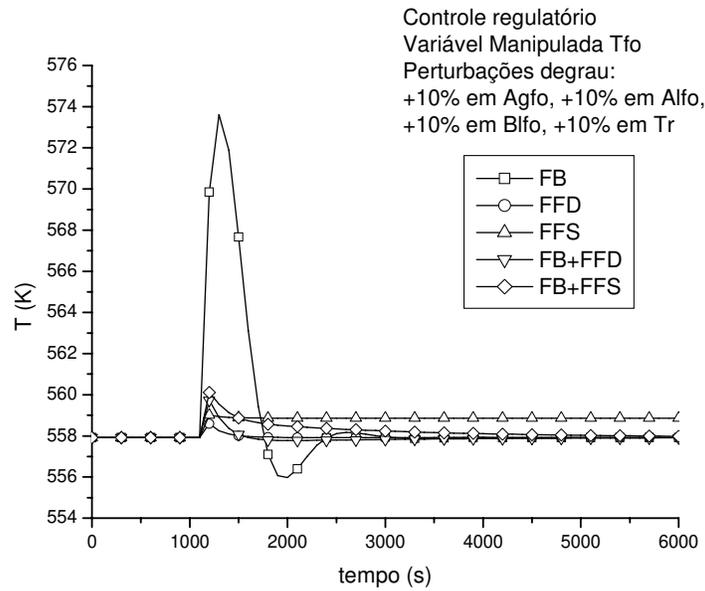


Figura 4.35 - Controle regulatório do reator com Tfo como variável manipulada – Perfil da variável controlada.

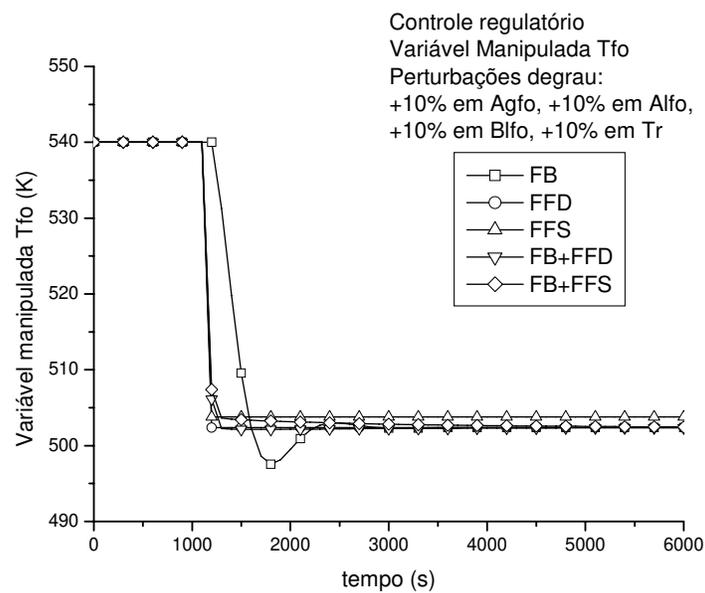


Figura 4.36 - Controle regulatório do reator com Tfo como variável manipulada – Perfil da variável manipulada.

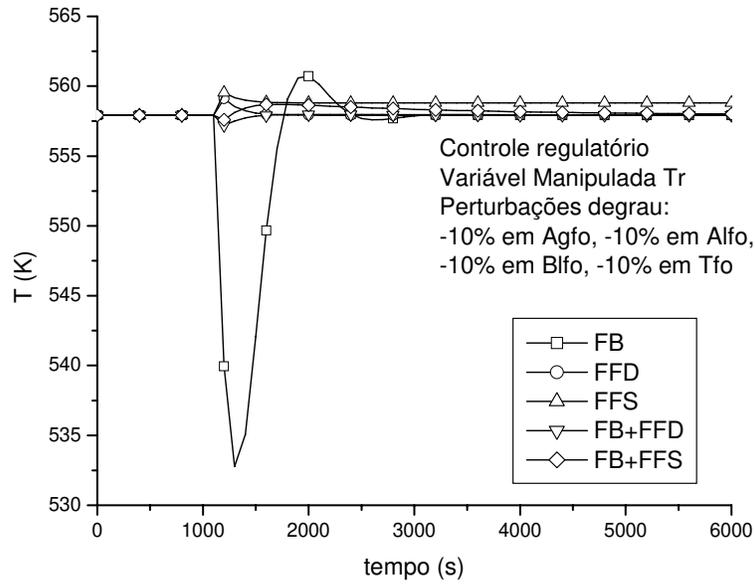


Figura 4.37 - Controle regulatório do reator com Tr como variável manipulada – Perfil da variável controlada.

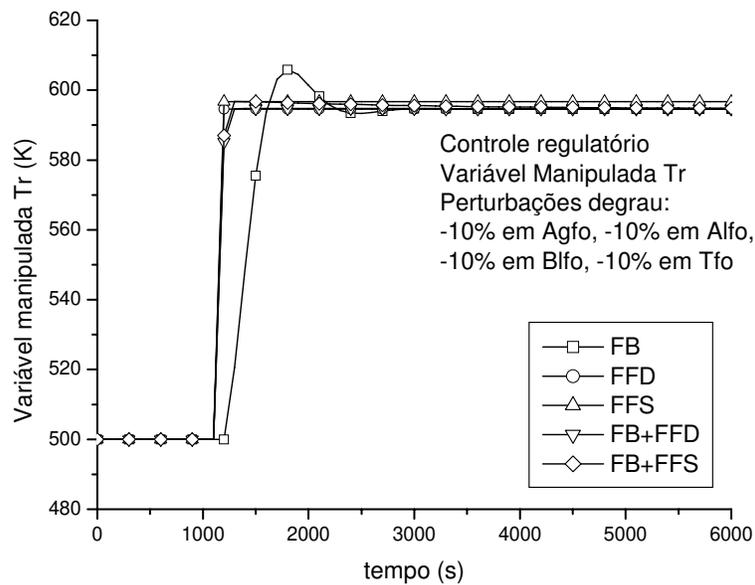


Figura 4.38 - Controle regulatório do reator com Tr como variável manipulada – Perfil da variável manipulada.

4.4 CONCLUSÕES

Neste capítulo foram apresentados os resultados obtidos com a utilização do controlador DMC, QDMC e STQDMC com as estratégias de controle clássicas apresentadas. Além disso, destaca-se a metodologia desenvolvida para determinação dos parâmetros ótimos do controlador preditivo. Este procedimento evita o aumento na complexidade do problema de integração, uma vez que não será necessária a inclusão da estimativa de parâmetros a cada vez que o sistema é perturbado. A série de parâmetros obtidos a partir da utilização da metodologia de planejamento fatorial se mostrou bastante adequada para diferentes situações operacionais do reator.

Além disso, foram avaliados também outros algoritmos (QDMC e STQDMC), assim como estratégias alternativas para o controle térmico do reator. Ficou evidenciado que deve-se fazer uma análise criteriosa dos objetivos de controle e restrições operacionais para que se possam definir quais as estratégias que apresentam melhor desempenho para determinadas situações.

A seguir serão integrados os procedimentos de controle extensamente avaliados neste capítulo aos problemas de otimização do reator, implementando-se, desta forma, a estrutura de otimização em duas camadas, controle hierárquico.

5. OTIMIZAÇÃO EM DUAS CAMADAS

5.1 INTRODUÇÃO

A integração de processos em tempo real envolvendo otimização e controle do processo pode ser realizada simultaneamente ou seqüencialmente. A estrutura mais tradicional é a estrutura em duas camadas, que pode ser vista na Figura 5.1. Nesta estrutura a camada de otimização calcula os valores de referência para a camada de controle avançado. O procedimento é realizado seqüencialmente.

Neste capítulo são mostrados os resultados obtidos mediante a otimização do processo empregando a estrutura hierárquica em duas camadas, onde utiliza-se os algoritmos de otimização Levenberg-Marquardt e SQP e o algoritmo de controle QDMC nas configurações *feedback* e *feedforward*.

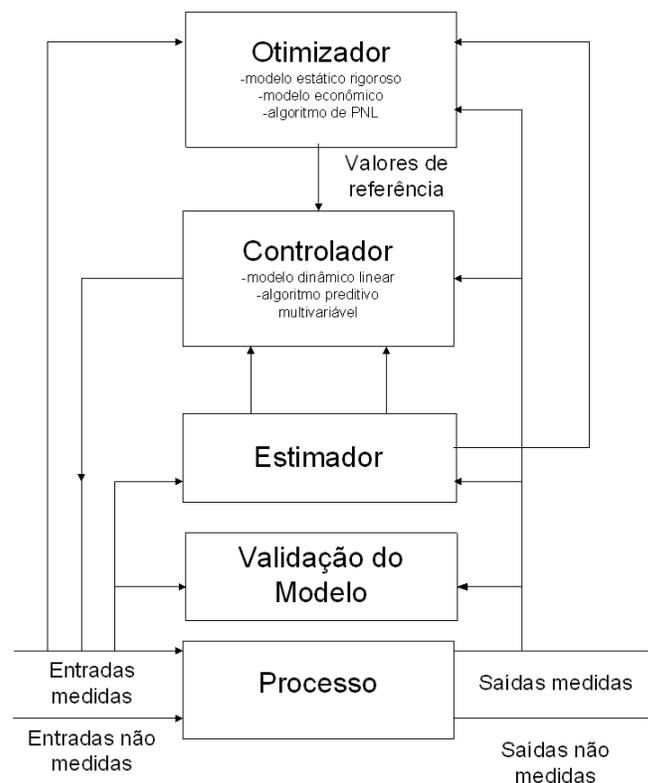


Figura 5.1 - Estrutura de otimização em duas camadas.

5.2 ESTRATÉGIA TRADICIONAL DE OTIMIZAÇÃO EM DUAS CAMADAS

O objetivo final deste trabalho é a integração do processo numa estrutura em uma camada. Mas inicialmente é aconselhável realizar a estrutura em duas camadas, que é a mais tradicional para observar como se comporta o processo.

Na estratégia em duas camadas o problema de otimização é resolvido independentemente do problema de controle e o algoritmo de otimização gera valores de referência para o controlador avançado. Esta estratégia apresenta a vantagem de que erros de modelagem existentes no problema econômico pouco irão influenciar o desempenho do sistema em malha fechada. De acordo com os resultados apresentados na literatura (Tvrzská de Gouvêa e Odloak, 1998), esta estratégia apresenta bons resultados na ausência de perturbações, e quando há perturbações fortes e freqüentes na planta e os objetivos econômicos variam significativamente, no entanto, esta estratégia pode não apresentar bons resultados.

O reator de hidrogenação é um sistema multivariável não linear com um número relativamente grande de variáveis operacionais que podem ser escolhidas como variáveis de decisão. O desempenho da otimização é dependente da escolha certa, o que não é uma tarefa trivial. Além disso, como o sistema é não linear, podem ser encontrados mínimos locais e a trajetória de solução pode ser uma função das estimativas iniciais. Outro ponto a ser considerado é a interação entre as variáveis e seus impactos no comportamento do processo.

Na integração do processo em duas camadas tem-se uma estrutura hierárquica, onde a camada de otimização calcula os *set-points* para o controlador, que é baseado num procedimento DMC. A camada de otimização é composta por uma função objetivo, restrições operacionais, balanços de massa e energia, e o modelo do processo.

A descrição matemática do problema de otimização considerado neste trabalho pode ser vista abaixo.

$$\begin{array}{ll}
 \min_{T_{fo}} (X - X_{referência})^2 & \min_{T_r} (X - X_{referência})^2 \\
 \text{s.t. } T_{fo}^{\min} \leq T_{fo} \leq T_{fo}^{\max} & \text{ou } \text{s.t. } T_r^{\min} \leq T_r \leq T_r^{\max} \\
 BM = 0 & BM = 0 \\
 BE = 0 & BE = 0
 \end{array} \quad (5.1)$$

onde $0,7 * T_{fo} \leq T_{fo} \leq 1,3 * T_{fo}$ (ou $0,7 * T_r \leq T_r \leq 1,3 * T_r$), X é a conversão de o-cresol na saída do reator e $X_{referência}$ é baseada na conversão de o-cresol obtida em condições normais de operação, na ausência de perturbações, ou a conversão máxima desejada. O modelo do processo é incluído no problema de otimização através dos seus balanços de massa (BM) e de energia (BE).

Inicialmente resolveu-se simplesmente manter a conversão do estado estacionário em todo o horizonte de tempo estudado, independente das alterações de composição e temperatura da matéria-prima ou das restrições econômicas, energéticas, etc., sofridas pelo processo. Esta é uma situação que pode acontecer, por exemplo, quando o produto deste processo é matéria-prima para outro processo. Este procedimento foi realizado tanto com o método de Levenberg-Marquardt quanto com o método SQP. Os resultados obtidos com os dois algoritmos de otimização são mostrados a seguir.

5.2.1 OTIMIZAÇÃO PELO MÉTODO DE LEVENBERG-MARQUARDT

O método de Levenberg-Marquardt resolve um problema de mínimos quadrados sujeito somente a limites nas variáveis de decisão. O problema geral é declarado como:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} F(x)^T F(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m f_i(x)^2 \quad (5.2)$$

sujeito a:

$$x_l \leq x \leq x_u \quad (5.3)$$

onde $m \geq n$, $F: \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}^m$ e $f_i(x)$ é o i -ésimo componente da função objetivo $F(x)$.

Os resultados obtidos para esta estratégia utilizando o método de Levenberg-Marquardt com o objetivo de manter a conversão nos valores de referência em condições normais de operação são mostrados na Figura 5.2 a Figura 5.7.

Na Figura 5.2 a Figura 5.4 foram realizadas alterações positivas nos valores de algumas variáveis de entrada e a temperatura de alimentação dos reagentes (T_{fo}) foi escolhida como variável manipulada. Observa-se claramente que a conversão foi mantida no nível desejado (Figura 5.2) com uma diminuição pouco significativa na temperatura dos reagentes (Figura 5.3).

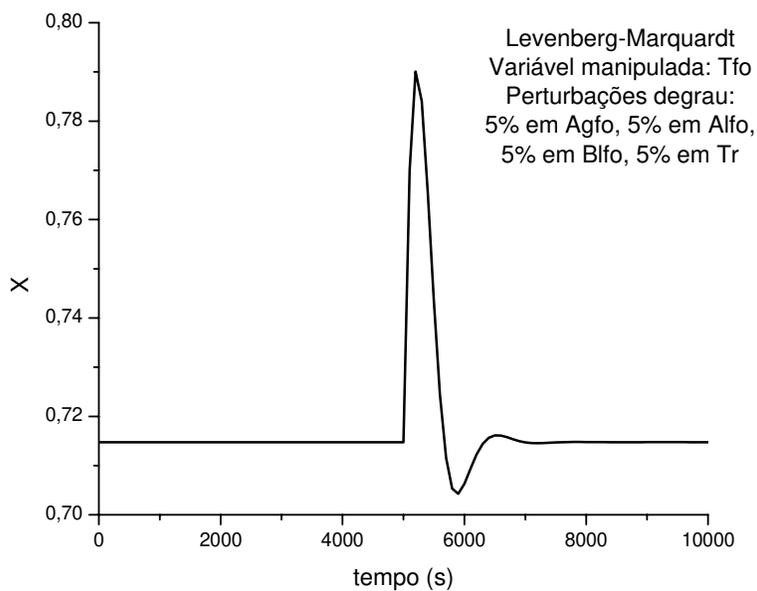


Figura 5.2 - Otimização em duas camadas (Levenberg-Marquardt) com T_{fo} como variável manipulada – Perfil de conversão.

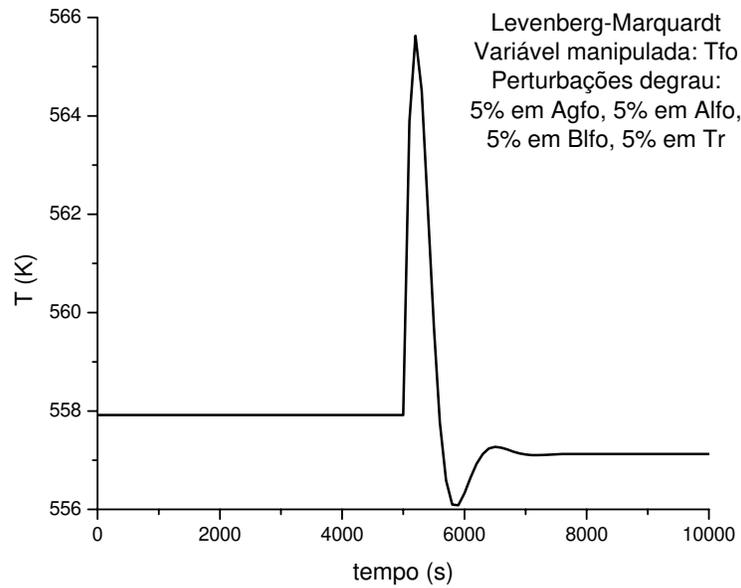


Figura 5.3 - Otimização em duas camadas (Levenberg-Marquardt) com Tfo como variável manipulada – Perfil de temperatura.

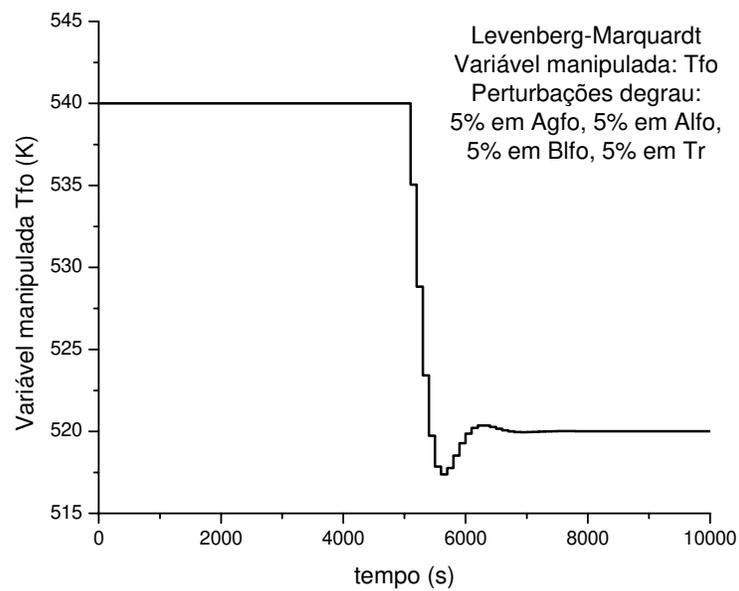


Figura 5.4 - Otimização em duas camadas (Levenberg-Marquardt) com Tfo como variável manipulada – Variável manipulada.

Já na Figura 5.5 a Figura 5.7 foram realizadas alterações negativas nos valores das mesmas variáveis de entrada, mas neste caso a variável manipulada foi a temperatura do fluido refrigerante (T_r). Novamente conseguiu-se chegar ao objetivo com um aumento de menos de 1% na temperatura de saída do reator (Figura 5.6).

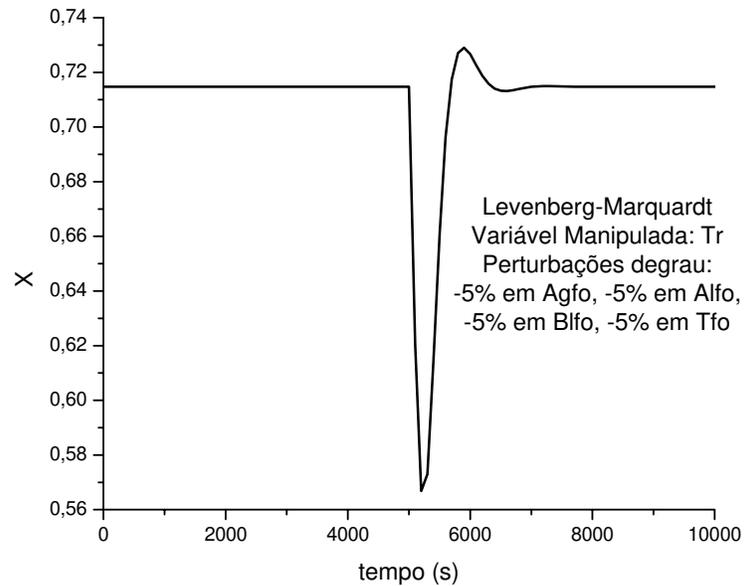


Figura 5.5 - Otimização em duas camadas (Levenberg-Marquardt) com T_r como variável manipulada – Perfil de conversão.

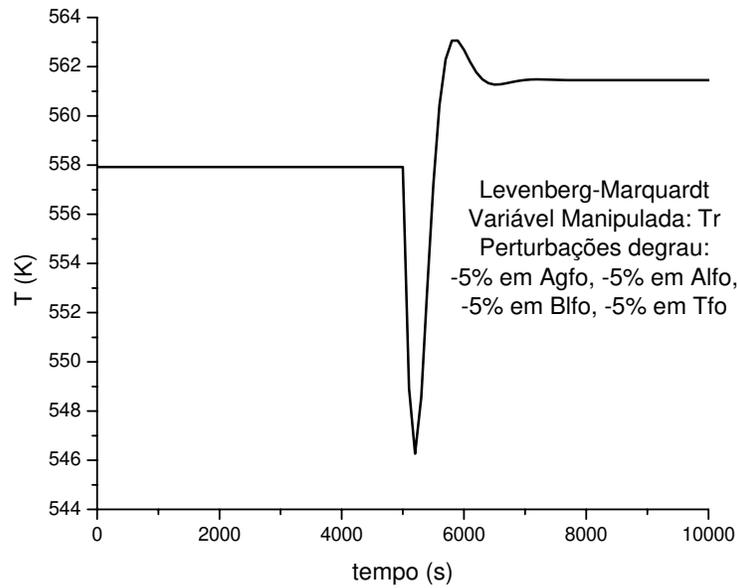


Figura 5.6 - Otimização em duas camadas (Levenberg-Marquardt) com Tr como variável manipulada – Perfil de temperatura.

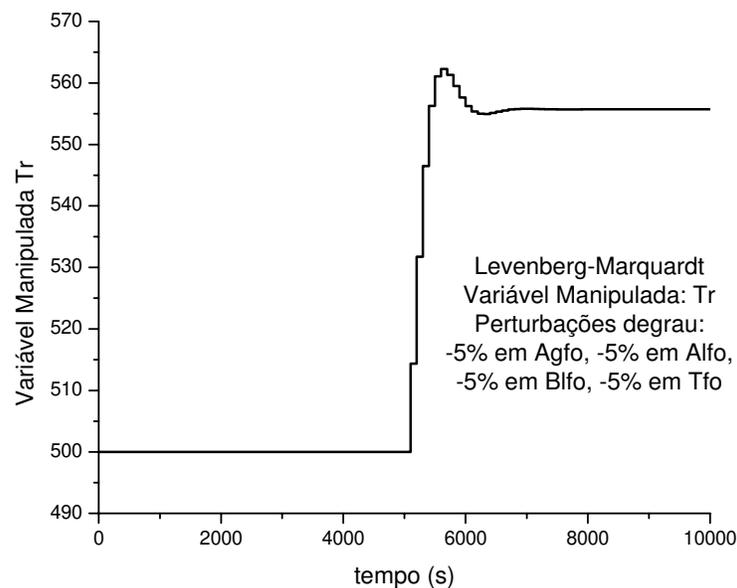


Figura 5.7 - Otimização em duas camadas (Levenberg-Marquardt) com Tr como variável manipulada – Variável manipulada.

5.2.2 OTIMIZAÇÃO PELO MÉTODO SQP

A utilização do método SQP desenvolvido por Schittkowski (1985) também teve seu desempenho avaliado. Neste caso o problema é declarado como:

$$\min_{x \in \mathcal{R}^n} f(x) \quad (5.4)$$

sujeito a:

$$\begin{aligned} g_j(x) &= 0, \quad \text{para } j = 1, \dots, m_k \\ g_j(x) &\geq 0, \quad \text{para } j = m_k + 1, \dots, m \\ x_l &\leq x \leq x_u \end{aligned} \quad (5.5)$$

onde assume-se que todas as funções do problema são continuamente diferenciáveis. O método obtém subproblemas de programação quadrática pelo uso de uma aproximação quadrática do Lagrangeano e pela linearização das restrições. Ou seja:

$$\min_{d \in \mathcal{R}^n} \frac{1}{2} d^T B_k d + \nabla f(x_k)^T d \quad (5.6)$$

sujeito a:

$$\begin{aligned} \nabla g_j(x_k)^T d + g_j(x_k) &= 0, \quad j = 1, \dots, m_k \\ \nabla g_j(x_k)^T d + g_j(x_k) &\geq 0, \quad j = m_k + 1, \dots, m \end{aligned} \quad (5.7)$$

$$x_l - x_k \leq d \leq x_u - x_k$$

onde B_k é uma aproximação positiva definida do Hessiano e x_k é a iteração atual. A solução do subproblema é d_k . Um procedimento de *line search* é usado para encontrar um novo ponto x_{k+1} :

$$x_{k+1} = x_k + \lambda d_k, \quad \lambda \in (0,1] \tag{5.8}$$

Neste novo ponto uma “função mérito” deverá ter um valor inferior ao do ponto anterior. No caso deste algoritmo a função mérito utilizada é a função Lagrangeana aumentada.

Quando a condição ótima não é alcançada, B_k é atualizada de acordo com a fórmula de BFGS modificada (Powell, 1978). Este algoritmo pode gerar pontos inviáveis durante o processo de solução. Então, se a viabilidade deve ser mantida para pontos intermediários, esta rotina não é adequada.

Como o método de diferenças finitas é usado para estimar o gradiente para alguns cálculos de precisão simples, uma estimativa não acurada do gradiente pode causar a obtenção de um ponto final não crítico. Nestes casos recomenda-se a aritmética de alta precisão, que foi utilizada neste trabalho.

O Apêndice B traz maiores detalhes sobre os métodos de otimização, baseado em Biegler e Grossmann (2004).

Com o propósito de comparar os algoritmos de otimização Levenberg-Marquardt e SQP, foi utilizado o método SQP para as mesmas estratégias utilizadas acima e, como pode ser visto na Figura 5.8 a Figura 5.13, os resultados se mostraram idênticos. Observou-se, no entanto, que, sendo o SQP um algoritmo mais complexo, a função objetivo foi calculada mais vezes do que no algoritmo de Levenberg-Marquardt, mas nada que tenha aumentado demasiadamente o tempo computacional requerido.

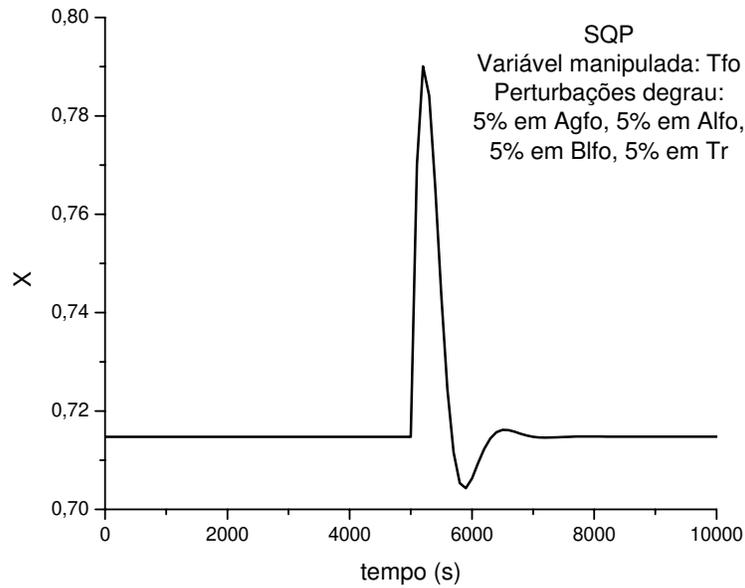


Figura 5.8 - Otimização em duas camadas (SQP) com Tfo como variável manipulada – Perfil de conversão.

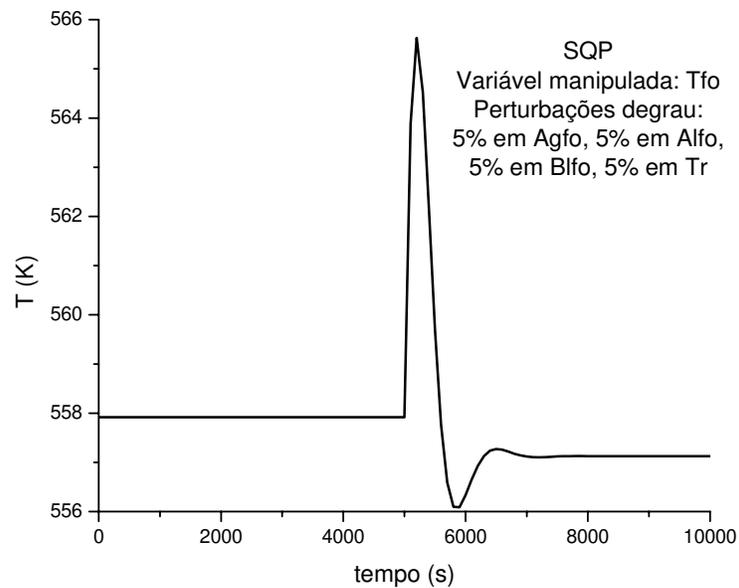


Figura 5.9 - Otimização em duas camadas (SQP) com Tfo como variável manipulada – Perfil de temperatura.

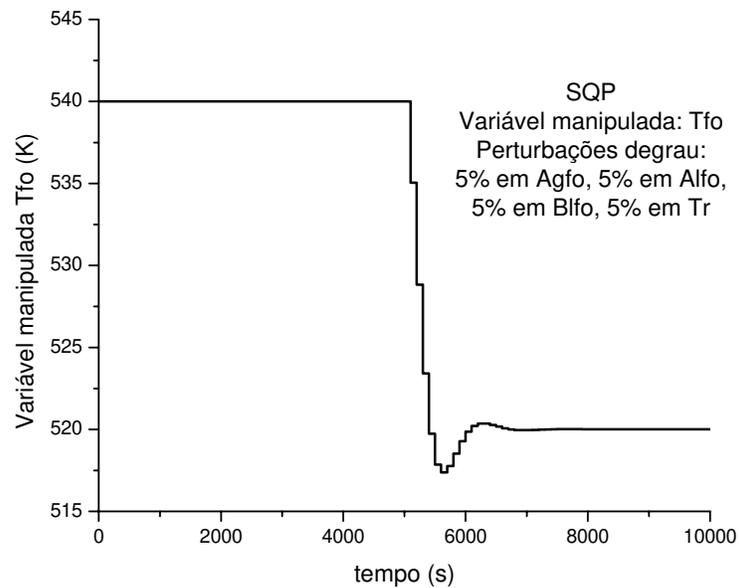


Figura 5.10 - Otimização em duas camadas (SQP) com Tfo como variável manipulada – Variável manipulada.

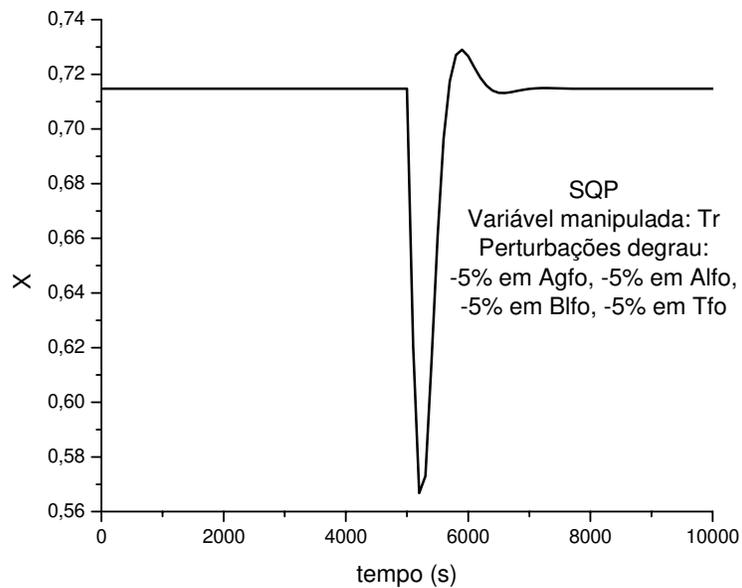


Figura 5.11 - Otimização em duas camadas (SQP) com Tr como variável manipulada – Perfil de conversão.

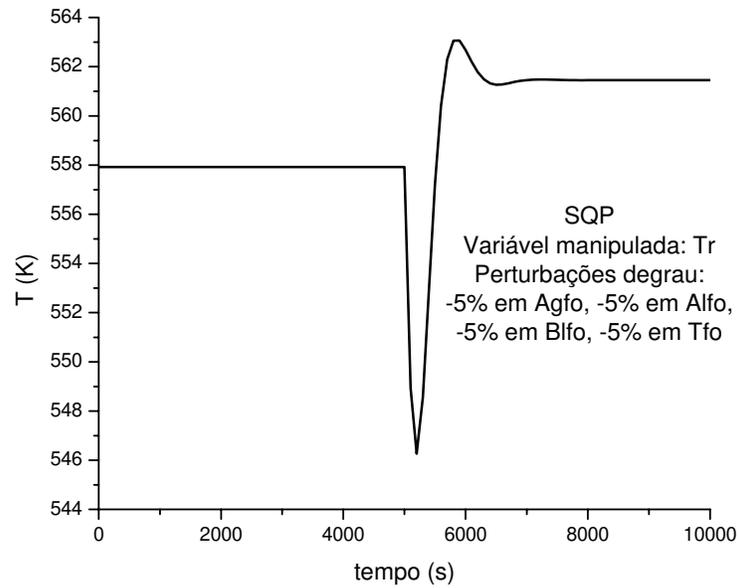


Figura 5.12 - Otimização em duas camadas (SQP) com Tr como variável manipulada – Perfil de temperatura.

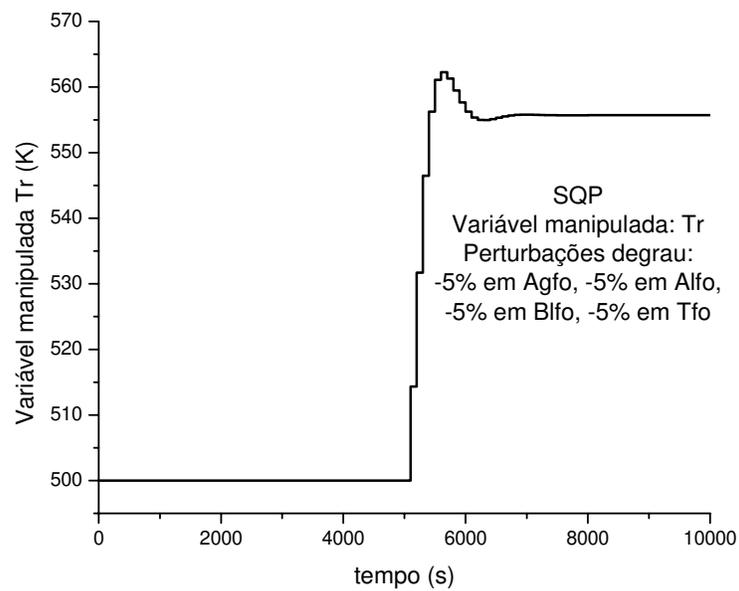


Figura 5.13 - Otimização em duas camadas (SQP) com Tr como variável manipulada – Variável manipulada.

A fim de continuar testando o algoritmo SQP para esta estratégia de otimização, foram realizadas alterações negativas nos valores das variáveis de entrada, manipulando-se a temperatura de alimentação dos reagentes (Figura 5.14 a Figura 5.16) e alterações positivas manipulando-se a temperatura do fluido refrigerante (Figura 5.17 a Figura 5.19). Mais uma vez observa-se que a conversão de referência foi mantida através de um comportamento satisfatório da variável manipulada.

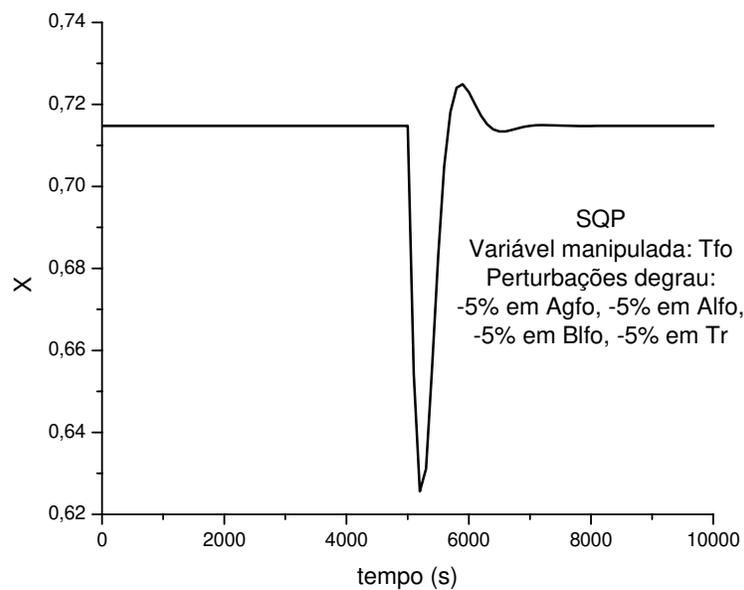


Figura 5.14 - Otimização em duas camadas (SQP) com Tfo como variável manipulada – Perfil de conversão.

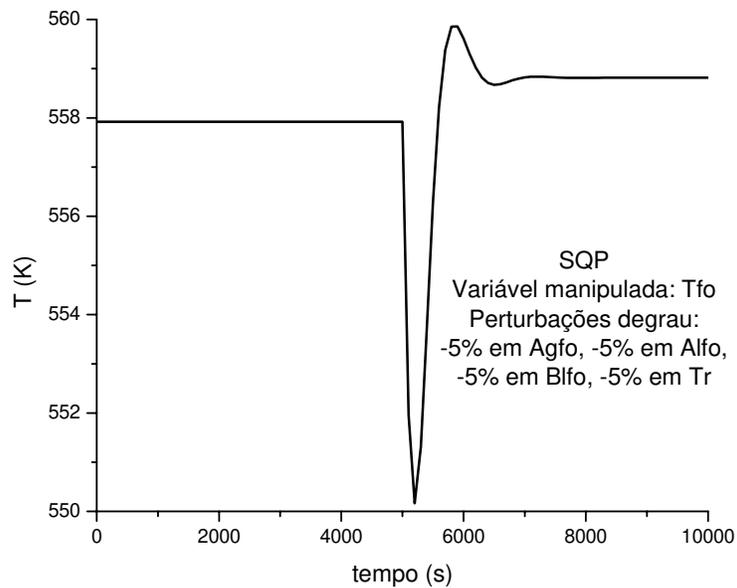


Figura 5.15 - Otimização em duas camadas (SQP) com Tfo como variável manipulada – Perfil de temperatura.

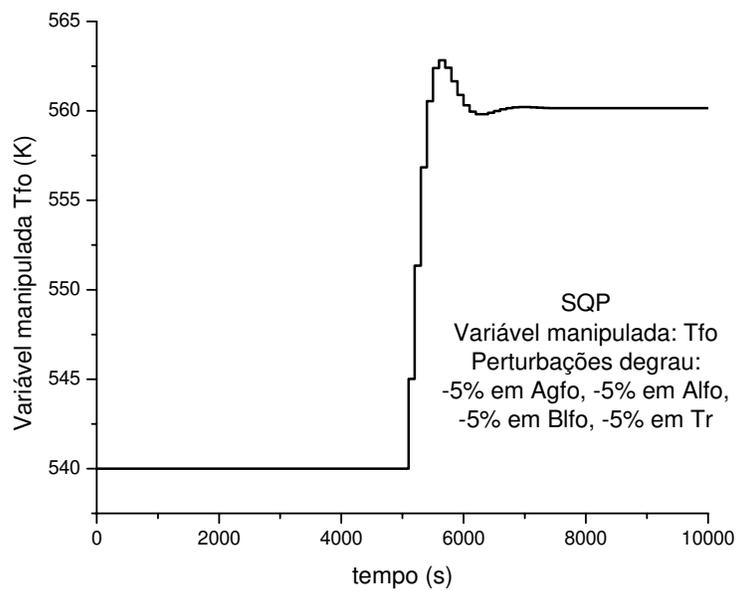


Figura 5.16 - Otimização em duas camadas (SQP) com Tfo como variável manipulada – Variável manipulada.

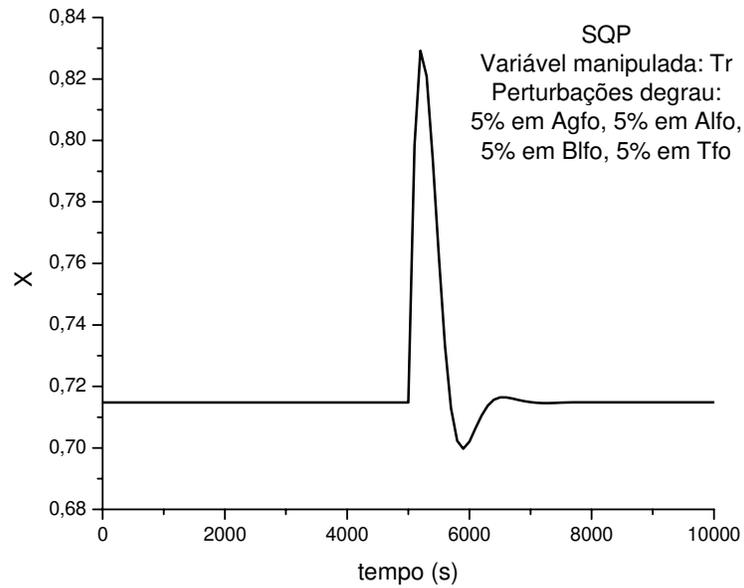


Figura 5.17 - Otimização em duas camadas (SQP) com Tr como variável manipulada – Perfil de conversão.

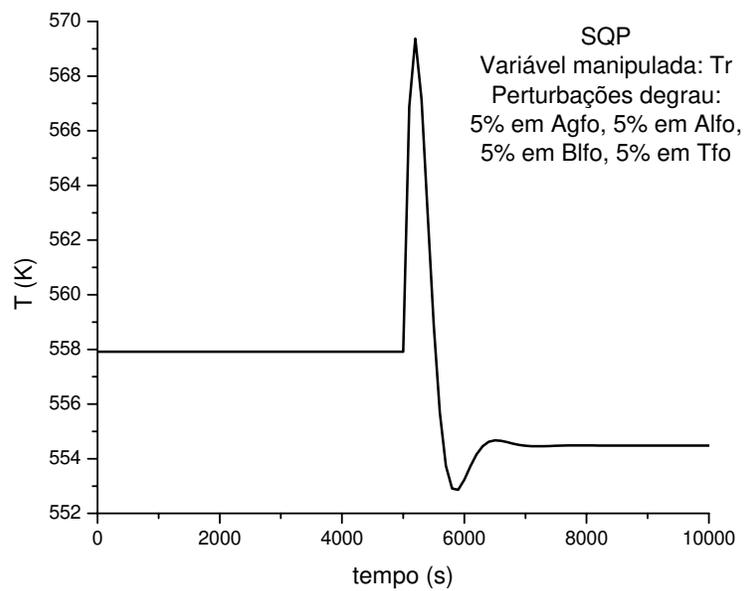


Figura 5.18 - Otimização em duas camadas (SQP) com Tr como variável manipulada – Perfil de temperatura.

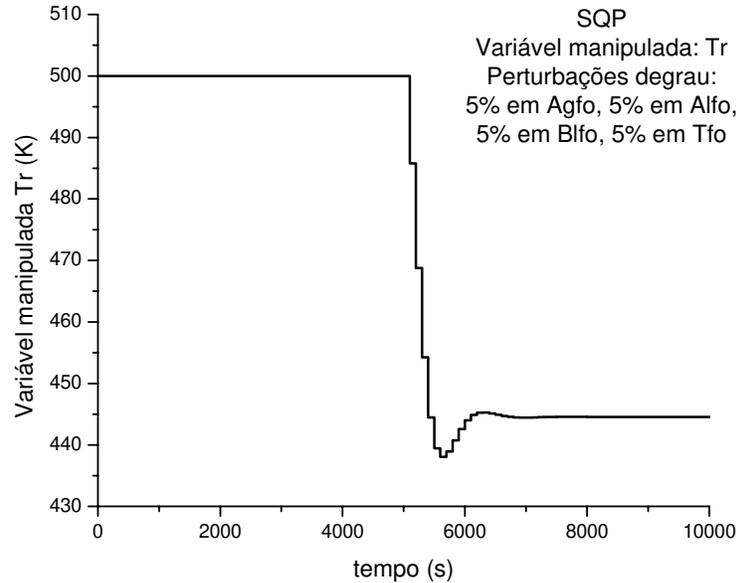


Figura 5.19 - Otimização em duas camadas (SQP) com Tr como variável manipulada – Variável manipulada.

Quando o objetivo do problema de otimização é a maximização da conversão na saída do reator, o problema apresentado na equação (5.3) pode ser usado, mas neste caso considera-se como $X_{referência}$ o valor unitário. Desta forma, o problema passa a ser descrito como:

$$\begin{array}{ll}
 \min_{T_{fo}} (X - 1)^2 & \min_{T_r} (X - 1)^2 \\
 \text{s.t. } T_{fo}^{\min} \leq T_{fo} \leq T_{fo}^{\max} & \text{s.t. } T_r^{\min} \leq T_r \leq T_r^{\max} \\
 0 \leq X \leq 1 & \text{ou } 0 \leq X \leq 1 \\
 BM = 0 & BM = 0 \\
 BE = 0 & BE = 0
 \end{array} \quad (5.9)$$

onde $0,7 \cdot T_{fo} \leq T_{fo} \leq 1,3 \cdot T_{fo}$ (ou $0,7 \cdot T_r \leq T_r \leq 1,3 \cdot T_r$). Neste caso incluiu-se a restrição na conversão de saída do reator, para que ela fique dentro de seus limites fisicamente possíveis.

Primeiramente submeteram-se os valores das variáveis de entrada a alterações positivas, manipulando-se a temperatura de alimentação dos reagentes. Os resultados podem ser vistos na Figura 5.20 a Figura 5.22. Conseguiu-se um aumento considerável na conversão (aproximadamente 0,93), e a temperatura do reator aumentou pouco menos de 10%, um resultado satisfatório levando-se em conta que uma conversão relativamente alta foi alcançada.

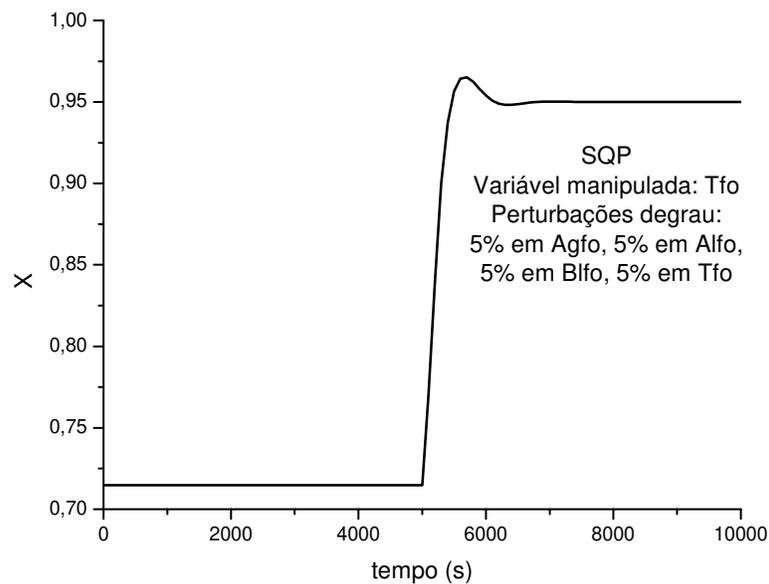


Figura 5.20 - Otimização em duas camadas (SQP) com Tfo como variável manipulada – Perfil de conversão.

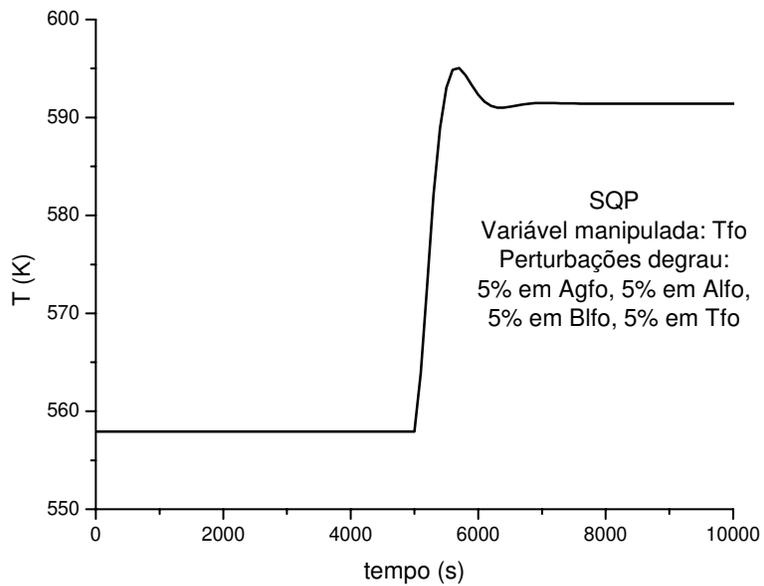


Figura 5.21 - Otimização em duas camadas (SQP) com Tfo como variável manipulada – Perfil de temperatura.

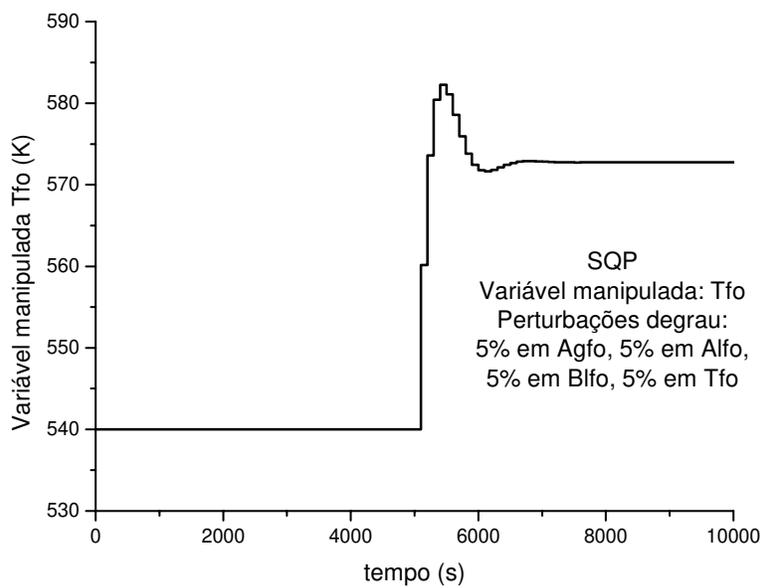


Figura 5.22 - Otimização em duas camadas (SQP) com Tfo como variável manipulada – Variável manipulada.

Na Figura 5.23 a Figura 5.25 são mostrados os resultados obtidos para uma alteração negativa nos valores das variáveis de entrada e manipulação da temperatura do fluido refrigerante. Neste caso a conversão obtida foi de aproximadamente 0,95, também com um aumento de pouco menos de 10% na temperatura do reator.

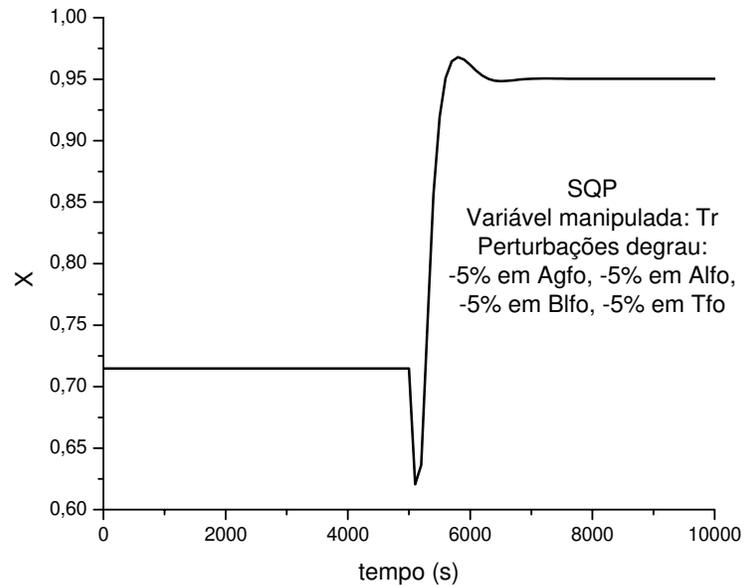


Figura 5.23 - Otimização em duas camadas (SQP) com Tr como variável manipulada – Perfil de conversão.

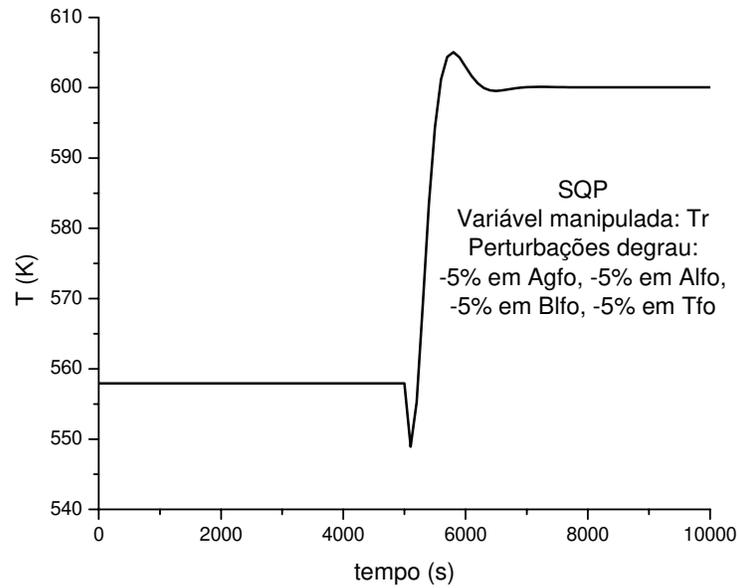


Figura 5.24 - Otimização em duas camadas (SQP) com Tr como variável manipulada – Perfil de temperatura.

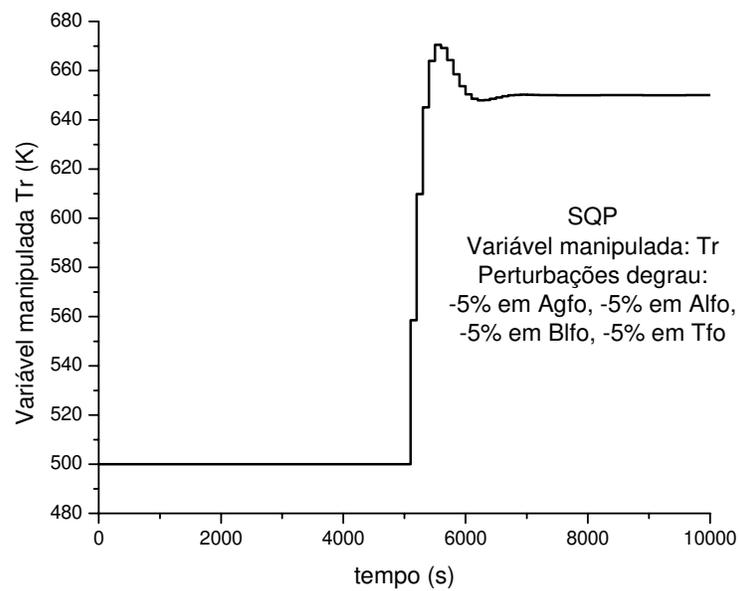


Figura 5.25 - Otimização em duas camadas (SQP) com Tr como variável manipulada – Variável manipulada.

Quando se altera o sistema negativamente, manipulando-se a temperatura de alimentação dos reagentes, o aumento na conversão é menos significativo (0,80 aproximadamente), mas a temperatura sofre um acréscimo de apenas 10K (Figura 5.26 a Figura 5.28).

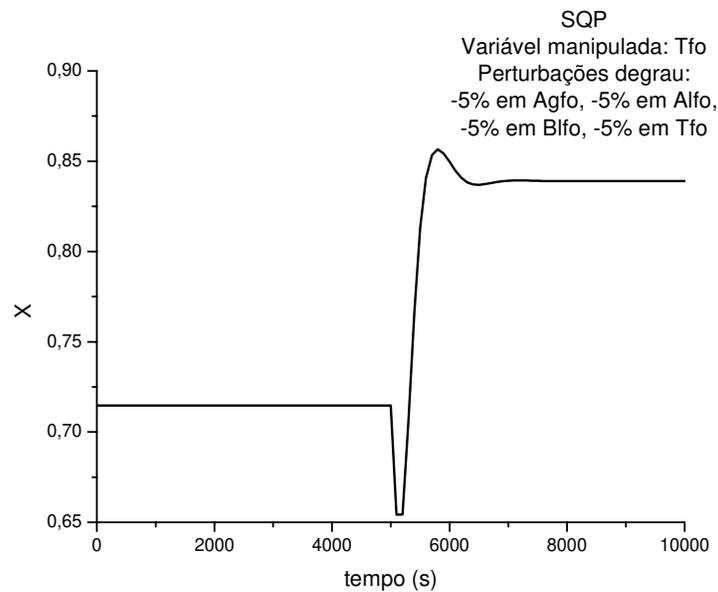


Figura 5.26 - Otimização em duas camadas (SQP) com Tfo como variável manipulada – Perfil de conversão.

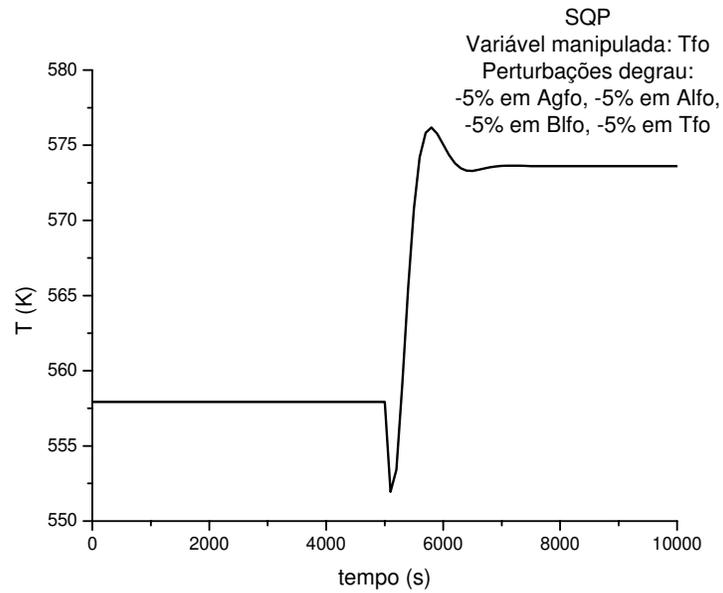


Figura 5.27 - Otimização em duas camadas (SQP) com Tfo como variável manipulada – Perfil de temperatura.

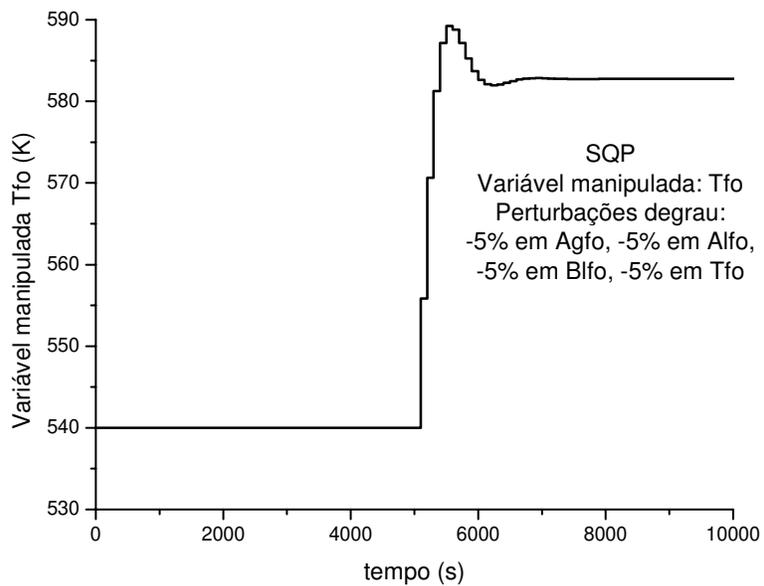


Figura 5.28 - Otimização em duas camadas (SQP) com Tfo como variável manipulada – Variável manipulada.

E quando as alterações são positivas e a variável manipulada é a temperatura do fluido refrigerante, a conversão obtida chega muito próximo de 100%, com um aumento um pouco maior da temperatura do reator (Figura 5.29 a Figura 5.31).

Diante disso, pode-se observar que, independente das alterações a que o sistema é submetido, ambas as malhas de controle levam a resultados extremamente satisfatórios.

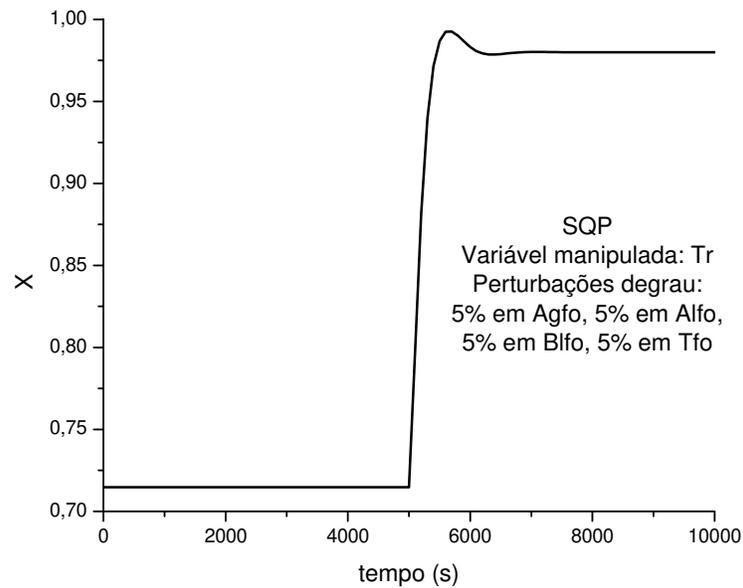


Figura 5.29 - Otimização em duas camadas (SQP) com Tr como variável manipulada – Perfil de conversão.

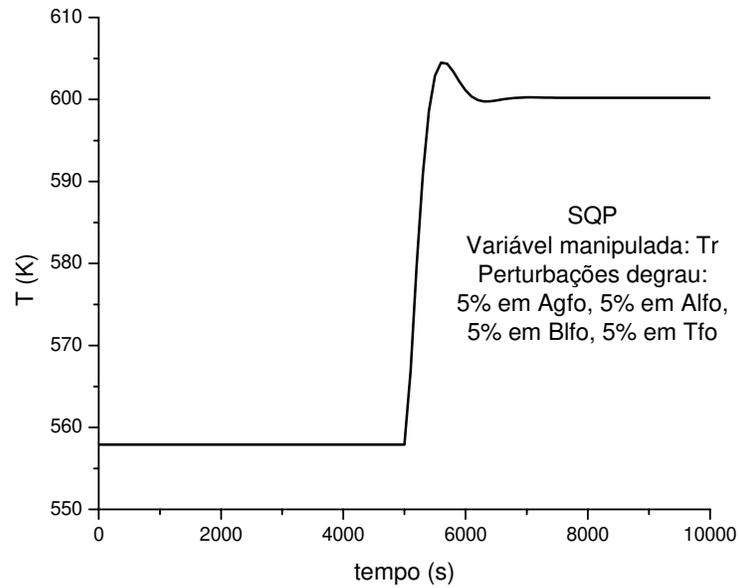


Figura 5.30 - Otimização em duas camadas (SQP) com T_r como variável manipulada – Perfil de temperatura.

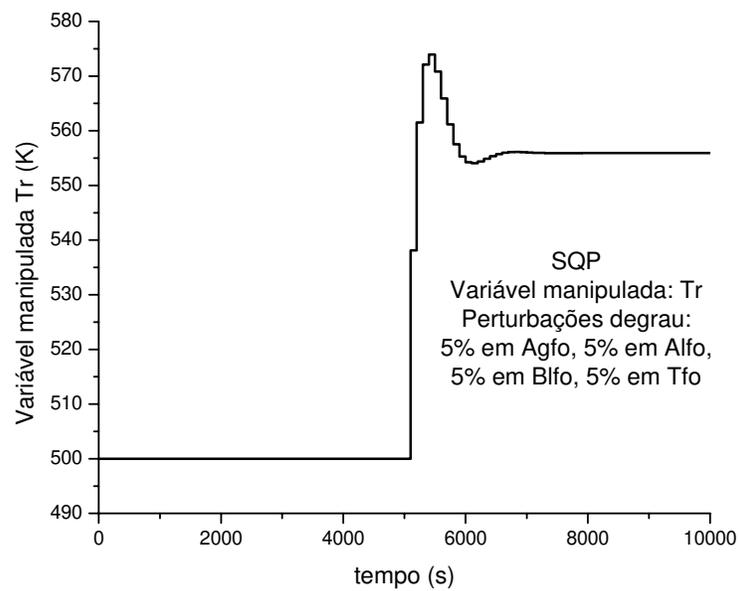


Figura 5.31 - Otimização em duas camadas (SQP) com T_r como variável manipulada – Variável manipulada.

De acordo com os resultados mostrados, observa-se que a estrutura de otimização em duas camadas na qual os *set-points* são gerados pelo bloco de otimização e enviados ao controle avançado apresenta resultados satisfatórios para o processo de hidrogenação de o-cresol. No entanto, os perfis dinâmicos apresentados tanto para a temperatura, quanto para a conversão de o-cresol na saída do reator mostram que os mesmos apresentam picos acentuados, fato que pode vir a ser problemático para a implementação prática desta estratégia.

Diante disso é proposta uma estratégia alternativa de otimização em duas camadas, que será apresentada a seguir.

5.3 ESTRATÉGIA ALTERNATIVA DE OTIMIZAÇÃO EM DUAS CAMADAS

O procedimento de otimização gera tanto os novos valores de *set-points*, quanto os valores das variáveis manipuladas. Como visto na seção anterior, a estratégia tradicional em duas camadas utiliza somente os novos valores de *set-points* gerados pelo bloco de otimização.

No entanto, se existe a necessidade de acelerar o procedimento, fazendo com que o sistema alcance rapidamente os valores de referência desejados, pode-se enviar a própria variável manipulada, determinada pelo algoritmo de otimização, para a camada de controle. Dessa forma, como já foi visto no Capítulo 4, referente ao controle do reator, o sistema se estabiliza mais rapidamente, mas a variável manipulada é alterada bruscamente. Se essa alteração não acarreta problemas de segurança para o reator, pode-se dizer que esta estratégia proposta é mais apropriada, como será visto através dos resultados obtidos.

Retomando aos casos analisados na seção anterior, na Figura 5.32 a Figura 5.34 são mostrados os perfis obtidos quando a variável manipulada foi a temperatura de alimentação dos reagentes, com alterações positivas nos valores das concentrações de alimentação e da temperatura do fluido refrigerante e com o objetivo de manter a conversão obtida com valores normais de operação. De acordo com a Figura 5.32 e Figura 5.33, observa-se que com a adição da estratégia de controle *feedforward*, a variação tanto da conversão quanto da

temperatura do reator é bem menos acentuada a partir do instante em que o sistema é perturbado até o momento em que ele encontra novamente o estado estacionário. Por outro lado, de acordo com a Figura 5.34, o perfil da variável manipulada mostra uma alteração brusca na temperatura de alimentação dos reagentes. Como já dito, se este procedimento puder ser realizado desta forma, mantendo a segurança e estabilidade do reator, esta estratégia é preferível àquela que usa somente o controle *feedback*, que, de certa forma, descarta a determinação da variável manipulada.

Um procedimento mais aconselhável seria a incorporação da estratégia mista dentro do controle hierárquico, visando mudanças menos bruscas na variável manipulada.

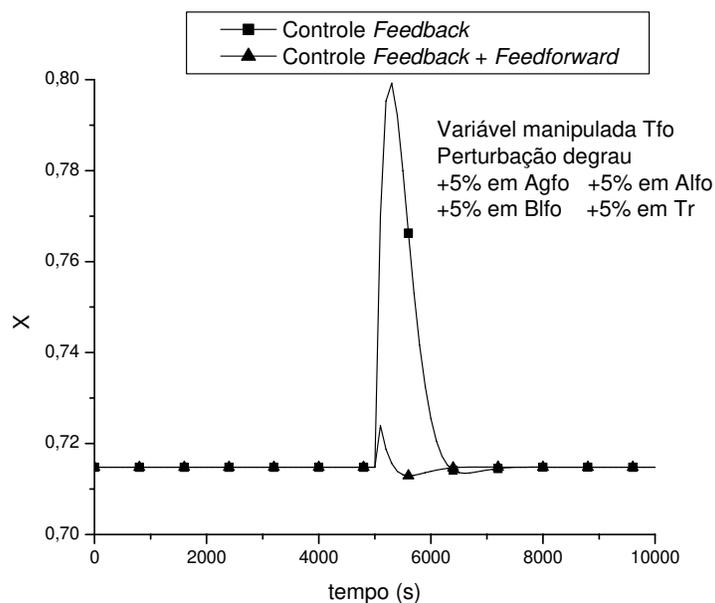


Figura 5.32 - Estratégia alternativa de otimização com Tfo como variável manipulada – Perfil de conversão.

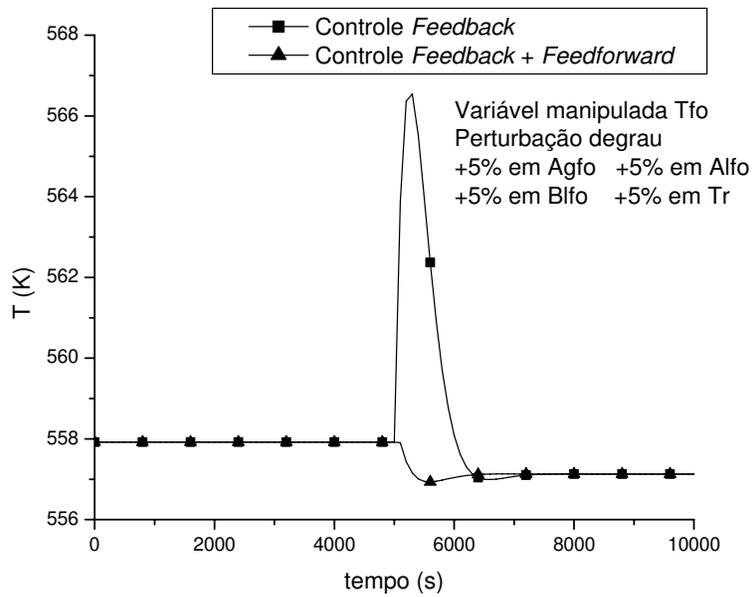


Figura 5.33 - Estratégia alternativa de otimização com T_{fo} como variável manipulada – Perfil de temperatura.

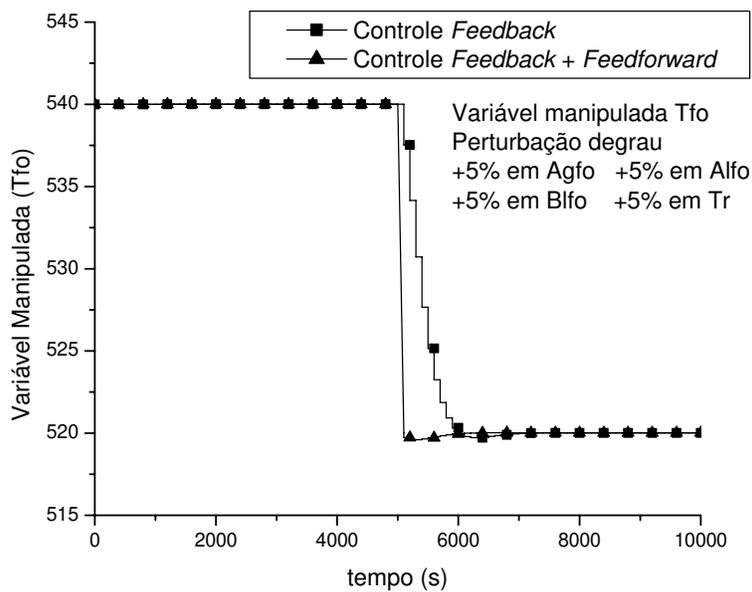


Figura 5.34 - Estratégia alternativa de otimização com T_{fo} como variável manipulada – Perfil da variável manipulada.

Quando a temperatura do fluido refrigerante é manipulada, e o sistema é alterado negativamente através das concentrações e da temperatura de alimentação dos reagentes, novamente observa-se uma variação muito menor na conversão (Figura 5.35) e na temperatura de saída do reator (Figura 5.36) a partir do instante da perturbação, às custas, novamente de mudanças bruscas na variável manipulada (Figura 5.37).

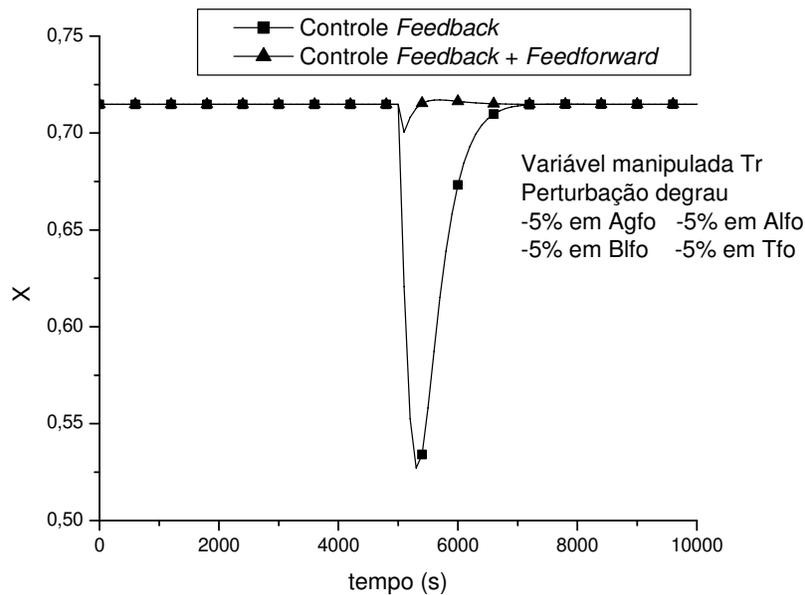


Figura 5.35 - Estratégia alternativa de otimização com T_r como variável manipulada – Perfil de conversão.

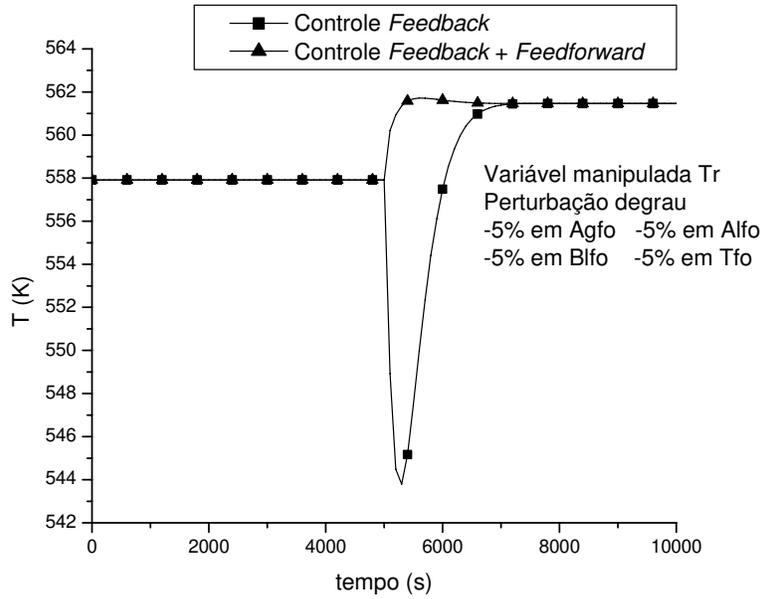


Figura 5.36 - Estratégia alternativa de otimização com T_r como variável manipulada – Perfil de temperatura.

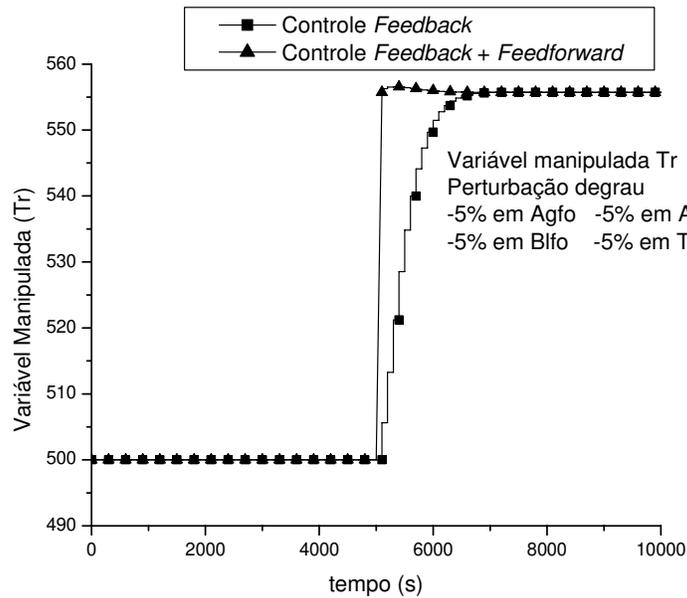


Figura 5.37 - Estratégia alternativa de otimização com T_r como variável manipulada – Perfil da variável manipulada.

Quando o objetivo do problema de otimização é maximizar a conversão de o-cresol, mais um vez a estratégia alternativa de otimização proposta é mais rápida, como pode ser observado pela Figura 5.38 e Figura 5.39, com uma mudança brusca na variável manipulada (Figura 5.40).

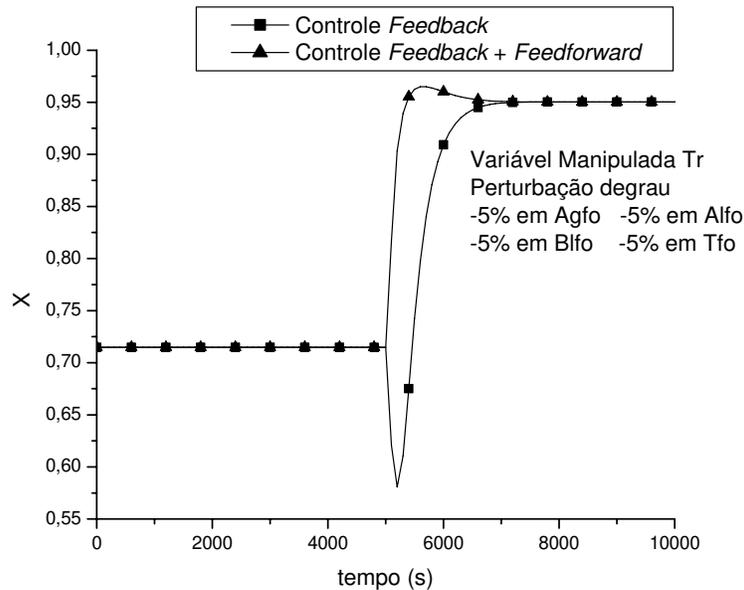


Figura 5.38 - Estratégia alternativa de otimização com Tr como variável manipulada – Perfil de conversão.

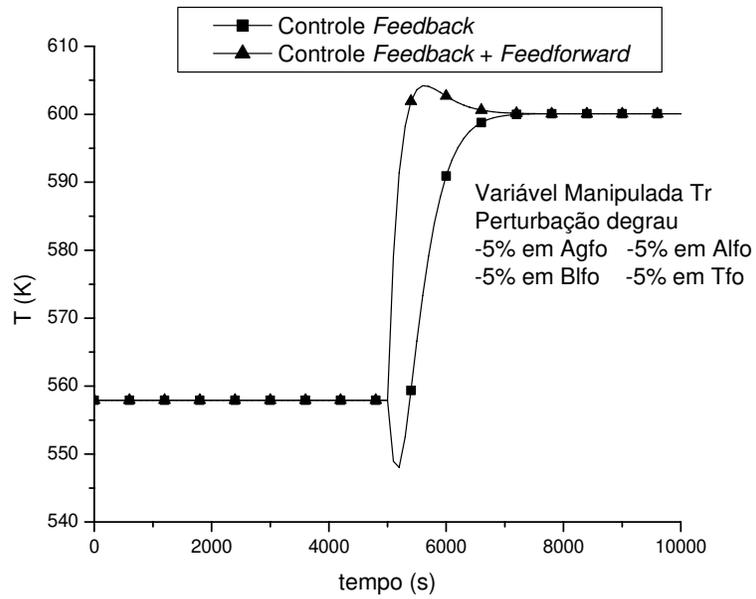


Figura 5.39 - Estratégia alternativa de otimização com T_r como variável manipulada – Perfil de temperatura.

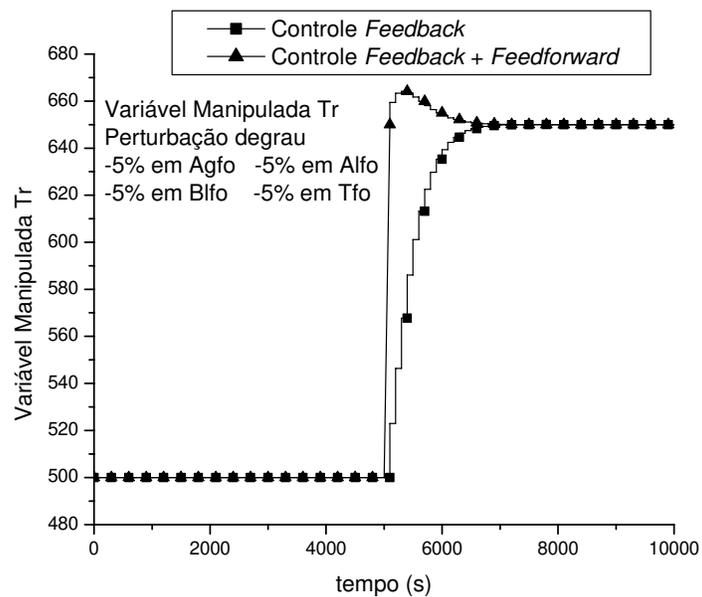


Figura 5.40 - Estratégia alternativa de otimização com T_r como variável manipulada – Perfil da variável manipulada.

5.4 CONCLUSÕES

A otimização em duas camadas do reator foi apresentada neste capítulo. Foram utilizados o controlador QDMC e os métodos de Levenberg-Marquardt e SQP. O primeiro foi utilizado somente para a manutenção da conversão nos valores de referência, independente das perturbações submetidas ao processo. O método SQP foi utilizado também para esta estratégia, mostrando resultados iguais, no entanto com maior cálculo de funções objetivo devido à sua maior complexidade. Além disso, o SQP foi utilizado ainda para a maximização da conversão, e apresentou resultados bastante satisfatórios. Além disso, foi proposta uma estratégia alternativa de otimização que utiliza, em adição à estratégia *feedback* (QDMC), também a estratégia *feedforward*, na qual a variável manipulada determinada pela camada de otimização também é enviada para a camada de controle. Neste caso, o procedimento como um todo é acelerado, ou seja, o sistema alcança mais rapidamente o *set-point* desejado, mas a variável manipulada sofre uma mudança brusca no momento em que o sistema é perturbado, sendo necessária uma criteriosa avaliação deste comportamento. De fato, aconselha-se que esta estratégia somente seja considerada quando a mudança brusca na variável manipulada não prejudica a segurança e estabilidade do processo.

De forma geral, o que se pode observar é que a estrutura em duas camadas apresenta bom desempenho para o problema em questão.

No próximo capítulo será mostrada a fundamentação matemática da estrutura em uma camada. Sugere-se que esta estratégia seja implementada num trabalho futuro para que se possa fazer a comparação entre as duas abordagens e definir qual delas apresenta melhores resultados, levando-se em conta também o tempo computacional requerido, que pode vir a ser um fator limitante.

6. OTIMIZAÇÃO EM UMA CAMADA

6.1 INTRODUÇÃO

Na estrutura em duas camadas, que é baseada somente na determinação de *set-points* para as saídas controladas, as mudanças no objetivo econômico não são rapidamente assimiladas e alguns tipos de perturbações podem ser desprezadas (Zanin et al., 2002). Além disso, a estrutura em duas camadas tem ainda outra deficiência. As camadas de controle e otimização podem entrar em conflito por não estarem tratando com as mesmas informações e por isso o ponto operacional ótimo pode ser um ponto sub-ótimo. Apesar disso, como a estratégia de controle avançado é normalmente um controlador preditivo que pode ser sintonizado de maneira robusta por uma das várias técnicas disponíveis na literatura, a estratégia em duas camadas é extremamente popular ainda nos dias de hoje porque garante uma operação adequada e robusta da planta (Tvrzská de Gouvêa e Odloak, 1998). Mas se a planta é perturbada, as mudanças nos *set-points* do controlador podem introduzir instabilidades na operação que podem levar a uma falha completa do controlador a menos que sua sintonia seja conservativa.

Por outro lado, a otimização em uma camada, ou controle otimizante, como muitas vezes é chamado, incorpora o objetivo econômico no objetivo de controle (Figura 6.1). Com isso a planta pode ser levada a um ponto operacional ótimo que leva em consideração todas as perturbações que estão ocorrendo. Apesar disso, nesta estratégia o algoritmo numérico usado pode não convergir e tornar a planta instável e ainda não ser modelado adequadamente, o que pode gerar problemas de *off-set*.

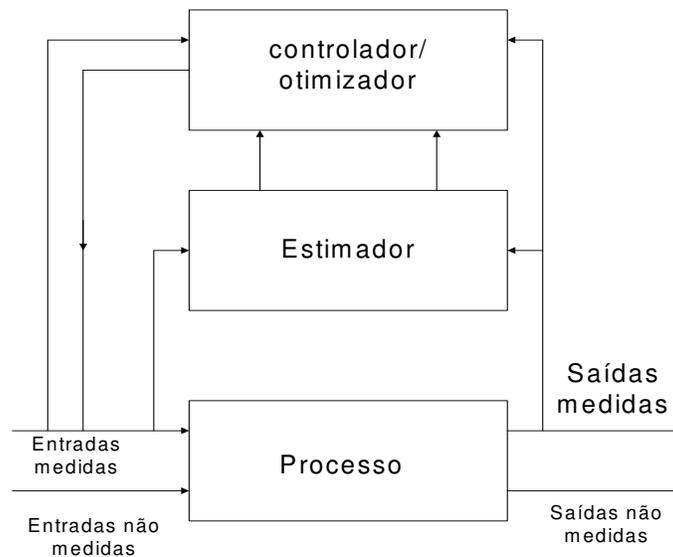


Figura 6.1 - Estrutura de otimização em uma camada.

De uma forma geral, o que pode ser visto na literatura (Zanin et al., 2000, 2002; Kassidas et al., 2000), é que a estrutura em uma camada assimila as mudanças nos objetivos econômicos muito mais rápido que a estrutura em duas camadas, o que é uma propriedade importante quando os objetivos de produção podem variar durante o ano. Para a estrutura em uma camada não é necessário escolher as variáveis controladas uma vez que todas elas fazem parte do problema de otimização. Além disso, o problema de otimização na estratégia em uma camada é um PNL, e desta forma podem ser incluídas facilmente restrições operacionais, e também limitações nas ações de controle (Tvrzská de Gouvêa, 1997).

No trabalho de Tvrzská de Gouvêa e Odloak (1998), a resposta dinâmica da estrutura em uma camada é mais suave tornando-a mais estável. Mas a resposta pode ser tão lenta que pode fazer com que esta estratégia não seja adequada se fortes perturbações ocorrem no processo, e o ponto operacional ótimo pode ser afetado por erros no modelo do processo.

Diante de todas estas considerações, a próxima etapa deste trabalho será a utilização da estrutura em uma camada para o processo de hidrogenação de o-cresol para que possa ser avaliada qual estratégia apresenta melhor desempenho neste caso.

6.2 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

A princípio será estudada a formulação proposta por Zanin (2001) para o problema da otimização em uma camada, que é definido como:

$$\min_{x_s, u_s, \Delta u(jT); j=1, \dots, nl} \sum_{i=1}^{nr} \|W_1(y_p(iT) - y_{sp})\|_2^2 + \sum_{i=1}^{nl} \|W_2 \Delta u(jT)\|_2^2 + W_3 f_{eco} \quad (6.1)$$

sujeito a:

$$h_p(x_s, u_s, d_s) = 0 \quad (6.2)$$

$$h_e(f_{eco}, x_s, u_s, d_s) = 0 \quad (6.3)$$

$$u_s^{\inf} \leq u_s \leq u_s^{\sup} \quad (6.4)$$

$$x_s^{\inf} \leq x_s \leq x_s^{\sup} \quad (6.5)$$

$$-\Delta u^{\max}(jT) \leq \Delta u(jT) \leq \Delta u^{\max}(jT); \quad j = 1, \dots, nl \quad (6.6)$$

$$u^{\inf}(jT) \leq u_{at} + \sum_{i=1}^j \Delta u(iT) \leq u^{\sup}(jT); \quad j = 1, \dots, nl - 1 \quad (6.7)$$

$$u_s = u_{at} + \sum_{j=1}^{nl} \Delta u(jT) \quad (6.8)$$

$$y_p(iT) = y_{pf}(iT) + \sum_{j=1}^{\min(nr, nl)} a_{dmc}((i-j+1)T) \Delta u(jT); \quad i = 1, \dots, nr \quad (6.9)$$

onde

a_{dmc} = matriz dos coeficientes do modelo linear do processo

d_s	=	vetor das perturbações no estado estacionário
f_{eco}	=	função objetivo econômico
h_e	=	restrições do modelo econômico
h_p	=	restrições do modelo não linear do reator
nl	=	horizonte de controle
nr	=	horizonte de predição
T	=	período de amostragem ou de execução do algoritmo
u	=	vetor das variáveis manipuladas
Δu	=	vetor das amplitudes das ações de controle
u_{at}	=	vetor das variáveis manipuladas no instante atual
u_s	=	vetor das variáveis manipuladas no estado estacionário
W_1	=	matriz diagonal dos pesos das variáveis controladas dinamicamente
W_2	=	matriz diagonal dos fatores de supressão das variáveis manipuladas
W_3	=	peso da parcela econômica da função objetivo
x_s	=	vetor das variáveis do modelo não linear do reator (não incluindo as variáveis manipuladas) no estado estacionário
y_p	=	vetor da predição linear das variáveis controladas dinamicamente
y_{pf}	=	vetor da predição linear das variáveis controladas dinamicamente, baseada somente nas ações de controle passadas

y_{sp} = vetor dos *set-points* das variáveis controladas dinamicamente

A função objetivo do problema (6.1) é composta pelas parcelas do controle dinâmico e da otimização econômica. Os dois primeiros termos da equação são relativos, respectivamente, à minimização dos erros preditos das variáveis controladas dinamicamente e à penalização dos movimentos das variáveis manipuladas. O terceiro termo da função objetivo corresponde propriamente ao objetivo econômico que se deseja alcançar.

Na equação (6.2) estão as restrições de igualdade do modelo estático não linear ou rigoroso do reator, que se baseiam nos balanços de massa e energia. As equações (6.4) e (6.5) consistem nos limites inferiores e superiores das variáveis do referido modelo. Para facilitar a visualização da formulação do problema, a notação de estado estacionário das variáveis manipuladas (u_s) é distinta das demais (x_s).

A equação (6.3) representa o cálculo da função objetivo econômico.

As equações (6.6) e (6.7) representam as restrições do problema dinâmico: limites inferiores, superiores e dos movimentos das ações de controle. Os valores dinâmicos das variáveis manipuladas estão relacionados com seus respectivos estados estacionários através da equação (6.8).

A predição das variáveis controladas em instantes futuros (y_p) é obtida pela equação (6.9), que é formada por duas parcelas: a primeira, determinada pelo algoritmo para predição de y_{pf} (descrito abaixo), é função somente das ações de controle e perturbações passadas e a correspondente ao conjunto das ações futuras a serem calculadas pelo algoritmo de controle e otimização.

Como a predição y_{pf} depende somente das ações de controle implementadas, a mesma é atualizada antes da solução do problema de otimização/controle. Para cada instante de amostragem, deve-se:

1. Adicionar em y_{pf} o efeito de $\Delta u(0)$, última ação de controle implementada, a fim de atualizar a predição das variáveis controladas efetuada no instante de amostragem anterior:

$$y_p(iT) = y_{pf}(iT) + a_{dmc}(iT)\Delta u(0); \quad i = 1, \dots, n \quad (6.10)$$

onde n é o horizonte do modelo, ou seja, o número de intervalos de amostragem requeridos para que a saída do mesmo atinja o estado estacionário após uma variação na sua entrada.

2. Efetuar a correção através da retroalimentação do processo, adicionando ao modelo, para os instantes futuros, a diferença entre o valor medido da variável controlada y_{at} e a sua predição no período anterior de amostragem $y_{pf}(T)$:

$$y_{pf}(iT) = y_{pf}(iT) + (y_{at} - y_{pf}(T)); \quad i = 2, \dots, n \quad (6.11)$$

3. Deslocar os valores preditos para atualizar a referência de tempo da amostragem anterior para a atual:

$$y_{pf}(iT) = y_{pf}((i+1)T); \quad i = 1, \dots, n-1 \quad (6.12)$$

Como a predição é feita até o estado estacionário, $y_{pf}(T)$ já está na sua posição correta.

A proposta é que esta estratégia seja implementada para o caso de estudo abordado neste trabalho e caso esta abordagem não forneça resultados satisfatórios para o processo em questão, pode-se propor alguma estratégia alternativa que possa incorporar suas características, assim como fez Schiavon Júnior e Corrêa (2000), que usou uma estrutura baseada no QDMC (com restrições), ao invés do DMC convencional (sem restrições) e um modelo de

convolução para o QDMC em lugar do modelo em espaço de estados para o DMC.

6.3 CONCLUSÃO

Neste capítulo foram apresentadas as bases teóricas para a implementação da estratégia em uma camada, onde os problemas de controle e otimização são resolvidos simultaneamente. Propõe-se que esta estratégia seja desenvolvida em trabalhos futuros para que se possa realizar sua avaliação, fazendo um comparativo de modo a identificar as vantagens e desvantagens de utilização das duas estratégias.

7. CONCLUSÕES GERAIS E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

7.1 CONCLUSÕES GERAIS

De acordo com os resultados apresentados até o momento, conclui-se que a estratégia de otimização em duas camadas apresenta resultados satisfatórios, mas somente poderá ser avaliado o seu desempenho quando for implementada a estrutura de otimização em uma camada. Além disso, sempre considerar os objetivos de controle e otimização para que se possa ponderar a utilização das estratégias de controle *feedback* ou *feedforward*, e até mesmo uma combinação entre as duas.

7.2 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Diante das conclusões apresentadas no item anterior e do que foi apresentado ao longo dos capítulos, algumas sugestões para trabalhos futuros são expostas a seguir:

- Implementação da estrutura de otimização em uma camada;
- Inclusão de restrições energéticas e econômicas nos problemas de controle e otimização;
- Implementação da estratégia mista através do parâmetro β (equação (4.10));
- Inclusão de restrições energéticas e econômicas nos problemas de controle e otimização;
- Implementação da estratégia mista através do parâmetro β (equação (4.10)) na estrutura de otimização em duas camadas;
- Implementação da estratégia de otimização em duas camadas com o modelo pseudo-homogêneo no bloco de otimização;

- Otimização dos parâmetros do controlador utilizando o modelo em malha fechada;
- Introdução no modelo do reator do efeito de desativação de catalisador;
- Incorporação das etapas de aquisição e análise de dados, assim como da análise do estado estacionário e do monitoramento multivariável;
- Proposição e avaliação de procedimentos decisórios da trajetória de otimização, visando manter o processo dentro dos padrões de segurança, e operando de maneira estável.

8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ALBUQUERQUE, J.S., BIEGLER, L.T. Data reconciliation and gross error detection for dynamic system. *American Institute of Chemical Engineering Journal*, v.42, p.2841-2856, 1996.
- BARROS NETO, B., SCARMINIO, I.S., BRUNS, R.E., *Planejamento e Otimização de Experimentos*. Campinas: Editora da Unicamp, 1995, 299p
- BEQUETTE, B.W. Nonlinear Control of Chemical Processes: a Review. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, v.30, p.1391-1413, 1991.
- BERGAULT, I., RAJASHEKHARAM, M.V., CHAUDHARI, R.V., SCHWEICH, D., DELMAS, H. Modeling and comparison of acetophenone hydrogenation in trickle-bed and slurry airlift reactors. *Chemical Engineering Science*, v.52, p.4033-4043, 1997.
- BIEGLER, L.T., GROSSMANN, I.E. Retrospective on optimization. *Computers and Chemical Engineering*, v.24, p.1169-1192, 2004.
- BIEGLER, L.T., GROSSMANN, I.E., WESTERBERG, A.W. A note on approximation techniques used for process optimization. *Computers and Chemical Engineering*, v.9, p.201-206, 1985.
- CLARKE, D. W., MOTHADI, C., TUFFS, P. S., Generalized Predictive Control – Part I. The Basic Algorithm. *Automatica*, v.23, n.2, p.137-148, 1987a.
- CLARKE, D. W., MOTHADI, C., TUFFS, P. S., Generalized Predictive Control – Part II. Extensions and Interpretations. *Automatica*, v.23, n.2, p.149-160, 1987b.
- CROWE, C.M. Recursive identification of gross errors in linear data reconciliation. *American Institute of Chemical Engineering Journal*, v.34, p.541-550, 1988.
- CROWE, C.M. Data Reconciliation – Progress and Challenges. *Journal of Process Control*, v.6, n.2-3, p.89-98, 1996.
- CUTLER, C.R., PERRY, R.T. Real Time Optimization with Multivariable Control is required to Maximize Profits. *Computers and Chemical Engineering*, v.7, n.5, p.663-667, 1983.

- CUTLER, C.R. E B.L. RAMAKER, Dynamic matrix Control-A Computer Control Algorithm. *AIChE 86th National Meeting*, Houston, TX, 1979.
- DARBY, M.L., WHITE, D.C. On line Optimization of Complex Process Units. *Chemical Engineering Progress*, v.84, n.10, p.51-59, 1988.
- DECHECHI, E.C. *Controle Avançado Preditivo Adaptativo "DMC Multivariável Adaptativo*. Campinas: Faculdade de Engenharia Química, UNICAMP, 1998. 168 p.Tese (Doutorado)
- DECKWER, W. D. *Bubble Column Reactors*. New York: John Wiley and Sons, 1992, 533 p
- DURBECK, R.C. *Principles for Simplification of Optimizing Control Models*. Cleveland (OH): Case Institute of Technology, 1965. PhD Thesis
- EDGAR, T.F., HIMMELBLAU, D.M. *Optimization of Chemical Processes*. Singapore: McGraw-Hill Book Company, 1989, 651 p
- FONSECA, E.F., *Controle Preditivo Baseado em Redes Neurais de Fermentação Alcoólica Contínua*. Pernambuco: Universidade Federal de Pernambuco, 1998. Tese (Mestrado)
- FORBES, J.F., MARLIN, T.E., MACGREGOR, J.F. Model Adequacy Requirements for Optimizing Plant-Operations. *Computers and Chemical Engineering*, v.18, n.6, p.497-510, 1994.
- FRALEIGH, L., GUAY, M., FORBES, J.F. Optimal sensor network design for real-time optimization. *American Institute of Chemical Engineering Annual Meeting*, Miami, 1998.
- GARCIA, C. E., MORSHEDI, A. M. Quadratic Programming Solution of Dynamic Matrix Control (QDMC), *Chemical Engineering Communications.*, v.46, p.73-87, 1986
- GILL, P.E., MURRAY, W., WRIGHT, M. *Practical optimization*, New York: Academic Press, 1981, 401 p
- GOLDEN, M.P., YDSTIE, B.E. Adaptative extremum control using approximate process models. *American Institute of Chemical Engineering Journal*, v.35, p.1157-1169, 1989.
- HICHRI, H., ARMAND, A., ANDRIEU, J, Kinetics and Slurry-type Reactor Modelling during Catalytic Hydrogenation of o-Cresol on Ni/SiO₂. *Chemical Engineering and Processing*, v.30, p.133-140, 1991.

- HIMMELBLAU, D.M. *Applied Nonlinear Programming*. New York: Mcgraw-Hill, 1972, 498 p
- KASSIDAS, A., PATRY, J., MARLIN, T. Integrating process and controller models for the design of self-optimizing control. *Computers and Chemical Engineering*, v.24, p.2589-2602, 2000.
- KHURI, A.I., CORNELL, J.A. *Response surface: design and analyses*, New York: Marcel Dekker Inc., 1987, 405 p
- KIM, I.W., LIEBMAN, M.J., EDGAR, T.F. Robust data reconciliation and gross error detection: the modified MIMT using NLP. *Computers and Chemical Engineering*, v.21, p.775-782, 1997.
- KRISHNAN, S., BARTON, G.W., PERKINS, J.D. Robust parameter estimation in on-line optimization – part 1. Methodology and simulated case study. *Computers and Chemical Engineering*, v.16, p.545-562, 1992.
- MARIANO, A.P. *Modelagem determinística de reatores de lama catalíticos trifásicos: aplicação para reações de hidrogenação*. Campinas: Faculdade de Engenharia Química, UNICAMP, 2003. 197 p.Tese (Mestrado)
- MATTEDI, A. *Síntese de um controlador híbrido fuzzy-preditivo: aplicação para processos de polimerização*. Campinas: Faculdade de Engenharia Química, UNICAMP, 2003. 132 p.Tese (Doutorado)
- MAURATH, P.R., MELLICHAMP, D.A., SEBORG, D.E. Predictive Controller Design for Single-Input-Single Output (SISO) Systems, *Industrial and Engineering Chemistry Research*, v.27, p.956-963, 1988.
- MAYNE, D. Q., RAWLINGS, J. B., RAO, C. V., & SCOKAERT, P. O. M. Constrained model predictive control: Stability and optimality. *Automatica*, v.36, p.789–814, 2000.
- McFARLANE, R.C., BACON, D.W. Empirical strategies for open-loop on-line optimization. *Canadian Journal of Chemical Engineering*, v.67, p.665-677, 1989.
- MELEIRO, L.A.C. *Projeto e aplicação de controladores baseados em modelos lineares, neurais e nebulosos*. Campinas: Faculdade de Engenharia Química, UNICAMP, 2002. 305 p.Tese (Doutorado)

- MILETIC, I., MARLIN, T. On-line statistical results analysis in real-time operations optimization. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, v.37, n.9, p.3670-3684, 1998a.
- MILETIC, I., MARLIN, T. Results diagnosis for real-time process operations optimization. *Computers and Chemical Engineering*, v.22, Supplement S, p. S475-S482, 1998b.
- MORARI, M., LEE, J.H. Model Predictive Control: Past, Present and Future. *Computers and Chemical Engineering*, v. 23, p.667-682, 1999.
- NADLER, D., FORBES, J.F. Results analysis for real-time optimization systems in the presence of trust-regions constraints. *47th Canadian Chemical and Engineering Conference*, Edmonton, 1997.
- NARASIMHAN, S., JORDACHE, C. Data Reconciliation & Gross Error Detection – An Intelligent Use of Process Data. Houston (TX): Gulf Publishing Company, 2000.
- PICHÉ, S., SAYYAR-RODSARI, B., JOHNSON, D., GERULES, M. Nonlinear Model Predictive Control using Neural Networks. *IEEE Control Systems Magazine*, p.53-62, 2000.
- PISTIKOPOULOS, E.N., DUA, V., BOZINIS, N.A., BEMPORAD, A., MORARI, M. On-line optimization via off-line parametric optimization tools. *Computers and Chemical Engineering*, v.24, p.183-188, 2000.
- POWELL, M.J.D. Algorithms for non linear constraints that use Lagrangian Functions. *Mathematical Programming*, v.14, n.2, p.224-248, 1978.
- QIN, S.J., BADGWELL, T.A. An Overview of Industrial Model Predictive Control Technology. In J. C. Kantor, C. E. Garcia, and B. Carnahan (eds), *Chemical Process Control*, v.93 of *AIChE Symposium Series*, p.232-256, 1997.
- RODRIGUES, J.A.D., VASCO DE TOLEDO, E.C., MACIEL FILHO, R. A tuned approach of the predictive-adaptative GPC controller applied to a fed-batch bioreactor using complete factorial design. *Computers and Chemical Engineering*, v.26, p.1493-1500, 2002.
- SANTANA, P. L. *Modelos Matemáticos para Reator de Lama Trifásico Aplicados à Hidrogenação do o-Cresol*, Campinas: Faculdade de Engenharia Química, UNICAMP, 1995. 212 p.Tese (Mestrado)

- SANTANA, P. L. *Modelagem Matemática para Reator Trifásico: Modelos Determinísticos, Neurais e Híbridos*. Campinas: Faculdade de Engenharia Química, UNICAMP, 1999. 202 p. Tese (Doutorado)
- SANTOS, L.O., BIEGLER, L.T. A Tool to Analyze Robust Stability for Model Predictive Controllers. *Journal of Process Control*, v.9, p.233-246, 1999.
- SCHIAVON JÚNIOR, A. L., CORRÊA, R. G. Applications of an alternative formulation for one-layer real time optimization. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, v.17, n.4-7, p.685-694, 2000.
- SCHITKOWSKI, K. NLPQL: A FORTRAN-subroutine for solving constrained nonlinear programming problems. *Annals of Operations Research*, v.5, p.485-500, 1985.
- SEBORG, D.E., EDGAR, T.F., MELLICHAMP, D.A. *Process Dynamics and Control*, New York: John Willey, 1989, 717 p
- SOUZA JÚNIOR, M. B. *Controle Preditivo de Longo Alcance: Uma Investigação*. Rio de Janeiro: COPPE/UFRJ, 1989. Tese (Mestrado)
- STEPHANOPOULOS, G. *Chemical Process Control: an introduction to theory and practice*, New Jersey: Prentice-Hall, 1984, 696 p
- TAMHANE, A.C., MAH, R.S.H. Data reconciliation and gross error detection in chemical process network. *Technometrics*, v.27, p.409-415, 1985.
- TJOA, I.B., BIEGLER, L.T. Simultaneous strategies for data reconciliation and gross error detection of nonlinear systems. *Computers and Chemical Engineering*, v.15, p.679-690, 1991.
- TONG, H., CROWE, C.M. Detecting persistent gross error by sequential analysis of principal components. *American Institute of Chemical Engineering Journal*, v.43, p.1242-1249, 1997.
- TVRZSKÁ DE GOUVÊA, M. *Uso de um algoritmo SQP na otimização de processos químicos contínuos em tempo real*. São Paulo: Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, Departamento de Engenharia Química, 1997. 278 p. Tese (Doutorado)
- TVRZSKÁ DE GOUVÊA, M. *Uso de um algoritmo SQP na otimização de processos químicos contínuos em tempo real*. São Paulo: Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, Departamento de Engenharia Química, 1997. 278 p. Tese (Doutorado)

- TVRZSKÁ DE GOUVÊA, M., ODLOAK, D. One-layer real time optimization of LPG production in the FCC unit: procedure, advantages and disadvantages. *Computers and Chemical Engineering*, v.22, Suppl., p.S191-S198, 1998.
- VASCO DE TOLEDO, E.C. *Modelagem, simulação e controle de reatores catalíticos de leito fixo*. Campinas: Faculdade de Engenharia Química, UNICAMP, 1999. 337 p.Tese (Doutorado)
- VASCO DE TOLEDO, E.C. *Modelagem, Simulação e Controle de um reator de lama catalítico trifásico*. Projeto de Pós Doutorado, FAPESP processo 99/09305-0, DPQ/FEQ/UNICAMP, Campinas, SP, 1999.
- VASCO DE TOLEDO, E.C., *Modelagem, Simulação e Controle de um reator de lama catalítico trifásico*, Relatório de Atividades (Projeto de Pós Doutorado), FAPESP processo 99/09305-0, DPQ/FEQ/UNICAMP, Campinas, SP, 2000.
- VASCO DE TOLEDO, E.C., SANTANA, P.L., WOLF-MACIEL, M.R., MACIEL FILHO, R. Dynamic modelling of a three-phase catalytic slurry reactor, *Chemical Engineering Science*, v.56, p.6055-6061, 2001.
- VASCO DE TOLEDO, E.C., MARIANO, A.P., STREMEL, D. P., MACIEL FILHO, R. Advanced Control of a Three-Phase Slurry Catalytic Reactor. *European Symposium on Computer-Aided Process Engineering 14*, v.18, 2004.
- ZAFIRIOU, E., MARCHAL, A. Stability of SISO Quadratic Dynamic Matrix Control with Hard Output Constraints. *AIChE Journal*, v.37, n.10, p.1550–1560 1991.
- ZANIN, A. C. *Implementação Industrial de um Otimizador em Tempo Real*. São Paulo: Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, Departamento de Engenharia Química, 2001. 161 p.Tese (Doutorado)
- ZANIN, A. C., TVRZSKÁ DE GOUVÊA, M., ODLOAK, D. Industrial implementation of a real-time optimization strategy for maximizing production of LPG in a FCC unit. *Computers and Chemical Engineering*, v.24, p.525-531, 2000.
- ZANIN, A. C., TVRZSKÁ DE GOUVÊA, M., ODLOAK, D. Integrating real-time optimization into the model predictive controller of the FCC system, *Control Engineering Practice*, v.10, p.819-831, 2002.
- ZHANG, Y., FORBES, J.F. Extended design cost: a performance criterion for real-time optimization systems. *Computers and Chemical Engineering*, v.24, n.8, p.1829-1841, 2000.

- ZHANG, H., ROBERTS, P.D. On-Line Steady-State System Optimization of Nonlinear Constrained Processes with Slow Dynamics. *Trans. Inst. Meas. Control*, v.12, p.251-258, 1990.
- ZHANG, H., ROBERTS, P.D. Integrated system optimization and parameter estimation using a general form of steady-state model. *International Journal of System Science*, v.22, p.1679-1693, 1991.

APÊNDICE A – CONTROLE DMC

A.1 CONTROLADORES PREDITIVOS E ADAPTATIVOS

A.1.1 ESTRATÉGIA DE CONTROLE

Controladores do tipo preditivo empregam um modelo matemático para representar o processo físico real a ser controlado. Os parâmetros do modelo podem ser considerados invariantes no tempo, ou identificados *on-line*, no caso de uma versão auto-ajustável.

Estes controladores utilizam valores das saídas do processo e ações de controle passadas em sua estratégia de controle, como apresentada na Figura A.1. A seguinte estratégia de controle foi utilizada:

- 1) a cada tempo de amostragem t são feitas previsões das saídas do modelo do processo ao longo de um horizonte de tempos de amostragem. Estas previsões são funções do modelo interno assumido, dos vetores de ações de controle e saídas do processo passadas, assim como do vetor de ações de controle futuras potenciais;
- 2) o comportamento da planta em malha fechada é definido por uma trajetória de referência, sendo esta um modelo de primeira ordem, não indicada na figura;
- 3) o vetor de ações de controle futuras é calculado de modo que a diferença entre a saída predita do modelo e a trajetória de referência seja minimizada. Alguns algoritmos como DMC e GPC, consideram a restrição de que, após um “horizonte de controle”, os incrementos na ação de controle são nulos;
- 4) só a primeira ação de controle calculada é aplicada à planta, de modo que erros de modelagem e presença de perturbações sejam considerados;
- 5) o procedimento completo é repetido no tempo de amostragem seguinte e os vetores de dados são atualizados, levando ao cálculo de uma ação de controle baseada nas últimas medidas.

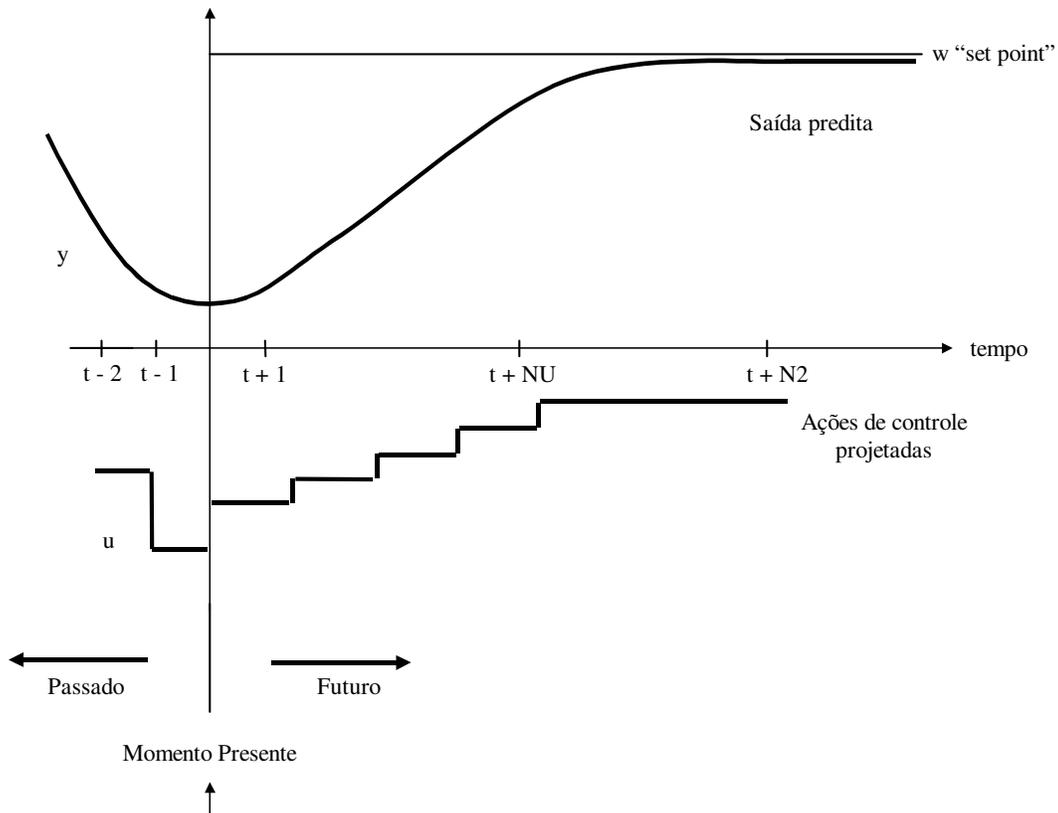


Figura A.1 - Estratégia de Predição de Longo Alcance.

A.1.2 MODELO INTERNO

Os controladores preditivos utilizam-se de um modelo interno do processo real para o cálculo da predição de longo alcance. O termo “interno” refere-se ao fato deste modelo estar dentro da lei de controle, na formulação do controlador.

Diferentes modelos são utilizados para este fim, sendo os mesmos divididos em dois grupos: não paramétricos e paramétricos. Considerando-se a Figura A.2:

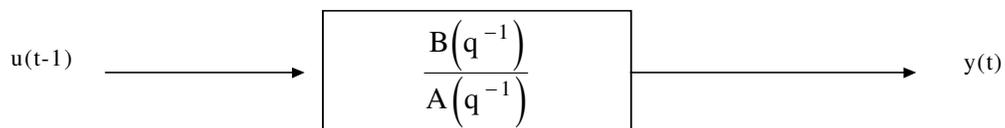


Figura A.2 - Modelo de Entrada e Saída.

Admitindo-se um modelo linearizado em torno de um ponto de operação, a representação pela equação de diferenças é:

$$A(q^{-1}) y(t) = B(q^{-1}) u(t-1) \quad (A.1)$$

onde $A(q^{-1})$ e $B(q^{-1})$ são polinômios dados por:

$$A(q^{-1}) = 1 + a_1 q^{-1} + \dots + a_{na} q^{-na}; \quad (A.2)$$

$$B(q^{-1}) = q^{-t_d} (b_0 + b_1 q^{-1} + \dots + b_{nb} q^{-nb}). \quad (A.3)$$

onde q^{-1} é o operador deslocamento, $q^{-1}y(t) = y(t-1)$, na e nb são as ordens de $A(q^{-1})$ e $B(q^{-1})$, respectivamente, e t_d é o tempo morto do processo.

Adotado por certos controladores preditivos, este modelo, chamado DARMA (“Deterministic Auto-Regressive and Moving Average”), é do tipo entrada-saída, e supõe que todas as variações na variável controlada, $y(t)$, sejam resultado da ação de controle, $u(t)$.

Outro modelo interno muito utilizado pelos primeiros algoritmos preditivos, o modelo que se baseia na resposta impulsional do processo pode ser obtido da equação (A.1) pela relação:

$$y(t) = H(q^{-1})u(t) \quad (A.4)$$

$$H(q^{-1}) = A(q^{-1})^{-1}B(q^{-1}) \quad (A.5)$$

Esta forma envolve um número infinito de termos, sendo representada por uma convolução discreta:

$$y(t) = \sum_{i=1}^{\infty} h_i u(t-i) \quad (A.6)$$

Assumindo que $h_i = 0$, após um número N de amostras, a equação (A.6) passa a ter uma representação finita dada por:

$$y(t) = \sum_{i=1}^N h_i u(t-i) \quad (A.7)$$

Os coeficientes h_i podem, na prática, ser determinados por caminhos alternativos. Originalmente no DMC, a proposta era a de determiná-los através das ordenadas da resposta a um degrau. Parece mais correto que sejam determinadas a partir da função de transferência obtida via qualquer método de identificação.

Os modelos apresentados até agora supõem que todas as variações da saída do processo, $y(t)$, são explicadas pela ação de controle. As aplicações práticas mostram que, mesmo com ações de controle constantes, a saída do processo continua flutuando, Souza Júnior (1989). Isto ocorre, não somente devido às perturbações determinísticas, mas também a uma série de flutuações estocásticas. Portanto, serão mais realistas os modelos do tipo:

$$A(q^{-1})y(t) = B(q^{-1})u(t-1) + x(t) \quad (\text{A.8})$$

onde $x(t)$ é o termo de perturbação estocástica.

Segundo Clarke et al. (1987a, 1987b), são encontrados dois tipos de perturbações principais: sinais randômicos, ocorrendo em tempos randômicos, e movimento Browniano.

Em ambos os casos, o modelo utilizado para representação do termo perturbação é dado por:

$$x(t) = C(q^{-1}) \frac{\xi(t)}{\Delta} \quad (\text{A.9})$$

onde:

$$C(q^{-1}) = 1 + c_1 q^{-1} + \dots + c_{nc} q^{-nc}; \quad (\text{A.10})$$

$$\Delta = 1 - q^{-1} \quad (\text{A.11})$$

nc = ordem do polinômio $C(q^{-1})$.

O ruído branco $\xi(t)$ é um sinal completamente não correlacionado, considerando-o aqui como tendo distribuição de amplitude gaussiana e, sendo assim, totalmente descrito pela sua média e covariância, Souza Júnior (1989).

Substituindo a equação (A.9) na equação (A.10), tem-se:

$$A(q^{-1})y(t) = B(q^{-1})u(t-1) + C(q^{-1})\frac{\xi(t)}{\Delta} \quad (\text{A.12})$$

Este modelo, conhecido como CARIMA (“Controlled Auto-Regressive Integrated Moving Average”), é utilizado por Clarke et al. (1987a, 1987b), e está representado na Figura A.3.

Chamando-se o ruído filtrado de $\eta(t)$:

$$\eta(t) = \frac{\xi(t)}{\Delta} \quad (\text{A.13})$$

que pode ser escrito:

$$\eta(t) = \eta(t-1) + \xi(t) \quad (\text{A.14})$$

Para as características descritas de $\xi(t)$, pode-se considerar $\eta(t)$ como movimento Browniano, Vasco de Toledo (1999).

Valendo-se da idéia de Souza Júnior (1989), que propôs uma alteração do modelo interno, chegou-se a um algoritmo de controle com ação integral variável, cujo termo perturbação é dado por:

$$x(t) = \frac{C(q^{-1})\xi(t) \left[1 - (1-\beta)q^{-1} \right]}{\Delta} \quad (\text{A.15})$$

onde $0 \leq \beta \leq 1$

No caso de $\beta = 1$, obtém-se o modelo CARIMA e, para $\beta = 0$, tem-se o modelo CARMA, que não proporciona ação integral ao algoritmo, e cuja representação se encontra na Figura A.4.

Substituindo a equação (A.15) na equação (A.8), tem-se o modelo interno utilizado no algoritmo GPC:

$$A(q^{-1})y(t) = B(q^{-1})u(t-1) + \frac{C(q^{-1})\xi(t) \left[1 - (1-\beta)q^{-1} \right]}{\Delta} \quad (\text{A.16})$$

Observa-se que os modelos CARMA, CARIMA e o proposto pela equação (A.16) são modelos paramétricos e o dado pela equação (A.7) é um modelo não paramétrico.

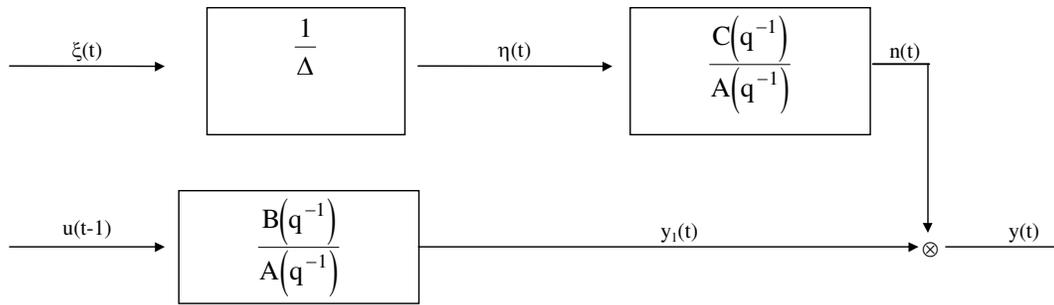


Figura A.3 - Modelo CARIMA.

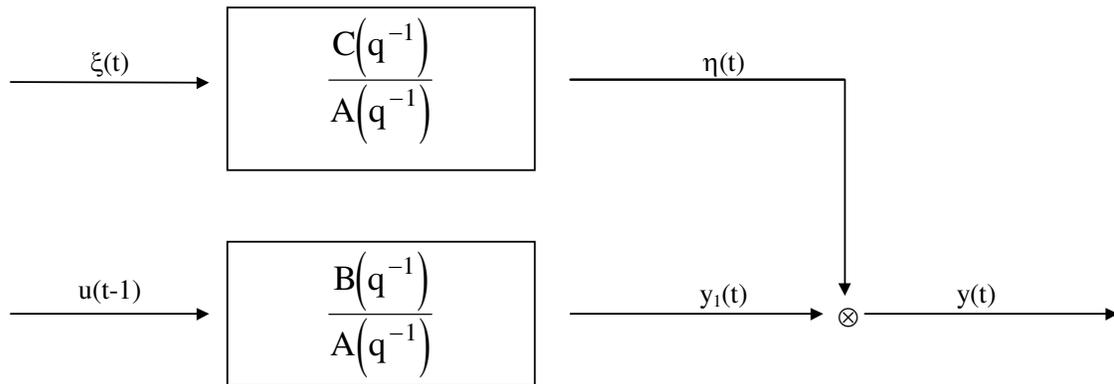


Figura A.4 - Modelo CARMA.

A.1.3 DMC

Os conceitos básicos do algoritmo de controle DMC foram originalmente apresentados por Cutler e Ramaker (1979). Baseado em um modelo de convolução do processo, o DMC calcula as futuras mudanças nas variáveis manipuladas que fazem com que as variáveis controladas sigam um caminho ótimo (*set-point*). Este caminho ótimo é determinado pela otimização de uma função objetivo.

A.1.3.1 Sistemas Monovariáveis

O algoritmo DMC utiliza um modelo de convolução discreto, baseado na resposta ao degrau, para representar o processo. Neste modelo, a variável de saída

(controlada), se relaciona com a variável de entrada (manipulada) através dos coeficientes de resposta ao degrau (h_i). Para o instante k pode-se escrever:

$$\hat{y}_k = \sum_{i=1}^{NM} h_i u_{k-i} \quad (\text{A.17})$$

onde NM é chamado de horizonte de modelo.

Para o instante $k+1$ pode-se escrever:

$$\hat{y}_{k+1} = \sum_{i=1}^{NM} h_i u_{k+1-i} \quad (\text{A.18})$$

Subtraindo a equação (A.17) da (A.18) tem-se que:

$$\hat{y}_{k+1} - \hat{y}_k = \sum_{i=1}^{NM} h_i (u_{k+1-i} - u_{k-i}) \quad (\text{A.19})$$

Definindo $\Delta u_k = u_k - u_{k-1}$, a equação (A.19) pode ser escrita como:

$$\hat{y}_{k+1} = \hat{y}_k + \sum_{i=1}^{NM} h_i \Delta u_{k+1-i} \quad (\text{A.20})$$

O modelo de convolução dado pela equação acima pode ser estendido para NP instantes futuros:

$$\hat{y}_{k+j} = \hat{y}_{k+j-1} + \sum_{i=1}^{NM} h_i \Delta u_{k+j-i} \quad j=1, \dots, NP \quad (\text{A.21})$$

onde NP é chamado de horizonte de predição.

O DMC corrige a predição da equação (A.21), incorporando uma estratégia de realimentação. No instante k , o valor predito da saída é comparado ao valor medido, sendo o desvio usado para a correção do valor predito nos NP instantes futuros. Por exemplo, para o instante $k+1$:

$$y_{k+1}^C = \hat{y}_{k+1} + (y_k - \hat{y}_k) \quad (\text{A.22})$$

onde y_k é o valor medido da saída.

Generalizando para os NP instantes futuros:

$$y_{k+j}^c = \hat{y}_{k+j} + (y_{k+j-1}^c - \hat{y}_{k+j-1}) \quad (\text{A.23})$$

onde, no instante $k+1$, y_{k+j-1}^c é igual ao valor medido y_k , como pode ser visto na equação (A.22).

Para o instante $k+2$, tem-se:

$$\begin{aligned} y_{k+2}^c &= \hat{y}_{k+2} + (y_{k+1}^c - \hat{y}_{k+1}) = \hat{y}_{k+2} + (\hat{y}_{k+1} + (y_k - \hat{y}_k) - \hat{y}_{k+1}) = \\ &= \hat{y}_{k+2} + (y_k - \hat{y}_k) \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

Para o instante $k+NP$:

$$y_{k+NP}^c = \hat{y}_{k+NP} + (y_k - \hat{y}_k) \quad (\text{A.25})$$

Pode-se observar que nas predições para os instantes de $k+1$ até $k+NP$, feitas no instante k , a correção é a mesma, calculada pelo valor medido menos o predito da saída no instante k (tempo atual).

Combinando as equações (A.21) e (A.23), chega-se a:

$$y_{k+j}^c = y_{k+j-1}^c + \sum_{i=1}^{NM} h_i \Delta u_{k+j-i} \quad j=1, \dots, NP \quad (\text{A.26})$$

Para o instante $k+1$ a equação (A.26) pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} y_{k+1}^c &= y_k^c + \sum_{i=1}^{NM} h_i \Delta u_{k+1-i} = y_k + \sum_{i=1}^{NM} h_i \Delta u_{k+1-i} = y_k + h_1 \Delta u_k + h_2 \Delta u_{k-1} + \dots + \\ &+ h_{NM} \Delta u_{k+1-NM} \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

Os valores de Δu_{k-1} , $\Delta u_{k-2}, \dots, \Delta u_{k-NM}$ são conhecidos. Agrupando-os num único termo, tem-se:

$$S_1 = \sum_{i=2}^{NM} h_i \Delta u_{k+1-i} \quad (\text{A.28})$$

Portanto a equação (A.27) torna-se:

$$y_{k+1}^c = y_k + h_1 \Delta u_k + S_1 \quad (\text{A.29})$$

Repetindo-se o procedimento para o instante $k+2$:

$$y_{k+2}^C = y_{k+1}^C + h_1 \Delta u_{k+1} + h_2 \Delta u_k + \dots + h_{NM} \Delta u_{k+2-NM} \quad (\text{A.30})$$

Agrupando novamente os valores conhecidos em um único termo:

$$y_{k+2}^C = y_{k+1}^C + h_1 \Delta u_{k+1} + h_2 \Delta u_k + S_2 \quad (\text{A.31})$$

$$\text{onde } S_2 = \sum_{i=3}^{NM} h_i \Delta u_{k+2-i}$$

Substituindo a equação (A.29) da equação (A.31):

$$y_{k+2}^C = y_k + (h_1 + h_2) \Delta u_k + h_1 \Delta u_{k+1} + S_1 + S_2 \quad (\text{A.32})$$

Definindo-se genericamente:

$$P_i = \sum_{m=1}^i S_m \quad i=1, \dots, NP \quad (\text{A.33})$$

$$S_m = \sum_{i=m+1}^{NM} h_i \Delta u_{k+m-i} \quad m=1, \dots, NP \quad (\text{A.34})$$

$$a_i = \sum_{j=1}^i h_j \quad i=1, \dots, NP \quad (\text{A.35})$$

Pode-se escrever para o instante $k+j$:

$$y_{k+j}^C = y_k + a_j \Delta u_k + a_{j-1} \Delta u_{k+1} + \dots + a_1 \Delta u_{k+j-1} + P_j \quad (\text{A.36})$$

A equação (A.36) pode ser escrita na forma de matriz como:

$$\begin{bmatrix} y_{k+1}^C \\ y_{k+2}^C \\ \vdots \\ y_{k+NP-1}^C \\ y_{k+NP}^C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ a_2 & a_1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{NP-1} & a_{NP-2} & \dots & a_1 & 0 \\ a_{NP} & a_{NP-1} & \dots & a_2 & a_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta u_k \\ \Delta u_{k+1} \\ \vdots \\ \Delta u_{k-NP-2} \\ \Delta u_{k+NP-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} y_k + P_1 \\ y_k + P_2 \\ \vdots \\ y_k + P_{NP-1} \\ y_k + P_{NP} \end{bmatrix} \quad (\text{A.37})$$

ou de maneira mais compacta:

$$(\underline{y}^C)_{NP} = (\underline{A}')_{NP \times NP} (\underline{\Delta u})_{NP} + (\underline{y}^P)_{NP} \quad (\text{A.38})$$

onde \underline{y}^P é a predição se não houver ação de controle no intervalo de k até $k+NP$, ou seja, a predição levando-se em conta somente as variações na variável manipulada no passado.

Na verdade na estratégia DMC reduz-se a dimensão do vetor $\underline{\Delta u}$. Admite-se que $\Delta u_{k+j}=0$ para $j \geq NC$, sendo $NC < NP$. NC é chamado de horizonte de controle. A equação (A.37) passa a ser:

$$\begin{bmatrix} y_{k+1}^C \\ y_{k+2}^C \\ \vdots \\ y_{k+NP-1}^C \\ y_{k+NP}^C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 & 0 & \cdots & 0 \\ a_2 & a_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{NP-1} & a_{NP-2} & \cdots & a_{NP-NC} \\ a_{NP} & a_{NP-1} & \cdots & a_{NP-NC+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta u_k \\ \Delta u_{k+1} \\ \vdots \\ \Delta u_{k-NC-2} \\ \Delta u_{k+NC-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} y_k + P_1 \\ y_k + P_2 \\ \vdots \\ y_k + P_{NP-1} \\ y_k + P_{NP} \end{bmatrix} \quad (\text{A.39})$$

ou

$$(\underline{y}^C)_{NP} = (\underline{A})_{NP \times NC} (\underline{\Delta u})_{NC} + (\underline{y}^P)_{NP} \quad (\text{A.40})$$

Nota-se que a matriz \underline{A} é formada pelas primeiras NC colunas de \underline{A}' .

Sendo o valor desejado (*set-point*) constante, tem-se em notação matricial:

$$\begin{bmatrix} y_{k+1}^d \\ y_{k+2}^d \\ \vdots \\ y_{k+NP-1}^d \\ y_{k+NP}^d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_{spk} \\ y_{spk} \\ \vdots \\ y_{spk} \\ y_{spk} \end{bmatrix} \quad (\text{A.41})$$

Subtraindo a equação (A.39) da (A.41):

$$\underline{E} = -\underline{A} \underline{\Delta u} + \underline{E}' \quad (\text{A.42})$$

onde \underline{A} e $\underline{\Delta u}$ são definidos na equação (A.39). \underline{E} e \underline{E}' são definidos a seguir:

$$\underline{E} = \begin{bmatrix} y_{k+1}^d - y_{k+1}^C \\ y_{k+2}^d - y_{k+2}^C \\ \vdots \\ y_{k+NP-1}^d - y_{k+NP-1}^C \\ y_{k+NP}^d - y_{k+NP}^C \end{bmatrix} \quad \underline{E}' = \begin{bmatrix} e_k - P_1 \\ e_k - P_2 \\ \vdots \\ e_k - P_{NP-1} \\ e_k - P_{NP} \end{bmatrix} \quad (\text{A.43})$$

onde

$$e_k = y_{spk} - y_k \quad (A.44)$$

O DMC calcula o vetor $\underline{\Delta u}$ para minimizar o seguinte critério de desempenho:

$$J = (\underline{E}^T \underline{E}) + (\underline{\Lambda} \underline{\Delta u})^T (\underline{\Lambda} \underline{\Delta u}) \quad (A.45)$$

que é a soma de dois termos:

- erro quadrático entre a trajetória da variável controlada desejada e a prevista num horizonte de predição;
- soma do quadrado da variação da variável manipulada multiplicada pelo quadrado do fator de supressão num horizonte de controle. Através deste fator pode-se restringir os movimentos da variável manipulada.

A estratégia original de Cutler e Ramaker (1979) obtém a solução deste problema por mínimos quadrados, chegando a:

$$\underline{\Delta u} = (\underline{A}^T \underline{A} + \underline{\Lambda}^T \underline{\Lambda})^{-1} \underline{A}^T \underline{E} \quad (A.46)$$

A matriz dos fatores de supressão, $\underline{\Lambda}$, tem dimensão NCxNC, com $\lambda_{ij}=f$, se $i=j$ e $\lambda_{ij}=0$ se $i \neq j$, onde f é o fator de supressão.

Implementa-se somente a primeira ação de controle:

$$u_k = u_{k-1} + \Delta u_k \quad (A.47)$$

No instante $k+1$ repete-se todo o procedimento.

A.1.4 PARÂMETROS ENVOLVIDOS NO CONTROLADOR DMC

A.1.4.1 Horizonte Mínimo de Predição

Se o tempo morto do processo, t_d , é exatamente conhecido, o valor de N_1 pode ser fixado como sendo igual à t_d . Caso t_d não seja conhecido ou variável, N_1 pode ser fixado igual a 1, sem perda da estabilidade, e o grau de $B(q^{-1})$ deve ser aumentado para considerar todos os possíveis desconhecidos valores de t_d (Vasco de Toledo, 1999).

Se um processo apresenta resposta inversa, existem algumas alternativas para que o algoritmo de controle ignore esta característica. Uma é escolher um valor de tempo de amostragem maior que a região da resposta inversa, e outra é que N_1 seja escolhido além da resposta inversa.

A.1.4.2 Horizonte Máximo de Predição

O valor de N_2 escolhido deve permitir informações suficientes da dinâmica do processo, as quais estão contidas na matriz G'_{\approx} . Na prática, N_2 é escolhido próximo ao tempo de ascensão do processo.

Quanto ao esforço computacional, deve-se escolher o menor possível, pois está relacionado com a dimensão da matriz G'_{\approx} . Para sistemas com resposta inversa, o valor de N_2 deve ser escolhido com mais critério.

O aumento de N_2 provoca ações de controle mais amenas; e uma diminuição, ações de controle mais enérgicas.

A.1.4.3 Horizonte de Controle

O horizonte de controle foi uma idéia retirada do algoritmo de controle DMC e incorporado no GPC, sendo um importante parâmetro de projeto, que influi na dimensão da matriz G'_{\approx} e, portanto, no esforço computacional do algoritmo. É interessante assumir o menor valor possível para este parâmetro.

O aumento do valor de Nu provoca ações de controle mais enérgicas, até um certo ponto, onde qualquer aumento em Nu ocasionará pouca diferença. Geralmente o valor de Nu igual a 1 dá aceitável controle. Um aumento em Nu é apropriado para sistemas complexos.

Pequenos valores de Nu podem garantir a inversão da matriz $G'_{\approx}^T G'_{\approx}$ para sistemas com tempo morto elevado, mesmo para $\lambda = 0$.

Com o uso da restrição do horizonte para as ações de controle, consegue-se uma amenização das mesmas, e também uma estabilidade da malha fechada.

A.1.4.4 Fator de Supressão de Movimento (λ)

Os algoritmos preditivos são providos de um peso, restrição, sobre a ação de controle, que é exercido pelo parâmetro λ . Quanto maior seu valor, menos enérgica será a ação de controle, dando estabilidade e diminuindo as oscilações da malha fechada.

Para sistemas com tempo morto elevado, a inversão da matriz $\underset{\approx}{G'}^T \underset{\approx}{G'}$ pode não ser garantida. Para isso muitas vezes é necessário utilizar $\lambda > 0$, para garantir a inversão, Vasco de Toledo (1999).

A.1.4.5 Constante da Trajetória de Referência (α)

Este parâmetro, como o próprio nome diz, está relacionado com o comportamento imposto pela trajetória de referência. Para pequenos valores de α , tem-se uma trajetória de referência menos suave, o que pode levar à sobre-elevações e ações de controle mais enérgicas. Já para um aumento de α , tem-se uma trajetória suave permitindo menores oscilações na variável controlada.

No caso de $\alpha = 0$, tem-se a trajetória igual ao “*set-point*”, sendo este o caso em que se tem maior velocidade por parte do algoritmo em função do parâmetro.

APÊNDICE B – ALGORITMO DE OTIMIZAÇÃO SQP

B.1 INTRODUÇÃO

A otimização se tornou a principal área de estudo na engenharia de processos, e vem evoluindo desde uma metodologia de interesse acadêmico até a tecnologia que tem um impacto significativo na indústria. Neste apêndice será apresentada a formulação matemática do algoritmo SQP (*Sequential Quadratic Programming*). No entanto, convém apresentar a classificação dos diversos tipos de problemas de otimização. Ressalta-se que esta classificação é independente dos métodos de solução.

Os problemas de otimização podem ser classificados em termos de variáveis discretas e contínuas. A maioria dos problemas para otimização contínua inclui programação linear (LP) e não linear (NLP). Uma importante subclasse do LP é o problema de complementaridade linear (LCP), enquanto que para o NLP pode-se citar a programação quadrática (QP) e a programação semidefinida (SP). Para o NLP, uma importante característica é se ele é ou não convexo. A não convexidade pode levar a múltiplos ótimos locais. Outra importante distinção a ser feita é se o problema é ou não diferenciável. Os problemas discretos são classificados em programação mista inteira linear (MILP) e não linear (MINLP).

Considerando sua formulação, problemas de otimização discreta/contínua quando representados em sua forma algébrica correspondem a problemas de programação mista inteira que têm a seguinte forma geral:

$$\begin{aligned} \min Z &= f(x, y) \\ \text{s.t. } h(x, y) &= 0 \\ g(x, y) &\leq 0 \\ x \in X, y &\in \{0, 1\}^m \end{aligned} \tag{MIP}$$

onde $f(x, y)$ é a função objetivo (por exemplo custo), $h(x, y) = 0$ são as equações que descrevem a performance do sistema (balanços de massa, taxas de produção), e $g(x, y) \leq 0$ são as desigualdades que definem as especificações ou restrições para planejamento e *scheduling*. As variáveis x são contínuas e

geralmente correspondem a variáveis de estado, enquanto que y são variáveis discretas, geralmente restritas entre 0 e 1 para definir, por exemplo, alocação de equipamentos e seqüenciamento de tarefas. O problema (MIP) corresponde a um problema de programação mista inteira não linear (MINLP) quando pelo menos uma das funções envolvidas é não linear. Se todas as funções são lineares, ele corresponde a um MILP. Se não existem variáveis discretas, o problema (MIP) é reduzido a um problema NLP ou LP.

B.2 APLICAÇÕES

Tanto a programação matemática quanto a otimização têm sido largamente encontradas em engenharia de processos. A principal razão para isso é que nestes problemas existem geralmente muitas soluções alternativas, e, por isso, muitas vezes não é fácil encontrar a solução ótima. Além disso, em muitos casos, o alcance da solução ótima gera grandes economias no processo. Em suma, otimização tem se tornado a principal tecnologia que ajuda a manter, ou até mesmo a aumentar a competitividade.

De uma forma geral, os problemas de *design* de processos tendem a gerar problemas NLP e MINLP, enquanto que planejamento e *scheduling* tendem a gerar problemas LP e MILP. A razão para isso é que os problemas de *design* utilizam modelos de processo preditivos, que geralmente são não lineares, enquanto que em planejamento e *scheduling*, as predições são menos importantes, uma vez que a maioria das operações é descrita através de exigências e atividades no tempo. No caso do controle de processos, a divisão é mais ou menos a mesma.

Na Tabela B.1 são indicados quais tipos específicos de modelos têm sido formulados para uma variedade de aplicações na engenharia de processos. Como visto na Tabela B.1, síntese e *design* têm sido dominadas por modelos NLP e MINLP devido à necessidade de manipular explicitamente as equações de desempenho, embora modelos mais simples gerem problemas LP e MILP. Problemas de operações, ao contrário, tender a ser dominados por modelos lineares, LP e MILP, para planejamento e *scheduling* e problemas de *supply chain*.

NLP, porém, têm um papel crucial para a otimização em tempo real. Em relação ao controle de processos, têm sido usados os modelos LP e NLP, embora o uso de MILPs em sistemas híbridos venha aumentando. Finalmente, nota-se que a otimização global tem se concentrado mais em *design* do que em problemas de operação. Nota-se também que as aplicações listadas na Tabela B.1 têm sido facilitadas não somente pelo progresso nos algoritmos de otimização, mas também pelo advento de técnicas e sistemas de modelagem.

Tabela B.1 – Aplicações de programação matemática em engenharia de processos.

	LP	MILP	QP, LCP	NLP	MINLP	Global	SA GA
<i>Design e síntese</i>							
HENS ^a	×	×		×	×	×	×
MENS ^b	×	×		×	×	×	×
Separações		×			×		
Reatores	×			×	×	×	
<i>Design de Equipamento</i>				×	×		×
<i>Flowsheeting</i>				×	×		
<i>Operações</i>							
<i>Scheduling</i>	×	×			×		×
<i>Supply Chain</i>	×	×			×		
Otimização em tempo real	×		×	×			
<i>Controle</i>							
MPC linear	×		×				
MPC não linear				×		×	
Híbrido		×		×	×		

^aHENS – *Heat Exchange Network Synthesis*; ^bMENS – *Mass Exchange Network Synthesis*

B.3 OTIMIZAÇÃO COM VARIÁVEIS CONTÍNUAS

Para a otimização de variáveis contínuas considera-se o problema (MIP) sem as variáveis discretas y , gerando o problema geral (NLP) apresentado abaixo:

$$\begin{aligned} \min & f(x, y) \\ \text{s.t.} & h(x) = 0 \\ & g(x) \leq 0 \end{aligned} \tag{NLP}$$

Uma característica chave do problema (NLP) é a sua convexidade, ou seja, se suas funções objetivo e regiões viáveis são convexas. Regiões viáveis convexas exigem que $g(x)$ seja convexa e $h(x)$ seja linear. Vale lembrar aqui que uma função $\phi(x)$ é convexa para $x \in X$ se: $\phi(\alpha x_1 + (1 - \alpha)x_2) \leq \alpha\phi(x_1) + (1 - \alpha)\phi(x_2)$ se mantém para todo $\alpha \in (0, 1)$ e $x_1, x_2 \in X$; estritamente convexo requer que esta desigualdade seja restrita. Se o (NLP) é um problema convexo, uma solução local é também uma solução global para (NLP). Além disso, se a função objetiva é estritamente convexa, esta solução é única. Por outro lado, as condições KKT podem satisfazer somente a situação ótima local para problemas não convexos e procedimentos de busca mais rigorosos são necessários para alcançar a solução global.

Em particular, se a função objetivo e as restrições do (NLP) são lineares, então o seguinte programa linear:

$$\begin{aligned} \min & c^T x \\ \text{s.t.} & Ax = b \\ & Cx \leq d \end{aligned} \tag{LP}$$

pode ser resolvido em um número finito de passos. O método padrão para resolver (LP) é o método simplex, desenvolvido na década de 40, embora métodos de ponto interior tenham se tornado bastante avançados e competitivos para problemas altamente restritos. Métodos para resolver (LP) são altamente difundidos e bem implementados. Atualmente, os algoritmos para resolver (LP) podem manipular milhões de variáveis e restrições e a aplicação de métodos de decomposição levam a soluções de problemas que são de duas a três ordens de

magnitude maiores que este. Também, o método de ponto interior é descrito abaixo a partir de uma perspectiva de problemas não lineares mais gerais.

Programas quadráticos representam uma ligeira modificação do (LP) e podem ser declarados como:

$$\begin{aligned} \min \quad & c^T x + \frac{1}{2} x^T Q x \\ \text{s.t.} \quad & Ax = b \\ & Cx \leq d \end{aligned} \tag{QP}$$

Se a matriz Q é positiva semidefinida (positiva definida) quando projetada num espaço nulo de restrições ativas, então (QP) é (estritamente) convexo e tem um único mínimo. Por outro lado, existem soluções locais para (QP) e métodos de otimização global mais elaborados são necessários para obter a solução global. QPs convexos podem também ser resolvidos em um número finito de passos. Uma variedade de estratégias de séries ativas têm sido criadas para resolver as condições KKT do QP e incorporar atualizações eficientes de restrições ativas. Métodos populares incluem algoritmos de espaços nulos (Gill, Murray and Wright, 1981), espaços reduzidos e métodos de complemento de Schur. Assim como os LPs, problemas QP também podem ser resolvidos com métodos de ponto interior.

B.4 RESOLUÇÃO DE UM PROBLEMA NLP

Para introduzir técnicas de solução para (NLP), primeiramente serão considerados algoritmos baseados em programação quadrática sucessiva (SQP) porque eles permitem a construção de uma variedade de algoritmos NLP baseados em etapas de Newton. Além disso, tem-se observado que estes algoritmos necessitam de poucos cálculos da função para resolver NLPs e podem ser confeccionados para uma vasta faixa de problemas de engenharia de processos com diferentes estruturas.

O SQP aplica o equivalente de uma etapa de Newton para as condições KKT do problema de programação não linear e isto leva a uma taxa rápida de convergência. Em um ponto estacionário do (NLP), x^* , as condições de KKT de primeira ordem para este problema são dadas por:

$$\nabla f(x^*) + A(x^*)\lambda + C(x^*)v = 0 \quad (\text{KKTa})$$

$$h(x^*) = 0 \quad (\text{KKTb})$$

$$g(x^*) + s = 0 \quad (\text{KKTc})$$

$$Sve = 0 \quad (\text{KKTd})$$

$$(s, v) \geq 0 \quad (\text{KKT e})$$

onde $e = [1, 1, \dots, 1]^T$, λ é o vetor multiplicador das igualdades, v o multiplicador das desigualdades, $A(x) = \nabla h(x)$, $C(x) = \nabla g(x)$, $S = \text{diag}\{s\}$, $V = \text{diag}\{v\}$.

Os métodos SQP encontram as soluções que satisfazem KKT gerando direções de busca como as de Newton na iteração k . Em geral, pode-se classificar os métodos SQP nas seguintes categorias:

- série ativa versus métodos de barreira para manipular limites e restrições de desigualdade nas direções de busca geradas;
- informações de segunda ordem podem ser fornecidas de várias maneiras e a estrutura do problema pode ser explorada por passos como o de Newton;
- *line search* versus métodos de região confiável para alcançar a convergência global.

B.4.1 SÉRIE ATIVA VERSUS MÉTODOS DE BARREIRAS

As condições de complementaridade (KKTd e KKT e) apresentam uma dificuldade chave na resolução das condições KKT. Na solução, as equações (KKTd) e os limites ativos (KKT e) são dependentes e servem para tornar o sistema KKT mal condicionado perto da solução. Algoritmos SQP tratam estas condições de duas formas. Na estratégia de séries ativas, as decisões discretas são feitas considerando a série de restrições ativas, $i \in I = \{i | g_i(x^*) = 0\}$, (KKTd) é substituída por $s_i = 0$, $i \in I$, e $v_i = 0$, $i \notin I$ e a determinação da série ativa é um problema combinatorial. Uma maneira relativamente menos custosa de determinar

uma estimativa da série ativa (e que também satisfaça (KKT_e)) é formular, no ponto x^k , e resolver o programa quadrático (QP) na iteração k , dada por:

$$\begin{aligned} \min & \nabla \phi(x^k)^T p + \frac{1}{2} p^T W(x^k, \lambda^k, \nu^k) p \\ \text{s.t.} & \quad h(x^k) + A(x^k)^T p = 0 \\ & \quad g(x^k) + C(x^k)^T p + s = 0, s \geq 0 \end{aligned} \tag{SQP}$$

As condições KKT do (SQP) são dadas por:

$$\nabla \phi(x^k) + W(x^k, \lambda^k, \nu^k) p + A(x^k) \lambda + C(x^k) \nu = 0 \tag{QPKKTa}$$

$$h(x^k) + A(x^k)^T p = 0 \tag{QPKKTb}$$

$$g(x^k) + C(x^k)^T p + s = 0 \tag{QPKKTc}$$

$$Sve = 0 \tag{QPKKTd}$$

$$(s, \nu) \geq 0 \tag{QPKKTe}$$

onde $W(x, \lambda, \nu) = \nabla^2 (f(x) + h(x)^T \lambda + g(x)^T \nu)$; $A(x^k) = \nabla h(x^k)$ e $C(x^k) = \nabla g(x^k)$ é a Hessiana da função Lagrangeano. É fácil mostrar que ((QPKKTa) – (QPKKTc)) corresponde à linearização de ((KKTa) – (KKTc)) na iteração k . Também, a seleção da série ativa é agora manipulada no nível QP satisfazendo as condições ((QPKKTd), (QPKKTe)). Para avaliar e mudar as candidatas a séries ativas, os algoritmos QP aplicam uma estratégia de atualização de matrizes para a matriz KKT associada com (SQP).

Para evitar o problema combinatorial de seleção da série ativa, métodos de barreira modificam o problema NLP para:

$$\begin{aligned} \min & \phi(x^k) - \mu \sum_i \ln s_i \\ \text{s.t.} & \quad h(x^k) = 0 \\ & \quad g(x^k) + s = 0 \end{aligned} \tag{IP}$$

onde a solução para este problema tem $s > 0$ para o parâmetro penalty $\mu > 0$, e a diminuição de μ para zero leva à solução do problema (NLP). As condições KKT para este problema podem ser escritas como:

$$\begin{aligned} \nabla\phi(x^*) + A(x^*)\lambda + C(x^*)\nu &= 0 \\ h(x^*) &= 0 \\ g(x^*) + s &= 0 \\ Sve &= \mu e \end{aligned} \tag{IPKKT}$$

e para $\mu > 0$, $s > 0$ e $\nu > 0$, passos de Newton gerados para resolver o (IPKKT) são bem comportados e análogos a (QPKKT), com uma modificação do lado direito de (QPKKTd). Além disso, se W^k é positiva definida no espaço nulo de $A(x^k)^T$, o passo de Newton pode ser escrito como o seguinte subproblema QP:

$$\begin{aligned} \min \nabla\phi(x^k)^T p + \frac{1}{2} p^T W(x^k, \lambda^k, \nu^k) p - \mu (S^k)^{-1} e^T \Delta s + \frac{1}{2} \Delta s^T (S^k)^{-1} \nu^k \Delta s \\ \text{s.t.} \quad h(x^k) + A(x^k)^T p = 0 \\ g(x^k) + C(x^k)^T p + s^k + \Delta s = 0 \end{aligned} \tag{IPQP}$$

onde $s = s^k + \Delta s$. Este QP pode ser mais simplificado se as restrições de desigualdade tomam a forma de limites simples. Nota-se que as condições de complementaridade são agora substituídas por termos penalty na função objetivo. As condições ótimas para este QP podem agora ser escritas como uma série de equações lineares e o problema combinatorial de selecionar a série ativa desaparece.

Resumindo, métodos de barreiras podem exigir mais iterações para resolver o (IP) para vários valores de μ , enquanto que os métodos de séries ativas requerem a solução de um subproblema (QP) do (SQP). Assim, se existem poucas restrições de desigualdade ou uma série ativa é conhecida, então resolver o problema (SQP) não é uma tarefa complicada, e o método de séries ativas é favorecido. Por outro lado, para problemas com muitas restrições de desigualdade, métodos de barreiras são geralmente mais rápidos, e eles evitam o problema combinatorial para selecionar a série ativa. Este é especialmente o caso para problemas de

grande escala quando um grande número de limites estão ativos, e esta proposta elimina a necessidade de escolher uma série ativa.

B.4.2 INFORMAÇÕES DE SEGUNDA ORDEM

Com o desenvolvimento e aumento das aplicações de ferramentas de diferenciação automática, existem uma variedade de plataformas de modelagem e simulação onde derivadas acuradas de primeira e segunda ordens podem estar disponíveis para otimização. Se tem-se derivadas de segunda ordem para as funções objetivo e restrições, elas podem ser usadas para construir a Hessiana, W^k , para os subproblemas QP acima. Porém, para obter uma solução única para estes problemas QPs, os gradientes das restrições ativas devem ainda ser completos e W^k deve ser positiva definida quando projetada no espaço nulo dos gradientes de restrições ativas.

Se segundas derivadas não estão disponíveis, aproximações quasi-Newton positivas definidas para a Hessiana reduzida (tal como BFGS) apresentam geralmente bastante sucesso. Definindo o vetor nd $d^T = [p^T \ \Delta s^T]$, o vetor nc

$$c^T = [h^T \ (g + s)^T] \text{ e}$$

$$H = \begin{bmatrix} A^T & 0 \\ C^T & I \end{bmatrix},$$

então pode-se parcionar $d = Zd_z + Yd_y$, onde $Z \in \Re^{nd \times (nd-nc)}$, $Y \in \Re^{nd \times nc}$, $HZ = 0$ e $[Z \ Y]$ é uma matriz não singular. Escrevendo os QPs (IPQP) ou (SQP), sem as restrições de limites da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \min_d \quad & a^T d + \frac{1}{2} d^T Q d \\ \text{s.t.} \quad & c + Hd = 0 \end{aligned} \tag{QP1}$$

então substituindo a partição para d dentro de (QP1) e simplificando tem-se:

$$d_y = -(H \ Y)^{-1} c \tag{RD}$$

e

$$\min_{d_z} \left(z^T a + z^T Q Y d_y \right)^T d_z + \frac{1}{2} d_z^T \left(z^T Q Z \right) d_z \quad (\text{ND})$$

Com esta decomposição, (RD) é geralmente um sistema de equações lineares esparso de ordem nc enquanto que (ND) tem somente $(nd - nc)$ variáveis. Se existem poucos graus de liberdade $(nd - nc)$, então as quantidades $(z^T Q Z)$ e $(z^T Q Y) d_y$ podem ser aproximadas com uma fórmula de atualização quasi-Newton e diferenças finitas, respectivamente. Além disso, uma aproximação de atualização de BFGS estabilizada para $(z^T Q Z)$ leva à Hessiana reduzida positiva definida em (ND) e uma solução única para o subproblema QP.

Finalmente, para problemas com funções objetivo quadráticas, como em reconciliação de dados, estimativa de parâmetros, e controle preditivo baseado em modelo, pode-se muitas vezes assumir que o valor da função objetivo e seu gradiente na solução são muito pequenos. Sob estas condições, pode-se mostrar que os multiplicadores (λ, v) também desaparecem e W pode ser substituído por $\nabla^2 \phi(x^*)$. A aproximação de *Gauss-Newton* tem-se mostrado muito eficiente para a solução de problemas de mínimos quadrados.

B.4.3 LINE SEARCH VERSUS MÉTODOS DE REGIÕES CONFIÁVEIS

Para alcançar a convergência partindo de pontos iniciais não muito bons, dois tipos de estratégias de globalização, *line search* e métodos de regiões confiáveis, são geralmente usados para os cálculos de direções de busca a partir dos subproblemas QP acima. Em uma proposta de região confiável, a restrição $\|d\| \leq \Delta$ é adicionada ao QP. O passo, $x^{k+1} = x^k + d$ é tomado se existe suficiente redução da função mérito (por exemplo, a função objetivo ponderada com algumas medidas das violações de restrições). Funções mérito comuns para os métodos SQP incluem a função Lagrangeana aumentada ou funções penalty exatas. Também o tamanho da região confiável Δ é ajustado de acordo com a redução da função mérito atual comparada à redução predita a partir do QP.

Porém, para valores de Δ suficientemente pequenos, (QP1) pode não ter solução. Ao invés disso, as restrições de regiões confiáveis podem ser aplicadas a subproblemas para d_y e d_z , que substituem (RD) e (ND), respectivamente. Tais métodos têm fortes propriedades de convergência global e são especialmente apropriados para NLPs mal condicionados.

Por outro lado, métodos *line search* podem ser mais eficientes em problemas onde os pontos iniciais são bons e os subproblemas QP bem condicionados, como em otimização em tempo real. Tipicamente, uma vez que a direção de busca do QP é calculada a partir de (SQP) ou de (IPQP), um tamanho de passo $\alpha \in [0, 1]$ é escolhido tal que $x^k + \alpha d$ leva a uma diminuição suficiente da função mérito.