

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

“CONTROLE PREDITIVO COM MODELO NÃO-LINEAR DE UM
TANQUE DE AQUECIMENTO EM BATELADA”

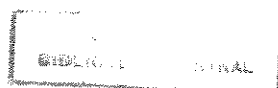
Autora: Mônica Oliveira Grassi

Orientador: Prof. Dr. Mário de Jesus Mendes

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

Março de 1995

Campinas - SP



BC
T/UNICAMP
G769c
124846
433/95
D | x |
R\$11,00
09/06/95

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

G769c

Grassi, Mônica Oliveira

Controle preditivo com modelo não-linear de um tanque
de aquecimento em batelada / Mônica Oliveira Grassi.--
Campinas, SP: [s.n.], 1995.

Orientador: Mário de Jesus Mendes.

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de
Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Controle de processo. 2. Programação não-linear.
3. *Controle preditivo. I. Mendes, Mário de Jesus.
II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de
Engenharia Química. III. Título.

CM-00070690-4

Aos meus pais, Evilásio e Yvone

Agradecimentos

Ao professor Mário de Jesus Mendes pela orientação e atenção dedicada;

ao colega Etienne Rocha pela valiosa colaboração, sugestões e constante incentivo;

à CAPES pelo apoio financeiro;

aos meus amigos, em especial a Kitaoka, Sonia, Lurdinha, Frede, Ana Frattini, Luis Antonio, Ana Cláudia, Hasan, Ângela, Ivana, Andrea e Moza;

a todos os funcionários e professores que contribuíram direta ou indiretamente para a realização deste trabalho, em especial a Andréia e ao prof. Roger Zemp;

aos meus irmãos, Giuseppe, Roberto e Isabella, cunhados, Fabíola e Robson, tio Carlinhos, pela amizade e incentivo em todos os momentos;

e principalmente aos meus pais, Evilásio e Yvone, e a minha avó Cleonice pelo carinho e apoio por toda a minha vida.

Nomenclatura

Controle Preditivo com Modelo:

Simbologias:

| | |
|--------|---|
| f | equações diferenciais no problema NLP1 |
| g | equações algébricas no problema NLP1 |
| h | restrições algébricas de igualdade no problema NLP1 |
| NP | número de pontos de colocação |
| p | vetor dos parâmetros do modelo |
| q | restrições algébricas de desigualdade no problema NLP1 |
| t_0 | instante inicial |
| u | vetor das variáveis manipuladas (de controle ou de entrada) |
| U | horizonte de controle |
| V | horizonte de predição |
| x | vetor das variáveis de estado |
| x_0 | vetor das condições iniciais |
| y | vetor das variáveis controladas (de saída) |
| Φ | função objetivo de controle |

Índices:

| | |
|--------|--------------|
| \max | valor máximo |
| \min | valor mínimo |

Colocação Ortogonal:

Simbologias:

| | |
|-------------------------------|--|
| a, b | intervalo de integração na eq.(2-5) |
| A_{ij} | matriz dos pontos de colocação representando a derivada primeira |
| a_j | coeficientes do polinômio de expansão da solução aproximada de (2-1) |
| $L_j(\theta)$ | polinômio interpolador de Lagrange |
| N | número de pontos internos de colocação |
| $P_{j-1}(\theta)$ | polinômio ortogonal de grau $j-1$ em θ |
| $P_N^{\alpha, \beta}(\theta)$ | polinômio ortogonal de Jacobi |

| | |
|------------------|---|
| t | tempo, s |
| y_0 | condição inicial do problema (2-1) |
| θ | variável tempo normalizada para o intervalo $\Delta t = t_h$ |
| $\omega(\theta)$ | $= \theta^\beta (1-\theta)^\alpha$, função peso do polinômio ortogonal de Jacobi |
| α, β | parâmetros do polinômio de Jacobi |
| Índices: | |
| i | pontos de colocação |

Colocação Ortogonal em Elementos Finitos:

Simbologias:

| | |
|----------------------|---|
| \mathbf{J} | matriz Jacobiana |
| NE | número de elementos de colocação |
| z | variável tempo normalizada para o intervalo $\Delta\theta^{(k)} = \theta_{k+1} - \theta_k$ |
| $\Delta\theta^{(k)}$ | $= \theta_{k+1} - \theta_k$, extensão do elemento de colocação |
| Índices: | |
| i | pontos de colocação |
| (k) | elementos de colocação |
| s_i | pontos de interseção (pontos- <i>splines</i> ou nós) entre os elementos de colocação (ou subintervalos) |
| - | valor relacionado à ordenada à esquerda de um nó |
| + | valor relacionado à ordenada à direita de um nó |
| ' | derivada primeira |

Método de Adams:

Simbologias:

| | |
|------------|--|
| est | estimativa do erro local na eq.(2-19) |
| NED | número de equações diferenciais |
| tol | tolerância desejada para a variável dependente |
| x_0, x_f | intervalo de integração |

Técnica de Otimização Não-Linear:

Simbologias:

| | |
|-----|----------------------------|
| d | direção de busca em (2-23) |
|-----|----------------------------|

| | |
|-----------|---|
| f | função objetivo quadrática |
| F | função objetivo não-linear |
| $ftol$ | tolerância de factibilidade não-linear |
| p | direção de busca em (2-24) |
| r | tolerância na otimização |
| α | comprimento do passo em (2-24) |
| λ | multiplicador de Lagrange para as restrições gerais |
| σ | comprimento do passo em (2-23) |
| ξ | multiplicador de Lagrange para os limites |
| Índices: | |
| $*$ | valor ótimo |
| n | iteração atual |

Modelagem Matemática da Operação do Processo:

Simbologias:

| | |
|------------|---|
| A_c | área de troca térmica entre o fluido de resfriamento e o conteúdo do tanque, m^2 |
| A_p | área de troca térmica entre a parede da camisa de vapor e o conteúdo do tanque, m^2 |
| A_{po} | área de troca térmica entre o vapor e a parede da camisa de vapor, m^2 |
| A_1, A_2 | agrupamentos de propriedades e constantes na eq.(3-10) |
| C_p | capacidade calorífica do conteúdo do tanque, $KJ/Kg.^{\circ}C$ |
| C_{pc} | capacidade calorífica do fluido de resfriamento, $KJ/Kg.^{\circ}C$ |
| C_{pp} | capacidade calorífica da parede da camisa de vapor, $KJ/Kg.^{\circ}C$ |
| F_c | vazão de água de resfriamento na serpentina, m^3/s |
| h_p | coeficiente de transferência de calor entre a parede da camisa e o conteúdo do tanque, $KJ/m^2.s$ |
| h_{po} | coeficiente de transferência de calor entre o vapor e a parede da camisa de vapor, $KJ/m^2.s$ |
| M_p | massa da parede da camisa de vapor, Kg |

| | |
|----------|--|
| Q_A | taxa de calor retirada do conteúdo do tanque pela serpentina, KJ/s |
| Q_V | taxa de calor fornecida ao conteúdo do tanque pela parede da camisa de vapor, KJ/s |
| t | tempo, s |
| T | temperatura do conteúdo do tanque, °C |
| T_{ce} | temperatura do fluido de resfriamento à entrada da serpentina, °C |
| T_{cs} | temperatura do fluido de resfriamento à saída da serpentina, °C |
| $T_d(t)$ | trajetória desejada (<i>setpoint</i>) para a temperatura do conteúdo do tanque, °C |
| T_p | temperatura da parede da camisa térmica, °C |
| T_s | temperatura do vapor na camisa do tanque, °C |
| U_c | coeficiente global de transferência de calor para a serpentina de resfriamento, KJ/m ² ·s |
| V | volume do tanque, m ³ |
| ρ | massa específica do conteúdo do tanque, Kg/m ³ |
| ρ_c | massa específica do fluido de resfriamento, Kg/m ³ |

Algoritmo de Controle/Otimização:

Simbologias:

| | |
|--------------|---|
| JAC | matriz Jacobiana |
| LI | vetor limite inferior |
| LS | vetor limite superior |
| MRL | matriz das restrições lineares |
| NRLIN | número de restrições lineares |
| NRNLN | número de restrições não-lineares |
| NV | número de variáveis no problema de otimização |
| NVE | número de variáveis de estado |
| RNL | vetor das restrições não-lineares |
| t_c | horizonte de controle |
| t_h | horizonte de predição |
| t_0 | instante inicial para atuação do controlador preditivo, s |

| | |
|-----------------|---|
| V | vetor das variáveis do problema de otimização |
| V' | vetor estruturado das variáveis do problema de otimização |
| ε | erro entre o valor desejado e o predito para T |
| Φ | função objetivo de controle |
| τ | período de amostragem, s |
| ω | peso da Quadratura Gaussiana |
| Índices: | |
| L | restrição linear |
| NL | restrição não-linear |
| V | variáveis |
| i | ponto de colocação |
| (k) | elemento de colocação |

Abreviaturas:

| | |
|------|---|
| CSTR | Reator Tanque Continuamente Agitado |
| DMC | Controle por Matriz Dinâmica |
| IMC | Controle com Modelo Interno |
| ISE | Integral do Quadrado do Erro (função) |
| LMPC | Controle Preditivo com Modelo Linear |
| MAC | Controle Algorítmico com Modelo |
| MISO | Múltiplas-Entradas Única-Saída (processo) |
| MPC | Controle Preditivo com Modelo |
| NLP | Programação Não-Linear |
| NMPC | Controle Preditivo com Modelo Não-linear |
| PID | Proporcional Integral Derivativo (controle) |
| QP | Programação Quadrática (método) |
| RG | Gradiente Reduzido (método) |
| SISO | Única-Entrada Única-Saída (processo) |
| SQP | Programação Quadrática Sucessiva (método) |
| UDMC | Controle por Matriz Dinâmica Universal |

Resumo

Nos últimos anos vem-se assistindo ao desenvolvimento de estratégias de controle de processos não-lineares as quais incorporam um modelo do processo na estrutura do controlador. O Controle Preditivo com Modelo Não-linear (NMPC), uma das técnicas de controle avançado de processos não-lineares, utiliza o conhecimento da dinâmica do processo (um modelo explícito do mesmo) para determinar os movimentos futuros ótimos da variável manipulada para um dado horizonte de controle, através da minimização sobre um horizonte de predição de uma função objetivo (baseada numa trajetória de saída desejada). O objetivo do controle é garantir que a saída do processo aproxime-se o máximo possível da trajetória a ela imposta.

Neste trabalho é feito um estudo por simulação do controle de um tanque de aquecimento em batelada hipotético, cujo modelo é constituído por um sistema de duas equações diferenciais ordinárias não-lineares de balanço de energia, usando a teoria do NMPC. O objetivo básico do trabalho é o de avaliar a influência dos parâmetros de projeto do NMPC sobre o desempenho do controlador. Para se evitar um problema de controle de dimensão muito elevada, as equações do modelo são discretizadas pelo método da Colocação Ortogonal em Elementos Finitos, fazendo-se uso de polinômios ortogonais de Jacobi. O sistema de equações diferenciais se torna algébrico e o problema de controle ótimo é transformado em um problema de programação não-linear (NLP) com as equações algébricas fazendo parte das restrições de igualdade. O problema resultante é resolvido através de uma estratégia que simultaneamente converge e otimiza o modelo algébrico por aplicação da técnica de otimização não-linear da Programação Quadrática Sucessiva (SQP). Os resultados permitem concluir que, mesmo para um problema simples como o definido acima, o desempenho do NMPC é fortemente dependente dos parâmetros de sintonia, como o tempo de amostragem e a duração do horizonte de predição. Além disso, observa-se uma influência clara do grau de aproximação obtido na discretização do modelo não-linear sobre o desempenho do controlador.

Palavras-chave: Controle Preditivo; Não-linear; Sintonização; Tanque de Aquecimento; Batelada; Servo-controle

Summary

In the recent years, control strategies of nonlinear processes, which incorporate a model of the process in the controller strategy, are being developed. The Nonlinear Model Predictive Control (NMPC), one of the most advanced control technique, uses the process dynamic (a model) for determine future movements of the manipulated variable in a control horizon through the minimization in a prediction horizon of the objective function (based on the output desired). The aim of control is to assume that the output of the process is closer to the imposed trajectory.

In this work, it is done a control simulation study of a Batch Heating Tank, whose model contains a system of two differential ordinary nonlinear equations of the energy balance, using NMPC. The aim is to evaluate the influence of the design parameters of NMPC in the performance of the controller. So as to avoid a problem of high dimension, the model equations are discretization by Orthogonal Collocation, using Jacobi polynomials. The system of differential equations becomes algebraic and the optimal control is transformed into a Nonlinear Programming Problem (NLP) with the algebraic equations being part of the equality restrictions. The resulting problem is solved by a strategy which simultaneously solves and optimizes the algebraic model by applying the Successive Quadratic Programming (SQP). The results allow us to conclude that, even for a simple problem, the NMPC performance is strongly dependent of the tune parameters, such as sampling time and the prediction horizon. Moreover, it is observed an influence of the approximation degree in the discretization of the nonlinear model in the performance of the controller.

Keywords: Predictive Control; Nonlinear; Tuning; Heating Tank; Batch; Servocontrol

Sumário

| | |
|---|------------|
| Introdução | 1 |
| 1. Controle Preditivo com Modelo | 3 |
| 1.1. Conceito do MPC | 4 |
| 1.2. Controle Preditivo com Modelo Linear (LMPC) | 6 |
| 1.3. Controle Preditivo com Modelo Não-Linear (NMPC) | 6 |
| 2. Análise de alguns Métodos Numéricos Utilizados na Formulação do NMPC .. | 14 |
| 2.1. Métodos de Discretização de Equações Diferenciais | 15 |
| 2.1.1. Colocação Ortogonal Global | 15 |
| 2.1.2. Colocação Ortogonal em Elementos Finitos | 20 |
| 2.2. Método de Adams | 24 |
| 2.3. Técnica de Otimização Não-Linear | 25 |
| 2.3.1. Programação Quadrática Sucessiva (SQP) | 27 |
| 3. Aplicação da Metodologia NMPC ao Controle de um Tanque de Aquecimento em Batelada | 31 |
| 3.1. Modelagem Matemática da Operação do Processo | 32 |
| 3.1.1. Descrição do Processo | 32 |
| 3.1.2. Balanço de Energia no Interior do Equipamento | 33 |
| 3.1.3. Balanço de Energia para a Parede entre o Vapor e o Meio Interno | 37 |
| 3.2. Problema de Controle | 39 |
| 3.2.1. Restrições | 43 |
| 3.2.2. Função Objetivo | 51 |
| 4. Resultados | 56 |
| 5. Discussão e Conclusões | 112 |
| Referências Bibliográficas | 115 |
| Apêndice A | 119 |
| Apêndice B | 128 |

Introdução

Apesar dos processos químicos serem, em geral, não-lineares, a aproximação mais comum no projeto de controladores é ainda a linearização das equações do modelo sobre algum ponto nominal de operação. Entretanto, a aproximação por linearização apenas se ajusta a processos moderadamente não-lineares. Tais descrições lineares necessariamente “perdem” informações a respeito do processo que se pretende representar e isso pode causar sérios problemas não só para o controle de processos contínuos mas também para o de processos em batelada, os quais operam sobre uma grande faixa de condições de operação.

Processos químicos não-lineares são naturalmente representados matematicamente por modelos não-lineares, os quais têm a vantagem de ser aplicáveis numa grande faixa de condições de operação.

A evolução na teoria de controle, combinada com os avanços em computadores (mais rápidos, mais memória), permite que estratégias de controle avançado sejam implementadas com sucesso para processos químicos. A maioria das técnicas de controle avançado é baseada num modelo dinâmico do processo incorporado ao controlador, mesmo em casos já considerados convencionais, como o do controle *feedforward*.

Com base nestas considerações e o fato de que estratégias de controle preditivo recentes baseadas explicitamente na representação dinâmica não-linear dos processos químicos vêm-se expandindo de forma rápida e mostrando-se bastante eficientes, surgiu o interesse em analisar o desempenho de tais estratégias em particular em associação com os problemas correspondentes de sintonização.

O objetivo deste trabalho, então, é o de desenvolver ferramentas para o projeto e implementação da estratégia de controle avançado NMPC (Controle Preditivo com Modelo Não-linear) aplicada a um processo químico simples o qual é modelado por equações diferenciais ordinárias não-lineares. O processo escolhido é o de um tanque de aquecimento em batelada e o problema é do tipo servo-controle MISO (duas variáveis de entrada e uma de saída). Este problema de controle pode, pois, ser visto como um ponto de partida para o estudo de um caso servo-controle mais importante, dentro da mesma classe, que é o reator em batelada exotérmico.

Uma característica importante desta estratégia de controle ótimo é o uso direto de modelo não-linear e a possibilidade de se trabalhar com restrições nas variáveis de entrada e saída.

O presente trabalho é dividido em cinco capítulos. Inicialmente, no capítulo 1, é apresentado um breve histórico sobre o controle de processos não-lineares, abordando mais especificamente a teoria do Controle Preditivo com Modelo Não-linear (NMPC), o qual é o objeto deste estudo.

Em seguida, o capítulo 2 tem por objetivo apresentar os fundamentos teóricos de alguns métodos numéricos, ferramentas que se fazem necessárias na formulação do NMPC, incluindo: Colocação Ortogonal Global, Colocação Ortogonal em Elementos Finitos, Método de Adams e Programação Quadrática Sucessiva (SQP).

Outra ferramenta de fundamental importância, abordada no capítulo 3, é a representação matemática do processo que, para este estudo em particular, é a mesma tanto para a simulação da operação quanto para o projeto do controlador. Ainda neste capítulo, o problema de controle é formulado e preparado para a implementação (linguagem Fortran) da estratégia NMPC.

O capítulo 4, por sua vez, apresenta os resultados da simulação do controle do processo em estudo e, a seguir, no capítulo 5, apresentam-se as conclusões e sugestões para futuros trabalhos.

O trabalho contém ainda dois apêndices. O primeiro, Apêndice A, contém um exemplo da aplicação dos métodos Colocação Ortogonal Global e Colocação Ortogonal em Elementos Finitos; o segundo, Apêndice B, detalha alguns dos aspectos da implementação do NMPC.

CAPÍTULO 1

Controle Preditivo com Modelo

1. Controle Preditivo com Modelo

O Controle Preditivo com Modelo (MPC) é tratado na literatura como uma família de controladores que incorporam um modelo dinâmico explícito do processo para prever o efeito de ações (futuras) da variável manipulada (ou de entrada, ou de controle) sobre a controlada (ou de saída) - o que justifica o seu nome. Os movimentos futuros da variável manipulada são determinados através de uma otimização, com o objetivo de minimizar o erro predito, sujeito à restrições de operação/projeto. Por isso, no contexto do MPC, o problema de controle incluindo diferentes objetivos, restrições, etc., é formulado como um problema de otimização dinâmica.

Fisher (1991), numa ampla revisão do controle de processos químicos em geral, ilustra a evolução da tecnologia de controle desde as estratégias multi-malhas tradicionais até os sistemas de controle modernos ajudados por computador e baseados em modelos multivariáveis. Métodos de projeto de controle baseados no conceito do MPC têm sido bastante aceitos em aplicações industriais, além de estudados em Universidades. A existência de várias maneiras alternativas de projetar ou implementar cada componente do MPC, além dessas alternativas poderem ser combinadas de modos diferentes, leva o MPC a ser considerado como uma técnica de controle ou um conceito, ao invés de ser tratado como um único tipo de controlador.

Este capítulo visa apresentar o conceito do Controle Preditivo com Modelo, bem como suas características, vantagens, etc., abordando de forma breve o Controle Preditivo com Modelo Linear (LMPC) e, mais especificamente, o Controle Preditivo com Modelo Não-linear (NMPC).

1.1. Conceito do MPC

Os Controladores Preditivos com Modelo são baseados em previsões do comportamento (futuro) do processo a ser controlado realizadas através de um modelo matemático do processo, suposto ser disponível e representativo.

O conceito de controle preditivo foi introduzido por Richalet *et al.* (1978) e Cutler e Ramaker (1980), e, desde então, muitos trabalhos têm sido realizados sobre essa nova estrutura de controle.

Um algoritmo de controle preditivo calcula uma seqüência de valores das variáveis de controle sobre um horizonte de predição, de modo que as saídas preditas do processo estejam próxima de uma trajetória desejada (de referência). Um modelo dinâmico do processo é usado para prever a saída do mesmo, e uma função objetivo é adotada para definir o quanto a saída predita do processo obedece a trajetória de referência. Qualquer modelo que descreva a relação entre as entradas e as saídas pode ser usado; a função objetivo geralmente é uma função das variáveis controladas, de estado e manipuladas, e a trajetória de referência pode ser uma ótima ou uma seqüência arbitrária de pontos. A minimização da função objetivo sobre um horizonte de predição produz uma seqüência ótima de valores das variáveis de entrada (horizonte de controle). Por isso, para encontrar essa trajetória ótima das variáveis de entrada, um problema de otimização deve ser resolvido. Embora a otimização seja desenvolvida para uma seqüência de movimentos futuros de controle, somente o primeiro elemento é implementado para o controle do processo. No próximo período de amostragem, todo o procedimento é repetido usando a última informação medida, com o horizonte de predição incrementado de um intervalo de tempo.

Apesar do fato de controladores preditivos serem todos baseados no mesmo princípio, existem muitas aproximações para o seu projeto. Usando diferentes modelos e funções objetivo, produzem-se diferentes controladores preditivos, cada um apresentando suas próprias propriedades.

Os primeiros MPC's, os quais foram desenvolvidos para processos lineares, têm-se mostrado superiores em relação aos controladores PID (Proporcional Integral Derivativo), mas não os substituíram em grande número. Recentemente, os MPC's vêm-se estendendo a processos não-lineares, prometendo fornecer um controle substancialmente melhor.

1.2. Controle Preditivo com Modelo Linear (LMPC)

Nos anos 80, houve um crescente uso de técnicas de Controle Preditivo com Modelo linear (LMPC). Uma pesquisa sobre controle preditivo com modelo, incluindo uma revisão da história, formulação, características, aplicações e referências desta estratégia, foi desenvolvida por García *et al.* (1989). Neste artigo, a metodologia MPC é revisada e comparada com outras técnicas aparentemente idênticas.

São muitas as técnicas de projeto de controladores derivadas do MPC, tais como, “Controle Algorítmico com Modelo” (MAC), o “Controle por Matriz Dinâmica” (DMC) e a metodologia do “Controle Inferencial”. Esses algoritmos relacionam a saída desejada à entrada manipulada, através de um modelo linear, e às perturbações não medidas. Eles foram racionalizados na estrutura do “Controle com Modelo Interno” (IMC). Algoritmos subsequentes dentro desta classe foram apresentados para incluir restrições lineares envolvendo as entradas e saídas, e limites nas entradas. A técnica LMPC mais citada é a DMC. Também, encontra-se na literatura a estrutura do “Controle Preditivo Unificado”, o qual é uma aproximação unificada para o projeto de controlador preditivo para processos SISO (única-entrada única-saída) lineares.

1.3. Controle Preditivo com Modelo Não-Linear (NMPC)

Estratégias de controle preditivo têm sido bem recebidas pelas indústrias, pois são intuitivas e trabalham explicitamente com restrições. Mas os métodos baseados na teoria de sistemas lineares apresentam limitações, pois podem não apresentar um bom desempenho para sistemas altamente não-lineares. Uma extensão direta dos métodos de controle preditivo com modelo linear resulta quando um modelo dinâmico não-linear do processo é usado. Durante os últimos 7 anos, tem existido um elevado crescimento do número de técnicas de controle que são baseadas nos conceitos de sistemas não-lineares. Uma vez que a teoria de controle não-linear vem evoluindo, combinada com os avanços em computação (*software* e *hardware*), mais pesquisas têm-se voltado para o problema de controle de processos não-lineares.

Processos de produção química costumam apresentar certas dificuldades no seu controle, incluindo o seu próprio comportamento dinâmico não-linear, além de outras características comuns aos processos tanto lineares quanto não-lineares (Bequette, 1991a):

- i) interações multivariáveis entre variáveis manipulada e controlada;
- i) variáveis de estado não medidas;
- iii) perturbações não medidas e frequentes;
- iv) processos de ordem elevada e distribuídos;
- v) parâmetros indeterminados e variando com o tempo;
- vi) restrições nas variáveis manipulada e de estado;
- vii) tempo-morto nas variáveis de entrada e medida.

Há 40 anos atrás já se percebia que uma das limitações no desempenho do sistema de controle era devido ao comportamento dinâmico não-linear do processo. As soluções iniciais eram baseadas, principalmente, em modificações em *hardware* (válvulas de igual percentagem ou extratores de raiz quadrada) para remover as não-linearidades maiores. No início dos anos 60, já se desenvolviam controladores para processos não-lineares.

Muitos projetos de processos químicos são realizados de forma conservativa de modo a evitar regimes de operação complexos. Por outro lado, controladores PID lineares convencionais apresentam limitações no desempenho quando aplicados a processos não-lineares (Chang e Chen, 1984). Seider e Brengel (1991) notam que desenvolvimentos recentes em controle preditivo com modelo em sistemas não-lineares tornam a operação nas condições economicamente ótimas uma meta realista.

A estrutura do IMC foi a base para os mais recentes algoritmos de controle não-linear. Seider e Brengel (1991) citam, em seu trabalho de revisão, algumas extensões do controle aplicado a sistemas não-lineares. Entre elas têm-se: um “método baseado em Newton”, “Controle por Matriz Dinâmica Universal” (UDMC), “métodos baseados em colocação”, um “algoritmo inferencial não-linear” e um “controlador preditivo não-linear

multi-passo". Vários trabalhos têm-se voltado para contornar as complexidades dos sistemas não-lineares através de transformações que convertam classes gerais de modelos lineares; contudo, quando restrições no processo estão presentes (o que é uma característica natural), estas costumam reter as não-linearidades e esta desvantagem se opõe à utilização desta metodologia.

Seider e Brengel (1991) examinam o impacto das não-linearidades em todos os aspectos das análises e sínteses de projetos de processos e de seus sistemas de controle, e ressaltam o importante papel do modelo do processo para sistemas não-lineares em todas as fases do projeto.

Bequette (1991a) apresenta uma revisão sobre o controle não-linear de processos, dando ênfase, principalmente, às técnicas que usam um modelo não-linear explícito do processo para o projeto ou implementação do sistema de controle. Este trabalho envolve desde estratégias iniciais com simples modificações em *hardware* nos anos 50 até as recentes aproximações de controle preditivo baseadas em programação não-linear (NLP). O autor apresenta ainda uma tabela contendo as operações unitárias que têm sido controladas por essas técnicas. Segundo Bequette, as técnicas de controle preditivo não-linear baseadas em NLP são capazes de trabalhar com a maioria das características comuns aos processos químicos - itens (i)-(vii) citados acima. A característica mais ressaltada destas técnicas é a habilidade de trabalhar explicitamente com restrições e, como desvantagem, cita o tempo computacional necessário para desenvolver a otimização com predição.

Vale ressaltar que técnicas de controle preditivo linear podem ser estendidas para trabalhar com sistemas não-lineares simplesmente formulando-se um problema de programação não-linear (NLP). A estrutura do controlador preditivo com modelo não-linear é mostrada em um diagrama de blocos na figura 1.1. Cada um dos blocos é assumido em geral ser não-linear. O controlador e o estimador incluem um modelo do processo e envolvem a solução de um programa não-linear; o primeiro determina os movimentos futuros da variável manipulada e, o segundo, o qual usa medidas do processo, pode inferir os valores das variáveis de estado e perturbações não medidas, e parâmetros desconhecidos ou que variem com o tempo. Este último constitui a porção *feedback* do algoritmo.

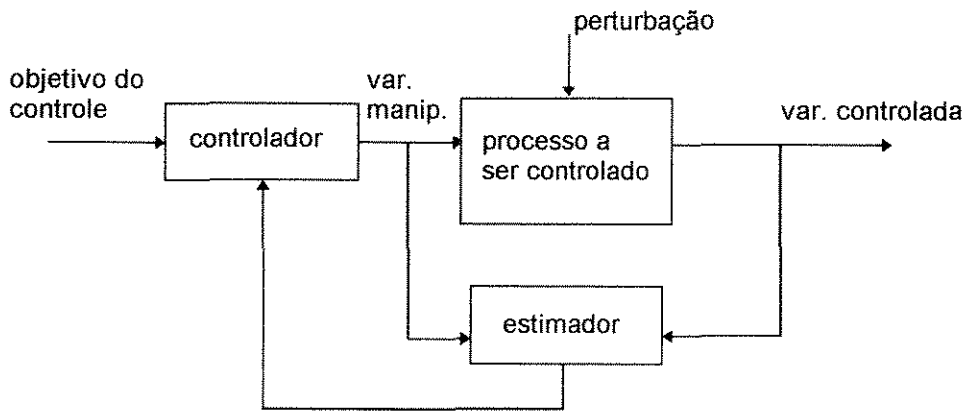


Figura 1.1. Estrutura do NMPC.

O algoritmo para implementação do NMPC pode ser inicializado estimando um conjunto de parâmetros do modelo, a partir dos dados de entrada e saída passados. O controlador, então, determina a seqüência das variáveis manipuladas (horizonte de controle) a qual minimiza um objetivo de desempenho do controle sobre um horizonte de tempo futuro (assumido ser no mínimo um tempo de amostragem); as entradas ótimas são usadas para controlar o processo real. No fim de um período de amostragem, novas medidas são tomadas e, opcionalmente, novas estimativas são realizadas. Finalmente, o horizonte de tempo é redefinido e os passos anteriores são repetidos - até atingir o tempo final fixado (para o caso de processo em batelada).

Então, o problema de controle envolve a otimização de uma função (função objetivo não-linear), a qual se encontra sujeita a restrições (não-lineares). Estas restrições incluem as equações diferenciais ordinárias que descrevem o processo a ser controlado (modelo dinâmico do processo) e limites nas variáveis de otimização. Este tipo de problema freqüentemente aparece no projeto de processos em batelada, na operação de processos semi-contínuos e na partida de processos contínuos.

O problema a ser resolvido pelo controlador pode ser estabelecido, de uma forma geral, como:

$$\min_{\mathbf{u}(t)} \Phi[\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t); \mathbf{p}] , \quad (i)$$

sujeita a:

(NLP1)

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} - \mathbf{f}[\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t); \mathbf{p}] = 0 \quad (ii)$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{g}[\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t); \mathbf{p}] \quad (iii)$$

$$\mathbf{h}[\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t); \mathbf{p}] = 0 \quad (iv)$$

$$\mathbf{q}[\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t); \mathbf{p}] \geq 0 \quad (v)$$

$$\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 \quad (vi)$$

$$\mathbf{u}_{\min} \leq \mathbf{u} \leq \mathbf{u}_{\max} \quad (vii)$$

$$\mathbf{x}_{\min} \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{x}_{\max} \quad (viii)$$

$$\mathbf{y}_{\min} \leq \mathbf{y} \leq \mathbf{y}_{\max} , \quad (ix)$$

onde \mathbf{y} , \mathbf{x} e \mathbf{u} são vetores das variáveis controladas, de estado e manipuladas, respectivamente, e \mathbf{p} é o vetor de parâmetros do modelo os quais podem incluir as perturbações (se existirem). As equações (ii) e (iii) (diferenciais e algébricas, respectivamente) descrevem o modelo do processo; (iv) são as restrições algébricas de igualdade, (v) são as restrições algébricas de desigualdade; (vii)-(ix) são os limites simples nas variáveis de otimização; (vi) é a condição inicial e (i) é a função objetivo a ser otimizada. As variáveis de decisão são, neste problema, representadas pelo vetor \mathbf{u} . Como se vê, o problema de controle ótimo é, pois, transformado em um de NLP com restrições.

Vale ressaltar que não existe uma forma especial imposta à função objetivo; no entanto, uma escolha particular para esta influenciará tanto na solução do problema quanto no esforço computacional para a sua obtenção. Também, as equações diferenciais ordinárias não precisam assumir uma forma especial e podem incluir termos de derivada espacial e/ou integral e de tempo-morto (Eaton e Rawlings, 1990).

Existem alguns métodos que podem ser usados para calcular a solução do **NLP1**. Numa formulação de controle ótimo clássico, costuma-se usar uma aproximação com algoritmos separados para resolver as equações diferenciais e realizar a otimização. Uma rotina de otimização serve como malha-externa para, iterativamente, selecionar novas seqüências da variável manipulada, enquanto que um método de resolução de equações

diferenciais ordinárias é usado para integrar as equações dinâmicas em cada iteração da otimização. Esta é uma estratégia de solução e otimização sequencial e existem várias versões desta na literatura. Este procedimento é de fácil implementação, uma vez que existem vários aplicativos para integração e otimização, porém, é difícil a incorporação de restrições nas variáveis de estado - necessitando de etapas adicionais, a fim de se trabalhar com uma mesma classe de restrições, podendo gerar resultados sub-ótimos e lentos (Eaton e Rawlings, 1990). Por outro lado, o algoritmo necessita da solução precisa das equações diferenciais em cada iteração, mesmo que esta esteja longe da solução ótima final, implicando num maior esforço computacional.

Um outro procedimento é reduzir as equações diferenciais a equações algébricas aplicando-se um método de resíduos ponderados (método de Galerkin, colocação ortogonal, etc.). As equações do modelo são então resolvidas simultaneamente com as outras restrições dentro de uma otimização de caminho não-factível (Programação Quadrática Sucessiva, SQP, Gradiente Reduzido, RG, etc.). Trabalhos anteriores de Hertzberg e Asbjornsen (1977), e também de Biegler (1984), introduziram o uso da colocação ortogonal para implementar a estratégia de solução e otimização simultâneas. Usando esta aproximação, as equações diferenciais são tratadas da mesma maneira que as outras restrições e não são resolvidas precisamente até a iteração final da otimização, devendo existir uma convergência muito mais rápida para o ótimo. A maior vantagem para esta aproximação é que restrições nas variáveis de estado são facilmente trabalhadas; contudo, muita atenção deve ser tomada para evitar soluções infactíveis (Bequette, 1991b). Esta estratégia de solução e otimização simultânea tem-se mostrado muito atrativa. Exemplos de aplicação deste método para determinar trajetórias ótimas da variável manipulada em malha-aberta têm sido reportados por Biegler (1984), Renfro *et al.* (1987) e Cuthrell e Biegler (1987). Renfro *et al.* (1987) mostraram que, quando a variável manipulada é uma constante discreta, como em controle digital, a estratégia de otimização e solução simultâneas somente pode ser implementada dentro de uma estrutura de elementos finitos. Renfro *et al.* (1987) e Cuthrell e Biegler (1987) introduziram o uso da colocação ortogonal em elementos finitos para discretizar as equações diferenciais, fornecendo uma representação precisa dos perfis da variável de estado sem usar polinômios de ordem muito alta, além de permitir a solução de uma classe mais geral de problemas de otimização (incluindo problemas com condições de contorno).

Ao se usar Colocação Ortogonal em Elementos Finitos, o horizonte de predição de V -períodos de amostragem corresponde a V -elementos finitos - um elemento para cada período de amostragem. O horizonte de controle é de U -períodos de amostragem ($V \geq U$). A figura 1.2 ilustra a aplicação deste método.

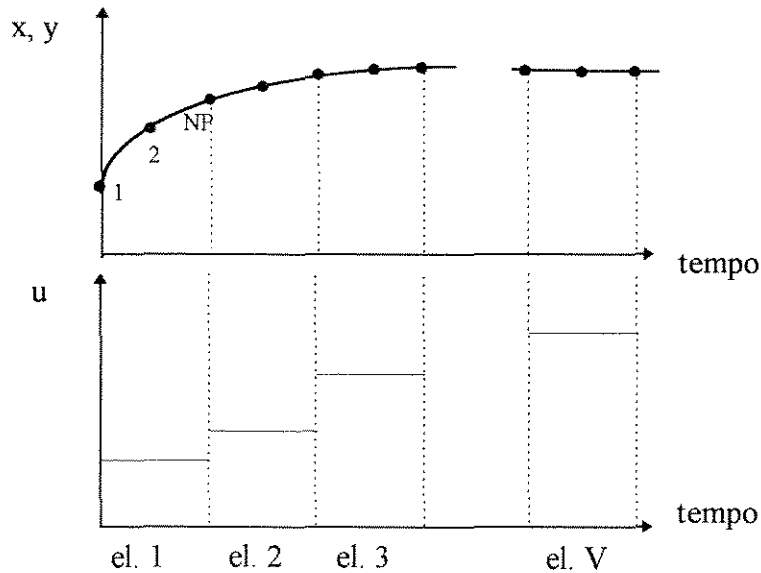


Figura 1.2. Divisão do horizonte de predição em V -elementos finitos e NP-pontos de colocação.

Trabalhos anteriores têm demonstrado que esta aproximação simultânea é, em termos de necessidades computacionais, superior às estratégias sequenciais. Eaton e Rawlings (1990, 1992) e Patwardhan *et al.* (1990) usaram uma estratégia de Controle Preditivo com Modelo Não-linear baseada na resolução de um problema de controle ótimo em malha-aberta em cada instante de amostragem, através do algoritmo de aproximação simultânea da simulação/otimização desenvolvido por Cuthrell e Biegler (1987). Este esquema pode ser usado para controlar processos descritos por diferentes tipos de modelos não-lineares, tais como, equações diferenciais ordinárias e algébricas, equações diferenciais parciais e algébricas, equações integrais e diferenciais e equações com tempo-morto, os quais são precisos sobre uma grande faixa de condições de operação.

Para a solução do NLP resultante, uma etapa necessária é a escolha da técnica de otimização não-linear com restrições e do método de discretização das restrições dinâmicas do modelo. As referências citadas acima usaram SQP juntamente com

Colocação Ortogonal Global ou Colocação Ortogonal em Elementos Finitos nos seus exemplos de aplicação. Outra decisão importante é quanto às condições iniciais apropriadas para as variáveis de estado no início do horizonte de predição. Para sistemas estáveis em malha-aberta (o que acontece com a maioria dos processos), as condições iniciais podem ser obtidas a partir da solução do modelo para o intervalo de tempo anterior, baseada na ação manipulada que realmente foi implementada no processo. Já para sistemas instáveis Bequette (1991a) afirma que normalmente se deve usar um procedimento de identificação das variáveis de estado, para que as mesmas não venham a divergir de modo significativo das variáveis de estado reais. Algumas características do controlador precisam, pois, ser especificadas, como os horizontes de predição e de controle, a forma da função objetivo, os estimadores e a trajetória desejada. Por fim, a característica mais importante deste procedimento recai no ajuste dos parâmetros de sintonização do controlador.

No presente trabalho, a estratégia NMPC é implementada através de uma aproximação simultânea de solução/otimização, baseada nos métodos de Colocação Ortogonal em Elementos Finitos e de Programação Quadrática Sucessiva (SQP), para realizar o controle da temperatura de um tanque de aquecimento (batelada) com misturador - problema do tipo servo-controle MISO. Para tanto, inicialmente se faz necessário uma análise das ferramentas matemáticas utilizadas no desenvolvimento desta estratégia de controle - métodos de discretização de equações diferenciais ordinárias e de otimização não-linear (capítulo 2) e modelagem do processo (capítulo 3).

CAPÍTULO 2

Análise de alguns Métodos Numéricos Utilizados na Formulação do NMPC

2. Análise de alguns Métodos Numéricos Utilizados na Formulação do NMPC

Este capítulo visa apresentar, de maneira breve, os fundamentos teóricos de alguns métodos numéricos utilizados neste estudo de simulação.

Inicialmente, apresentam-se os métodos de discretização de equações diferenciais por Colocação Ortogonal Global e por Colocação Ortogonal em Elementos Finitos (métodos de aproximação que serão usados na estratégia de controle para reduzir o problema de otimização dinâmica a um problema de programação não-linear com restrições algébricas de igualdade). Em seguida, é discutido rapidamente o método de Adams para a resolução de equações diferenciais (método rigoroso usado para simular a operação do processo) e, por fim, o método de otimização não-linear, Programação Quadrática Sucessiva (técnica aplicada para a resolução do problema de programação não-linear resultante).

2.1. Métodos de Discretização de Equações Diferenciais

Esta seção apresenta os fundamentos teóricos de aplicação dos métodos de aproximação polinomial Colocação Ortogonal Global e Colocação Ortogonal em Elementos Finitos. Um exemplo é apresentado no Apêndice A.

2.1.1. Colocação Ortogonal Global

Na Colocação Ortogonal Global (ou, simplesmente, Colocação Ortogonal), um caso particular do método dos Resíduos Ponderados, a solução da equação diferencial é aproximada por um polinômio e o método requer a satisfação da equação em determinados pontos de colocação. Ao se aplicar o método, a equação diferencial ordinária transforma-se em um conjunto de equações algébricas lineares, ou não, (ou equações diferenciais ordinárias se se partiu de equações diferenciais parciais) a serem resolvidas simultaneamente.

A resolução da equação diferencial consiste em aproximar as derivadas da função por somatórios ponderados dos valores da função nos pontos de colocação. Sempre que possível, esta solução aproximada é escolhida de modo a satisfazer as condições de contorno e de geometria estabelecidas no problema.

Basicamente, a solução aproximada proposta é uma série truncada de polinômios ortogonais, cujos coeficientes são determinados tomando como pontos de colocação os zeros do polinômio de maior grau da mesma família.

A principal vantagem deste método é que, além de apresentar uma formulação simples, ele permite resolver eficientemente o problema com um número de pontos (de colocação) bem reduzido, quando comparado a outros métodos - como, por exemplo, Diferenças Finitas - implicando num menor tempo computacional, e ainda se tem um mínimo de escolhas arbitrárias a se fazer, como a função de aproximação da solução e os pontos de colocação, uma vez que a função peso é especificada.

Este método, desenvolvido por Villadsen e Stewart (1967) entre outros, tem-se mostrado como uma ferramenta muito eficiente no campo da engenharia e recentemente tem sido aplicado no campo de controle de processo, visando a construção de modelos não-lineares de ordem reduzida.

Na aplicação do método, as seguintes etapas devem ser cumpridas:

- i)* definição da família de polinômios ortogonais;
- ii)* determinação dos pontos de colocação;
- iii)* determinação dos coeficientes da matriz dos pontos de colocação;
- iv)* cálculo da solução aproximada.

A seguir, as etapas descritas acima serão desenvolvidas, de maneira bem sucinta, voltando-se sempre para um tipo básico de problema: problema de valor de contorno, no qual a variável independente é o tempo.

Então, dado o problema, o primeiro passo é *(i)* definir a família de polinômios ortogonais a usar na expansão da solução do referido problema, devendo esta satisfazer, se possível, as condições de contorno estabelecidas no mesmo.

De um modo geral, a aproximação polinomial para um problema com condições iniciais é definida como se segue.

Dada a equação diferencial: $\frac{dy}{d\theta} = f(y, \theta)$, (2-1)

com condição inicial $y(\theta = 0) = y_0$, (2-2)

sua solução pode ser aproximada por (Biegler, 1984):

$$y(\theta) \cong y_0 + \theta \sum_{j=1}^N a_j \cdot P_{j-1}(\theta) , \quad (2-3)$$

ou, para um dado ponto de colocação θ_i :

$$y(\theta_i) \cong y_0 + \theta_i \sum_{j=1}^N a_j \cdot P_{j-1}(\theta_i) , \quad (2-4)$$

onde $P_{j-1}(\theta)$ são polinômios ortogonais de grau $j-1$ em θ , a_j são coeficientes do polinômio de expansão, N é número de pontos internos de colocação e θ_i são pontos de colocação.

Para se especificar a família de polinômios ortogonais e determinar os coeficientes destes polinômios que compõem a solução aproximada, deve-se aplicar a seguinte condição de ortogonalidade (Villadsen e Stewart, 1967):

$$\int_a^b \theta \cdot P_{j-1}(\theta) \cdot P_N(\theta) d\theta = 0 , \quad (2-5)$$

ou seja, P_N tem que ser ortogonal a cada P_{j-1} , com $j=1, \dots, N$.

Comparando-se (2-5) com a expressão geral (Finlayson, 1980):

$$\int_a^b \omega(\theta) \cdot P_{j-1}(\theta) \cdot P_N(\theta) d\theta = 0 , \quad (2-6)$$

onde $\omega(\theta)$ é a função peso (≥ 0), tem-se que:

$$\omega(\theta) = \theta. \quad (2-7)$$

Assim, consegue-se definir os polinômios ortogonais a serem usados no problema de valor inicial que, para um intervalo $a=0$ e $b=1$, pode ser o de Jacobi da forma $P_N^{\alpha, \beta}(\theta)$ com função peso $\omega(\theta)=\theta^\beta(1-\theta)^\alpha$. Comparando-se esta com (2-7), tem-se que $\alpha=0$ e $\beta=1$, ou seja, para que a aproximação proposta satisfaça à condição inicial os polinômios usados devem ser:

$$P_N^{0,1}(\theta). \quad (2-8)$$

Polinômios de Jacobi são bastante utilizados na literatura e os valores aqui especificados para α e β levam os pontos de colocação a se concentrarem à esquerda do intervalo de tempo considerado, ou seja, no início do mesmo. Este intervalo de tempo, pois, deve ser adimensionalizado entre 0 e 1, uma vez que o polinômio é definido sobre o intervalo $a=0$ e $b=1$.

Os coeficientes a_j podem ser encontrados por substituir a solução aproximada (2-4) e a condição inicial (2-2) no problema (2-1) fazendo o resíduo ser zero, e resolver a expressão final nos pontos discretizados θ_i os quais são as raízes de $P_N(\theta)$.

Uma vez encontrados os polinômios (P_0, P_1, \dots, P_N), deve-se (ii) calcular as raízes do de maior grau, as quais representarão os pontos de colocação (θ_i); os outros polinômios, de grau inferior, irão compor a expansão da solução.

A ortogonalidade na equação (2-6) assegura que os zeros de $P_N(\theta)$ sejam reais, distintos e localizados no intervalo $a=0$ e $b=1$.

É conveniente frisar que os pontos de colocação obtidos são também ótimos pontos de quadratura para integração numérica sobre a mesma região (0, 1).

A equação diferencial no problema (2-1) pode ser escrita em função dos pontos de colocação θ_i (representados pela matriz A_{ij}) e de $y(\theta)$ nesses pontos, como se mostra a seguir (Finlayson, 1980; Villadsen e Michelsen, 1978):

$$\frac{dy(\theta_i)}{d\theta} \equiv \sum_{j=1}^{N+2} A_{ij} \cdot y(\theta_j) = f(y(\theta_i), \theta_i), \quad (2-9)$$

onde A_{ij} é a matriz dos pontos de colocação representando a derivada primeira e $i=2, \dots, N+2$.

Como se pode observar, a equação diferencial é aproximada por um sistema de equações algébricas e o resíduo, nos pontos de colocação, é feito ser zero. Neste caso, não se aplica a colocação ortogonal para $i=1$, pois a solução aproximada proposta (2-4) já satisfaz à condição inicial (2-2).

Quanto à (iii) matriz dos pontos de colocação (A_{ij}), esta depende apenas dos pontos de colocação, os quais foram calculados anteriormente.

Uma resolução analítica de A_{ij} é dada por (Michelsen e Villadsen, 1972):

$$A_{ij} = L'_j(\theta_i) = \frac{1}{\theta_i - \theta_j} \cdot \frac{p'(\theta_i)}{p'(\theta_j)}, \quad i \neq j$$

$$A_{jj} = L'_j(\theta_j) = \frac{1}{2} \cdot \frac{p''(\theta_j)}{p'(\theta_j)}, \quad (2-10)$$

onde, a solução é aproximada por um polinômio interpolador de Lagrange:

$$y(\theta) \cong \sum_{j=1}^{N+1} y_j \cdot L_j(\theta), \quad (2-11)$$

$$\text{com } L_j(\theta) = \frac{p(\theta)}{(\theta - \theta_j) \cdot p'(\theta_j)} \quad \text{e} \quad (2-12)$$

$$p(\theta) = (\theta - \theta_1)(\theta - \theta_2)(\theta - \theta_3) \dots (\theta - \theta_N)(\theta - \theta_{N+1}), \quad (2-13)$$

onde $p(\theta)$ é um polinômio ortogonal e $L_j(\theta)$ é o polinômio interpolador de Lagrange.

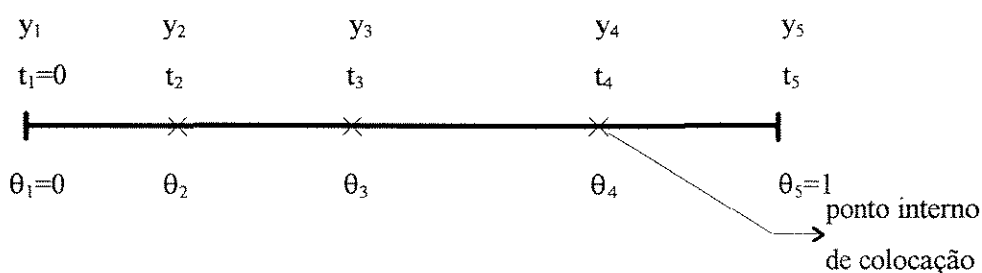
Como se vê, para esta resolução, precisa-se apenas dos pontos de colocação (θ_i) calculados na etapa anterior.

Villadsen e Michelsen (1978) apresentam subrotinas para o cálculo de A_{ij} e θ_i , para polinômios ortogonais de Jacobi, precisando-se definir apenas o valor de α e β e o

grau do polinômio - e é o que se usará neste trabalho. Finlayson (1980) fornece a matriz A_{ij} na forma de tabela para alguns valores de N .

Realizadas todas as etapas (i), (ii) e (iii), o próximo passo agora é calcular a solução aproximada, ou seja, resolver o sistema de equações algébricas resultante (se se partiu de equações diferenciais ordinárias). Se o sistema obtido for linear, pode-se resolvê-lo por Eliminação de Gauss, por exemplo; e se for não-linear, deve-se, pois, construir o Jacobiano (método de Newton) e por conseguinte aplicar Gauss para sua resolução. No caso de se partir de equações diferenciais de ordem mais alta, estas podem ser resolvidas pela aplicação repetida do método apresentado.

A seguir, a figura 2.1 representa esquematicamente a aplicação do método.



$$\theta = \frac{t - t_1}{t_5 - t_1}$$

Figura 2.1. Colocação Ortogonal Global, $N=3$.

2.1.2. Colocação Ortogonal em Elementos Finitos

A Colocação Ortogonal em Elementos Finitos, também conhecida como Colocação *Spline* Global (*spline* = por partes), é uma combinação dos métodos das Diferenças Finitas e da Colocação Ortogonal Global.

Este método é atrativo por apresentar uma rápida convergência (característica associada ao método da colocação ortogonal), além de permitir que os pontos de colocação localizem-se em regiões onde a solução varie rapidamente (grandes gradientes) ou que sejam de maior interesse (característica associada ao método das diferenças finitas), implicando na obtenção de uma melhor aproximação (Finlayson, 1974).

Para se aplicar este método, o domínio θ $[0,1]$ deve ser dividido em NE- elementos (subintervalos), de comprimentos não necessariamente iguais, com o k-ésimo elemento se estendendo de θ_k à θ_{k+1} , e aplicar o procedimento da Colocação Ortogonal em cada elemento. Então, a equação diferencial é escrita em termos da solução nos pontos de colocação dentro de cada elemento, obtendo-se, como na Colocação Ortogonal, um sistema de equações algébricas. Como em cada elemento k a variável independente deve assumir valores entre 0 e 1, define-se uma nova variável:

$$z^{(k)} = \frac{\theta - \theta_k}{\theta_{k+1} - \theta_k} = \frac{\theta - \theta_k}{\Delta\theta^{(k)}} , \quad (2-14)$$

onde $\Delta\theta^{(k)}$ é a extensão do elemento k e θ_k é a posição do nó (início do elemento k) no intervalo original (ver fig.2.2).

Aqui, a equação diferencial no problema (2-1) pode ser escrita em função dos pontos de colocação e do valor da função nesses pontos dentro de cada elemento k (Finlayson, 1980; Villadsen e Michelsen, 1978):

$$\frac{dy(z_i^{(k)})}{dz} \cong \sum_{j=1}^{N+2} \mathbf{A}_{ij} \cdot y(z_j^{(k)}) = f(y(z_i^{(k)}), z_i^{(k)}) , \quad (2-15)$$

com $i=2, \dots, N+1$ e $k=1, \dots, NE$.

Para se garantir a continuidade da função e da sua derivada, deve-se impor as seguintes condições nos pontos de interseção z_{s_i} (pontos-*splines* ou nós) entre os subintervalos:

$$y_-(z_{s_i}) = y_+(z_{s_i}) \quad (2-16)$$

e

$$y'_-(z_{s_i}) = y'_+(z_{s_i}) . \quad (2-17)$$

A continuidade de y' , derivada primeira da variável y , é expressa em termos das matrizes de discretização \mathbf{A}_- e \mathbf{A}_+ (matrizes dos pontos de colocação representando a

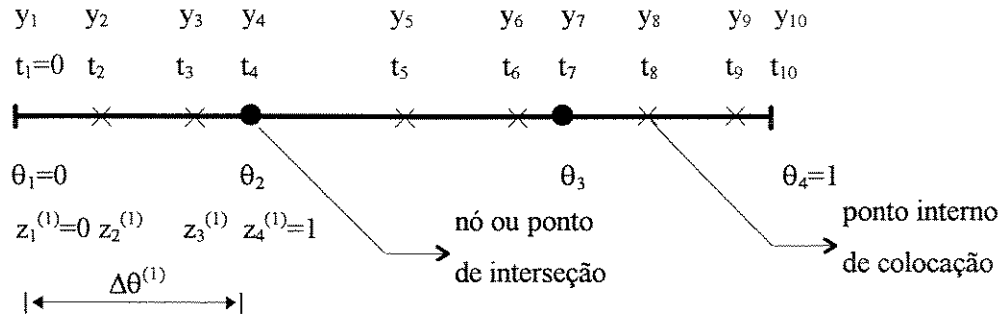
primeira derivada), baseadas nas ordenadas do intervalo à esquerda e à direita do ponto de interseção z_{s_i} incluindo ambos os pontos extremos do intervalo.

Desse modo, obtém-se um número suficiente de equações algébricas (partindo-se de equações diferenciais ordinárias) lineares, ou não, que devem ser resolvidas simultaneamente, podendo-se, assim, determinar as ordenadas de colocação (em relação aos pontos internos de colocação para cada elemento), as ordenadas dos pontos de interseção entre elementos e, possivelmente, uma ou ambas as ordenadas de contorno. O vetor solução é:

$$\mathbf{y} = (y_1^{(1)}, y_2^{(1)}, \dots, y_{N+2}^{(1)}, y_2^{(2)}, y_3^{(2)}, \dots, y_{N+2}^{(2)}, y_2^{(3)}, \dots, y_{N+2}^{(NE)})^T, \quad (2-18)$$

onde $y_i^{(k)}$ é a solução no i -ésimo ponto de colocação do elemento k , com $i=1, \dots, N+2$ e $k=1, \dots, NE$.

Uma representação esquemática da aplicação do método pode ser vista na figura 2.2.



$$z^{(k)} = \frac{\theta - \theta_k}{\theta_{k+1} - \theta_k} = \frac{\theta - \theta_k}{\Delta\theta^{(k)}}$$

Figura 2.2. Colocação Ortogonal em Elementos Finitos, $NE=3$ e $N=2$.

Vale salientar que, para se obter resultados satisfatórios, é necessário uma localização eficiente dos elementos sobre o intervalo global definido pelo problema a ser resolvido. Carey e Finlayson (1975) sugerem, após o cálculo de uma solução, o uso do resíduo (equação diferencial com a solução aproximada substituída nela) em cada

elemento para, baseado no seu cálculo, poder determinar a localização apropriada de novos elementos finitos sobre o domínio. Este método (de interpolação) é adequado para pequenos valores de N (8 a 10) e os autores citam técnicas mais refinadas (Michelsen e Villadsen, 1972) apropriadas para N maiores (até 80). Também, Cuthrell e Biegler (1987) apresentam uma estratégia para a localização dos nós dos elementos finitos com o objetivo de minimizar o erro de aproximação.

É interessante notar a forma do Jacobiano para a resolução, através do método Newton-Raphson, do sistema algébrico não-linear obtido - matriz esparsa com estrutura diagonal em bloco (figura 2.3) - ao se trabalhar com o vetor solução (2-18).

Para se explorar esta característica da matriz esparsa, Renfro *et al.* (1987) sugerem aplicar uma nova tecnologia para avaliação do Jacobiano (Coleman *et al.*, 1984), reduzindo significativamente o tempo de cálculo.

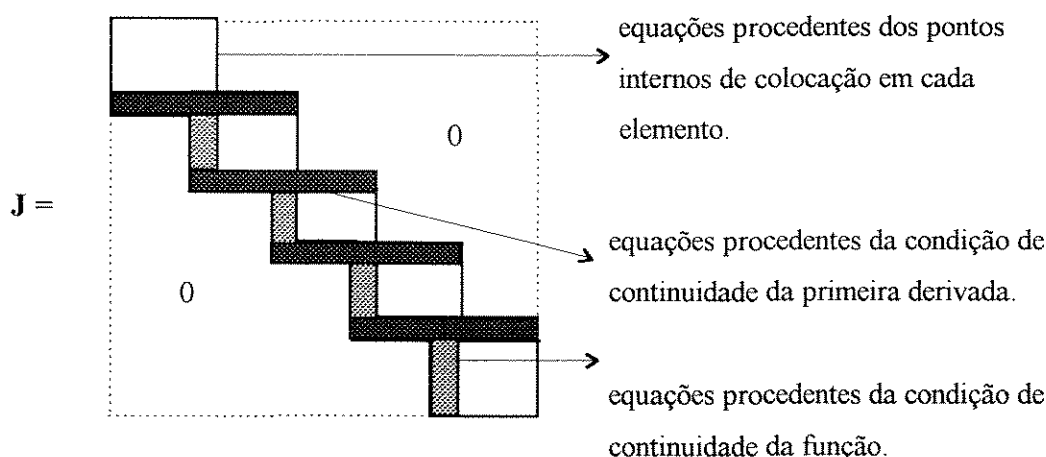


Figura 2.3. Estrutura da matriz Jacobiana (J) para Colocação Ortogonal em Elementos Finitos, $NE=5$.

No Apêndice A, encontra-se um exemplo de aplicação (Eaton e Rawlings, 1990) destes dois métodos apresentados acima, cujos resultados ainda são comparados com o método Runge-Kutta-Gill. O exemplo estudado, problema de valor inicial, envolve um reator CSTR.

Os resultados apresentados mostram-se bastante satisfatórios e pode-se observar através do gráfico gerado (fig.A.2) que, para o exemplo estudado, os métodos numéricos aplicados descrevem perfeitamente a solução desejada - perfil da concentração ao longo do tempo. Sabe-se da literatura (por exemplo, Cuthrell e Biegler, 1989) que os métodos de aproximação, Colocação Ortogonal Global e Colocação Ortogonal em Elementos

Finitos, permitem uma solução rápida e precisa de uma grande variedade de equações diferenciais e que os resultados aqui obtidos podem ser generalizados para problemas mais complexos, principalmente ao se aplicar Colocação Ortogonal em Elementos Finitos.

2.2. Método de Adams

O método de Adams é um método linear de resolução de equações diferenciais ordinárias de passo e ordem variáveis. Este método integra um sistema de equações diferenciais ordinárias de primeira ordem ($y'_i = f_i(x, y_1, y_2, \dots, y_n)$) sobre um determinado intervalo (x_0 à x_f), a partir de condições iniciais apropriadas, calculando a solução em um conjunto de pontos previamente especificados (manual NAG, D02, 1991).

Para este trabalho, fez-se uso da rotina D02CBF, da Biblioteca Matemática NAG, na linguagem Fortran, para realizar a simulação da operação do tanque de aquecimento. Alguns parâmetros que se fazem necessários estipular são o número de equações diferenciais (NED), a tolerância desejada nos cálculos (tol), o valor inicial da variável independente (x) e da solução (y_1, y_2, \dots, y_n), o valor final da variável independente (x_f) e uma subrotina contendo as funções a serem integradas.

Para a subrotina utilizada, a precisão da solução e interpolação depende da tolerância desejada, das propriedades matemáticas do sistema de equações diferenciais e do tamanho do intervalo de integração. A precisão é controlada pelos parâmetros tolerância (tol) e estimativa do erro local (est). Na ausência de conhecimentos anteriores da solução, pode-se adotar $\text{tol} = 10^{-p}$ onde p é a quantidade desejada de casas decimais corretas para a solução. Para todas as simulações da operação do tanque, apresentadas posteriormente neste trabalho, definiu-se a tolerância em 10^{-4} . Em cada passo da solução numérica, uma estimativa do erro local (est) é feita, sendo que o passo atual somente é aceito se a seguinte condição for satisfeita:

$$\text{est} = \sqrt{\sum_{i=1}^n (\varepsilon_i / (\tau_r \times |y_i| + \tau_a))^2} \leq 1 \quad , \quad (2-19)$$

onde, $\tau_r = \text{tol}$, $\tau_a = \text{tol}$ e ε_i é uma estimativa do erro local em y_i (calculado internamente).

Se a condição não for satisfeita, o tamanho do passo é reduzido e a solução é recalculada no passo atual.

Para uma descrição mais detalhada deste método e de sua implementação prática, ver Hall e Watt (1976).

2.3. Técnica de Otimização Não-Linear

Na prática, a maioria dos processos químicos é de natureza não-linear e, por isso, os métodos mais comumente empregados nos problemas de otimização de processos são não-lineares multivariáveis com restrições (ou problemas de programação não-linear, NLP, com restrições).

A otimização de processos químicos envolve uma malha fechada contendo um algoritmo de otimização e outro de simulação do processo.

As equações envolvidas no problema de otimização de processos químicos são, como se segue:

$$\begin{aligned} F(x, y), \quad & \text{função objetivo não-linear, a ser minimizada ou maximizada,} \\ & \text{em função das variáveis do processo} \\ & e \\ & \hspace{15em} (2-20) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} h(x, y) &= 0 \text{ e} \\ c(x, y) &> 0, \quad \text{sistemas de equações incluindo o modelo do} \\ & \quad \text{processo e restrições (as quais são estipuladas pelas próprias} \\ & \quad \text{limitações operacionais ou de projeto).} \end{aligned}$$

No problema de otimização, o número de variáveis a serem conhecidas excede o número de equações, e o ajuste é possível através da minimização (ou maximização) da função objetivo.

As variáveis de decisão são normalmente variáveis de entrada do processo, em número igual ao de graus de liberdade do processo a ser otimizado.

Na solução de (2-20), algumas das restrições são identificadas como ativas, isto é, são exatamente satisfeitas. Isso implica na divisão das variáveis entre livres e fixas, sendo as denominadas de “fixas” fixadas em seus limites.

Outra informação importante em problemas de otimização é a definição das condições necessárias de primeira ordem, as condições de Kuhn-Tucker. Assim, diz-se que um ponto x é um ponto Kuhn-Tucker de primeira ordem para (2-20) se as seguintes condições são observadas (manual NAG, E04, 1991):

- i) x é factível;
- ii) os vetores ξ e λ (multiplicadores de Lagrange para os limites e para as restrições gerais) existem, tal que

$$g = C^T \lambda + \xi, \quad (2-21)$$

onde g é o gradiente da função objetivo avaliado em x , C é a matriz dos gradientes das restrições lineares e não-lineares ativas e $\xi_j = 0$ se a j -ésima variável for livre;

- iii) o multiplicador de Lagrange correspondente a uma restrição de desigualdade ativa no seu limite inferior deve ser não-negativo, e deve ser não-positivo para uma restrição de desigualdade ativa no seu limite superior.

Quanto à resolução do problema (de otimização de processos), costuma-se distinguir os métodos existentes em dois grupos: métodos *feasible path* (direção ou caminho factível) e métodos *infeasible path* (direção ou caminho não-factível).

Para o primeiro, método de caminho factível, as restrições de igualdade devem ser satisfeitas a cada iteração entre o algoritmo de otimização e o de simulação, pois tem-se um teste de convergência para cada módulo (otimização e simulação). Já para o segundo, método de caminho não-factível, as restrições de igualdade são satisfeitas somente no ponto ótimo; os módulos de otimização e simulação são resolvidos simultaneamente, com apenas um teste de convergência.

Dentre as principais técnicas de resolução de problemas NLP com restrições tem-se (Himmelblau, 1989):

- i) Método dos Multiplicadores de Lagrange,
- ii) Método do Gradiente Reduzido (RG),
- iii) Método da Programação Quadrática (QP),
- iv) Método da Função Penalizada (*Penalty*),
- v) Método da Função Lagrangeana Aumentada,
- vi) Método da Programação Quadrática Sucessiva (SQP).

Na década passada, duas aproximações foram aplicadas, quase que exclusivamente, para resolver as condições de Kuhn-Tucker surgindo em otimizações de projeto de processo. Uma é o SQP (como implementado na biblioteca NAG) e a outra, é o algoritmo do Gradiente Reduzido (como implementado no pacote MINOS).

Ambos os algoritmos, SQP e RG, implementam uma estratégia de caminho infactível com respeito às restrições de igualdade, isto é, as restrições de igualdade não são satisfeitas depois que as variáveis do problema são ajustadas, mas somente quando o algoritmo converge para o ótimo. Uma das grandes vantagens destes métodos, quando comparados com uma estratégia de caminho factível, é seu aumento da velocidade computacional.

A seguir, apresentar-se-á, de forma breve, a técnica de otimização SQP, a qual será aplicada, mais adiante neste trabalho, ao algoritmo de controle. Esta técnica é uma das mais modernas, eficientes e de rápida resolução, apresentando, pois, uma grande aplicação na otimização de processos químicos - justificando, assim, a sua escolha.

2.3.1. Programação Quadrática Sucessiva (SQP)

A Programação Quadrática Sucessiva (ou Sequencial, Recursiva), SQP, é uma técnica de otimização que resolve uma classe geral de problemas NLP com restrições. O método SQP utiliza, para isso, a Programação Quadrática (QP) sequencialmente - como o seu nome sugere.

Este método foi primeiro mencionado por Wilson (1963) como sendo a base do seu método SOLVER (Fletcher, 1990).

O método QP é um procedimento que minimiza uma função quadrática de n -variáveis sujeita a m -restrições de desigualdade e/ou igualdade lineares ou linearizadas

($m < n$). O problema QP é a forma mais simples de um problema NLP com restrições de desigualdade (Himmelblau, 1989).

O algoritmo SQP, por sua vez, é dito corresponder ao método de Newton aplicado a uma função Lagrangeana estrita, ou aproximadamente, quadrática.

Para minimizar uma função objetivo não-quadrática, é necessário primeiramente aproximá-la para uma quadrática e, para uma restrição não-linear, é preciso linearizá-la em um ponto. É isso que o SQP realiza inicialmente. A partir disso, sua estratégia, então, é a seguinte: no início de uma iteração, uma estimativa da solução ótima (x^*) é conhecida e, na tentativa de se melhorar esse valor, procura-se obter uma direção de busca p através da resolução do problema que se segue, na sua forma geral:

minimizar uma função quadrática $f(x, y)$ em termos de p ,

sujeita a:

(2-22)

restrições de igualdade lineares em função de p e

restrições de desigualdade lineares em função de p .

Então, a direção de busca p , para reduzir $f(x, y)$, é a solução de um subproblema QP. Este, pois, é dito ser a malha interna ou iteração menor da estratégia de otimização SQP. Em uma iteração menor típica, a nova iteração p^{n+1} é definida por:

$$p^{n+1} = p^n + \sigma d, \quad (2-23)$$

onde p^n é a iteração atual, σ é o comprimento do passo (não-negativo) e d é a direção de busca.

Uma vez que p foi calculado, a malha externa ou iteração maior da estratégia de otimização procede para determinar o comprimento do passo α que produza um “decréscimo suficiente” na função mérito Lagrangeana aumentada. Como na iteração menor, a nova iteração x^{n+1} é definida por:

$$x^{n+1} = x^n + \alpha p, \quad (2-24)$$

onde x^n é a iteração atual, α é o comprimento do passo (não-negativo) e p é a direção de busca.

A malha externa, por sua vez, é responsável por gerar uma sequência de iterações (x^n) que convirja para o ótimo (x^*) - um ponto Kuhn-Tucker de primeira ordem para o problema (2-20). Também, estima os valores dos multiplicadores de Lagrange e prediz o valor do conjunto ativo.

Neste trabalho, fez-se uso da rotina E04UCF, da Biblioteca Matemática NAG (1991), na linguagem Fortran, a qual implementa o método SQP - rotina essencialmente idêntica à do SOL/NPSOL (Gill *et al.*, 1986). Para tanto, é necessário fornecer subrotinas que definam as funções objetivo e restrições não-lineares, juntamente com uma estimativa inicial da solução do problema de otimização e tantas derivadas parciais (Jacobiano) quanto possível. Esta rotina trata todas as matrizes como densas. Para problemas grandes e esparsos, o pacote MINOS (Murtagh e Saunders, 1993) pode ser usado.

Alguns parâmetros de tolerância estipulados neste método precisam ser definidos. A "tolerância de factibilidade" vem determinar as violações máximas permitidas nas restrições lineares e não-lineares num ponto factível. A "precisão da função" é uma medida da precisão com a qual as funções objetivo e restrições não-lineares podem ser calculadas. A "tolerância na direção de busca" controla a precisão com a qual o passo α em cada iteração aproxima a função mérito a um mínimo ao longo da direção de busca. A "tolerância na otimização" vem especificar a precisão desejada na iteração final para a aproximação da solução do problema.

O programa terminará com sucesso se a sequência iterativa de valores de x for julgada ter convergido e o ponto final satisfizer as condições de Kuhn-Tucker. Então, o critério de convergência para a sequência de iterações é:

$$\alpha \|p\| \leq \sqrt{r} (1 + \|x\|), \quad (2-25)$$

onde r é a tolerância na otimização, p é a direção de busca e α é o comprimento do passo.

E o critério para uma iteração satisfazer as condições de primeira ordem para um mínimo é:

$$\|Z^T g_{FR}\| \leq \sqrt{r} (1 + \max(1, |F(x, y)|, \|g_{FR}\|)) \quad (2-26)$$

e

$$|res_j| \leq ftol, \quad \text{para todo } j, \quad (2-27)$$

onde $Z^T g_{FR}$ é o gradiente projetado, g_{FR} é o gradiente da função objetivo $F(x, y)$ com respeito às variáveis livres, res_j é a violação da j -ésima restrição não-linear ativa e $ftol$ é a tolerância de factibilidade não-linear.

CAPÍTULO 3

Aplicação da Metodologia NMPC ao Controle de um Tanque de Aquecimento em Batelada

3. Aplicação da Metodologia NMPC ao Controle de um Tanque de Aquecimento em Batelada

Neste capítulo, inicialmente, desenvolve-se a representação matemática do processo em estudo - etapa de fundamental importância em projeto de sistema de controle baseado em modelo não-linear - encerrando-se a apresentação das ferramentas matemáticas necessárias à aplicação da estratégia de controle NMPC.

Em seguida, parte-se para a elaboração do problema de controle específico deste estudo, dando-se ênfase aos parâmetros, funções e gradientes, das restrições e função objetivo, necessários para a resolução do mesmo, ou seja, implementação e simulação do algoritmo de controle/otimização.

3.1. Modelagem Matemática da Operação do Processo

O sistema não-linear escolhido para o presente estudo trata de um tanque de aquecimento (batelada) com camisa de vapor e serpentina para realizar, respectivamente, o aquecimento e o resfriamento do meio interno.

Nesta seção, serão apresentados, primeiramente, uma descrição breve do processo e, em seguida, os balanços de energia (para o conteúdo e a parede do tanque) com a devida determinação dos parâmetros necessários para a especificação do sistema em estudo. Maiores detalhes sobre o modelo em estudo podem ser encontrados em César (1992) (e Jutan e Uppal, 1984) e Andrade (1992) (e Kravaris e Chung, 1987).

3.1.1. Descrição do Processo

O modelo do processo utilizado neste estudo de simulação envolve um tanque com capacidade de 1 m^3 (figura 3.1), o qual deve operar sobre períodos de 1 h.

O tanque é alimentado, selado e o seu conteúdo é continuamente agitado.

Calor é adicionado ao sistema (Q_V) através do vapor, à temperatura T_s , na camisa do tanque, e é retirado para o ambiente (Q_A) através da água de resfriamento a qual flui numa serpentina. O vapor condensado é coletado e direcionado para um dreno.

O objetivo do controle deste tanque é levar a temperatura do seu meio interno, T , a evoluir segundo uma trajetória desejada $T_d(t)$.

Para que o processo obedeça a essa trajetória predeterminada para a temperatura do meio interno, o controle da taxa de aquecimento é realizado regulando a temperatura do vapor T_s , enquanto que o controle da taxa de resfriamento é obtido manipulando a vazão de água de resfriamento (F_c).

A figura 3.1 representa esquematicamente o equipamento.

3.1.2. Balanço de Energia no Interior do Equipamento

De um modo geral, o balanço de energia realizado no interior de um equipamento, no qual não ocorre transformações químicas, envolvendo taxas de aquecimento e resfriamento, é dado por:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{calor} \\ \text{acumulado} \\ \text{no} \\ \text{sistema} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{calor} \\ \text{adicionado} \\ \text{ao} \\ \text{sistema} \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} \text{calor} \\ \text{retirado} \\ \text{do} \\ \text{sistema} \end{array} \right\}. \quad (3-1)$$

Logo, para o processo em estudo, pode-se equacionar o balanço energético como se segue:

$$\rho V c_p \frac{dT}{dt} = Q_V - Q_A. \quad (3-2)$$

Observando-se a equação acima, pode-se notar que:

- i) Não se consideram as perdas energéticas pela superfície do líquido agitado.
- ii) O termo $\rho V c_p$ é suposto ser independente da temperatura.

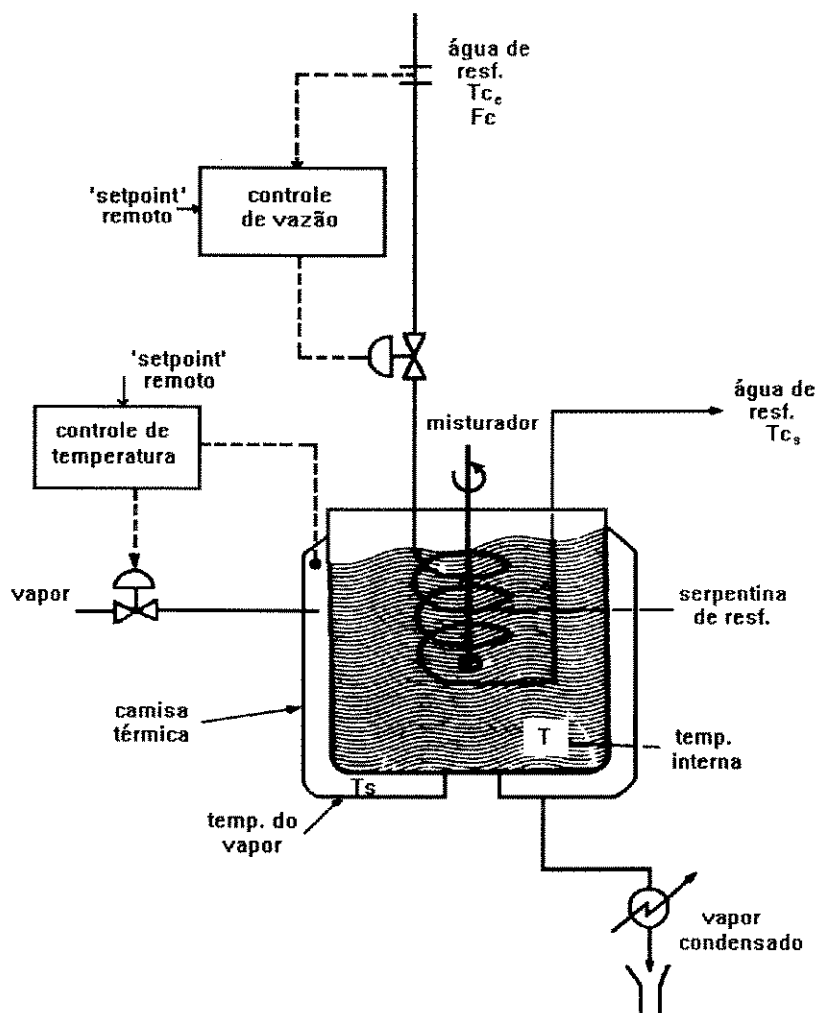


Figura 3.1. Tanque de aquecimento com camisa e serpentina.

• Cálculo de Q_V

A taxa de transferência de calor (Q_V) da parede da camisa térmica (à temperatura T_p) para o meio interno (à temperatura T) é expressa por:

$$Q_V = h_p A_p (T_p - T) , \quad (3-3)$$

onde h_p é o coeficiente de transferência de calor entre a parede da camisa e o meio interno, cujo valor é dado pela equação de Chilton e Dreew (Coulson e Richardson, 1980):

$$h_p \frac{D_t}{k} = 0,87 \left(\frac{c_p \mu}{k} \right)^{1/3} \left(\frac{L^2 N \rho}{\mu} \right)^{0,62} \left(\frac{\mu}{\mu_p} \right)^{0,14} . \quad (3-4)$$

A partir de (3-4), observa-se que o cálculo de h_p depende apenas de propriedades físicas da mistura interna e de parâmetros relativos às dimensões do equipamento. O último termo nessa equação, que compensa a diferença entre a viscosidade na região adjacente à camisa (μ_p) e a do meio interno (μ), é desprezado, pelo fato de se trabalhar com uma mistura em fase líquida diluída. Também, vale à pena salientar que, por características próprias do sistema estudado, as propriedades físicas serão tomadas como um valor médio a uma determinada temperatura de operação. Com isso, h_p será considerado constante durante toda a batelada.

• Cálculo de Q_A

A taxa de transferência de calor (Q_A) do meio interno (à temperatura T) para o fluido de resfriamento (com temperaturas T_{c_e} e T_{c_s} à entrada e à saída da serpentina, respectivamente), é dada por:

$$Q_A = F_c \rho_c c_{p_c} (T_{c_s} - T_{c_e}) = \frac{U_c A_c \left[(T - T_{c_s}) - (T - T_{c_e}) \right]}{\ln \left[\frac{T - T_{c_s}}{T - T_{c_e}} \right]} . \quad (3-5)$$

Para a obtenção da expressão acima, foram levadas em conta as seguintes hipóteses:

- i) a capacidade térmica da parede da serpentina é desprezível, ou seja, todo o calor perdido pelo meio interno é transferido para o fluido de resfriamento;
- ii) a troca térmica ocorre em regime *quasi*-estacionário.

Explicitando-se T_{c_s} em (3-5) e resolvendo a expressão para Q_A em função apenas de T e T_{c_e} obtém-se:

$$Q_A = F_c \rho_c c_{p_c} (T - T_{c_e}) \left[1 - \exp \left(- \frac{U_c A_c}{F_c \rho_c c_{p_c}} \right) \right]. \quad (3-6)$$

• Cálculo de U_c

O coeficiente global de transferência de calor para a serpentina de resfriamento (U_c) é função da intensidade da agitação da mistura interna e da vazão de água de resfriamento (Coulson e Richardson, 1980):

$$\frac{1}{U_c} = \frac{1}{h_p} + \frac{1}{h_r} \frac{A_c}{A_{c_o}}, \quad (3-7)$$

onde h_r é o coeficiente de transferência de calor entre a parede da serpentina e o fluido de resfriamento, cujo valor é dado por (Coulson e Richardson, 1980):

$$h_r = (h_r)_{\text{tubo reto}} \left(1 + 3,5 \frac{D_t}{D_r} \right). \quad (3-8)$$

O valor de $(h_r)_{\text{tubo reto}}$, coeficiente de película da água, é dado por (3-9) (Coulson e Richardson, 1980), correlação válida para a água e para uma grande faixa de valores do número de Reynolds:

$$h_r \frac{D_t}{k_r} = 0,023 \left(\frac{D_t v_r r_r}{m_r} \right)^{0,8} \left(\frac{c_{p_r} m_r}{k_r} \right)^{0,4} \quad (3-9)$$

As propriedades físicas correspondem à água à temperatura média entre a entrada e saída, e as eventuais resistências oferecidas pelas incrustações não foram consideradas.

De posse do valor de h_p , eq.(3-4), e h_r , eq.(3-8) e eq.(3-9), e realizando as devidas substituições e agrupamentos na eq.(3-7), consegue-se obter a seguinte expressão final para U_c :

$$\frac{1}{U_c} = \frac{1}{A_1 F_c^b} + \frac{1}{A_2}, \quad (3-10)$$

onde A_1 , A_2 e b representam agrupamentos de propriedades e constantes envolvidas nas expressões acima.

Analisando-se, pois, as expressões que originaram a eq.(3-10), nota-se que U_c depende das propriedades físicas da mistura interna e do fluido de resfriamento, do número de Reynolds relacionado com a agitação da mistura interna, da geometria da serpentina e da velocidade de escoamento do fluido de resfriamento.

3.1.3. Balanço de Energia para a Parede entre o Vapor e o Meio Interno

A modelagem do tanque em estudo envolve outro termo importante, correspondente ao comportamento dinâmico da temperatura da parede da camisa entre o vapor e o meio interno.

O balanço energético para essa parede

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{calor} \\ \text{acumulado} \\ \text{na} \\ \text{parede} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{calor} \\ \text{cedido} \\ \text{pelo} \\ \text{vapor} \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} \text{calor} \\ \text{cedido} \\ \text{à} \\ \text{mistura interna} \end{array} \right\}, \quad (3-11)$$

toma, para o processo em estudo, a forma:

$$M_p c_{p_p} \frac{dT_p}{dt} = h_{p_o} A_{p_o} (T_s - T_p) - h_p A_p (T_p - T). \quad (3-12)$$

A tabela 3.1 reúne todos os parâmetros (considerados constantes) envolvidos nas expressões acima desenvolvidas, os quais serão utilizados na simulação da operação e controle do tanque de aquecimento, cujos resultados serão apresentados no capítulo 4. Esses parâmetros são os mesmos usados por César (1992) e Andrade (1993) em trabalhos já publicados.

Tabela 3.1. Parâmetros utilizados na simulação do tanque de aquecimento.

| meio interno | fluido de resfriamento e serpentina | vapor e camisa de aquecimento |
|--|--|---|
| $V = 1,0 \text{ (m}^3\text{)}$ | $C_{p_c} = 4,18 \text{ (KJ/ Kg}^\circ\text{C)}$ | $C_{p_p} = 1,13 \text{ (KJ/ Kg}^\circ\text{C)}$ |
| $C_p = 1,0 \text{ (}\frac{\text{KJ}}{\text{Kg}^\circ\text{C}}\text{)}$ | $\rho_c = 10^3 \text{ (Kg/ m}^3\text{)}$ | $M_p = 1168 \text{ (Kg)}$ |
| | $T_{c_e} = 25 \text{ (}^\circ\text{C)}$ | $T_{s_{\min}} = 70,0 \text{ (}^\circ\text{C)}$ |
| | $A_c = 5,0 \text{ (m}^2\text{)}$ | $T_{s_{\max}} = 150,0 \text{ (}^\circ\text{C)}$ |
| $\rho = 10^3 \text{ (}\frac{\text{Kg}}{\text{m}^3}\text{)}$ | $A_1 = 1,504.10^3$ | $A_{p_o} = 4,3 \text{ (m}^2\text{)}$ |
| | $A_2 = 3,66$ | $A_p = 4,0 \text{ (m}^2\text{)}$ |
| | $b = 0,8$ | $h_{p_o} = 5,11 \text{ (KJ/ m}^2\text{s)}$ |
| | $F_{c_{\min}} = 2,5.10^{-4} \text{ (m}^3\text{/ s)}$ | $h_p = 4,22 \text{ (KJ/ m}^2\text{s)}$ |
| | $F_{c_{\max}} = 6,5.10^{-3} \text{ (m}^3\text{/ s)}$ | |

Reunindo-se as expressões (3-2), (3-3), (3-6) e (3-12) e realizando-se as devidas substituições, obtém-se, assim, um sistema não-linear de duas equações diferenciais ordinárias, para simular o comportamento dinâmico do tanque de aquecimento em estudo:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{1}{\rho V c_p} \left\{ h_p A_p (T_p - T) - F_c \rho_c c_{p_c} (T - T_{c_e}) \left[1 - \exp \left(- \frac{U_c A_c}{F_c \rho_c c_{p_c}} \right) \right] \right\} \quad (3-13)$$

e

$$\frac{dT_p}{dt} = \frac{1}{c_{p_p} M_p} \left\{ h_{p_o} A_{p_o} (T_s - T_p) - h_p A_p (T_p - T) \right\}. \quad (3-14)$$

O sistema apresenta duas variáveis manipuladas, F_c e T_s , e duas variáveis de estado, a temperatura do tanque T e a temperatura da parede T_p .

Para este estudo, é assumido que as dinâmicas das malhas de controle *feedback* para F_c e T_s são negligenciáveis.

3.2. Problema de Controle

Para este trabalho, o problema **NLP1** (estabelecido no capítulo 1) será resolvido através da técnica de otimização de caminho infactível Programação Quadrática Sucessiva (SQP), juntamente com o método de discretização de equações diferenciais Colocação Ortogonal em Elementos Finitos, o qual aproxima o modelo dinâmico do processo por um modelo algébrico. Uma característica desta estratégia de otimização é que ela converge o problema para o ótimo e resolve as equações diferenciais simultaneamente, não sendo necessário a satisfação das restrições (resolução das equações do modelo) em cada iteração.

Procedimentos de integração que envolvam um tamanho de passo variável não são apropriados para serem usados dentro de uma estratégia de solução e otimização simultânea, já que o número de variáveis do problema não é fixo (Renfro, Morshedi e Asbjornsen, 1987).

Logo, o problema original (**NLP1**) pode ser restabelecido como,

$$\min_{\mathbf{x}, \mathbf{u}} \Phi(\mathbf{x}, \mathbf{u}; \mathbf{p}) ,$$

sujeita a:

(NLP2)

$$\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{u}; \mathbf{p}) = 0$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{u}; \mathbf{p})$$

$$\mathbf{h}(\mathbf{x}, \mathbf{u}; \mathbf{p}) = 0$$

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}, \mathbf{u}; \mathbf{p}) \geq 0$$

$$\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0$$

$$\mathbf{x}_{\min} \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{x}_{\max}$$

$$\mathbf{u}_{\min} \leq \mathbf{u} \leq \mathbf{u}_{\max}$$

$$\mathbf{y}_{\min} \leq \mathbf{y} \leq \mathbf{y}_{\max} ,$$

onde \mathbf{A} é a matriz dos pontos de colocação (Villadsen e Michelsen, 1978; Finlayson, 1980).

Pode-se notar que, com esta aproximação **NLP2**, ambas as variáveis \mathbf{u} e \mathbf{x} são tratadas como variáveis de decisão na otimização, apesar das variáveis de estado \mathbf{x} poderem ser determinadas pelo modelo a partir das variáveis de entrada \mathbf{u} . Do mesmo modo, restrições nestas variáveis podem ser facilmente incorporadas na formulação do problema impondo-lhes limites nos pontos de colocação.

Uma vez discretizadas as equações diferenciais ordinárias do modelo do processo, aplica-se simplesmente o método SQP para a resolução de **NLP2**. Para cada iteração n , o método SQP monta e resolve o problema QP, em função dos gradientes das funções objetivo e restrição, para determinar a direção de busca \mathbf{p} para a próxima iteração \mathbf{x}^{n+1} , \mathbf{u}^{n+1} (como visto no capítulo 2):

$$\min_p \nabla \Phi(\mathbf{x}^n, \mathbf{u}^n)^T \mathbf{p} + \frac{1}{2} \mathbf{p}^T \mathbf{C}^n \mathbf{p},$$

sujeita a:

(QP1)

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}^n, \mathbf{u}^n) + \nabla \mathbf{F}(\mathbf{x}^n, \mathbf{u}^n)^T \mathbf{p} = 0$$

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}^n, \mathbf{u}^n) + \nabla \mathbf{G}(\mathbf{x}^n, \mathbf{u}^n)^T \mathbf{p} = 0$$

$$\mathbf{h}(\mathbf{x}^n, \mathbf{u}^n) + \nabla \mathbf{h}(\mathbf{x}^n, \mathbf{u}^n)^T \mathbf{p} = 0$$

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}^n, \mathbf{u}^n) + \nabla \mathbf{q}(\mathbf{x}^n, \mathbf{u}^n)^T \mathbf{p} \geq 0$$

$$\mathbf{x}_{\min} \leq \mathbf{x}^n + \mathbf{p} \leq \mathbf{x}_{\max}$$

$$\mathbf{u}_{\min} \leq \mathbf{u}^n + \mathbf{p} \leq \mathbf{u}_{\max},$$

onde \mathbf{C}^n é a matriz que contém informações sobre os gradientes nas iterações anteriores, $\mathbf{F} = \mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{u}; \mathbf{p})$ e $\mathbf{G} = \mathbf{y} - \mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{u}; \mathbf{p})$.

Para o presente estudo, problema de otimização diferencial/algébrico não-linear com valor inicial e restrições, tem-se a seguinte formulação do problema de programação não-linear (NLP):

$$\min_{\substack{T, T_p, \\ F_c, T_s}} \Phi = \int_{t_0}^{t_0+t_h} (T_d - T)^2 dt, \quad (i)$$

sujeita a:

(NLP3)

$$\mathbf{R}_1 = \frac{dT}{dt} - \frac{1}{\rho V c_p} \left\{ h_p A_p (T_p - T) - F_c \rho_c c_{p_c} (T - T_{c_e}) \left[1 - \exp \left(- \frac{U_c A_c}{F_c \rho_c c_{p_c}} \right) \right] \right\} = 0 \quad (ii)$$

$$\mathbf{R}_2 = \frac{dT_p}{dt} - \frac{1}{c_{p_p} M_p} \left\{ h_{p_o} A_{p_o} (T_s - T_p) - h_p A_p (T_p - T) \right\} = 0 \quad (iii)$$

$$U_c = \frac{A_1 A_2 F_c^b}{A_2 + A_1 F_c^b} \quad (iv)$$

$$t=0: T=25\text{ }^{\circ}\text{C}; T_p=25\text{ }^{\circ}\text{C} \quad (\text{v})$$

$$2,5 \cdot 10^{-4} \leq F_c \leq 6,5 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3 / \text{s} \quad (\text{vi})$$

$$70,0 \leq T_s \leq 150,0\text{ }^{\circ}\text{C},$$

onde:

$$T_d = 54 + 71 \cdot \exp(-2,5 \cdot 10^{-3} t) \text{ }^{\circ}\text{C}, \quad (3-15)$$

sendo T_d a trajetória desejada para a temperatura do meio interno do tanque (esta trajetória resulta de trabalhos de otimização sobre reatores em batelada publicados em literatura (Ray e Szekeley, 1973), e é a mesma utilizada por César (1991) e Andrade (1992)). t_0 é o instante inicial para atuação do controle preditivo, t_h é o horizonte de predição, T é a temperatura do conteúdo do tanque predita pelo modelo de controle (única variável de estado medida no processo a cada período de amostragem τ), T_p é a temperatura da parede da camisa térmica predita pelo modelo de controle (variável de estado), T_s é a temperatura do vapor da camisa de aquecimento (variável manipulada), F_c é a vazão do fluido de resfriamento (variável manipulada) e R_1 e R_2 são as restrições de igualdade (modelo do processo). Para este estudo de simulação em particular, o sistema de equações diferenciais ordinárias que compõe o modelo de controle é exatamente o mesmo já desenvolvido para representar a operação do processo, não havendo, pois, nenhuma simplificação adicional.

Pode-se notar, pelo o exposto acima, que se deseja a solução (iterativa) de um problema de controle MISO (duas variáveis de entrada e uma de saída) não-linear sujeito à restrições não-lineares, cujo objetivo é o de levar a temperatura do meio interno do tanque de aquecimento a obedecer uma trajetória $T_d(t)$ predeterminada.

Para a resolução do problema **NLP3**, obedecendo a forma proposta **NLP2**, as restrições R_1 e R_2 (e U_c) devem ser colocadas na forma discretizada. O método de discretização empregado para R_1 e R_2 , como já declarado anteriormente, será o da Colocação Ortogonal em Elementos Finitos. Utilizando-se este método, costuma-se conseguir uma aproximação das equações diferenciais ordinárias do modelo com uma

precisão desejada, sem usar polinômios de ordem muito alta, permitindo, inclusive, que o algoritmo **NLP3** seja utilizado na resolução de uma classe mais geral de problemas de otimização diferencial/algébrico. Ao mesmo tempo, as variáveis de entrada podem ser tratadas como funções constantes discretas (valor constante para cada elemento). Com isso, tendo-se já definido o conjunto de variáveis de decisão $[T, T_p, F_c \text{ e } T_s]$, as equações diferenciais ordinárias são transformadas em um conjunto de igualdades algébricas nos N -pontos de colocação (zeros dos polinômios ortogonais).

A integral que aparece na função objetivo Φ será resolvida pelo método Quadratura Gaussiana.

A seguir, trabalhar-se-á com as restrições de igualdade e a função objetivo de modo a colocá-las na forma apropriada para a implementação (linguagem Fortran) do algoritmo de controle/otimização para a resolução do problema de programação não-linear resultante, **NLP3**, através da técnica de otimização SQP.

3.2.3. Restrições

As restrições dinâmicas para o problema **NLP3**, expressas nesta seção por (ii) e (iii), representam modelo explícito do processo que se deseja controlar. Estas restrições, seguindo a estratégia descrita anteriormente, devem ser discretizadas tornando-se algébricas. Para tal, é aplicado o método da Colocação Ortogonal em Elementos Finitos.

Dentre as restrições, pode-se distinguir uma não-linear (3-13) e outra linear (3-14).

Ao se aplicar o método da Colocação Ortogonal em Elementos Finitos para discretizar essas equações acima, o primeiro passo é adimensionalizar a variável independente (tempo, t) entre 0 e 1, pois pretende-se aproximar a solução por um polinômio ortogonal de Jacobi do tipo $P_N^{\alpha,\beta}$. A nova variável θ (adimensionalizada entre 0 e 1) é dada por:

$$\theta = \frac{t}{t_h} \therefore t = \theta \cdot t_h, \quad 0 \leq \theta \leq 1$$

$$dt = t_h d\theta, \quad (3-16)$$

onde t_h é o horizonte de predição. Como foi visto no capítulo 1, o horizonte de predição t_h é expresso em número de elementos NE, sendo que cada elemento é igual a um período de amostragem.

Realizando-se a mudança da variável (3-16) na eq.(3-13), tem-se

$$\frac{1}{t_h} \frac{dT}{d\theta} = \frac{1}{\rho V c_p} \left\{ h_p A_p (T_p - T) - F_c \rho_c c_{p_c} (T - T_{c_e}) \left[1 - \exp \left(- \frac{U_c A_c}{F_c \rho_c c_{p_c}} \right) \right] \right\} \quad (3-17)$$

e para a eq.(3-14), tem-se

$$\frac{1}{t_h} \frac{dT_p}{d\theta} = \frac{1}{c_{p_p} M_p} \left\{ h_{p_o} A_{p_o} (T_s - T_p) - h_p A_p (T_p - T) \right\}. \quad (3-18)$$

Feito isso, as condições iniciais do problema passam a ser:

$$\theta = 0: \quad T = 25 \text{ } ^\circ\text{C}; \quad T_p = 25 \text{ } ^\circ\text{C}. \quad (3-19)$$

Em seguida, deve-se dividir o intervalo $\theta (0,1)$ em NE-elementos de iguais extensões (pois vão corresponder aos períodos de amostragem da variável medida - os quais são fixos) e, mais uma vez, adimensionalizar entre 0 e 1 a variável independente (tempo, θ), para cada elemento k de extensão θ_k até θ_{k+1} . A nova variável é então,

$$z^{(k)} = \frac{\theta - \theta_k}{\theta_{k+1} - \theta_k} = \frac{\theta - \theta_k}{\Delta\theta^{(k)}} \quad \begin{aligned} \theta &= z^{(k)} \cdot \Delta\theta^{(k)} + \theta_k \\ d\theta &= \Delta\theta^{(k)} \cdot dz^{(k)}. \end{aligned} \quad (3-20)$$

Efetuada-se a mudança da variável θ para z na eq.(3-17), tem-se

$$\frac{1}{t_h \Delta\theta^{(k)}} \frac{dT}{dz^{(k)}} = \frac{1}{\rho V c_p} \left\{ h_p A_p (T_p - T) - F_c \rho_c c_{p_c} (T - T_{c_e}) \left[1 - \exp \left(- \frac{U_c A_c}{F_c \rho_c c_{p_c}} \right) \right] \right\} \quad (3-21)$$

e para a eq.(3-18), tem-se

$$\frac{1}{t_h \Delta \theta^{(k)}} \frac{dT_p}{dz^{(k)}} = \frac{1}{c_{p_p} M_p} \left\{ h_{p_o} A_{p_o} (T_s - T_p) - h_p A_p (T_p - T) \right\}. \quad (3-22)$$

As condições iniciais ficam sendo:

$$z_1^{(1)}=0; \quad T=25 \text{ } ^\circ\text{C}; \quad T_p = 25 \text{ } ^\circ\text{C}. \quad (3-23)$$

Como mudanças nas variáveis manipuladas ou independentes, F_c e T_s (consideradas constantes discretas), podem levar as derivadas das variáveis de estado ou dependentes a serem descontínuas nos nós, a continuidade de T e T_p nos nós é aplicada apenas aos valores das funções e não aos das suas derivadas (Renfro *et al.*, 1987). Esse procedimento gera um conjunto de NVE·(NE-1) equações algébricas de conexão, onde NVE é número de variáveis de estado. Em princípio, tais equações podem ser usadas para a eliminação de variáveis nos nós. Contudo, é preferível manter tais equações, criando um modelo esparsa favorável através do agrupamento de colunas da matriz Jacobiana das restrições não-lineares. Este procedimento pode reduzir o tempo de cálculo dos gradientes necessários para o algoritmo NLP, usando-se um método que explore esta estrutura esparsa do Jacobiano.

Por fim, deve-se aplicar Colocação Ortogonal Global nos N-pontos internos em cada elemento k com $k=1, \dots, NE$, obtendo-se, assim, o seguinte conjunto de equações algébricas:

da eq.(3-21)

$$\begin{aligned} \frac{1}{t_h \Delta \theta^{(k)}} \sum_{j=1}^{N+2} \mathbf{A}_{ij} \cdot T_j^{(k)} - \frac{1}{\rho V c_p} \{ h_p A_p (T_{p_i}^{(k)} - T_i^{(k)}) - \\ F_c^{(k)} \rho_c c_{p_c} (T_i^{(k)} - T_{c_e}) [1 - \exp(-\frac{U_c^{(k)} A_c}{F_c^{(k)} \rho_c c_{p_c}})] \} = 0; \end{aligned} \quad (3-24)$$

da eq.(3-22)

$$\frac{1}{t_h \Delta \theta^{(k)}} \sum_{j=1}^{N+2} A_{ij} \cdot T_{Pj}^{(k)} - \frac{1}{c_{p_p} M_p} \{h_{p_o} A_{p_o} (T_s^{(k)} - T_{P_i}^{(k)}) - h_p A_p (T_{P_i}^{(k)} - T_i^{(k)})\}, \quad (3-25)$$

onde $i=2, \dots, N+2$

e da eq.(3-10)

$$U_c^{(k)} = \frac{A_1 A_2 F_c^{b(k)}}{A_2 + A_1 F_c^{b(k)}}. \quad (3-26)$$

Como condições iniciais, têm-se

$$z_1^{(1)}=0; \quad T_1^{(1)} = 25 \text{ } ^\circ\text{C}; \quad T_{P_1}^{(1)} = 25 \text{ } ^\circ\text{C}, \quad (3-27)$$

e como condição de continuidade das variáveis dependentes:

$$T_{(N+2)}^{(k-1)} = T_{(1)}^{(k)} \quad ; \quad T_{(N+2)}^{(k)} = T_{(1)}^{(k+1)}$$

e

$$T_{P(N+2)}^{(k-1)} = T_{P(1)}^{(k)} \quad ; \quad T_{P(N+2)}^{(k)} = T_{P(1)}^{(k+1)}. \quad (3-28)$$

Agora, para o problema em questão, serão definidos alguns parâmetros importantes e necessários para a implementação da técnica de otimização SQP.

Para inicializar, pode-se definir, sempre em função do número de elementos de colocação NE e do número de pontos internos de colocação N, o número de variáveis no problema (NV), dado por:

$$NV = NE \cdot (2 \cdot N + 4), \quad (3-29)$$

das quais, cada uma se apresenta na seguinte proporção:

NE-variáveis $F_C^{(k)}$

NE-variáveis $T_S^{(k)}$

$(N + 1) \cdot$ NE-variáveis $T_{Pi}^{(k)}$

$(N + 1) \cdot$ NE-variáveis $T_i^{(k)}$,

com $i=2,\dots,N+2$ e $k=1,\dots,NE$.

Para o número de restrições não-lineares (NRNLN), tem-se:

$$NRNLN = NE \cdot (N + 1) ; \quad (3-30)$$

da mesma forma, o número de restrições lineares é dado por:

$$NRLIN = NE \cdot (N + 1) . \quad (3-31)$$

Outro ponto importante é a definição dos limites das restrições não-lineares e lineares, assim como, seus respectivos Jacobiano e gradientes (derivadas primeiras das restrições em relação às variáveis) e os limites impostos às variáveis. Trabalhando-se com um vetor único para os limites inferior e superior, tem-se:

$$LI = \begin{bmatrix} LI_V \\ LI_L \\ LI_{NL} \end{bmatrix} \quad (3-32)$$

e

$$LS = \begin{bmatrix} LS_V \\ LS_L \\ LS_{NL} \end{bmatrix} , \quad (3-33)$$

onde cada elemento dos vetores limite inferior (**LI**) e limite superior (**LS**) será visto a seguir.

Quanto às restrições não-lineares de igualdade, eq.(3-23), estas estarão expressas sob a forma $\mathbf{RNL}_j(\mathbf{V}) = 0$, para $j=1, \dots, \text{NRNL}$, ou seja, já está embutido que seus limites, inferior (\mathbf{LI}_{NL}) e superior (\mathbf{LS}_{NL}), são iguais a zero - gerando um vetor de ordem NRNLN. Essas restrições formam um sistema de equações não-lineares e, para a sua resolução, necessita-se da construção do seu Jacobiano, matriz de ordem NRNLN×NV. Resumindo,

-Limites das restrições não-lineares:

$$\mathbf{LI}_{\text{NL},j} = \mathbf{LS}_{\text{NL},j} = 0, \quad (3-34)$$

com $j=1, \dots, \text{NRNLN}$ - vetores de ordem NRNLN.

-Jacobiano das restrições não-lineares:

$$\text{matriz das 1}^{\text{as}} \text{ derivadas} = \mathbf{JAC}_{ij}(\mathbf{V}), \quad (3-35)$$

com $i=1, \dots, \text{NRNLN}$ e $j=1, \dots, \text{NV}$ - matriz de ordem NRNLN×NV.

Quanto às restrições lineares de igualdade, eq.(3-24), pode-se identificar que os limites, inferior(\mathbf{LI}_L) e superior (\mathbf{LS}_L), são iguais sendo o seu valor igual ao termo independente para o primeiro elemento de colocação, e zero, para o segundo elemento em diante. Isso gera um vetor de ordem NRLIN. Seus gradientes são formados pelos coeficientes das variáveis de otimização, uma vez que as expressões são lineares, gerando uma matriz de ordem NRLIN×NV. Resumindo,

-Limites das restrições lineares:

$$\mathbf{LI}_{L,j} = \mathbf{LS}_{L,j} = -\frac{1}{t_h \cdot \Delta\theta^{(k)}} \mathbf{A}_{i1} \cdot \mathbf{T}_{p1}^{(k)}, \quad (3-36)$$

com $k=1, j=1, \dots, N+1$ e $i=2, \dots, N+2$ e

$$\mathbf{LI}_L(\mathbf{j}) = \mathbf{LS}_L(\mathbf{j}) = 0, \quad (3-37)$$

com $j=N+2, \dots, \text{NRLIN}$ - vetores de ordem NRLIN .

-Gradientes das restrições lineares:

$$\text{matriz dos coeficientes} = \mathbf{MRL}_{ij}, \quad (3-38)$$

com $i=1, \dots, \text{NRLIN}$ e $j=1, \dots, \text{NV}$ - matriz de ordem $\text{NRLIN} \times \text{NV}$.

Quanto aos limites impostos às variáveis por questão de operação ou de segurança, para o problema em estudo, apenas as variáveis manipuladas, F_c e T_s , os apresentam, como se segue,

$$2,5 \cdot 10^{-4} \leq F_c \leq 6,5 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3 / \text{s} \quad \text{e} \quad 70 \leq T_s \leq 150^\circ \text{C}$$

e, para efeito de cálculo,

$$T \geq 0^\circ \text{C} \quad \text{e} \quad T_p \geq 0^\circ \text{C}. \quad (3-39)$$

Então, pode-se identificar os limites, inferior (\mathbf{LI}_V) e superior (\mathbf{LS}_V), como sendo, para cada variável:

$$F_c: \quad \mathbf{LI}_{V,j} = 2,5 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3 / \text{s} \text{ e}$$

$$\mathbf{LS}_{V,j} = 6,5 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3 / \text{s}, \quad (3-40)$$

com $j=1, \dots, \text{NE}$;

$$T_s: \quad \mathbf{LI}_{V,j} = 70,0^\circ \text{C} \text{ e}$$

$$LS_{V,j} = 150,0^\circ\text{C} , \quad (3-41)$$

com $j=NE+1, \dots, 2 \cdot NE$;

T_p, T : $LI_{V,j} = 0^\circ\text{C}$ e

$$LS_{V,j} = +\infty , \quad (3-42)$$

com $j=2 \cdot NE+1, \dots, NV$ - vetores de ordem NV .

De acordo com os vetores/matrizes gerados acima, deve-se trabalhar com o seguinte vetor único das variáveis (generalizando-o por V):

$$V = \begin{bmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \\ V_4 \end{bmatrix} ,$$

onde,

$$V_1 = F_c^{(k)} ,$$

$$V_2 = T_s^{(k)} ,$$

$$V_3 = T_{p_i}^{(k)} ,$$

$$V_4 = T_i^{(k)} , \quad (3-43)$$

com $k=1, \dots, NE$ e $i=2, \dots, N+2$ - vetor de ordem NV (como dito anteriormente).

Vale ressaltar que, no intuito de se obter uma estrutura diagonal em bloco para a matriz Jacobiana esparsa das restrições não-lineares, o vetor V das variáveis de

otimização (apresentado anteriormente) deve ser modificado, obedecendo a seguinte ordenação:

$$\mathbf{V}' = \begin{bmatrix} \mathbf{V}_1' \\ \vdots \\ \mathbf{V}_{NE}' \end{bmatrix},$$

onde,

$$\mathbf{V}_k' = \left[F_c^{(k)}, T_s^{(k)}, T_{p_2}^{(k)}, \dots, T_{p_{N+2}}^{(k)}, T_2^{(k)}, \dots, T_{N+2}^{(k)} \right]^T, \quad (3-44)$$

com $k=1, \dots, NE$.

Deste modo, todos os vetores/matrizes vistos nesta seção também devem ser reordenados.

Para todas as simulações deste estudo, fez-se uso de subrotinas descritas por Villadsen e Michelsen (1978) para o cálculo dos pontos de colocação z_i (para o polinômio de Jacobi $P_N^{0,1}(z)$), da matriz dos pontos de colocação \mathbf{A}_{ij} e dos pesos de Quadratura Gaussiana ω_i (nos pontos de colocação).

3.2.4. Função Objetivo

Para este trabalho, escolheu-se a função objetivo de controle como sendo a integral do quadrado do erro entre o valor desejado para a temperatura do meio interno e o seu valor predito através do algoritmo de controle - função ISE, Integral do Quadrado do Erro - ou seja,

$$\Phi = \int_{t_0}^{t_0+t_h} (T_d - T)^2 dt = \int_{t_0}^{t_0+t_h} \varepsilon^2 dt. \quad (3-45)$$

Aplicando-se a Quadratura Gaussiana para a resolução da integral, obtém-se

$$\Phi = \sum_{k=1}^{NE} \sum_{i=1}^{N+2} \omega_i \varepsilon_i^{(k)2}, \quad (3-46)$$

onde ω_i são os pesos de Quadratura Gaussiana nos pontos de colocação - calculados, como já esclarecido anteriormente, através da subrotina descrita por Villadsen e Michelsen (1978) - e $\varepsilon_i^{(k)}$ é o erro entre o valor desejado e o predito para T no ponto de colocação i do elemento k:

$$\varepsilon_i^{(k)} = T_{di}^{(k)} - T_i^{(k)}. \quad (3-47)$$

Como se pode observar em (3-47), a expressão do valor desejado para a temperatura do meio interno, eq.(3-15), precisa ser discretizada no tempo - notação em função de i e k - para se tornar compatível com as outras expressões, as quais já foram discretizadas no tempo aplicando-se Colocação Ortogonal em Elementos Finitos.

Então, obedecendo procedimentos anteriores, primeiro deve-se adimensionalizar a variável t, entre 0 e 1, obtendo-se θ (como a expressão 3-16), ou ainda, para um determinado horizonte de predição, tem-se:

$$t_i = \theta_i \cdot t_h + t_0$$

e com isso, a eq.(3-15) passa a ser:

$$T_{di} = 54 + 71 \cdot \exp[-2,5 \cdot 10^{-3} (\theta_i \cdot t_h + t_0)]. \quad (3-48)$$

Agora, realizando-se a segunda mudança na variável tempo, tem-se z (como a expressão 3-20), ou, para um determinado período de amostragem, tem-se

$$\theta_i = z_i^{(k)} \cdot \Delta\theta^{(k)} + \theta_k$$

e, portanto, a expressão final para a trajetória desejada $T_d(z)$ fica sendo:

$$T_{di}^{(k)} = 54 + 71 \cdot \exp[-2,5 \cdot 10^{-3} (t_h (z_i^{(k)} \cdot \Delta\theta^{(k)} + \theta_k) + t_0)]. \quad (3-49)$$

A partir disso, chega-se à seguinte expressão final para a função objetivo de controle:

$$\Phi = \sum_{k=1}^{NE} \sum_{i=1}^{N+2} \omega_i \left\{ \left[54 + 71 \cdot \exp \left(-2,5 \cdot 10^{-3} (t_h(z_i^{(k)}) \cdot \Delta\theta^{(k)} + \theta_k) + t_0 \right) \right] - T_i^{(k)} \right\}^2, \quad (3-50)$$

apresentando as seguintes variáveis de decisão para o problema **NLP3**:

$$F_c^{(k)}, T_s^{(k)}, T_{p_i}^{(k)} \text{ e } T_i^{(k)}, \quad (3-51)$$

com $i=2, \dots, N+2$ e $k=1, \dots, NE$.

Um cálculo necessário para a aplicação da técnica SQP é o do gradiente da função objetivo:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial F_c^{(k)}} = 0$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial T_s^{(k)}} = 0$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial T_{p_i}^{(k)}} = 0$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial T_i^{(k)}} = -2 \cdot \omega_i (T_{d_i}^{(k)} - T_i^{(k)}), \quad (3-52)$$

com $k=1, \dots, NE$ e $i=2, \dots, N+2$ - vetor de ordem NV.

A figura 3.2 representa o diagrama de blocos para a implementação da resolução do problema de controle/otimização.

É interessante notar que somente o primeiro movimento das variáveis manipuladas é implementado no instante atual. Contudo, os valores das variáveis manipuladas e controlada nos instantes futuros são úteis ao projetar o desempenho do sistema controlado e fornecer advertências quando o sistema estiver-se aproximando do projeto do processo e operando nas restrições (Seider e Brengel, 1991). O procedimento descrito pelo diagrama é, então, repetido em cada instante de amostragem. Para cada instante de amostragem, $T_{PI}^{(1)}$ é estimado ou feito igual ao $T_{PI}^{(2)}$ predito no instante de amostragem prévio e $T_1^{(1)}$ assume o valor medido (atual).

No presente estudo, o modelo de controle é assumido ser “perfeito” uma vez que é o mesmo usado para simular a operação do processo não se levando em conta, pois, o efeito de erros de modelagem. Quanto à perturbações, não são consideradas neste sistema. Também, o MPC assume que ruídos de medidas são zero, embora haja casos em que esses ruídos possam ser facilmente removidos por filtragem (Fisher, 1991).

DIAGRAMA DE BLOCOS:

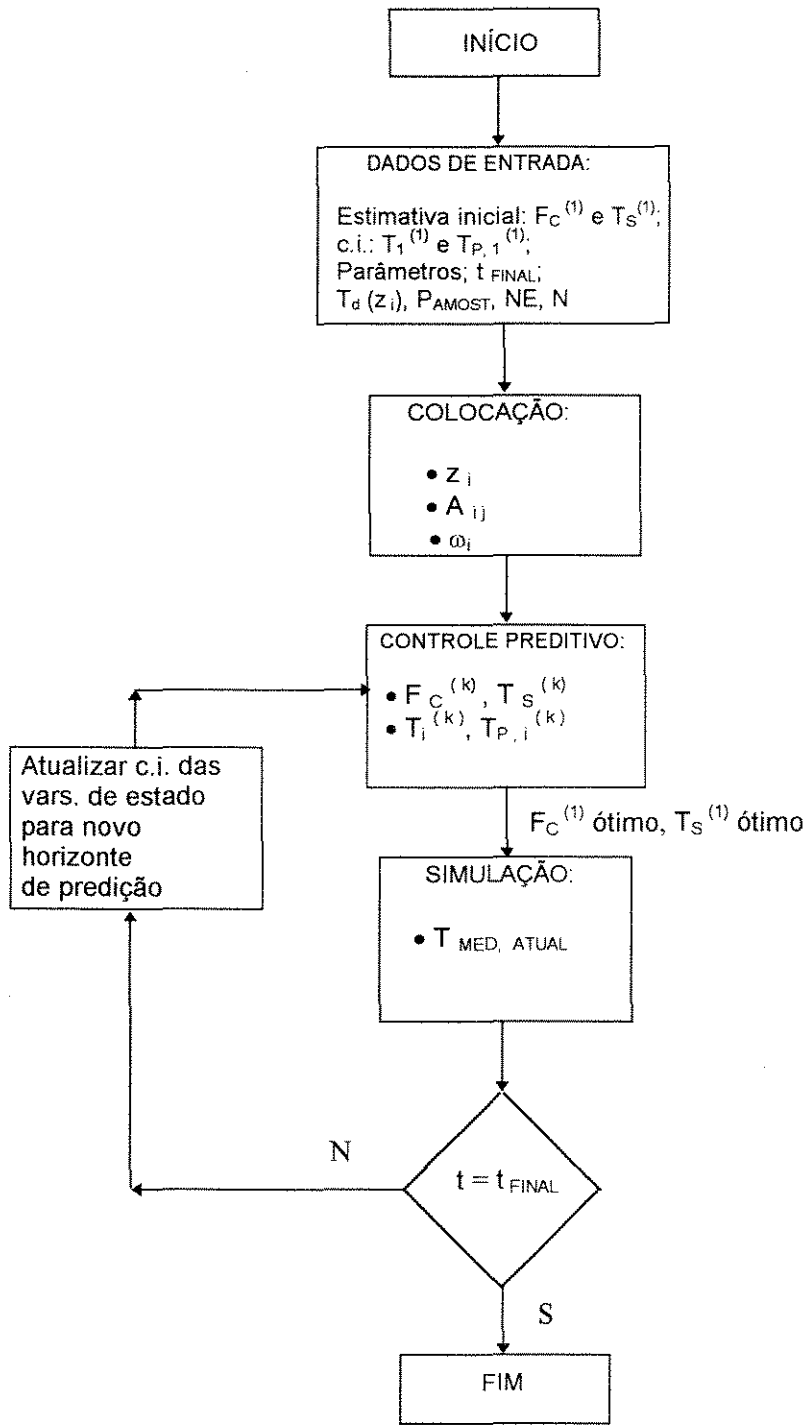


Figura 3.2. Diagrama de blocos para a implementação do algoritmo de controle NMPC.

CAPÍTULO 4

Resultados

4. Resultados

Com o objetivo de se estudar o comportamento do algoritmo NMPC, podendo-se avaliar o seu desempenho para o sistema em estudo, a resposta do NMPC é simulada fazendo-se variar parâmetros como horizonte de predição (ou, igualmente, o número de elementos de colocação), período de amostragem e número de pontos de colocação. Os parâmetros de sintonização deste controlador são basicamente dois: horizonte de predição e horizonte de controle. Neste trabalho, o horizonte de controle assume sempre o mesmo valor do horizonte de predição, fazendo-o variar entre 1 e 3 e, para um caso mais extremo, 5. Estes parâmetros vêm afetar não somente a resposta do sistema de controle, mas também, o tempo de cálculo para cada instante de amostragem.

A apresentação dos resultados será dividida em duas partes. Na primeira, apresentam-se as respostas do NMPC considerando-se que as variáveis de estado podem ser medidas (T) ou estimadas (T_p). Na segunda parte, assume-se que apenas a variável controlada T é medida, fazendo-se uso do valor predito de T_p , no estágio prévio, para realizar a nova predição - uma vez que se trata de um sistema estável em malha-aberta.

As simulações, tanto da operação do sistema quanto do controle, partem do instante inicial, $t=0$, com as temperaturas do meio interno do tanque (T) e da parede da camisa térmica (T_p) iguais a 25 °C, para uma operação batelada de 1 h. Inicialmente, são atribuídos os valores $5 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$ e 80 °C às variáveis F_c e T_s , respectivamente, obedecendo as suas restrições. Os parâmetros do modelo para as simulações encontram-se listados na tabela 3.1, os quais são considerados constantes em todos os cálculos.

A tolerância estipulada para o cálculo de T em todas as simulações da operação do tanque foi de 10^{-4} .

Na implementação do método SQP, foram especificadas as tolerâncias de factibilidade linear e não-linear em 10^{-6} , a tolerância na otimização em 10^{-8} , a precisão da função em $4,37 \cdot 10^{-15}$ e a tolerância na direção de busca em 0,9. Vale salientar que a rotina utilizada para este método, E04UCF, trata todas as matrizes como densas.

Os cálculos foram desenvolvidos em dupla precisão, linguagem Fortran, numa estação de trabalho Sun Spark 4.

As simulações que se seguem compreendem variações no período de amostragem de 10 s, 20 s e 30 s, no número de elementos de colocação (ou horizonte de predição) de 1, 2, 3 e 5, e no número de pontos internos de colocação de 1, 2 e 3.

Uma vez que o processo e o modelo do controle são assumidos desenvolver-se identicamente, somente as variações no *set-point* podem ser investigadas aqui, uma vez que perturbações não são consideradas neste sistema.

Nesta primeira parte, inicia-se a apresentação dos resultados com as figuras 4.1 a 4.12 representando a simulação do comportamento do tanque a partir dos perfis ótimos das variáveis manipuladas para um período de amostragem $\tau=10$ s.

Os resultados nestas figuras claramente mostram que o desempenho do NMPC deteriora ao se aumentar o horizonte de predição, decrescendo a velocidade da resposta. A figura 4.13, que condensa os resultados das simulações representadas nas figuras 4.1 a 4.12, vem confirmar esta conclusão. Esta última figura mostra igualmente que o valor de N também afeta o desempenho do NMPC; à medida que se aumenta N o valor do ISE diminui.

Analisando-se a evolução da temperatura do meio interno do tanque quando comparada com a trajetória desejada, percebe-se que para $N_E=1$ e $N \geq 2$ obtém-se um excelente desempenho do controlador, enquanto satisfazendo as restrições nas variáveis de controle, obtendo-se uma resposta rápida e suave. Também, observando-se o comportamento das variáveis manipuladas, vê-se que, para essas mesmas condições ($N_E=1$ e $N \geq 2$), estas variáveis assumem valores economicamente mais favoráveis (uma vez que são utilidades consumidas). Nota-se, portanto, a habilidade do controlador em trabalhar com restrições de uma maneira explícita, sem prejuízo na velocidade de resposta da temperatura.

É interessante observar que a precisão da solução é limitada somente pelo erro introduzido pelo procedimento da colocação ortogonal. Os parâmetros α e β no polinômio ortogonal influenciam na precisão da integração, mas não afetam a dimensão NV do problema. Eles são expoentes na função peso usada na determinação dos coeficientes do polinômio de Jacobi e, por isso, eles afetam a maneira como as raízes estão agrupadas no elemento de colocação. Neste problema de valor inicial em estudo, as raízes foram concentradas no início do subintervalo ($\alpha=0$ e $\beta=1$), onde se deseja uma melhor representação do perfil da temperatura. Uma vez que a formulação do problema é desenvolvida, a qual assegura que a colocação pode ser aplicada precisamente, no caso

para $NE=1$ e $N=2$ ou 3 , então, a precisão da solução para o problema de controle ótimo está sujeita somente à tolerância nas condições ótimas (Biegler, 1984).

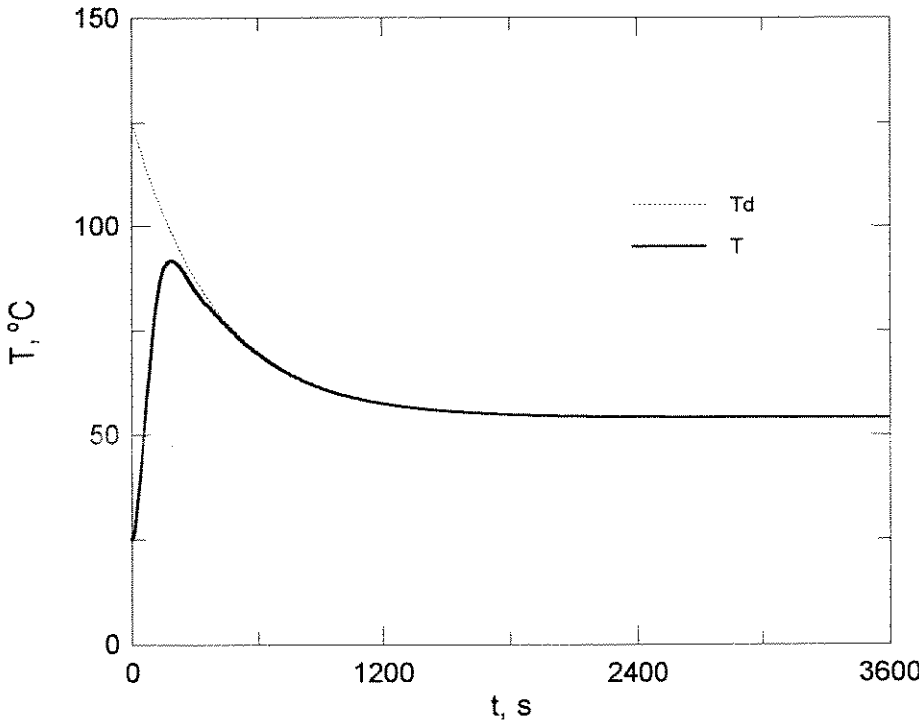
Deve-se salientar que em todas as simulações considerou-se o caso mais crítico em termos de número de variáveis na otimização, uma vez que se assumiu sempre $t_c=t_h$, trabalhando-se com carga computacional máxima. Também, isto resulta num controle mais rígido.

As figuras 4.14 a 4.25 ilustram as simulações das respostas do NMPC para $\tau=20$ s, e as figuras 4.27 a 4.38, para $\tau=30$ s, com os respectivos resumos dos resultados representados nas figuras 4.26 e 4.39. Estes resultados mostram certas oscilações nas respostas, não se apresentando de forma suave como para $\tau=10$ s, e ainda uma resposta lenta.

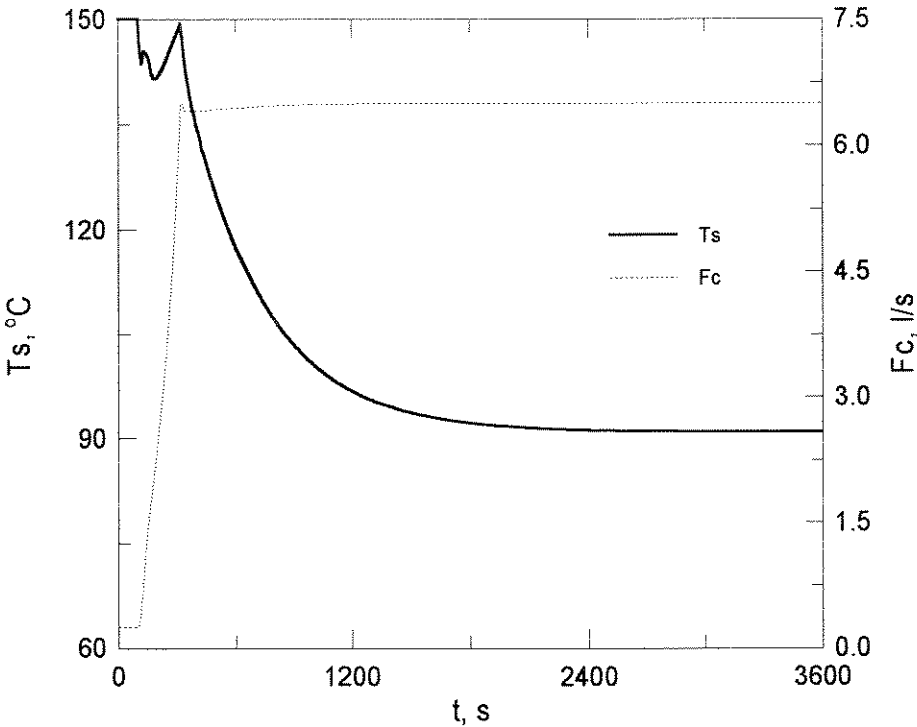
As figuras 4.40 a 4.51 constituem a segunda parte da apresentação dos resultados, para o caso em que apenas T é medido, sendo T_p inicializado com o seu valor predito previamente.

Comparando-se esses resultados com aqueles das figuras 4.1 a 4.12, vê-se que estes últimos apresentam uma resposta mais rápida. Isto é intuitivo, pois quanto mais e melhores medidas/estimativas se têm, obtêm-se melhores condições iniciais e melhores controles, considerando-se que o modelo e os parâmetros são confiáveis. A maioria das técnicas de controle não-linear assume que todas as variáveis de estado são medidas (na prática geralmente impossível) ou estimadas.

Agora comparando-se as figuras 4.13 e 4.52, percebe-se que, para esta última, a diferença no comportamento da temperatura em relação ao valor desejado é sempre menor, o que mostra estar-se obtendo uma boa predição do comportamento da variável T_p para que T obedeça T_d .

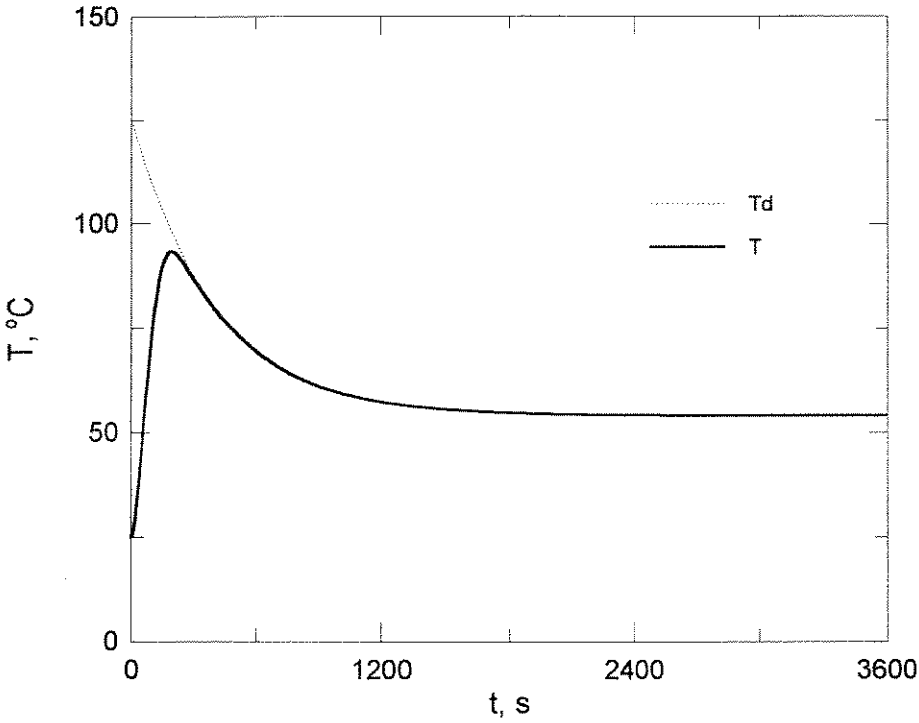


(a) Variável controlada.

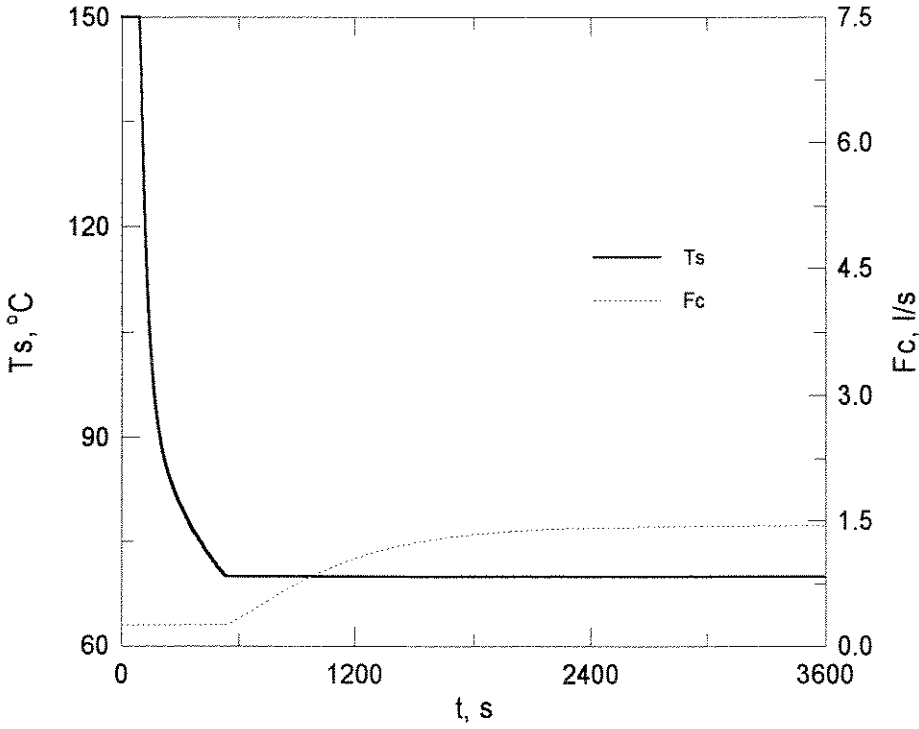


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.1. Resultados da simulação para $NE=1$, $\tau=10$ s e $N=1$.

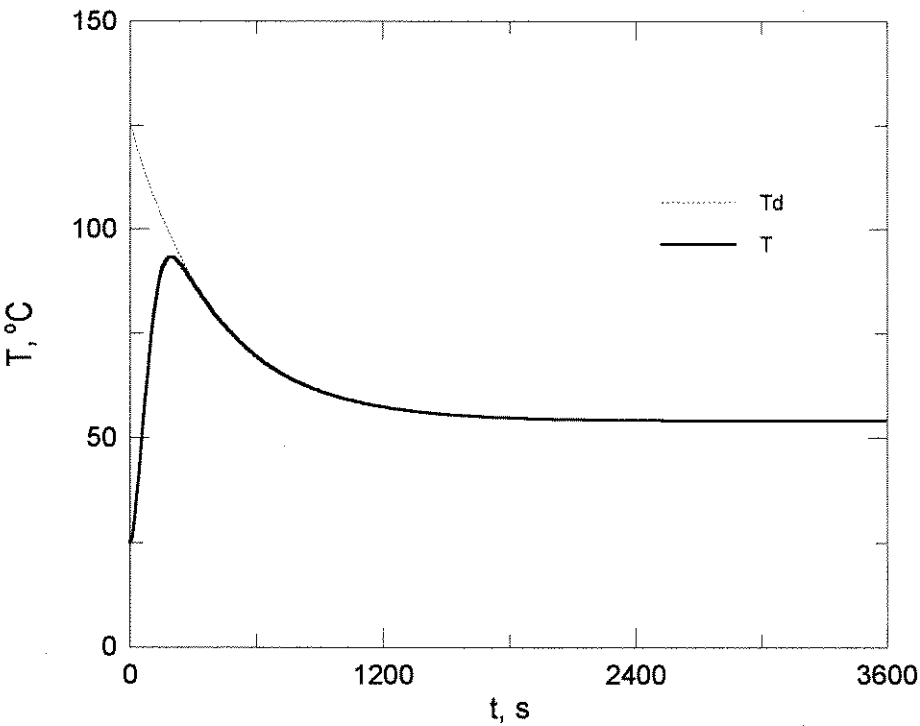


(a) Variável controlada.

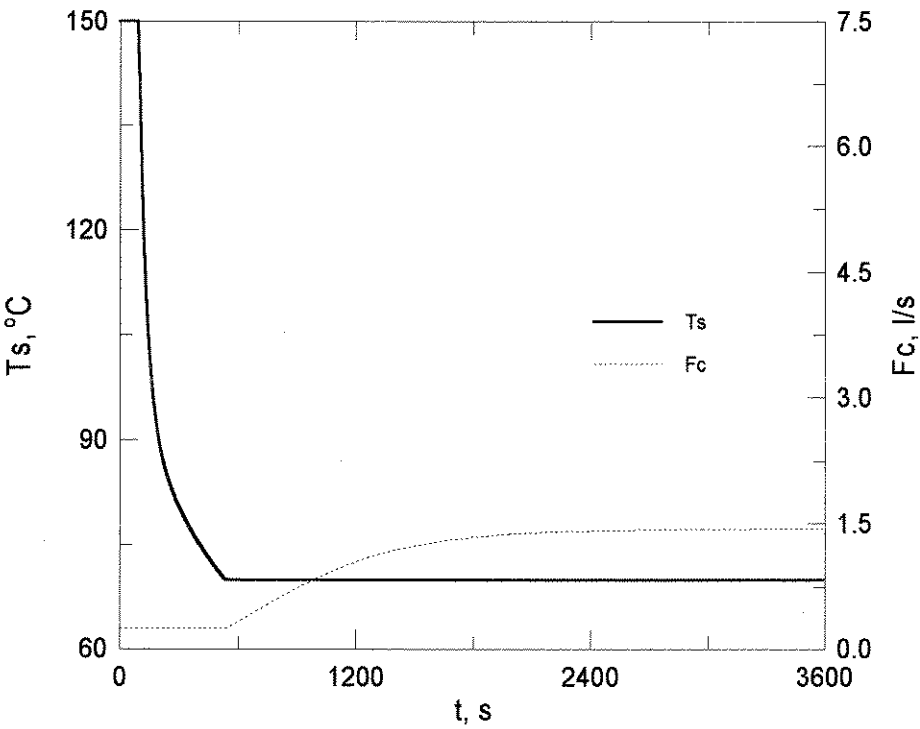


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.2. Resultados da simulação para $NE=1$, $\tau=10$ s e $N=2$.

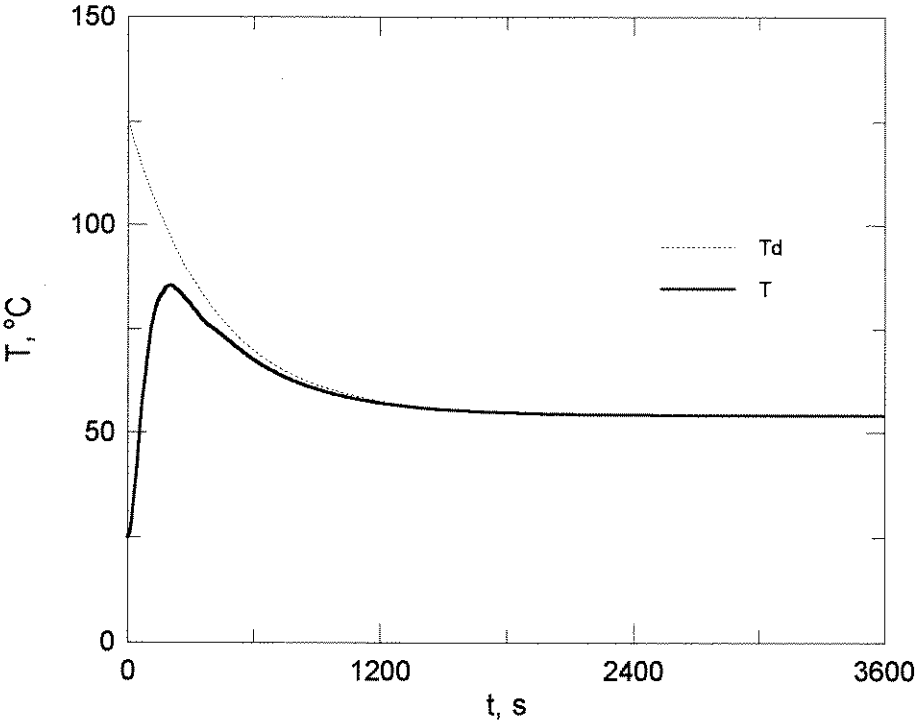


(a) Variável controlada.

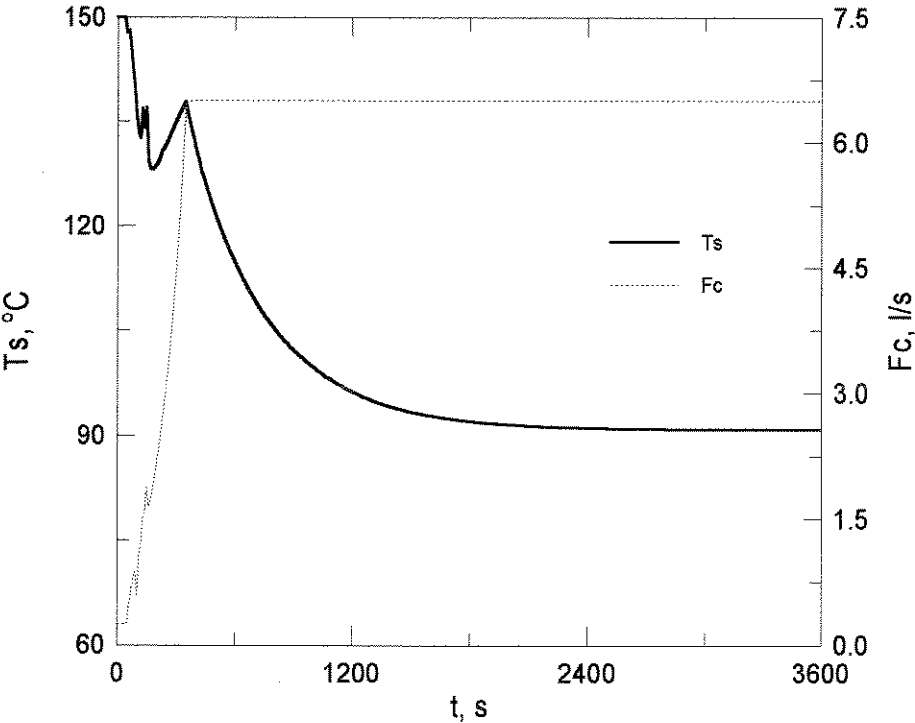


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.3. Resultados da simulação para $NE=1$, $\tau=10 \text{ s}$ e $N=3$.

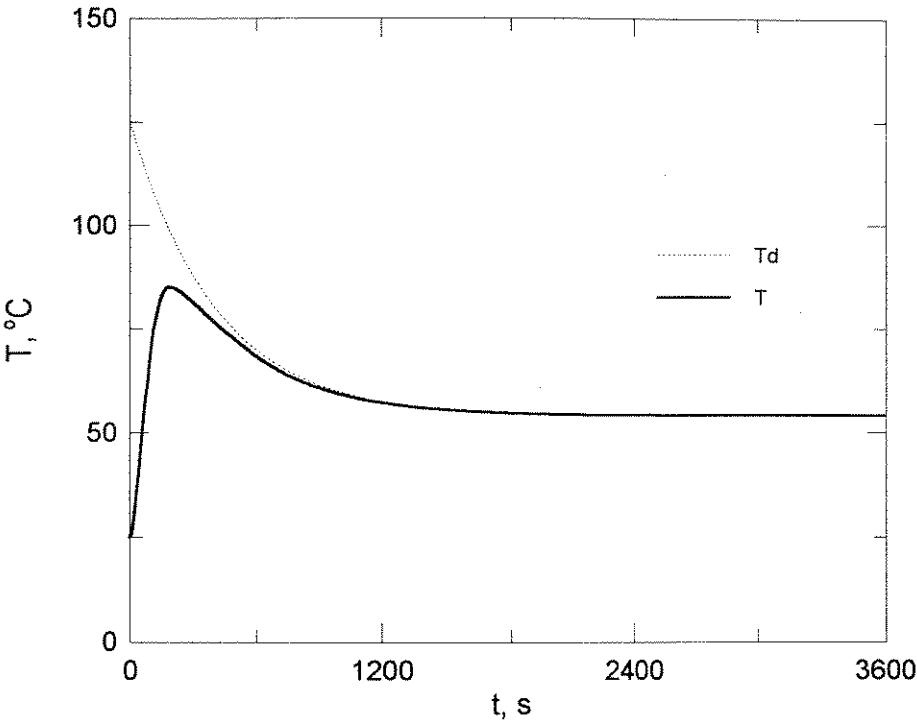


(a) Variável controlada.

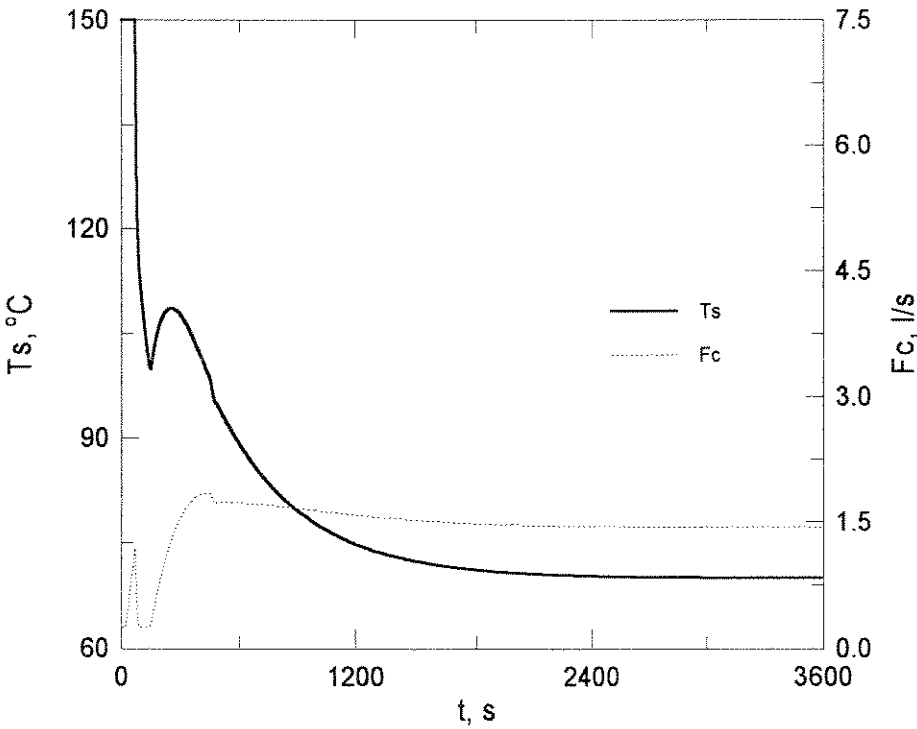


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.4. Resultados da simulação para $NE=2$, $\tau=10$ s e $N=1$.

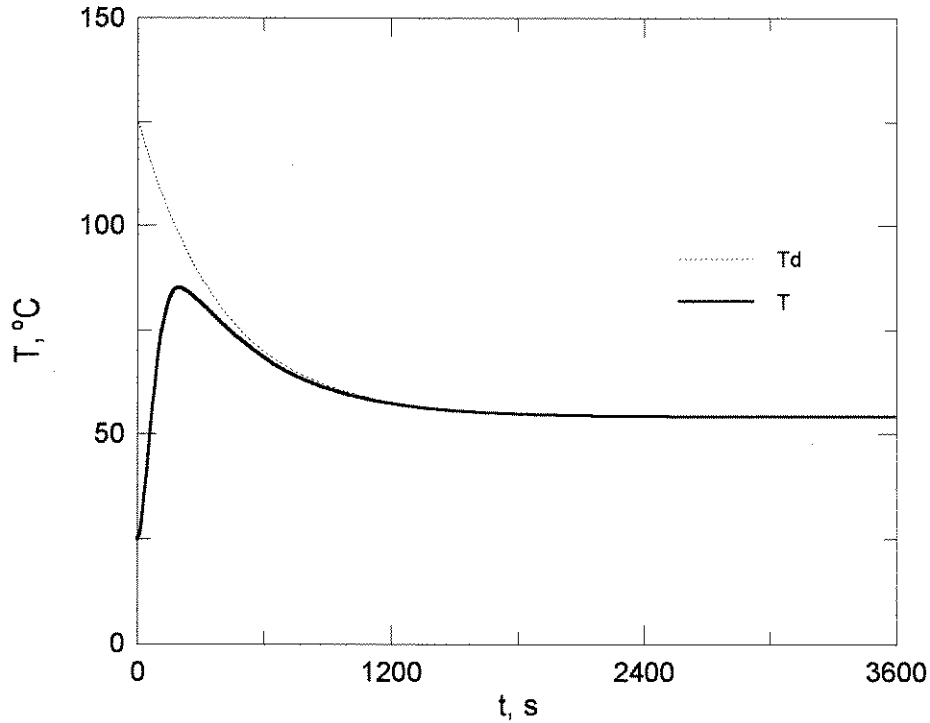


(a) Variável controlada.

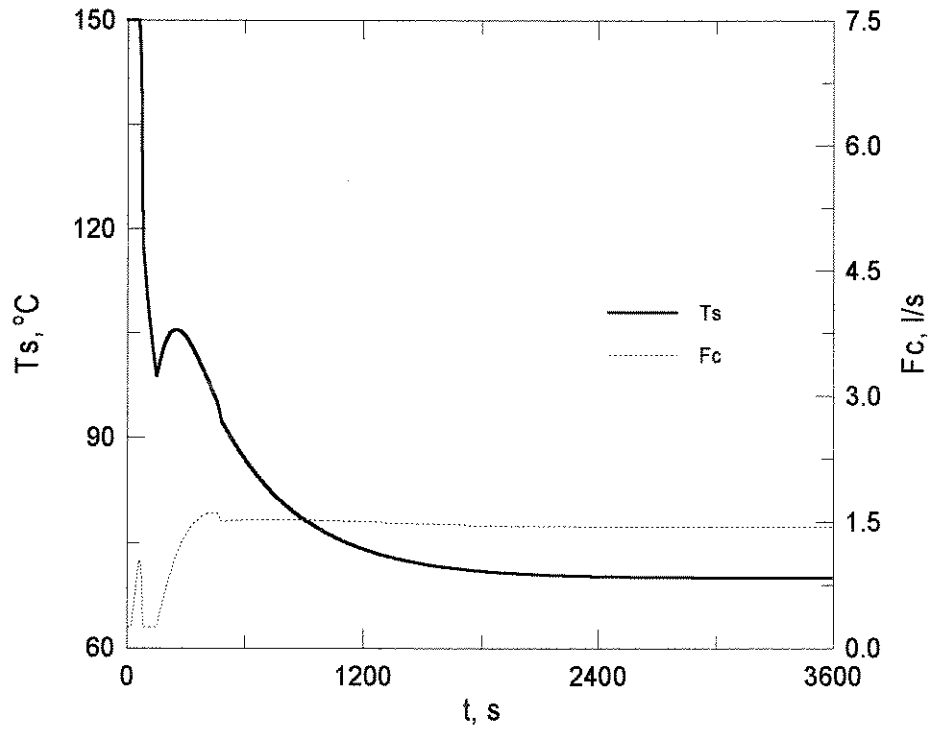


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.5. Resultados da simulação para $NE=2$, $\tau=10$ s e $N=2$.

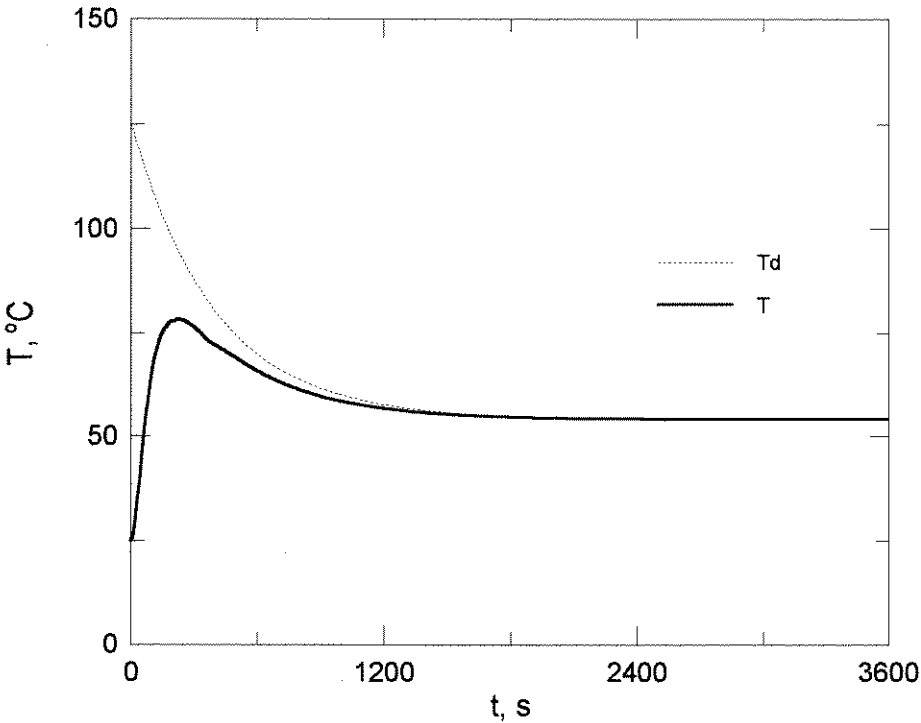


(a) Variável controlada.

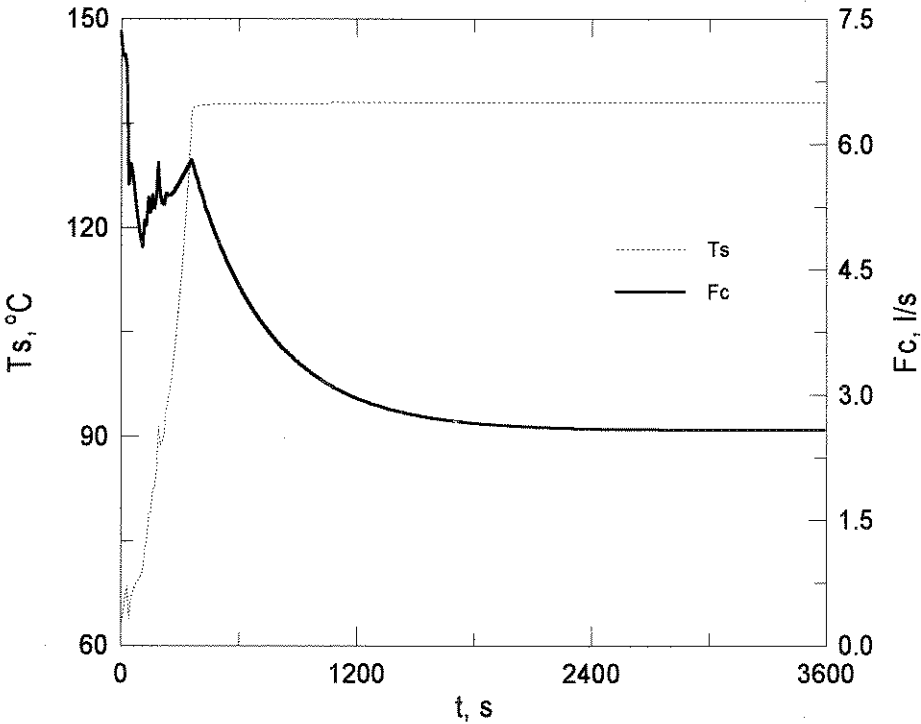


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.6. Resultados da simulação para $NE=2$, $\tau=10$ s e $N=3$.

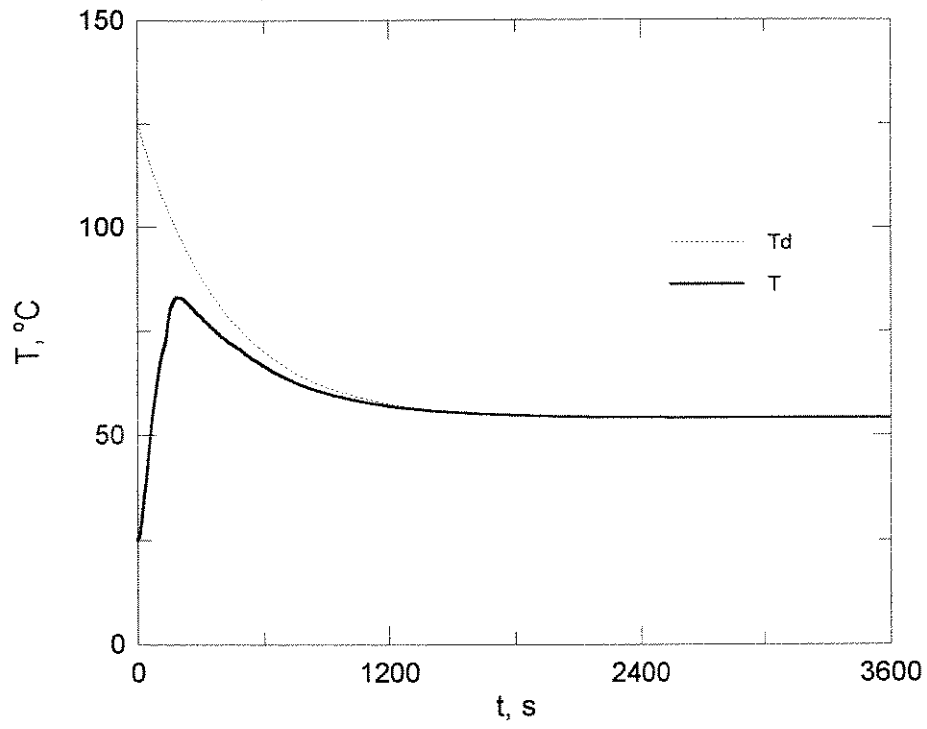


(a) Variável controlada.

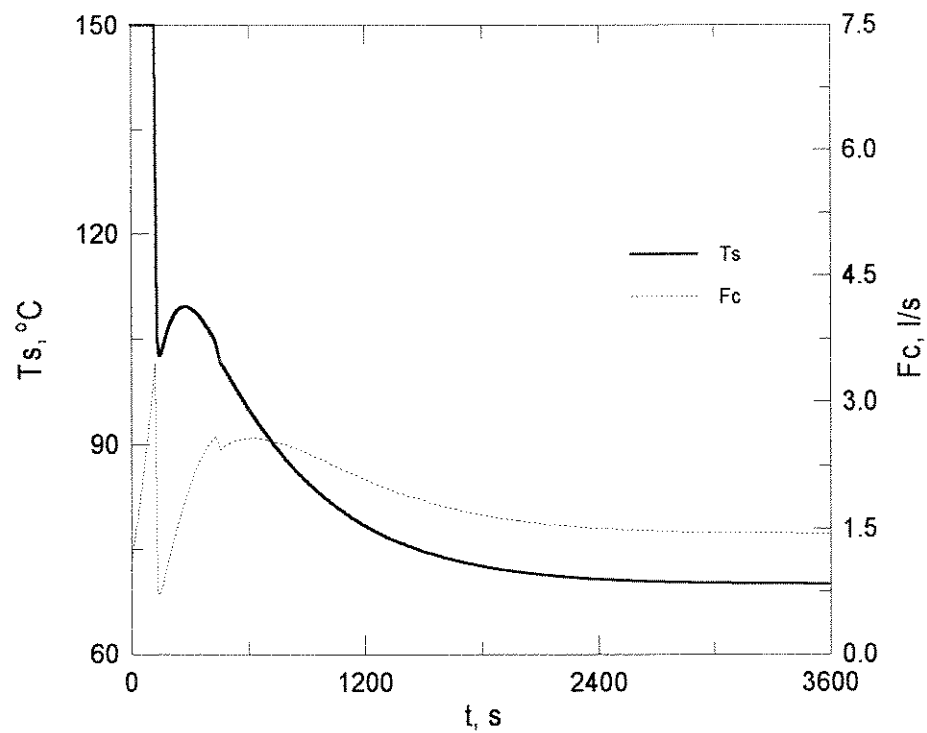


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.7. Resultados da simulação para $NE=3$, $\tau=10$ s e $N=1$.

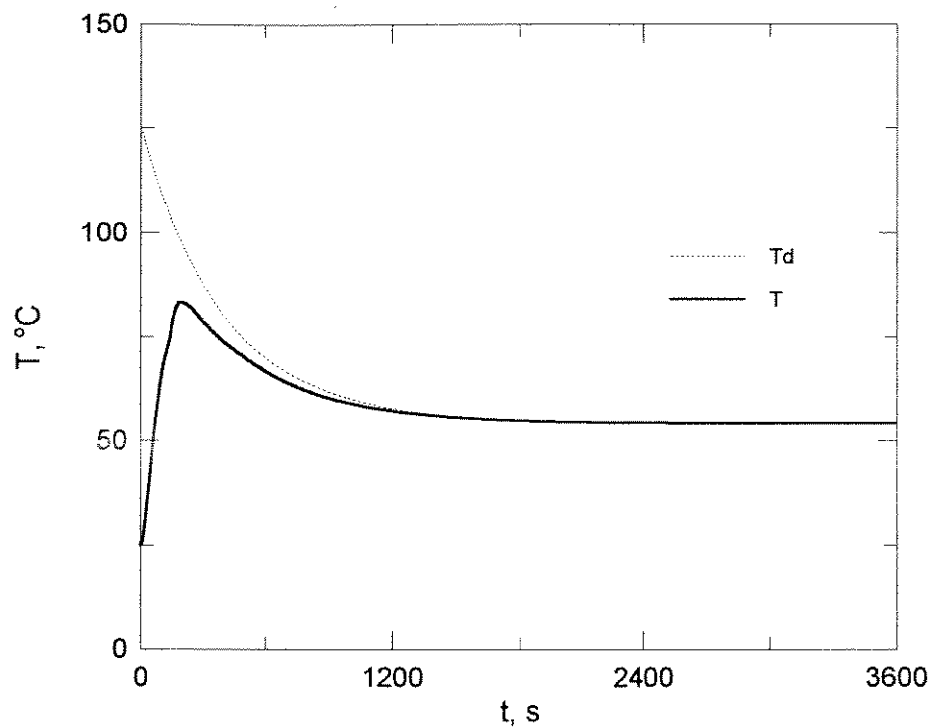


(a) Variável controlada.

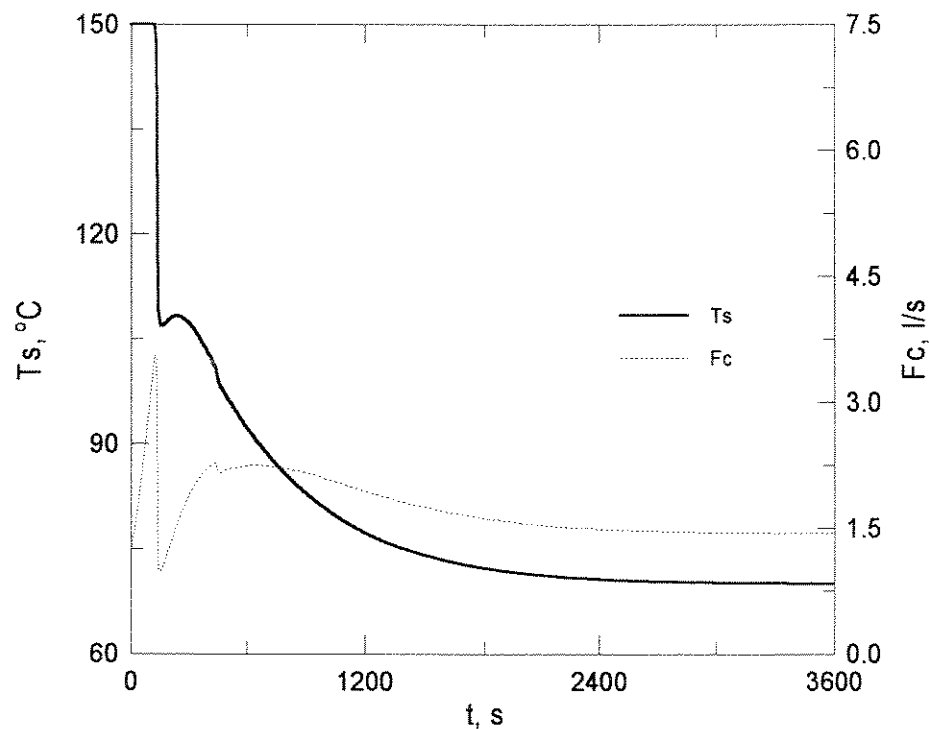


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.8. Resultados da simulação para $NE=3$, $\tau=10$ s e $N=2$.

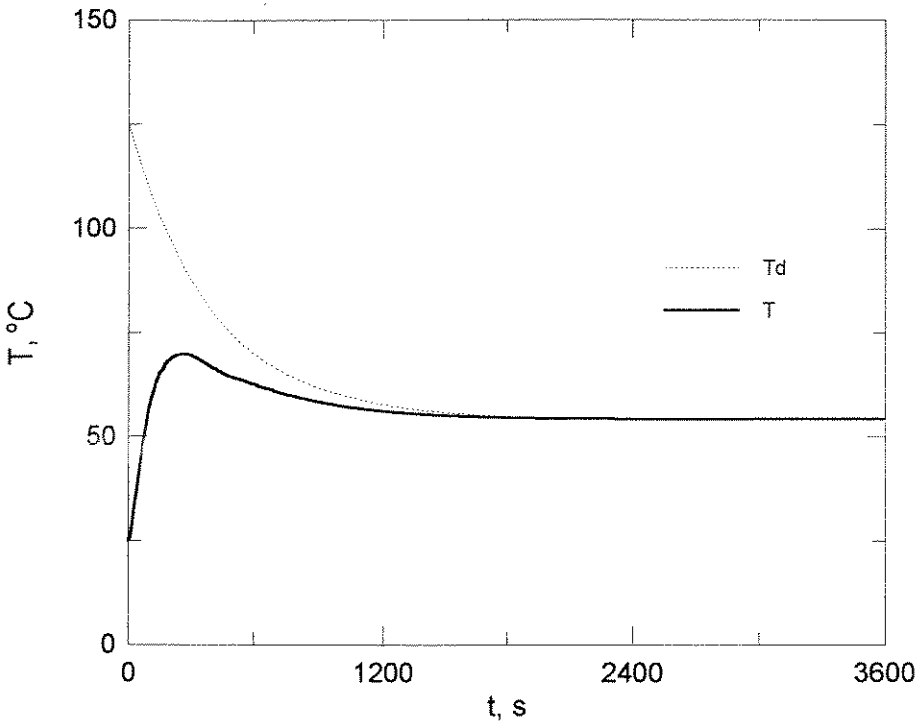


(a) Variável controlada.

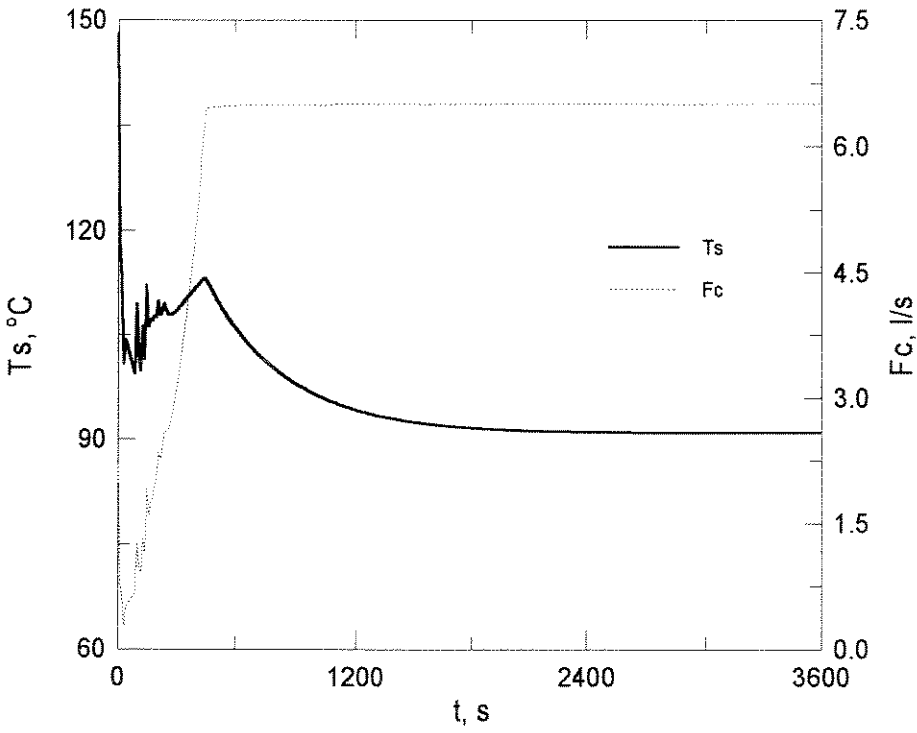


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.9. Resultados da simulação para $NE=3$, $\tau=10$ s e $N=3$.

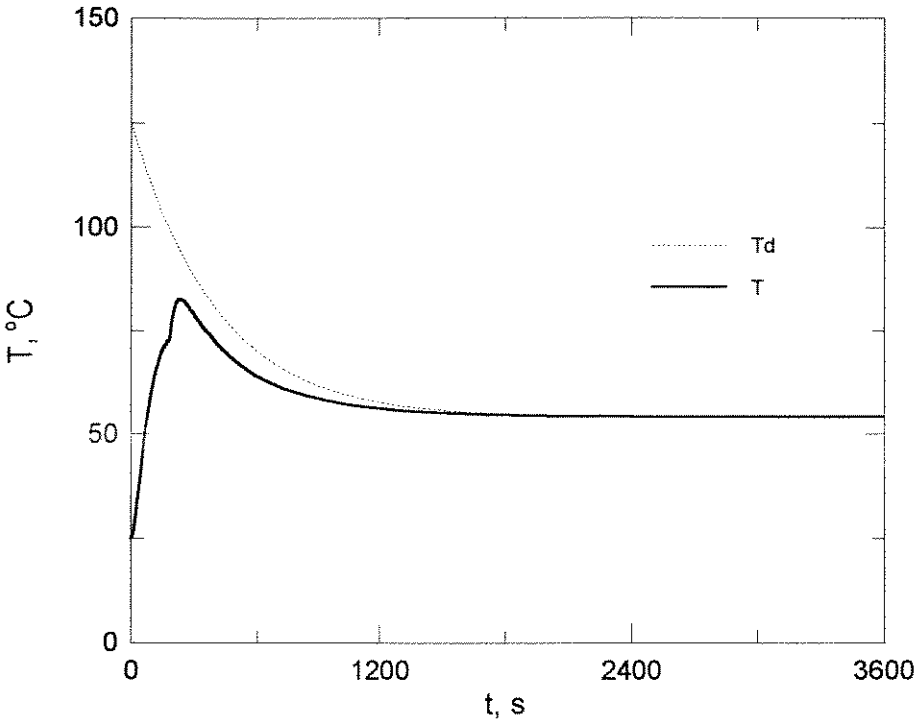


(a) Variável controlada.

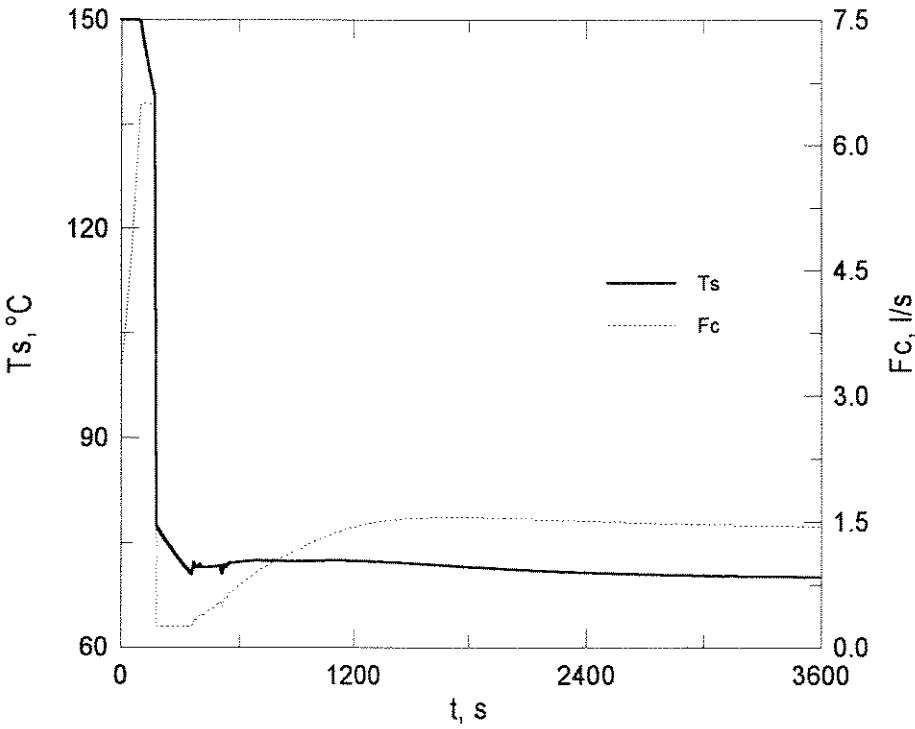


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.10. Resultados da simulação para $NE=5$, $\tau=10$ s e $N=1$.

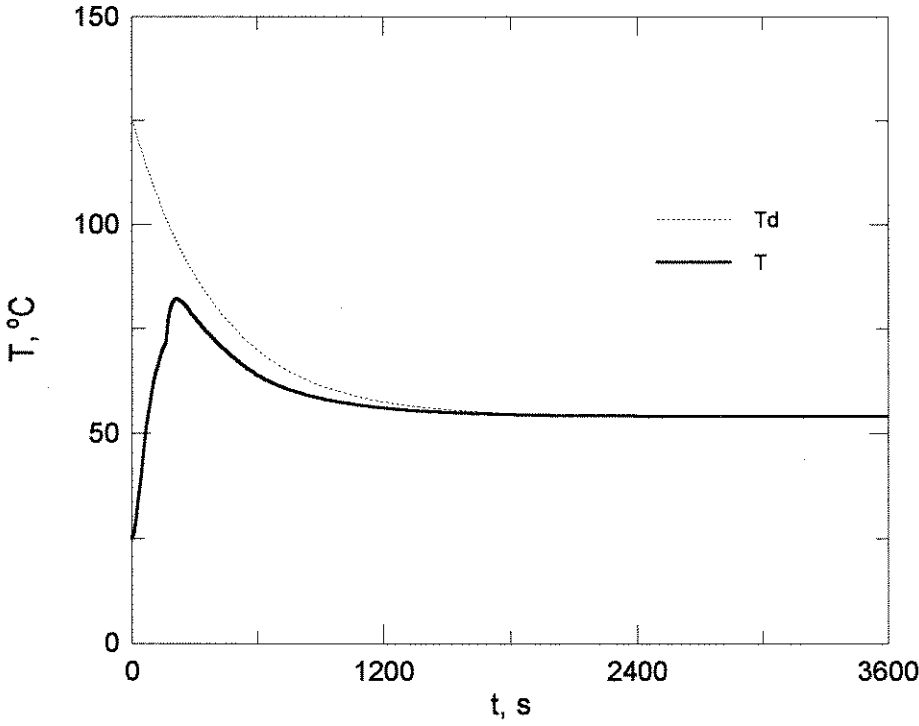


(a) Variável controlada.

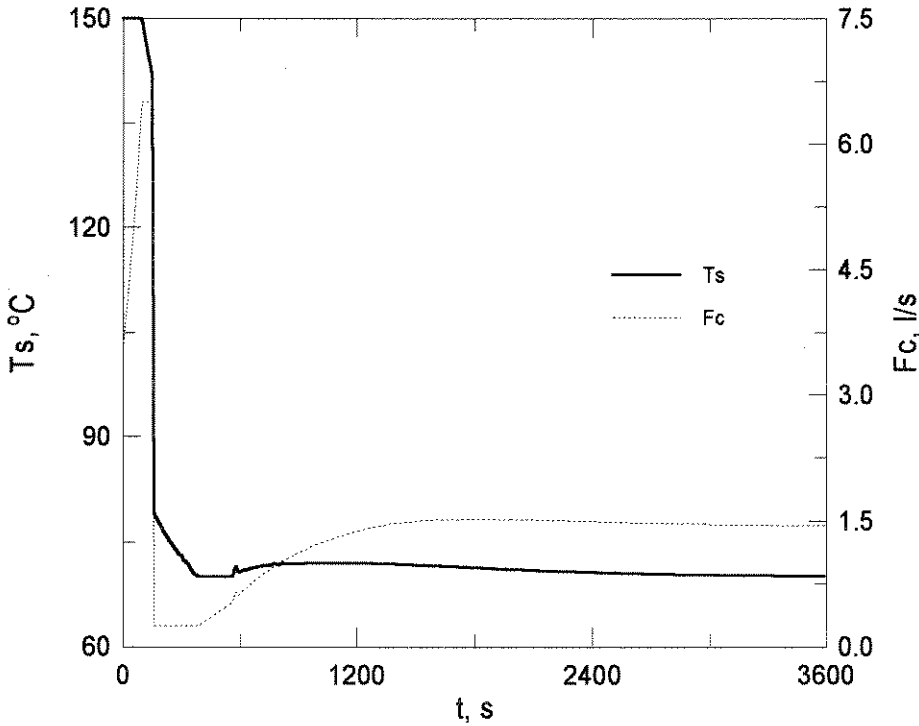


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.11. Resultados da simulação para $NE=5$, $\tau=10$ s e $N=2$.



(a) Variável controlada.



(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.12. Resultados da simulação para $NE=5$, $\tau=10$ s e $N=3$.

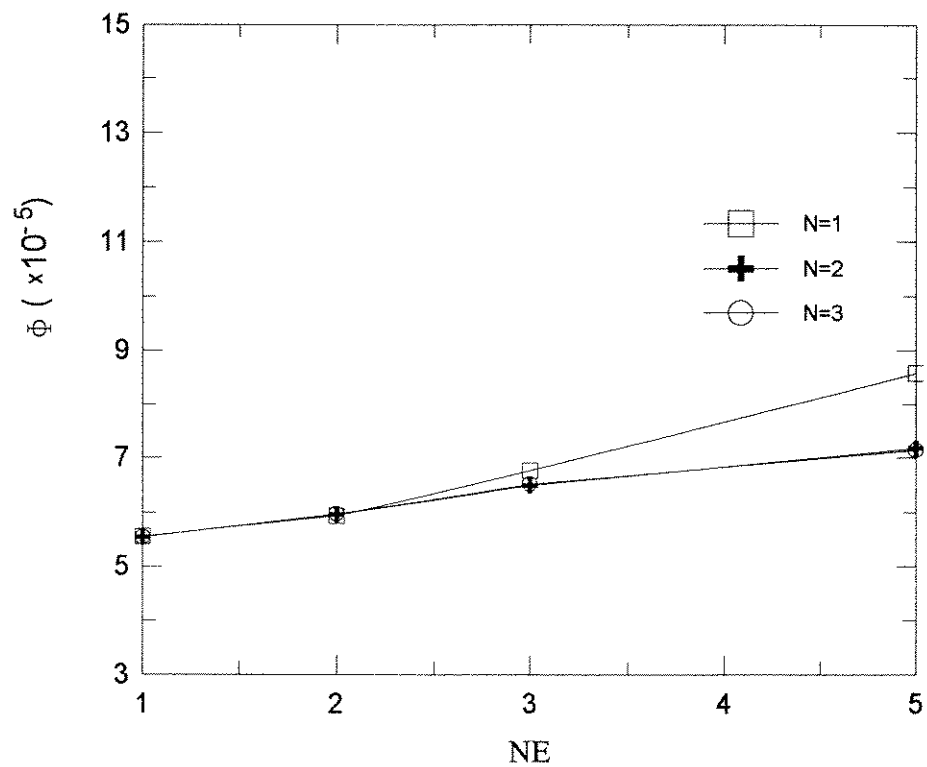
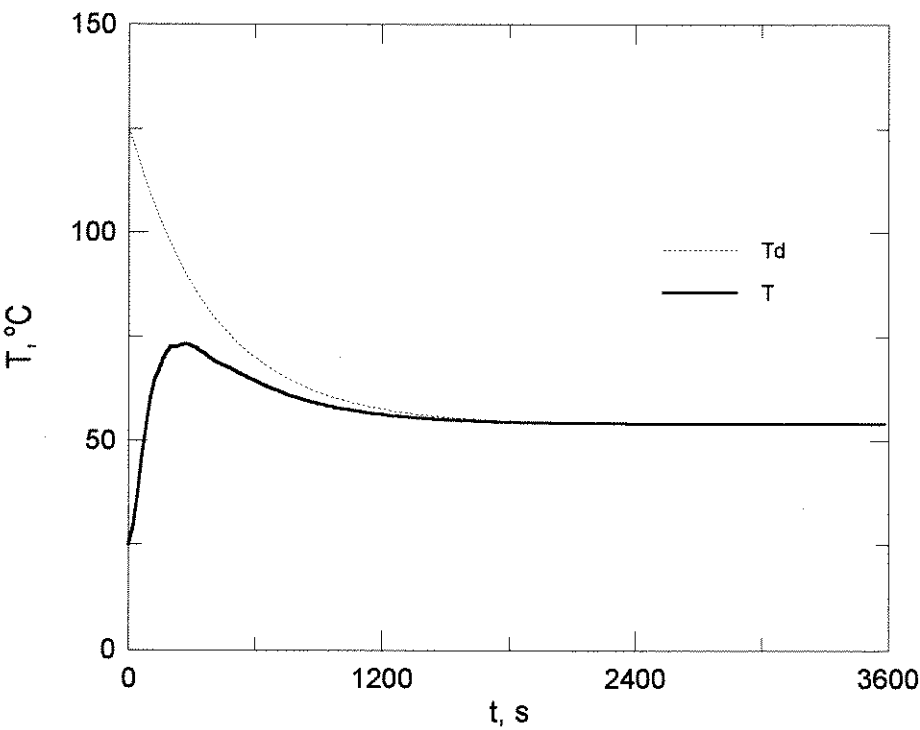
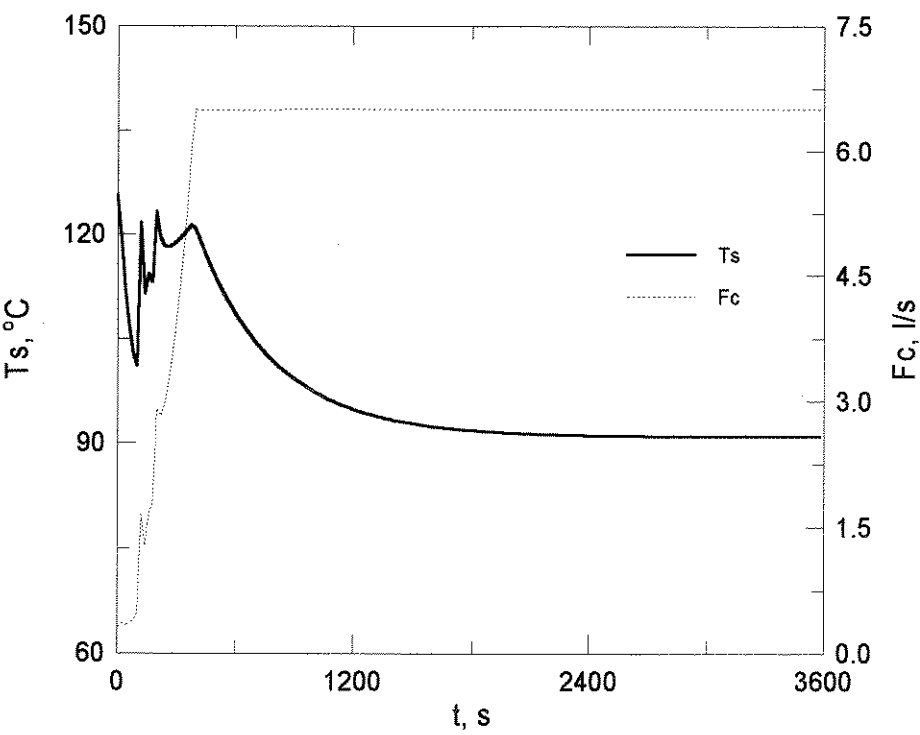


Figura 4.13. Influência de NE e N no desempenho do controlador ($\tau=10$ s).

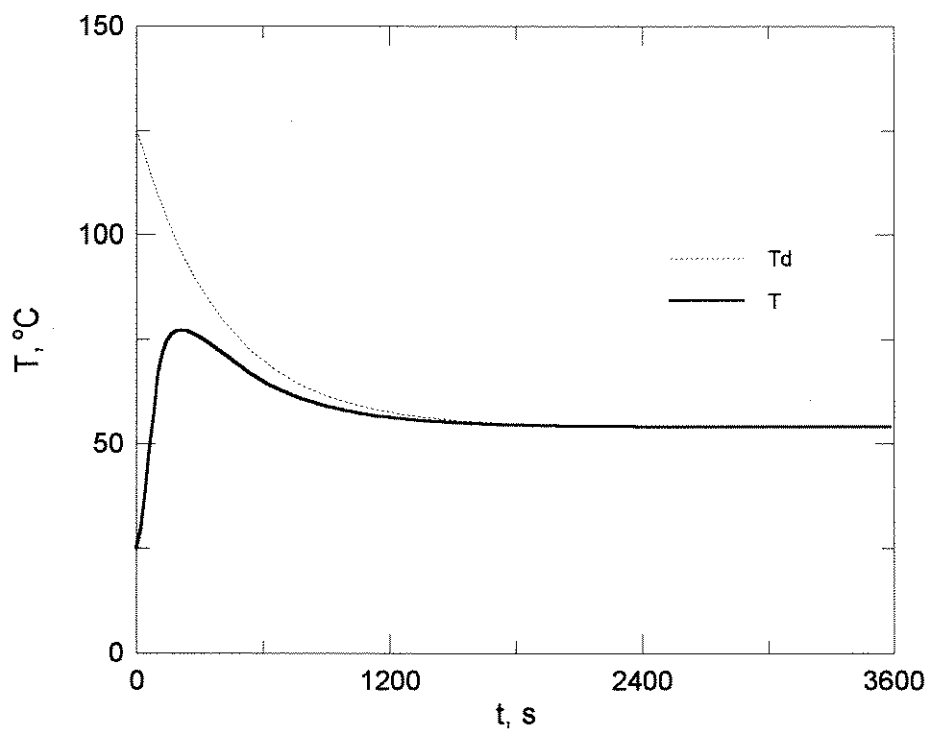


(a) Variável controlada.

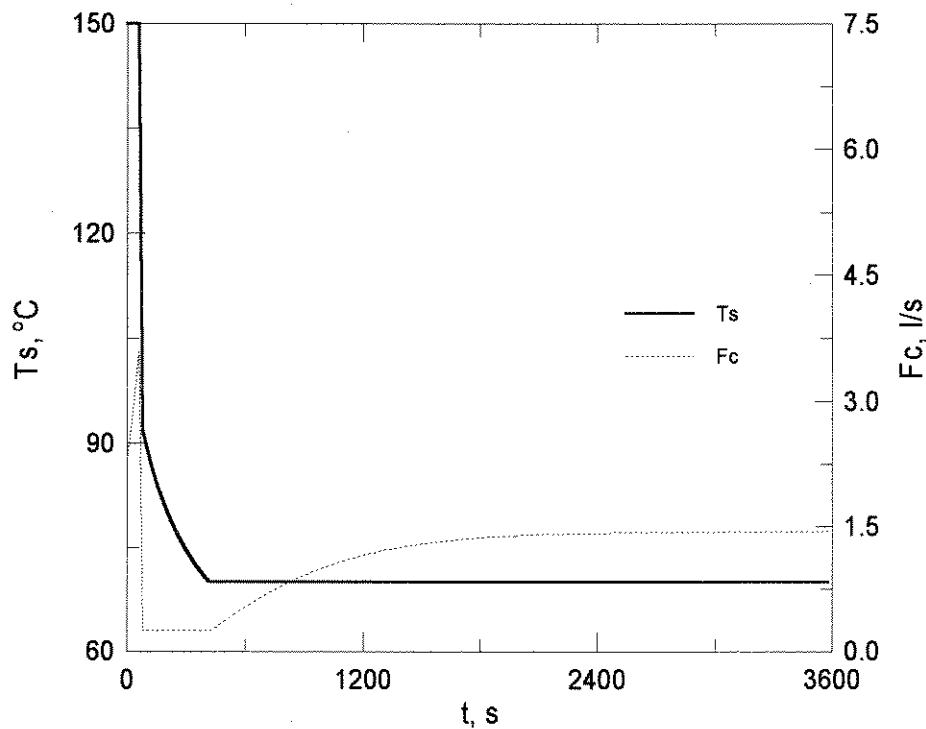


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.14. Resultados da simulação para $NE=1$, $\tau=20$ s e $N=1$.

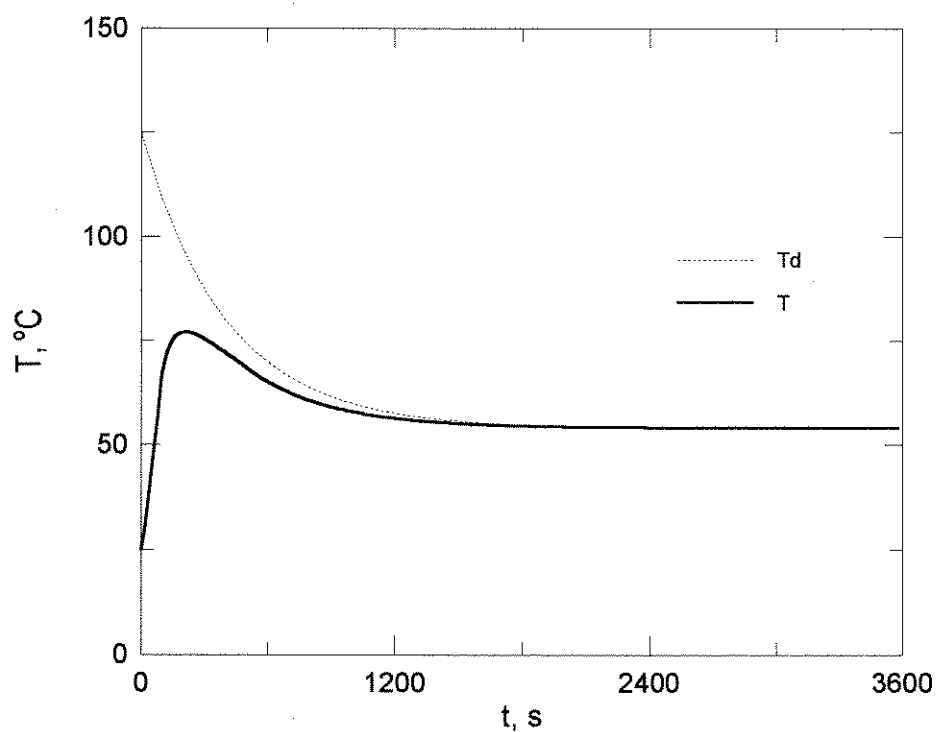


(a) Variável controlada.

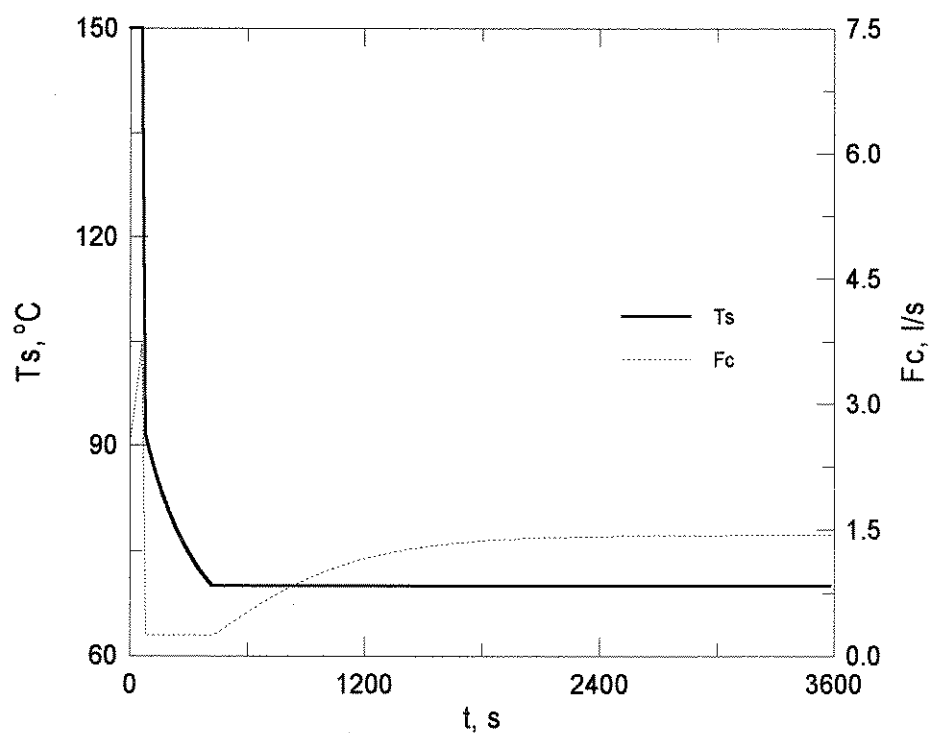


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.15. Resultados da simulação para $NE=1$, $\tau=20$ s e $N=2$.

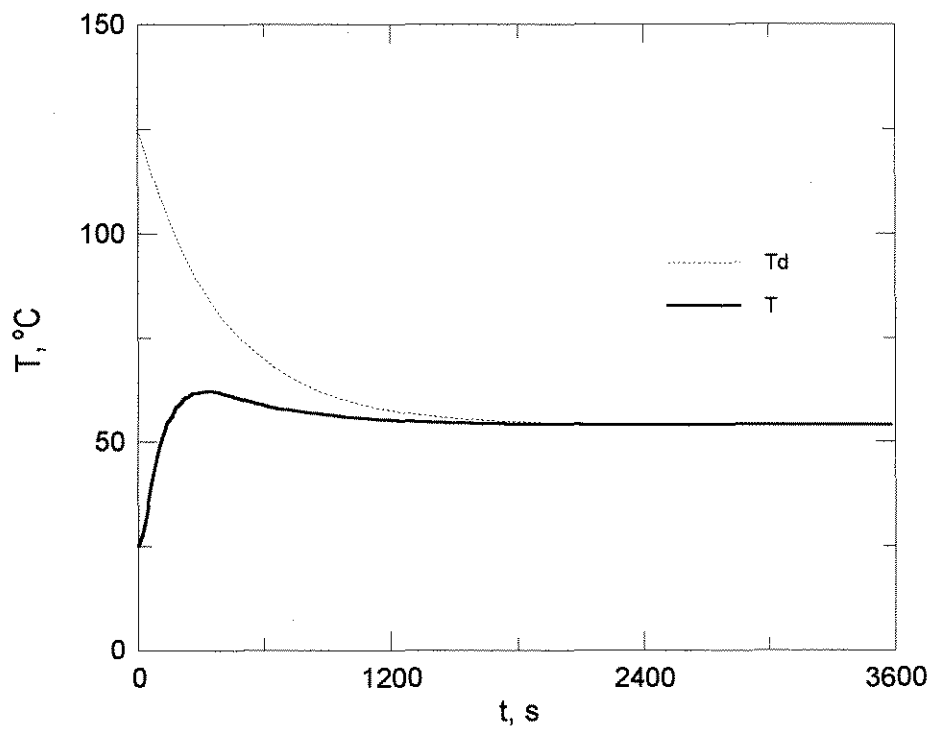


(a) Variável controlada.

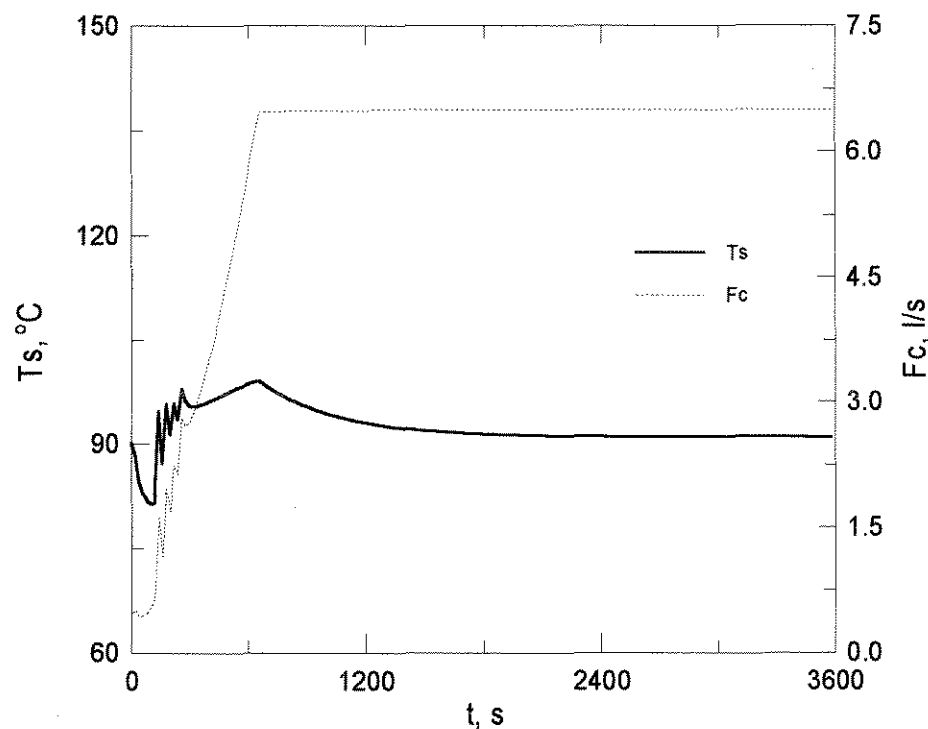


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.16. Resultados da simulação para $NE=1$, $\tau=20$ s e $N=3$.

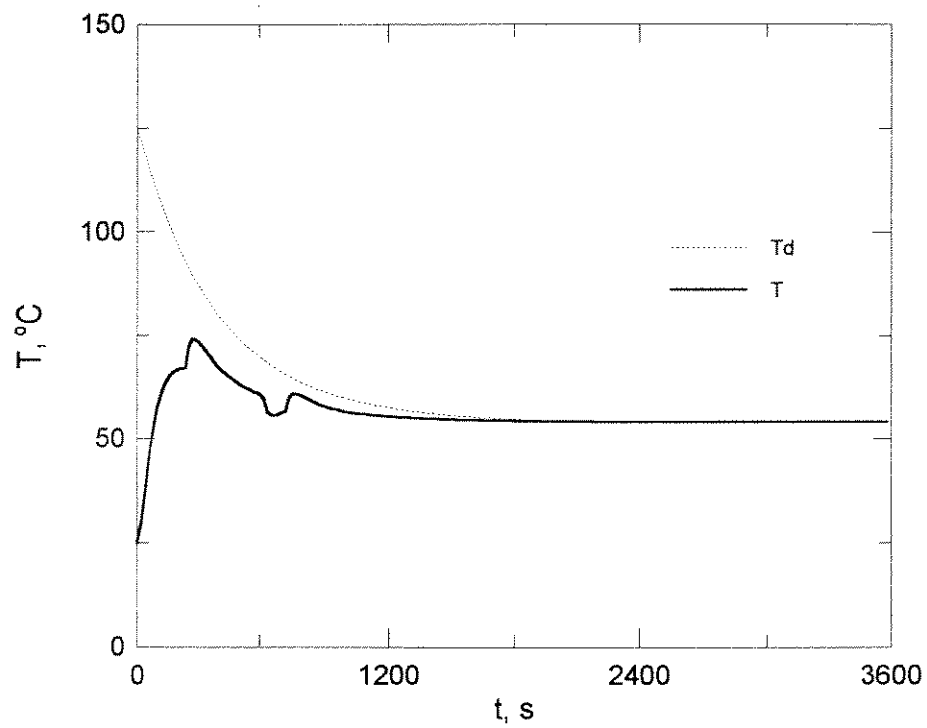


(a) Variável controlada.

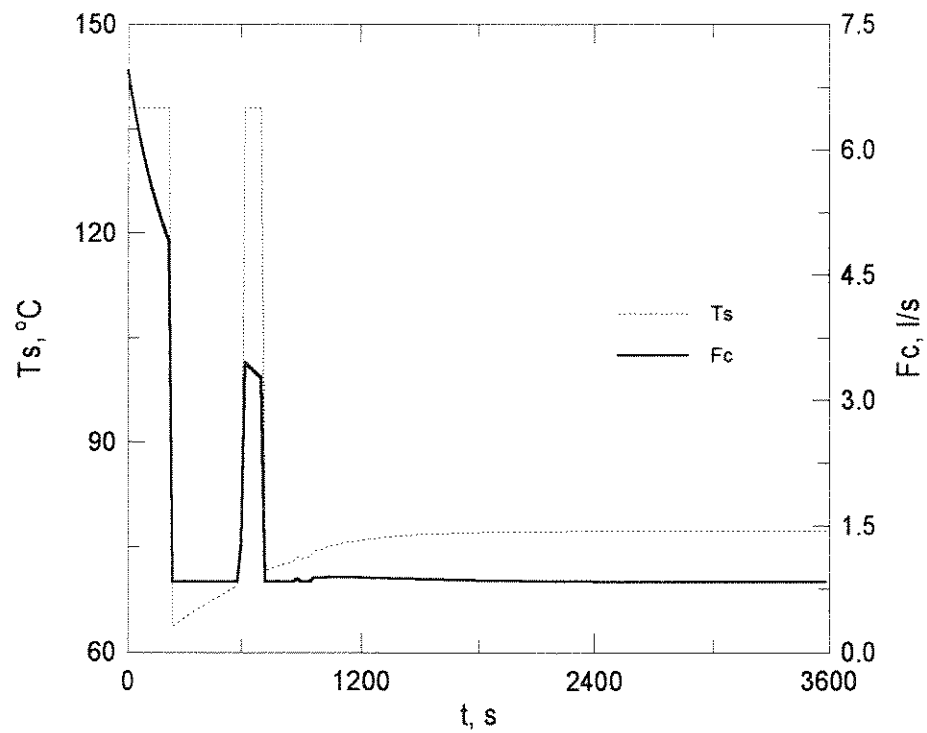


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.17. Resultados da simulação para $NE=2$, $\tau=20\text{ s}$ e $N=1$.

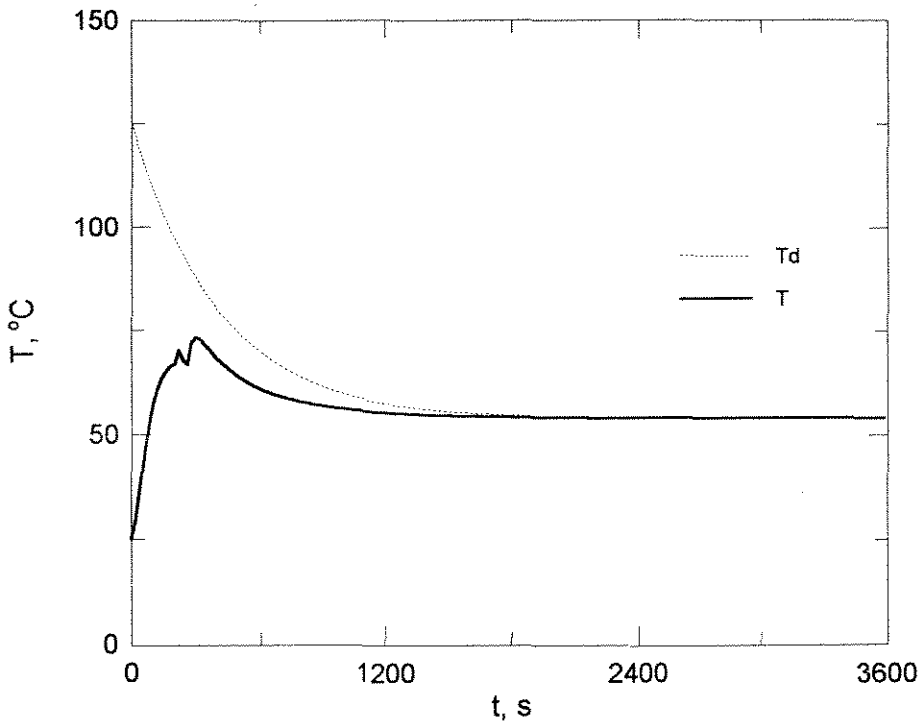


(a) Variável controlada.

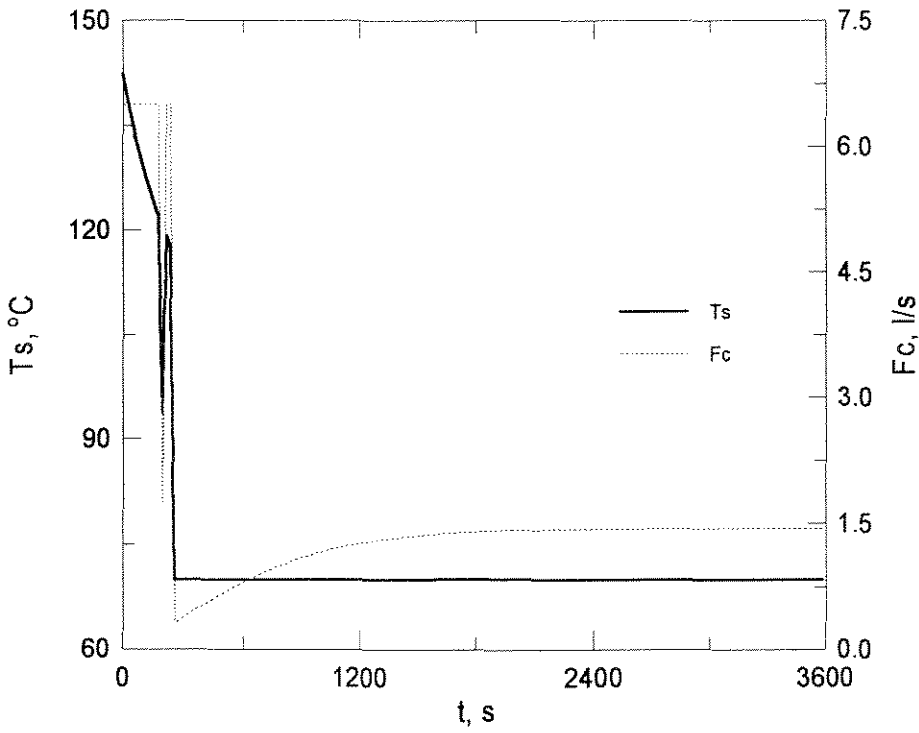


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.18. Resultados da simulação para $NE=2$, $\tau=20$ s e $N=2$.

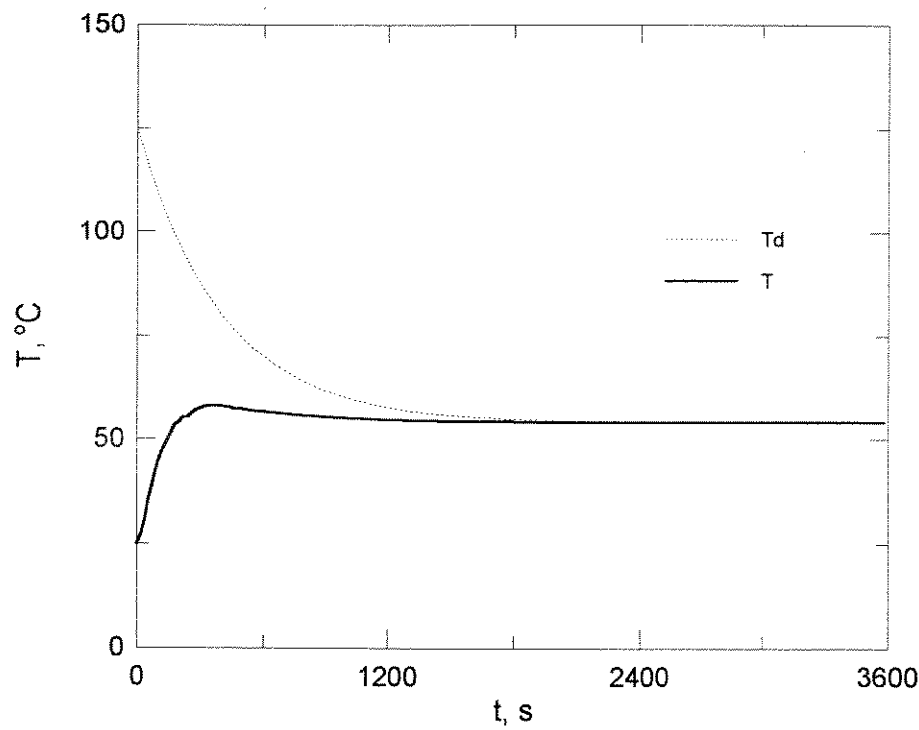


(a) Variável controlada.

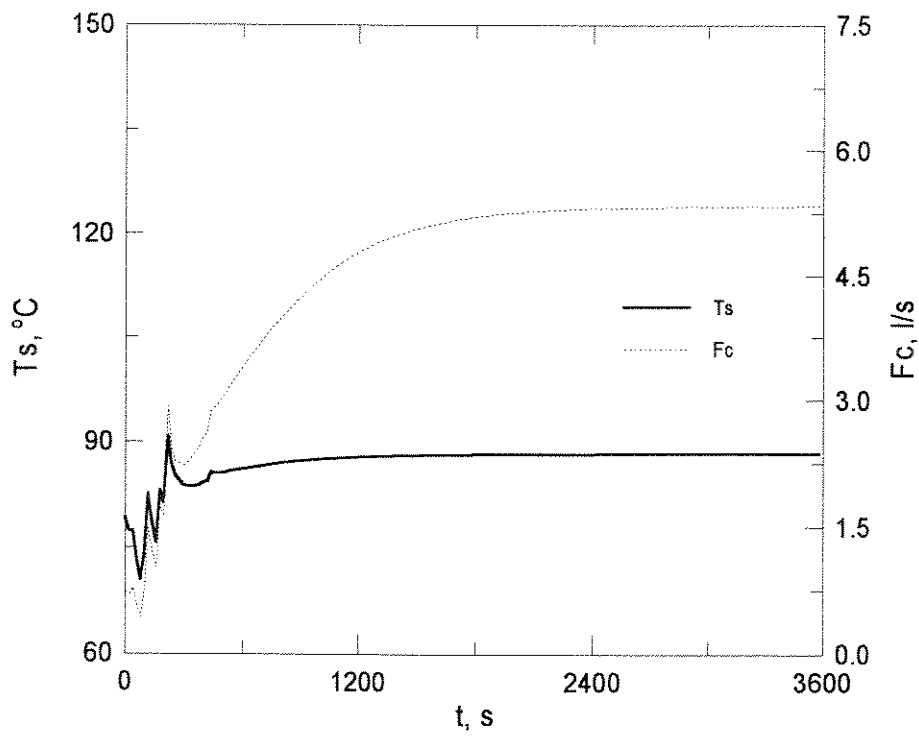


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.19. Resultados da simulação para $NE=2$, $\tau=20$ s e $N=3$.

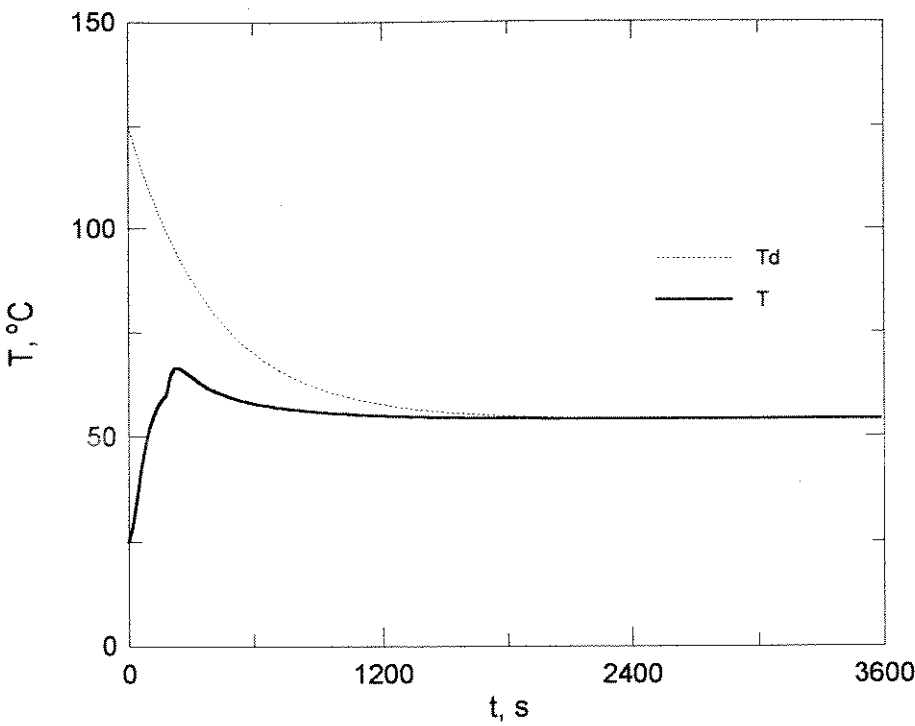


(a) Variável controlada.

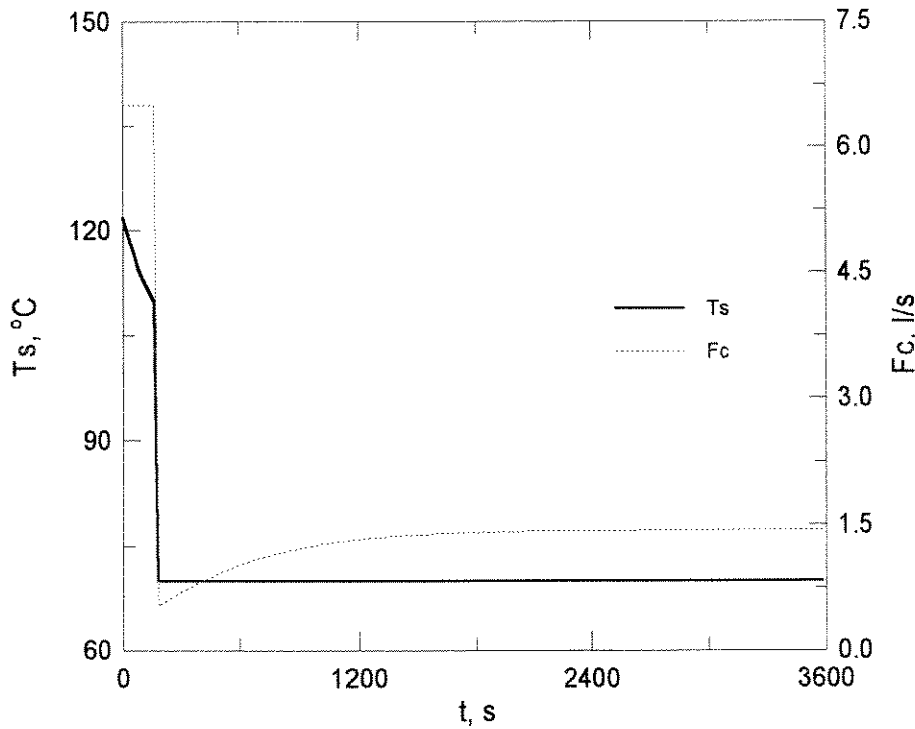


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.20. Resultados da simulação para $NE=3$, $\tau=20$ s e $N=1$.

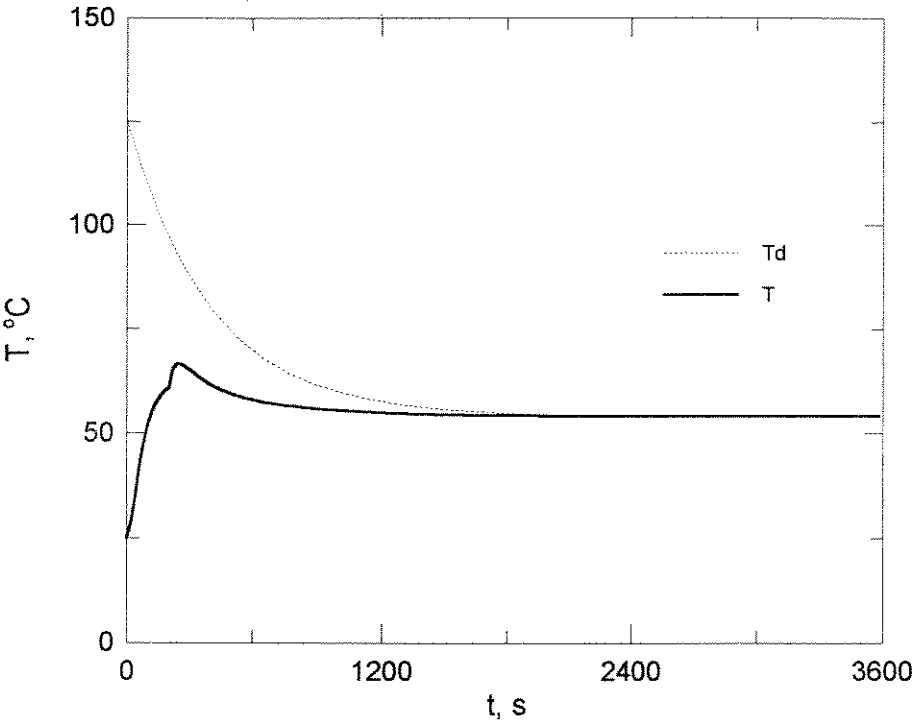


(a) Variável controlada.

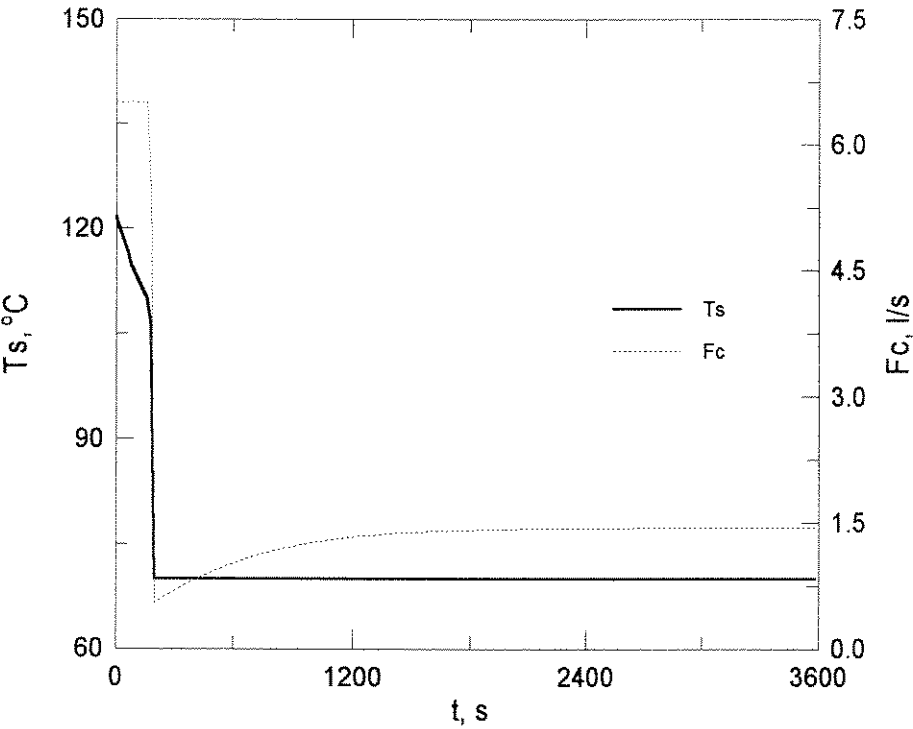


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.21. Resultados da simulação para $NE=3$, $\tau=20$ s e $N=2$.

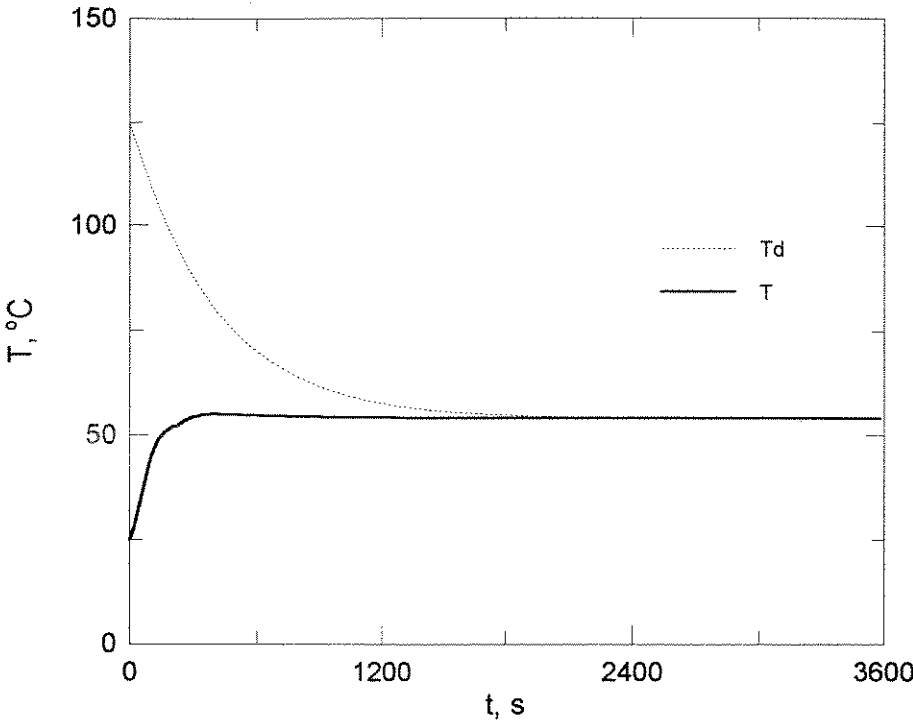


(a) Variável controlada.

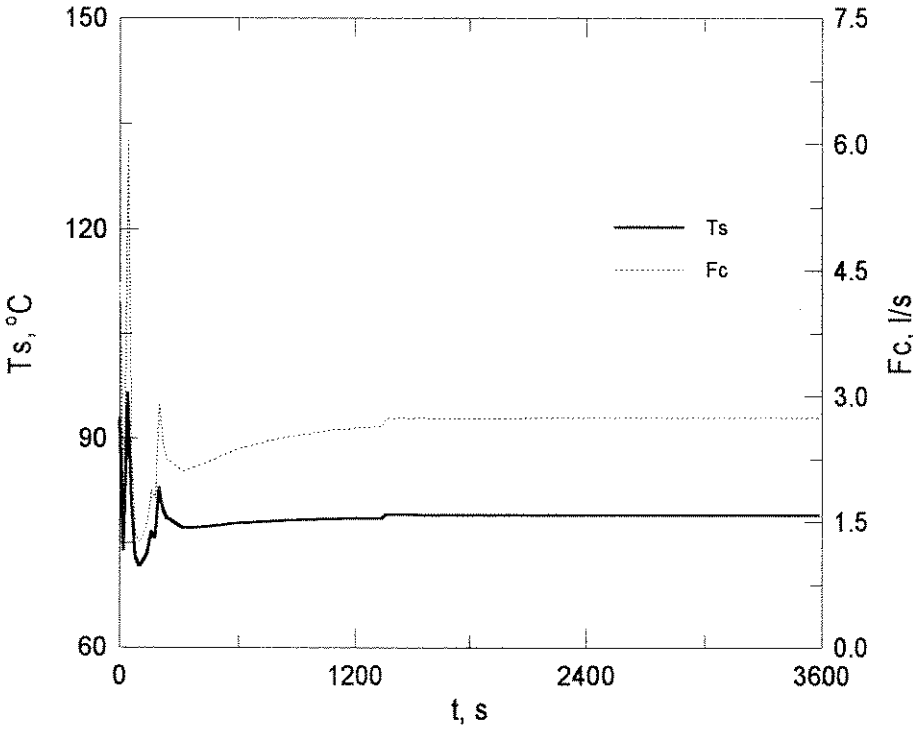


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.22. Resultados da simulação para $NE=3$, $\tau=20$ s e $N=3$.

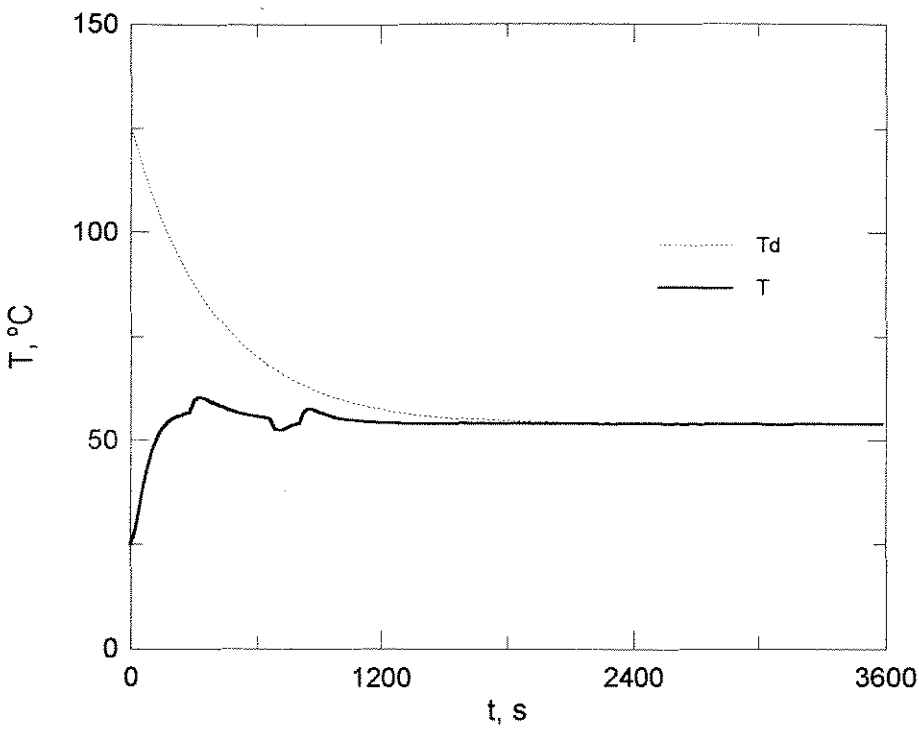


(a) Variável controlada.

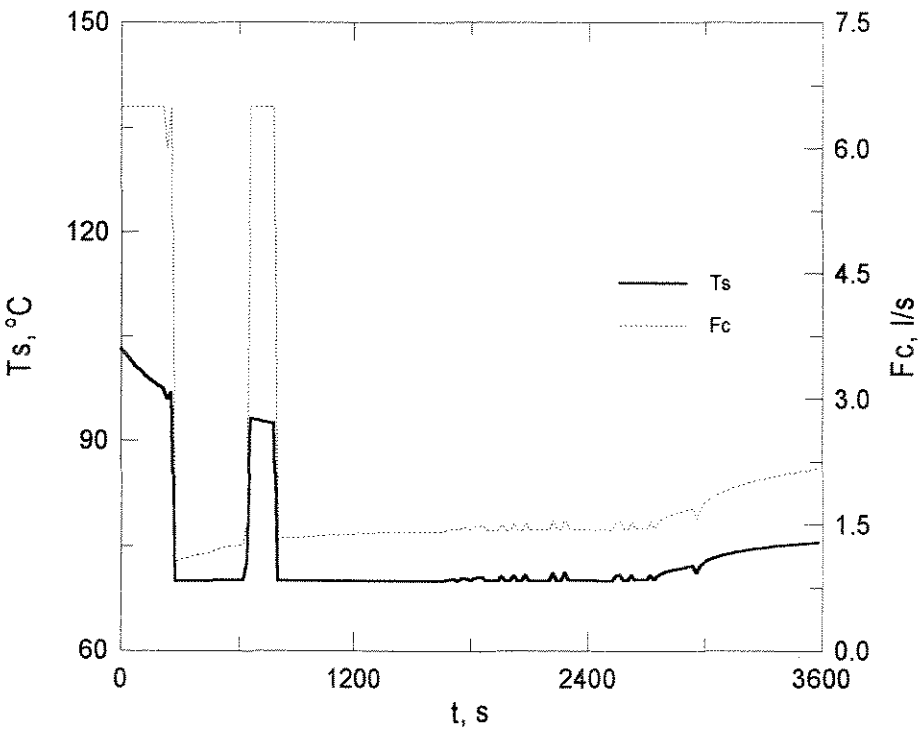


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.23. Resultados da simulação para $NE=5$, $\tau=20$ s e $N=1$.

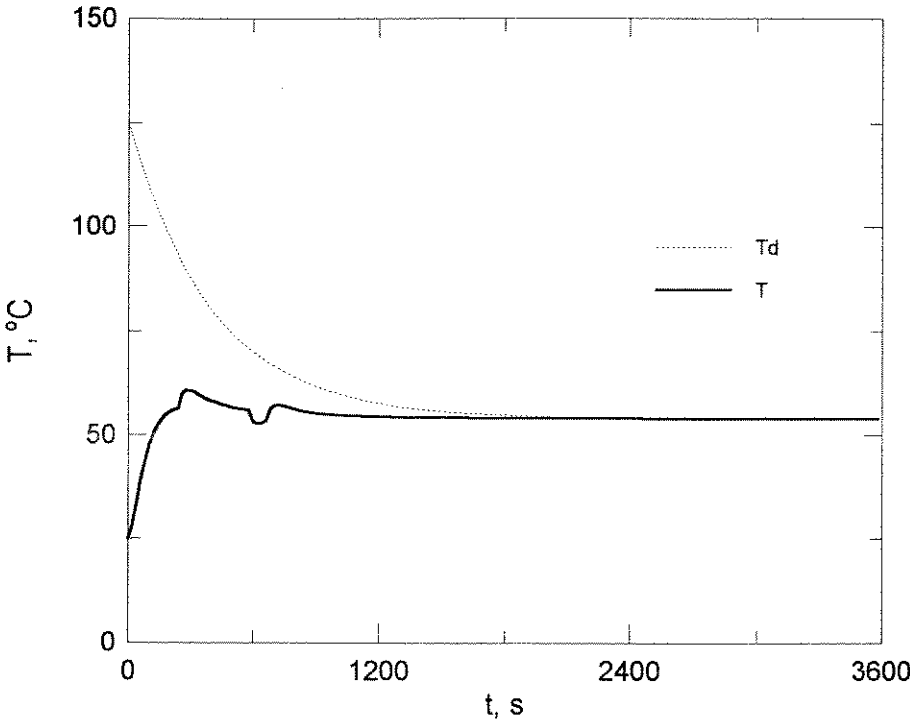


(a) Variável controlada.

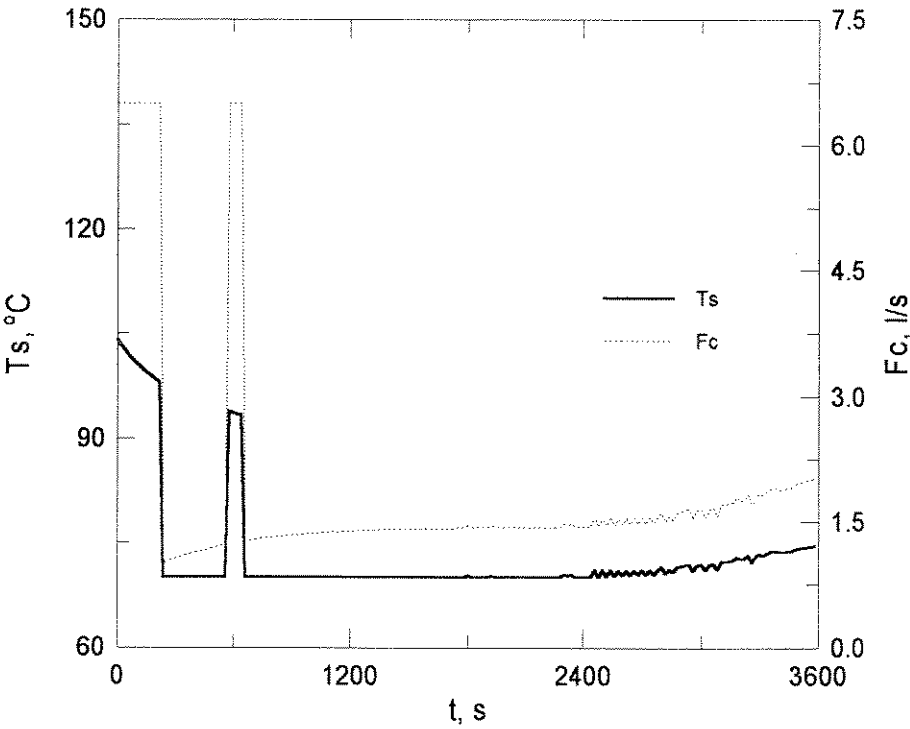


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.24. Resultados da simulação para $NE=5$, $\tau=20$ s e $N=2$.



(a) Variável controlada.



(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.25. Resultados da simulação para $NE=5$, $\tau=20$ s e $N=3$.

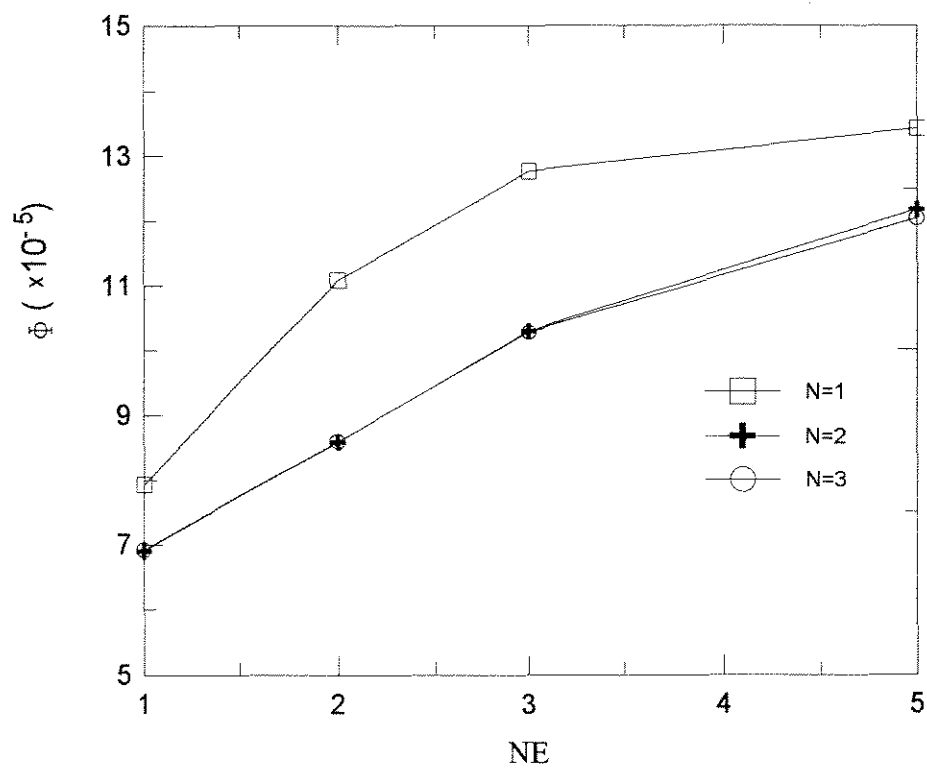
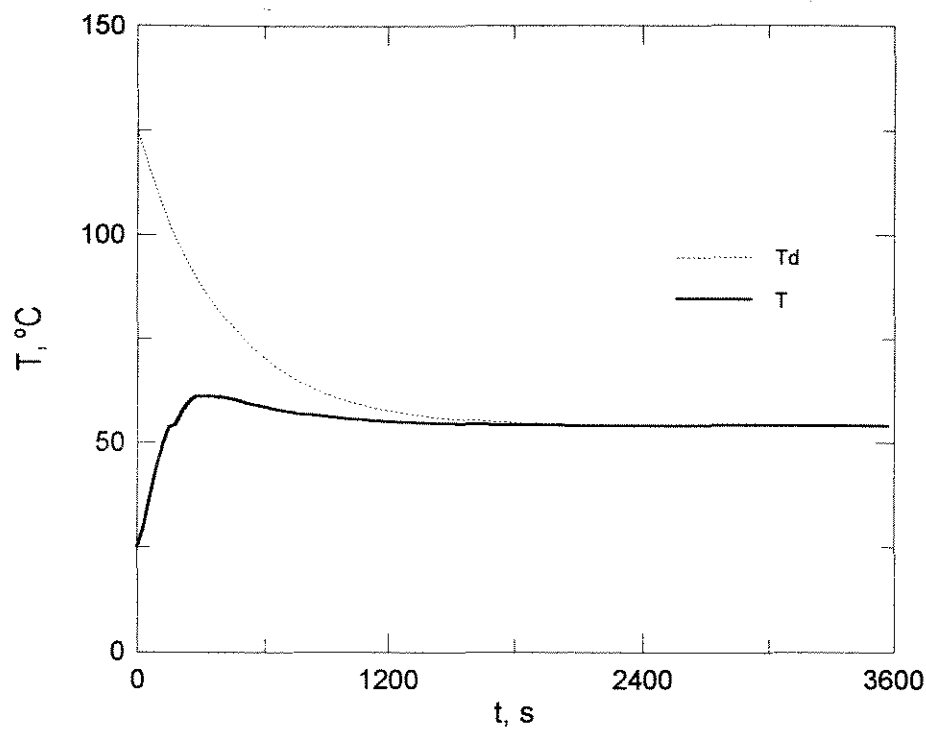
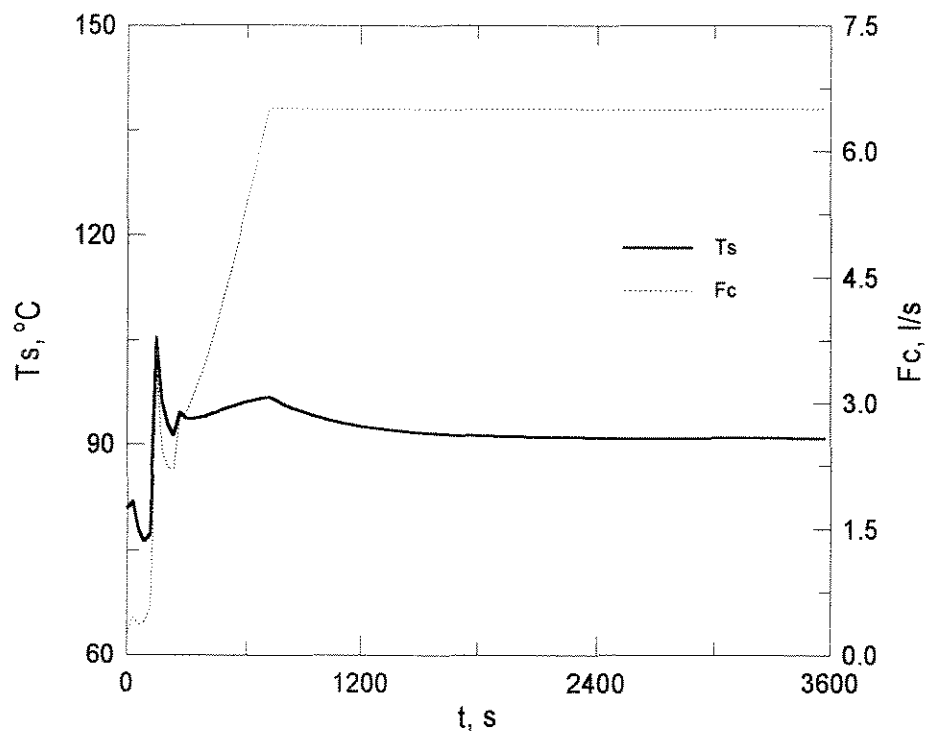


Figura 4.26. Influência de NE e N no desempenho do controlador ($\tau=20$ s).

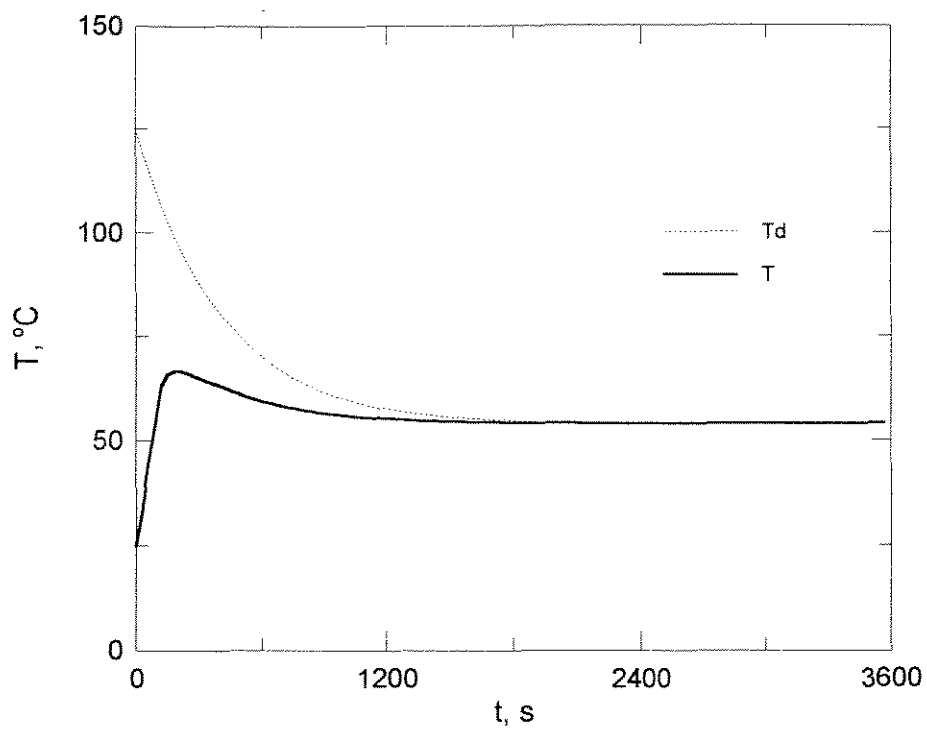


(a) Variável controlada.

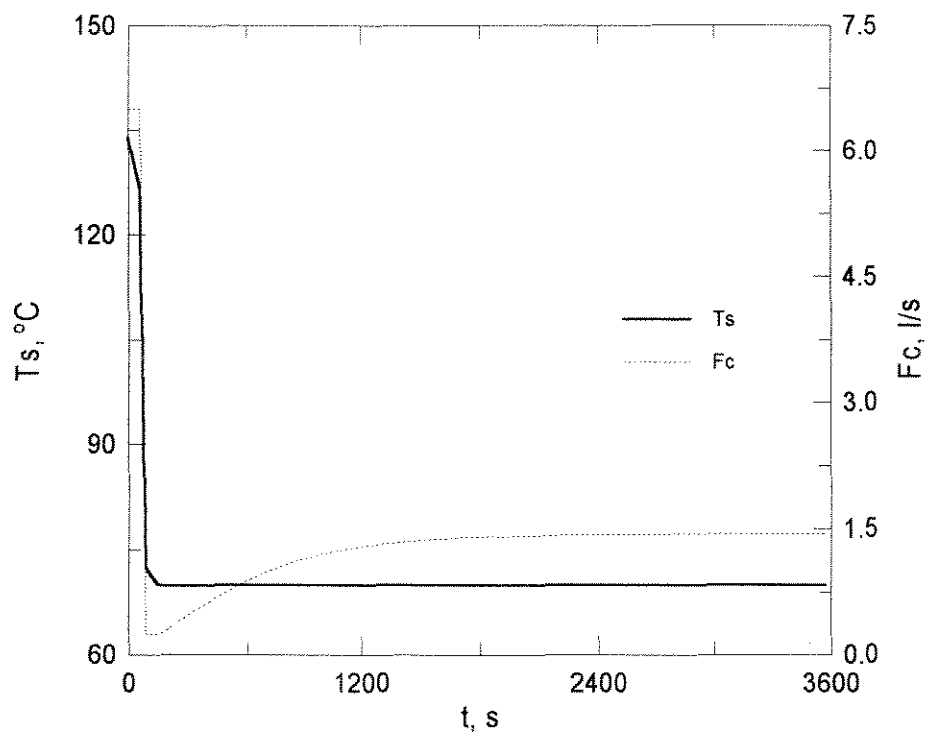


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.27. Resultados da simulação para $NE=1$, $\tau=30$ s e $N=1$.

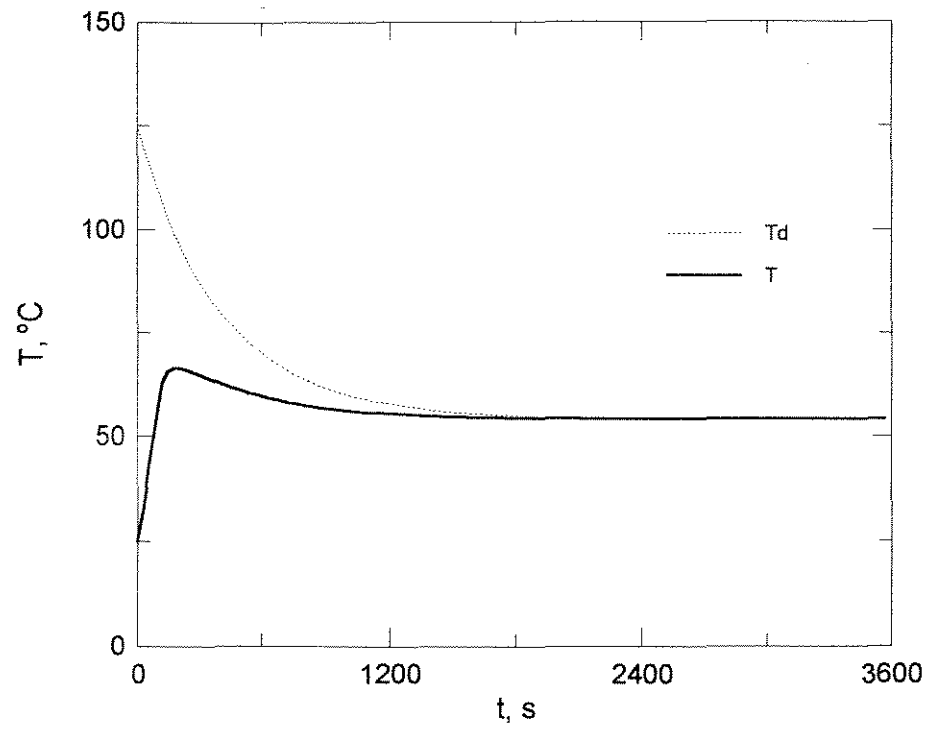


(a) Variável controlada.

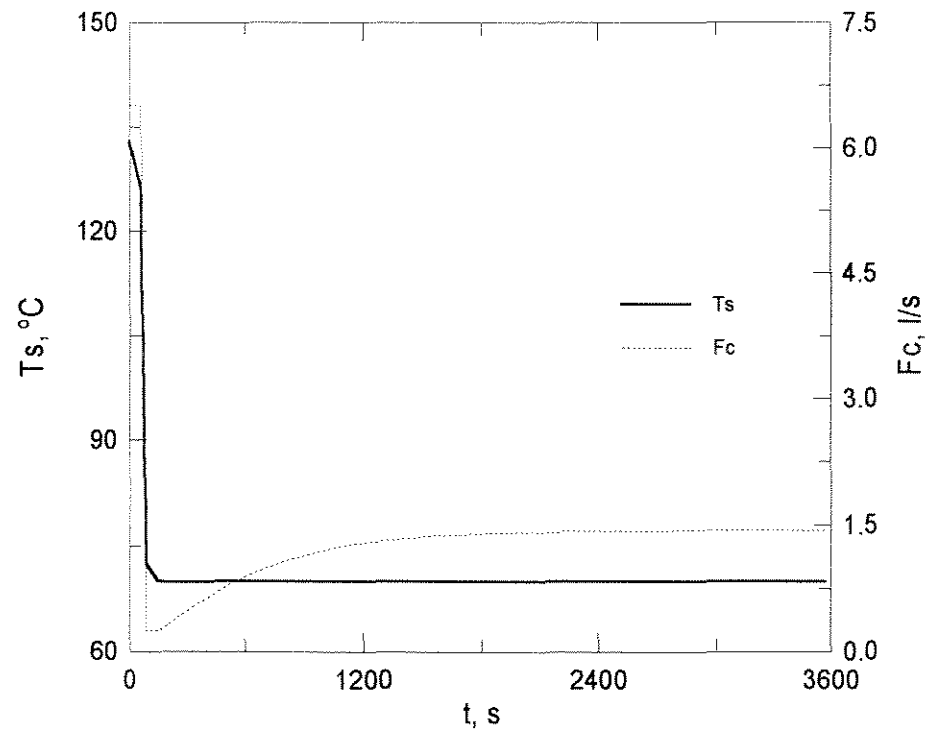


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.28. Resultados da simulação para $NE=1$, $\tau=30\text{ s}$ e $N=2$.

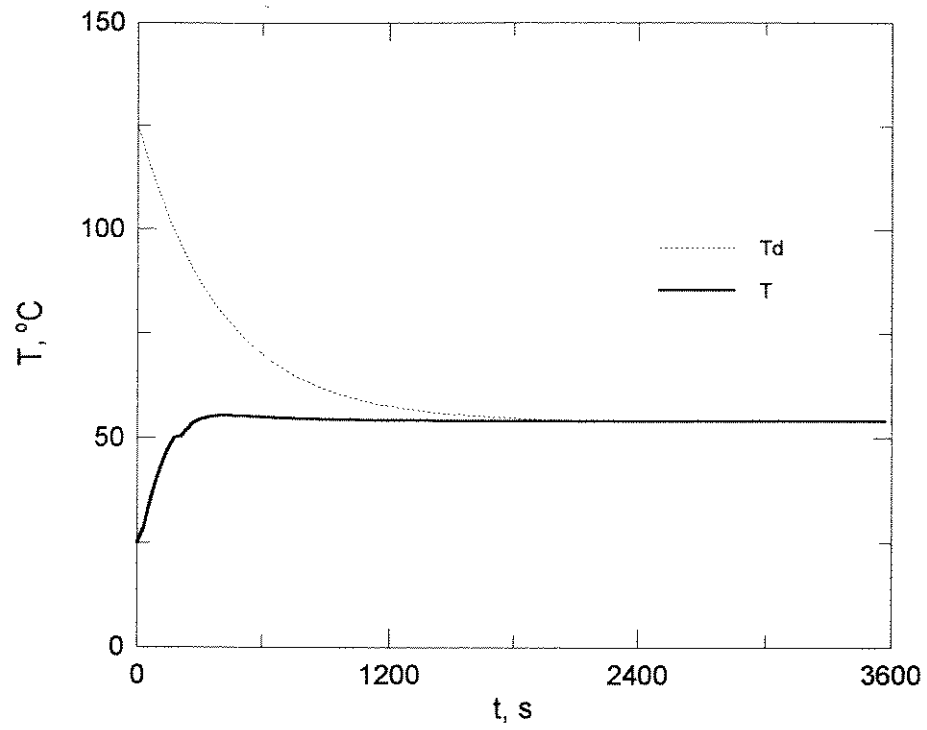


(a) Variável controlada.

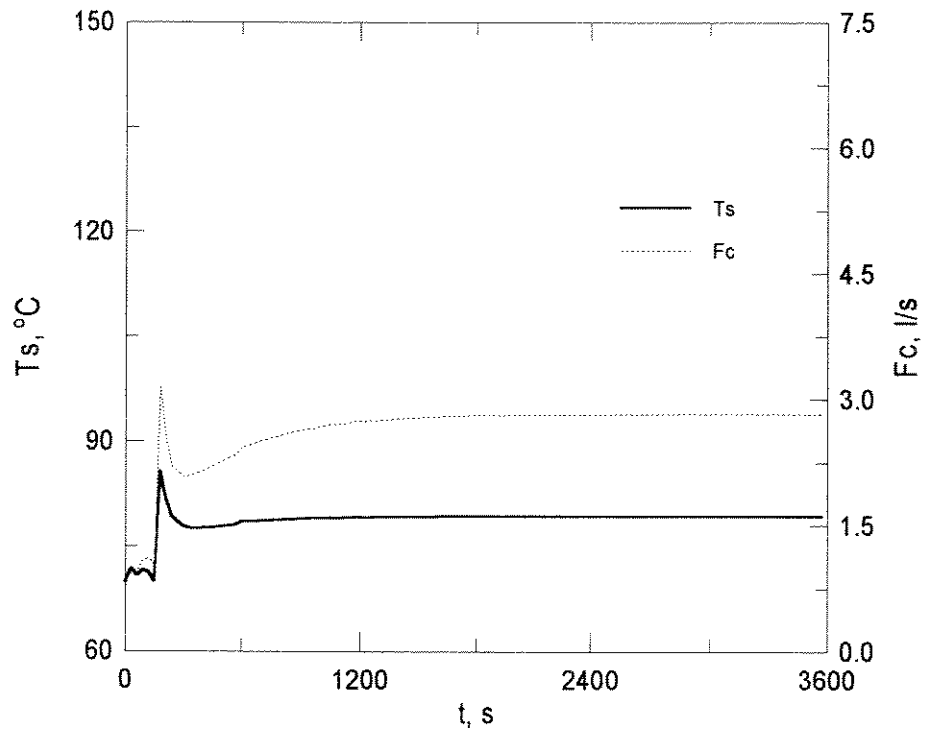


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.29. Resultados da simulação para $NE=1$, $\tau=30 \text{ s}$ e $N=3$.

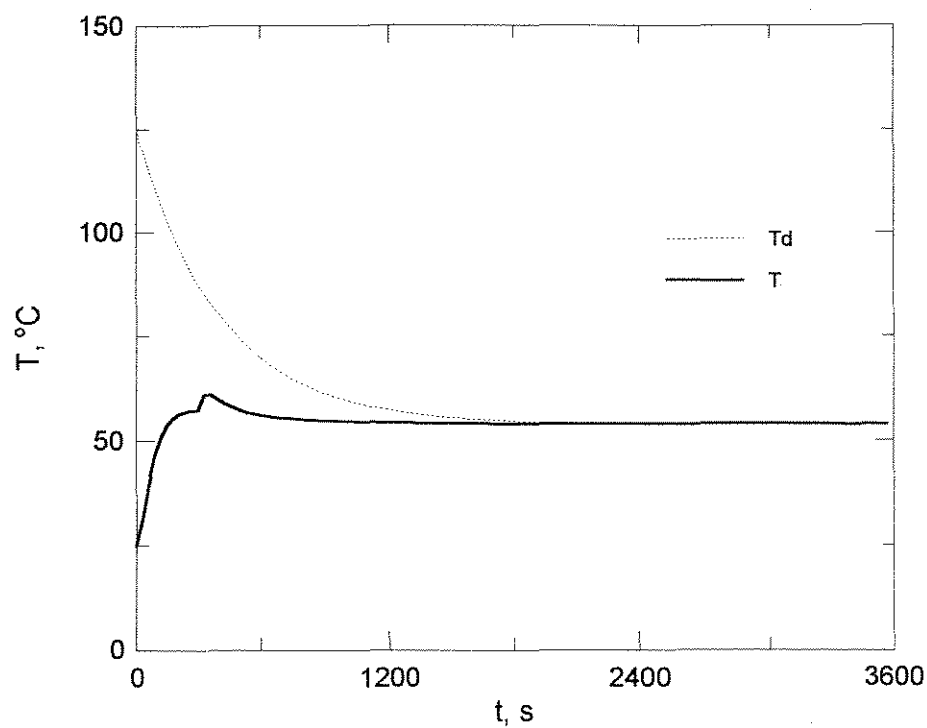


(a) Variável controlada.

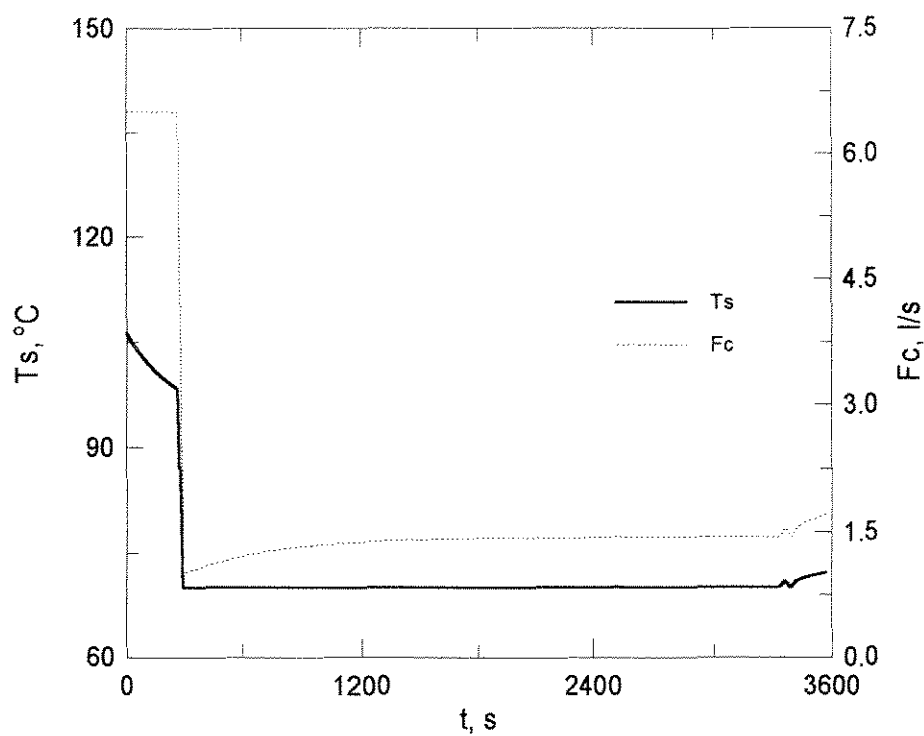


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.30. Resultados da simulação para $NE=2$, $\tau=30 \text{ s}$ e $N=1$.

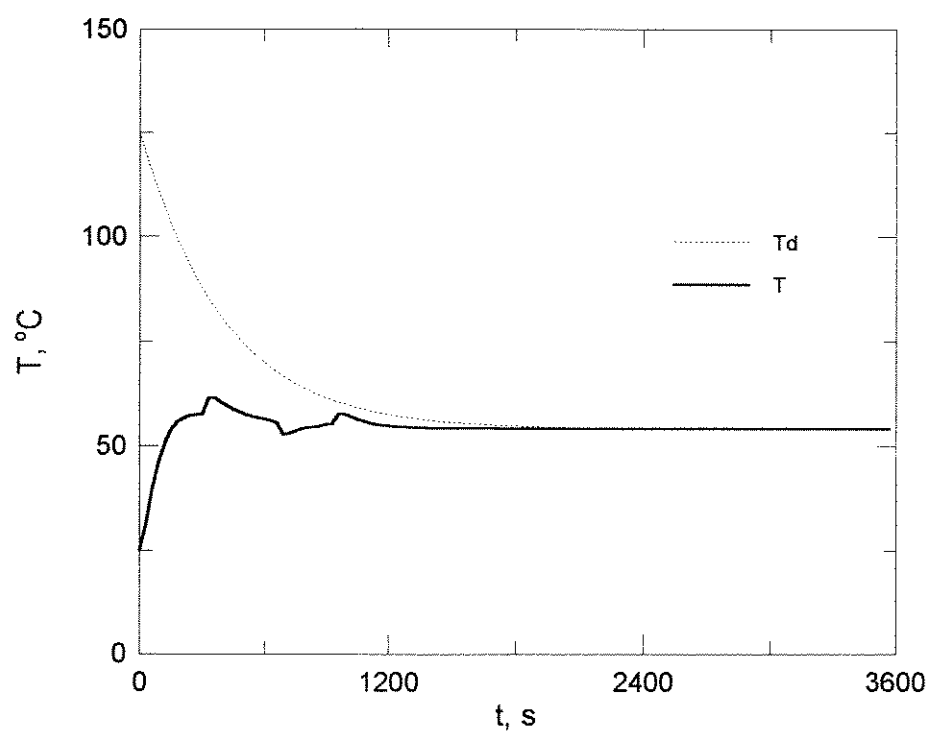


(a) Variável controlada.

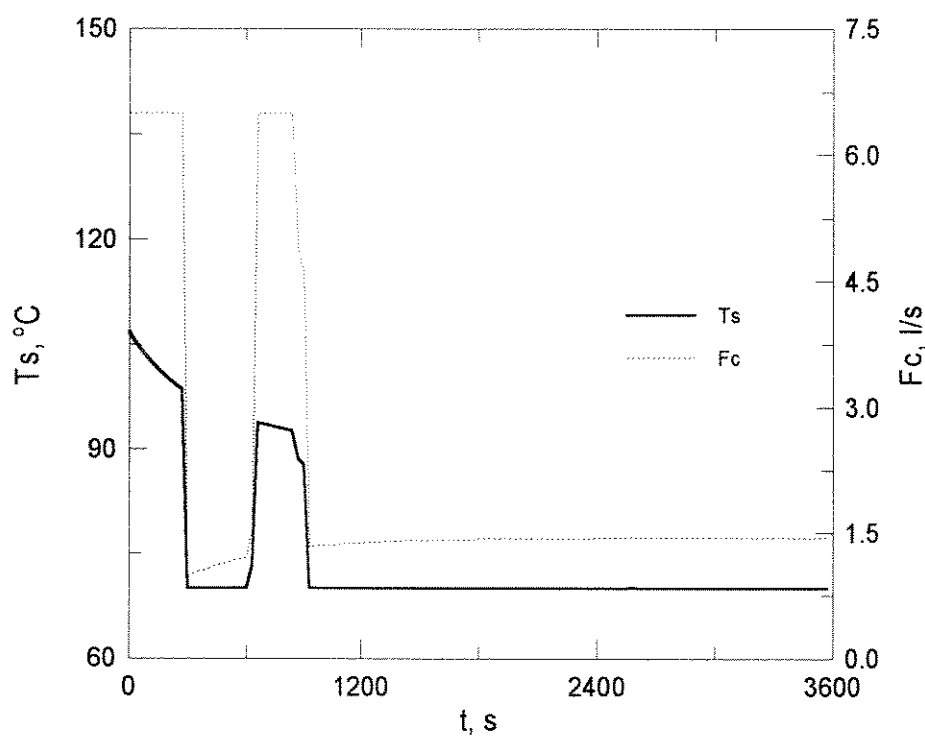


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.31. Resultados da simulação para $NE=2$, $\tau=30$ s e $N=2$.

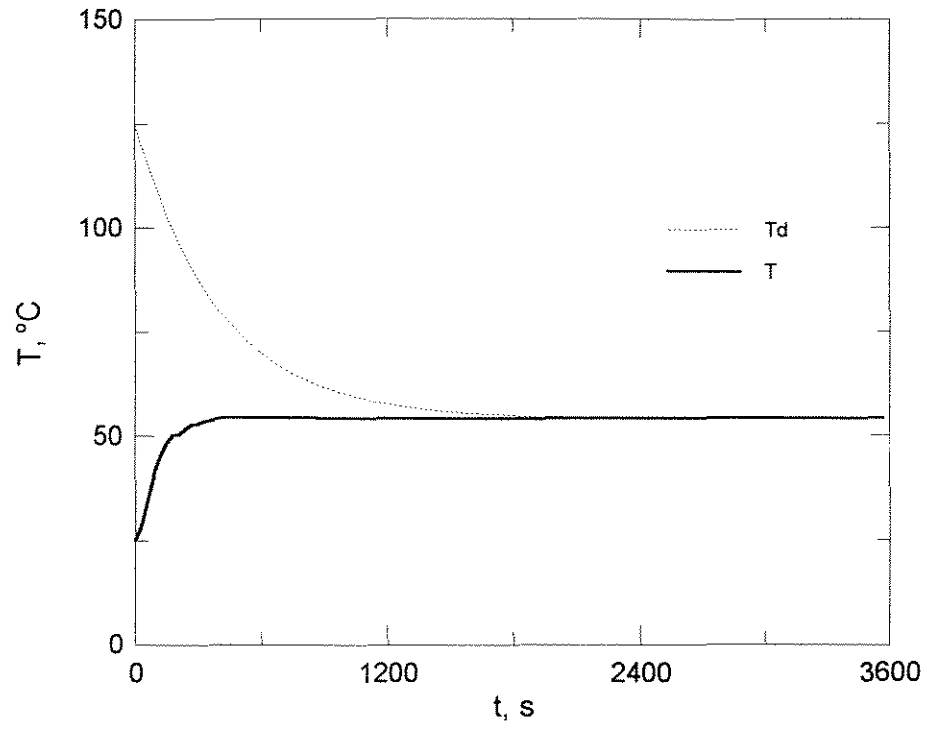


(a) Variável controlada.

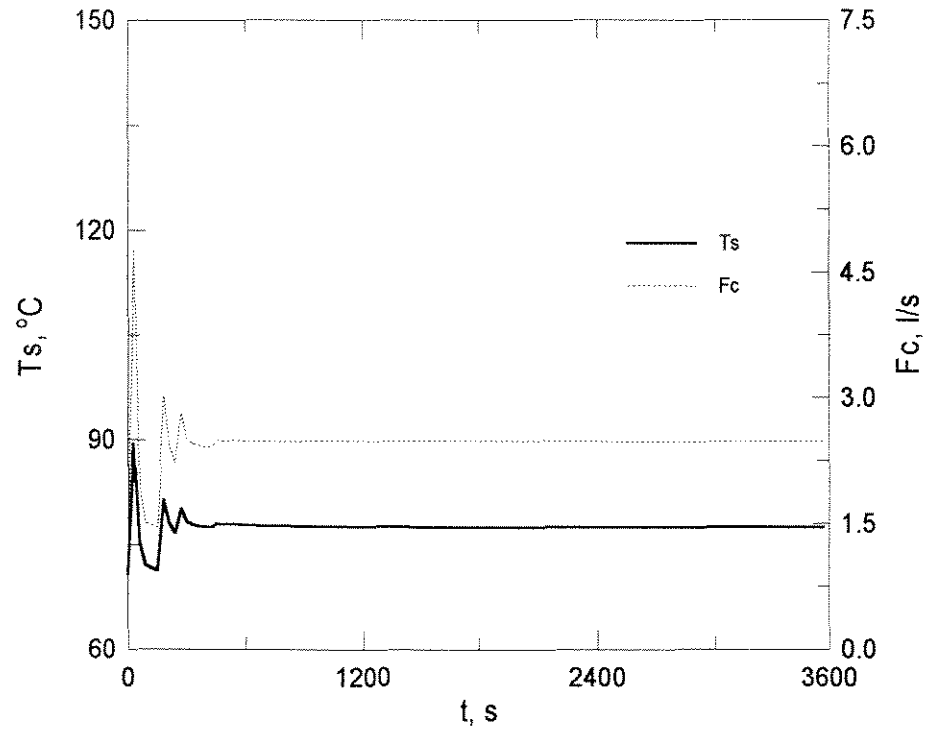


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.32. Resultados da simulação para $NE=2$, $\tau=30$ s e $N=3$.

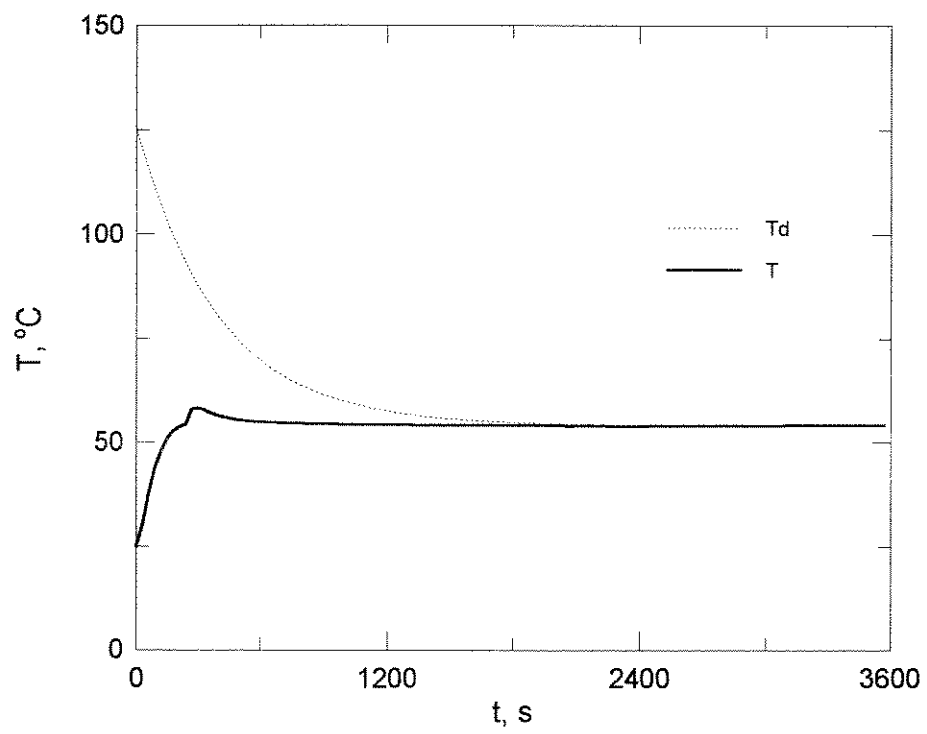


(a) Variável controlada.

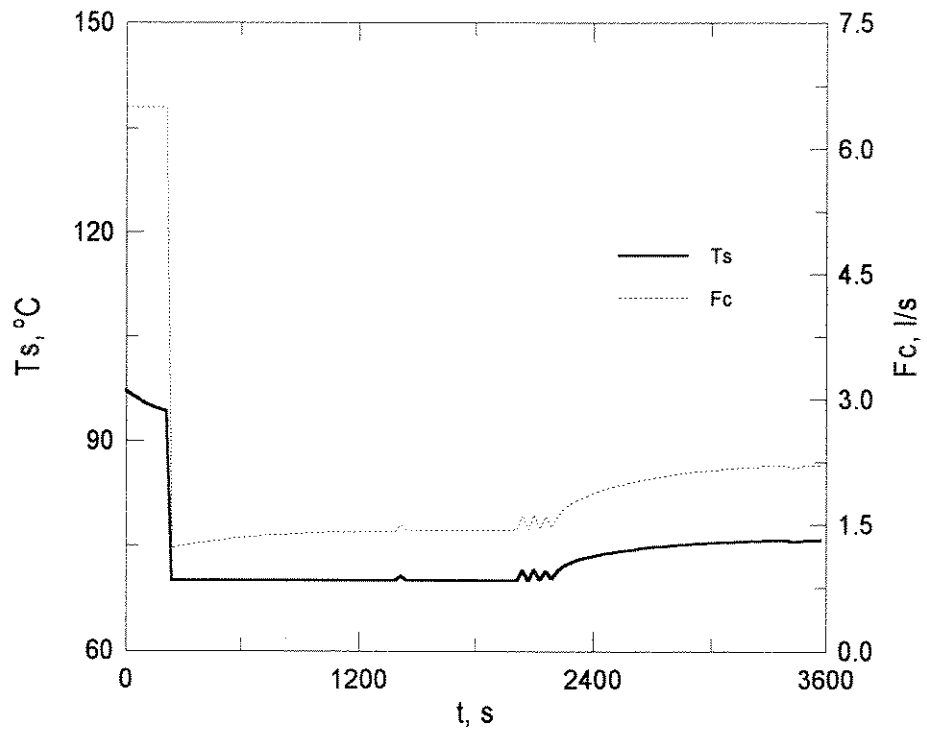


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.33. Resultados da simulação para $NE=3$, $\tau=30$ s e $N=1$.

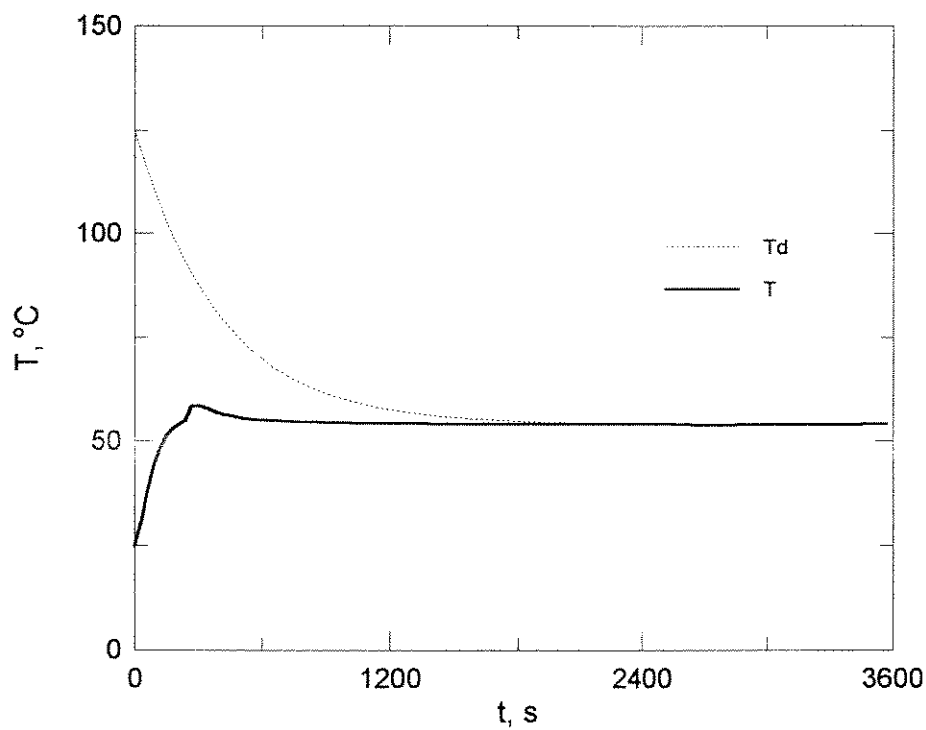


(a) Variável controlada.

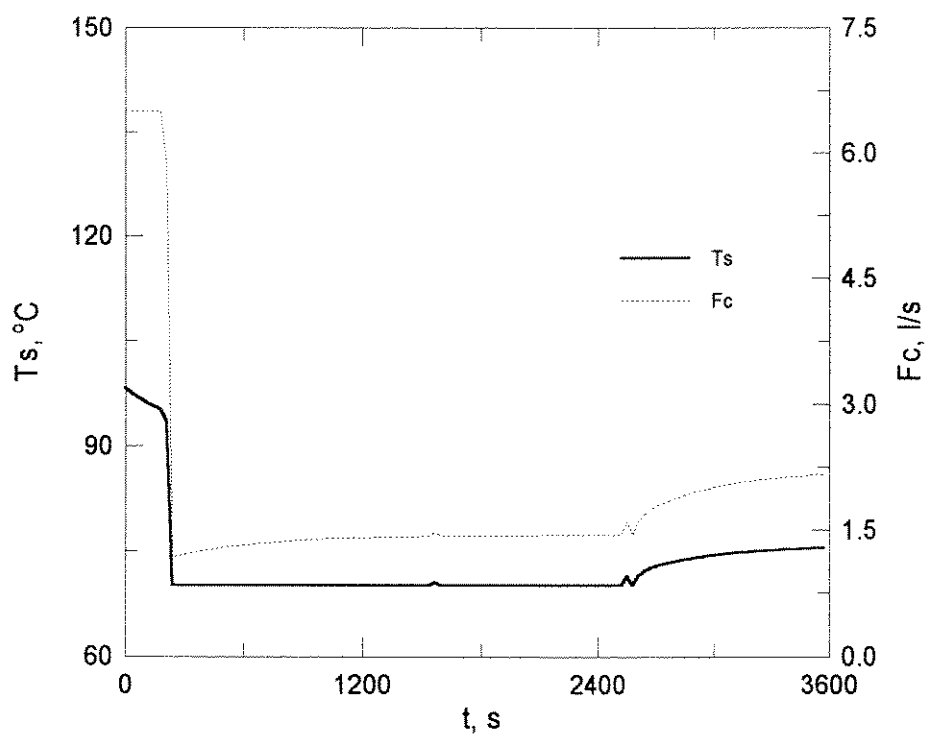


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.34. Resultados da simulação para $NE=3$, $\tau=30\text{ s}$ e $N=2$.

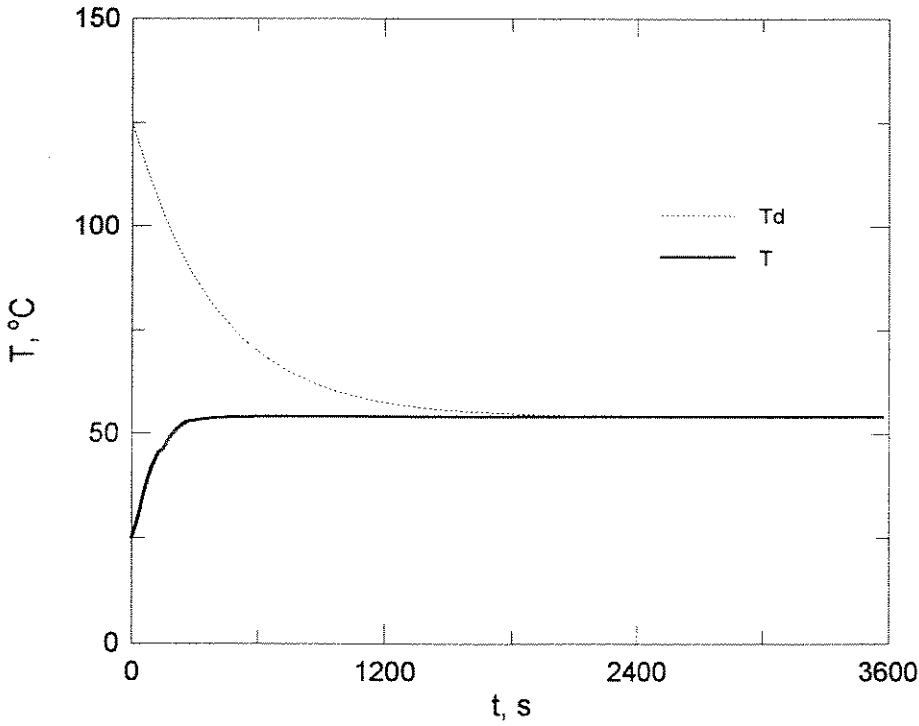


(a) Variável controlada.

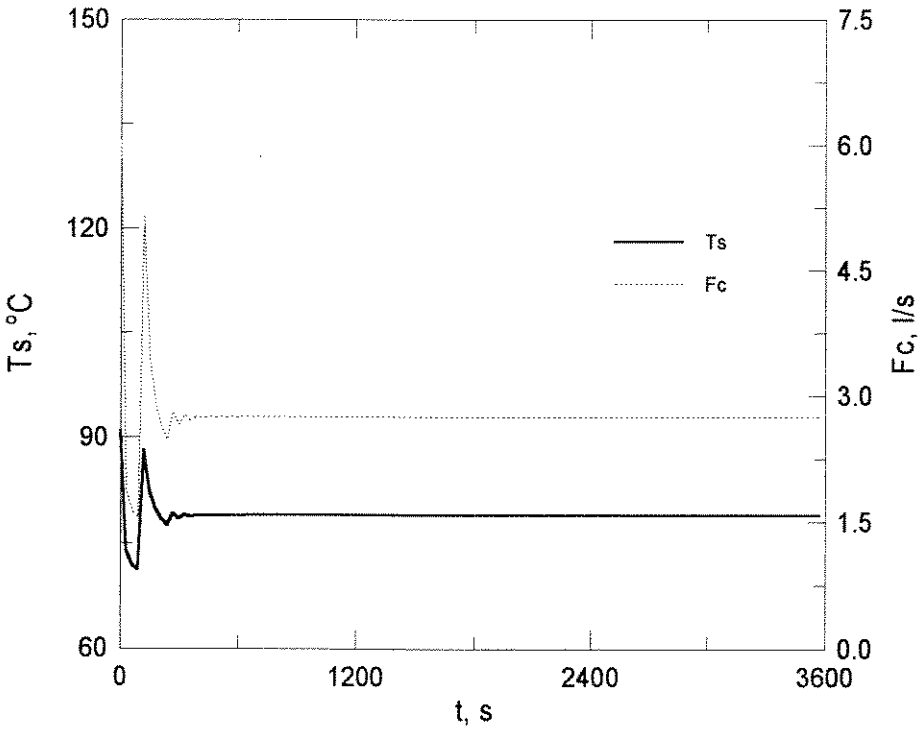


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.35. Resultados da simulação para $NE=3$, $\tau=30$ s e $N=3$.

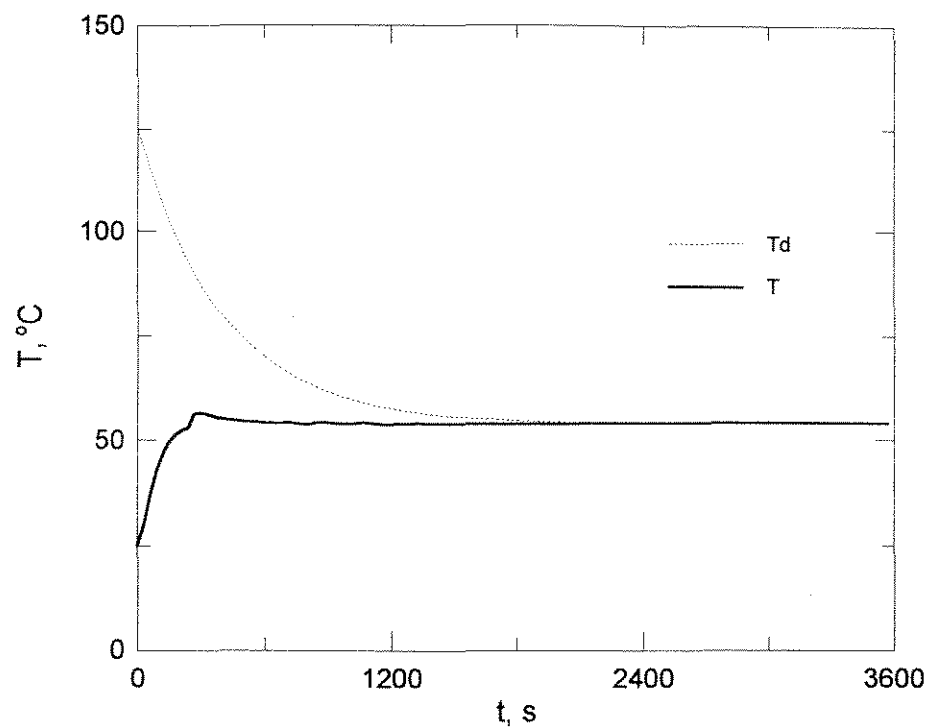


(a) Variável controlada.

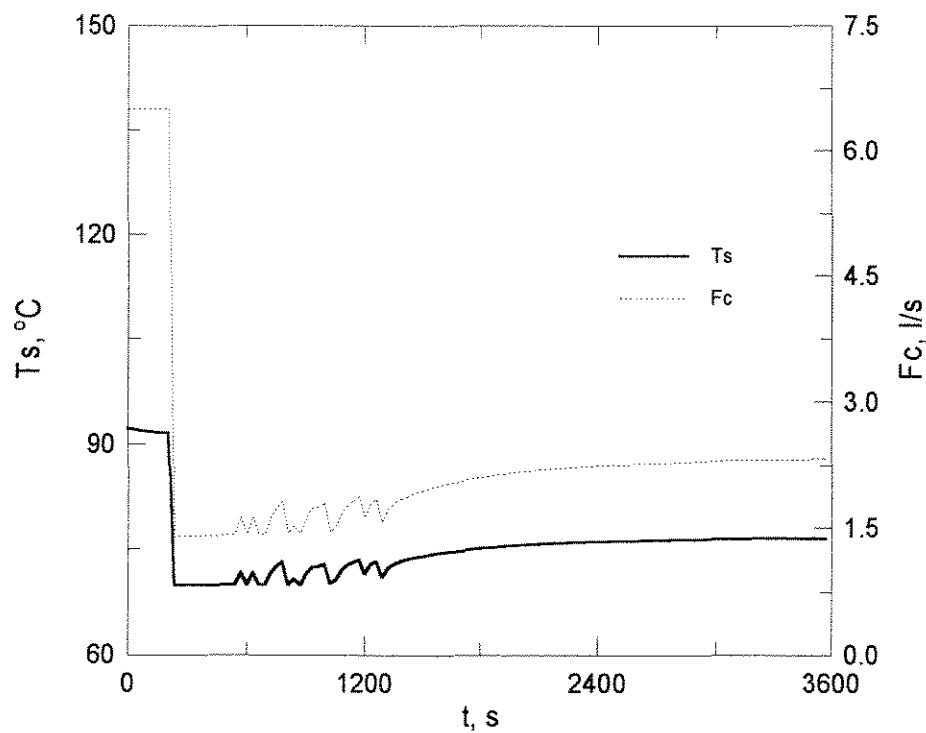


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.36. Resultados da simulação para $NE=5$, $\tau=30$ s e $N=1$.

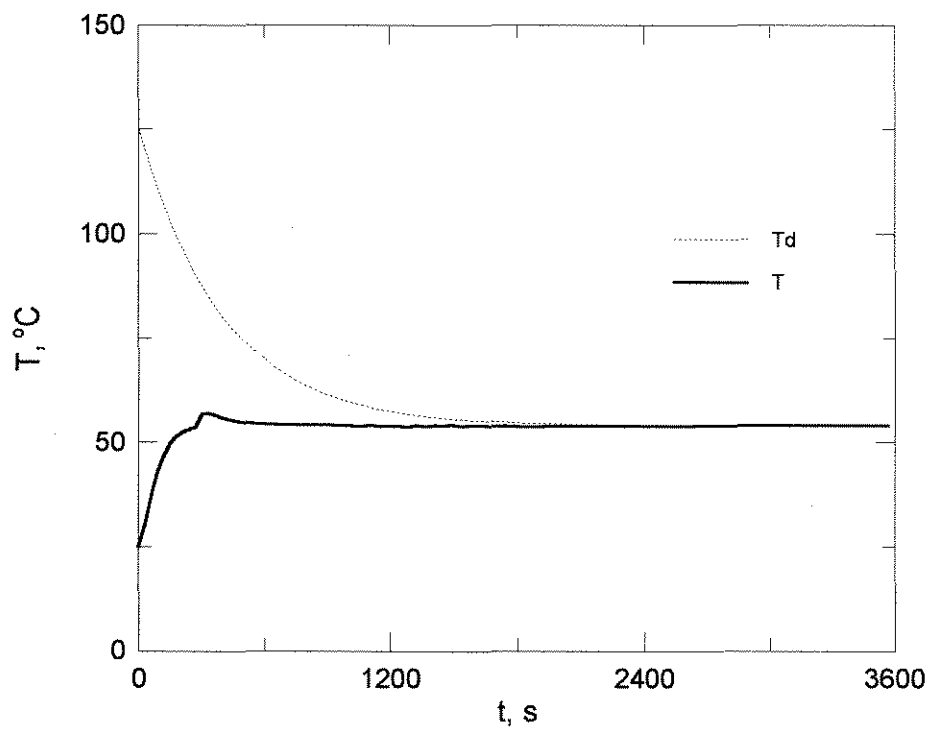


(a) Variável controlada.

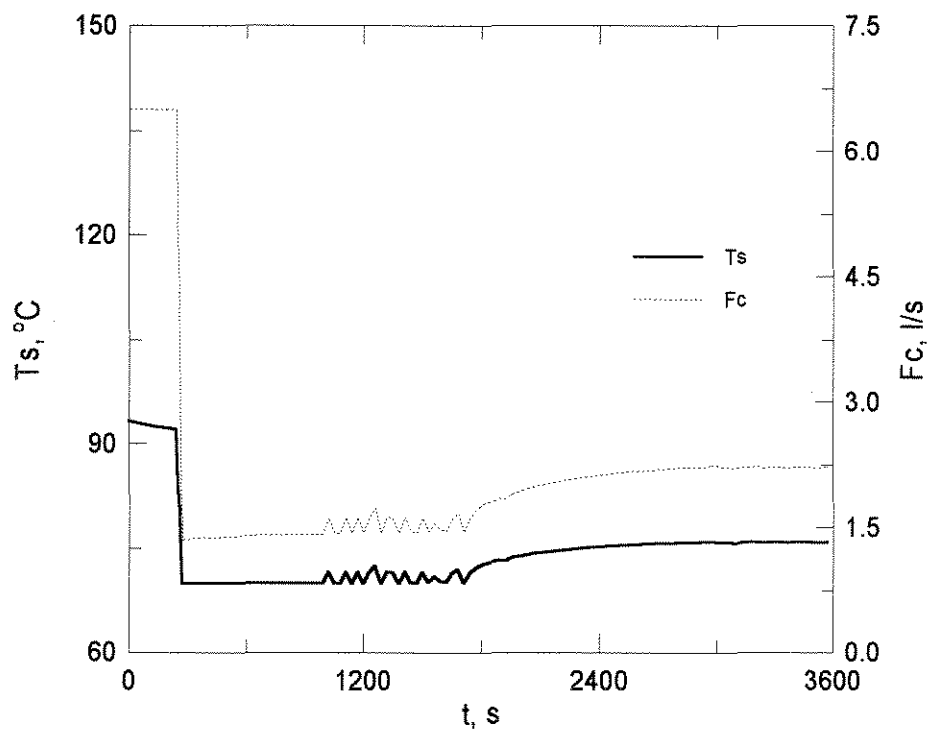


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.37. Resultados da simulação para $NE=5$, $\tau=30$ s e $N=2$.



(a) Variável controlada.



(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.38. Resultados da simulação para NE=5, $\tau=30$ s e N=3.

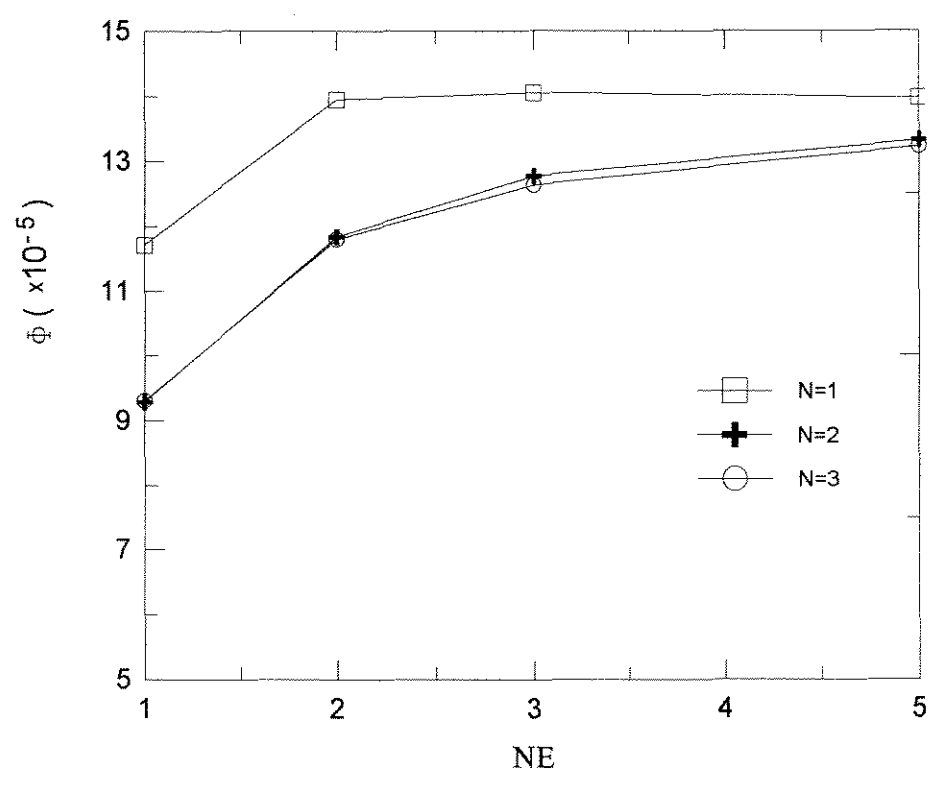
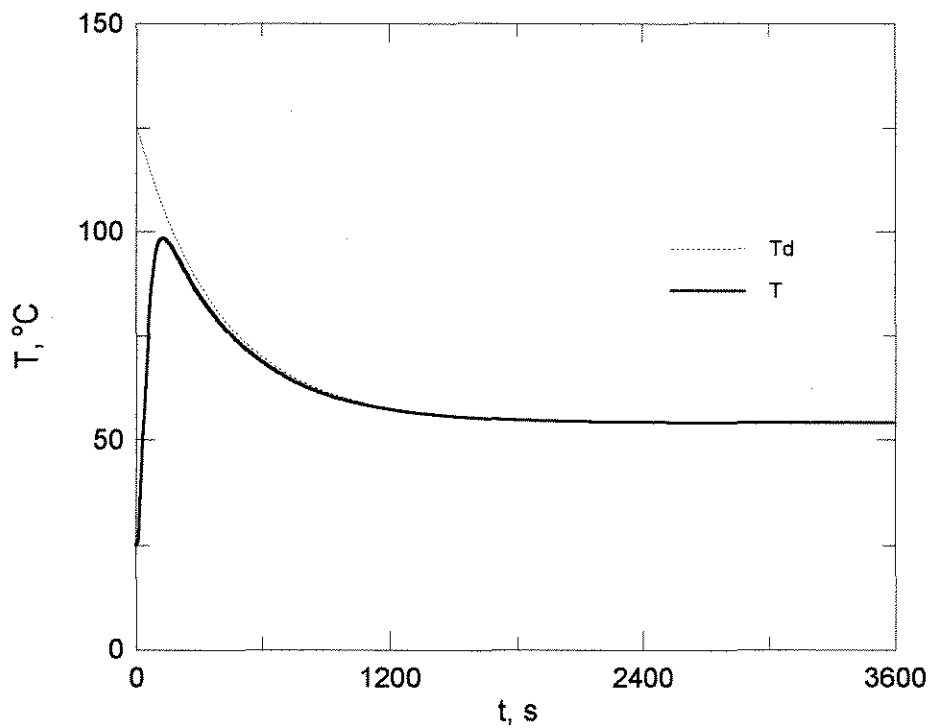
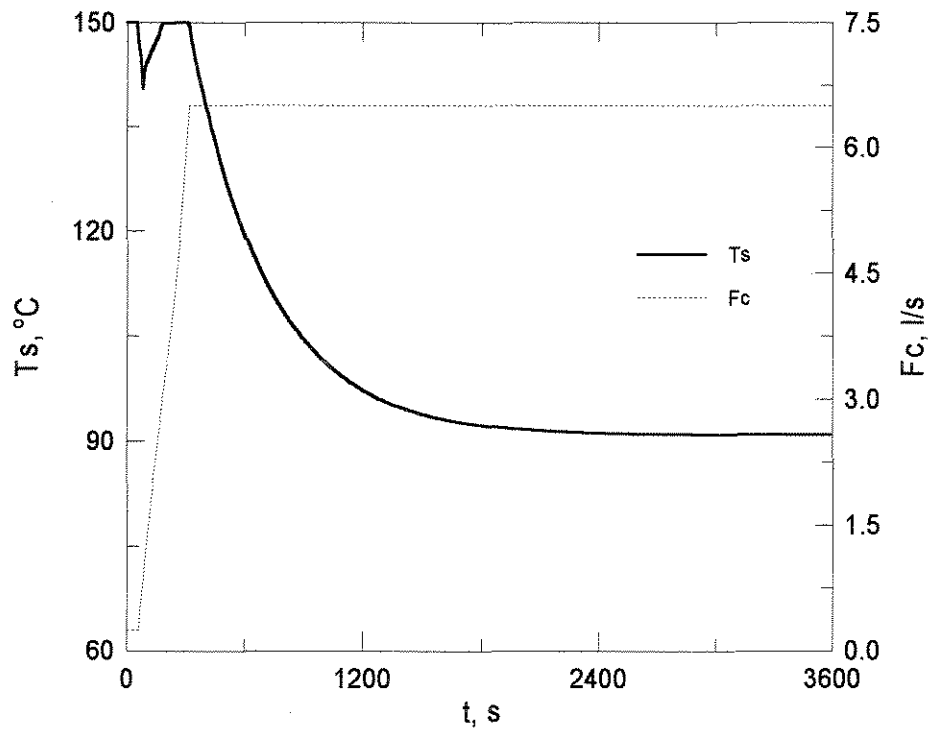


Figura 4.39. Influência de NE e N no desempenho do controlador ($\tau=30$ s).

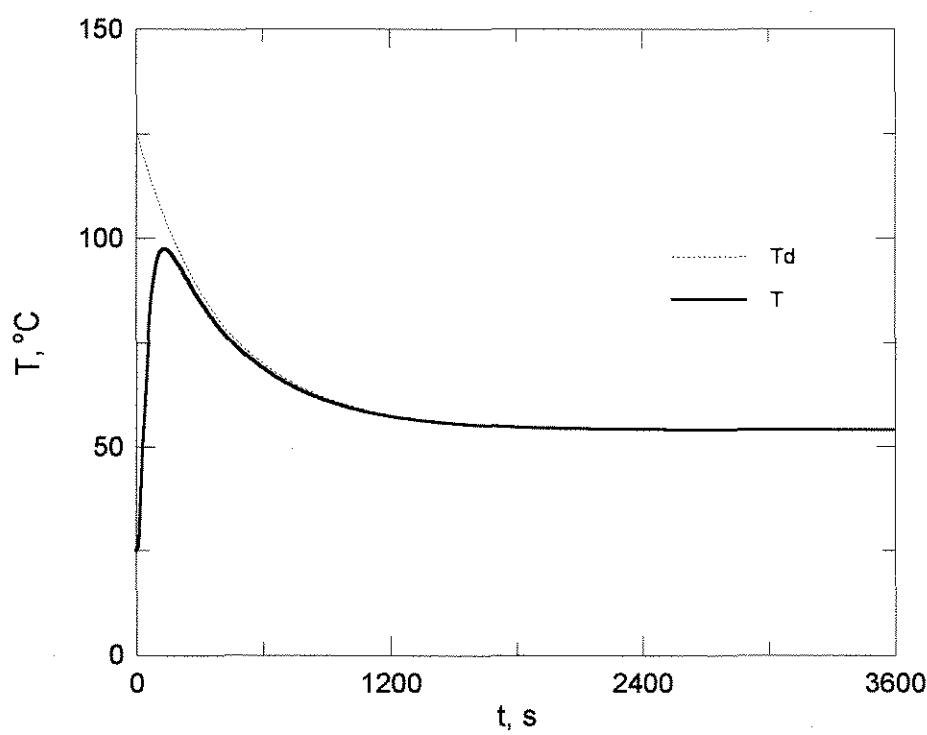


(a) Variável controlada.

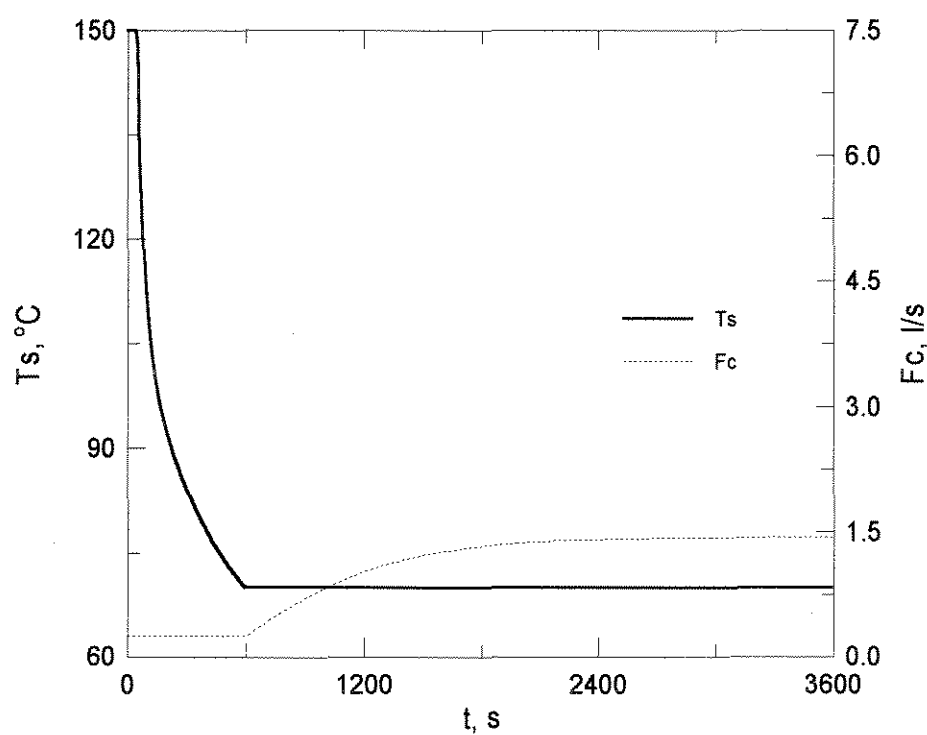


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.40. Resultados da simulação para $NE=1$, $\tau=10 \text{ s}$ e $N=1$.

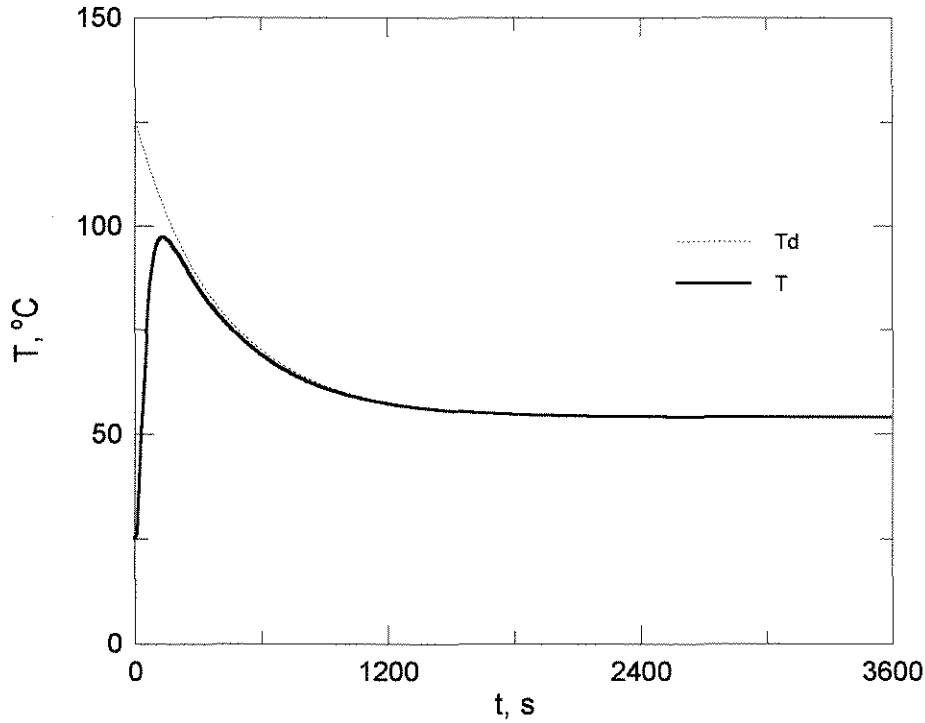


(a) Variável controlada.

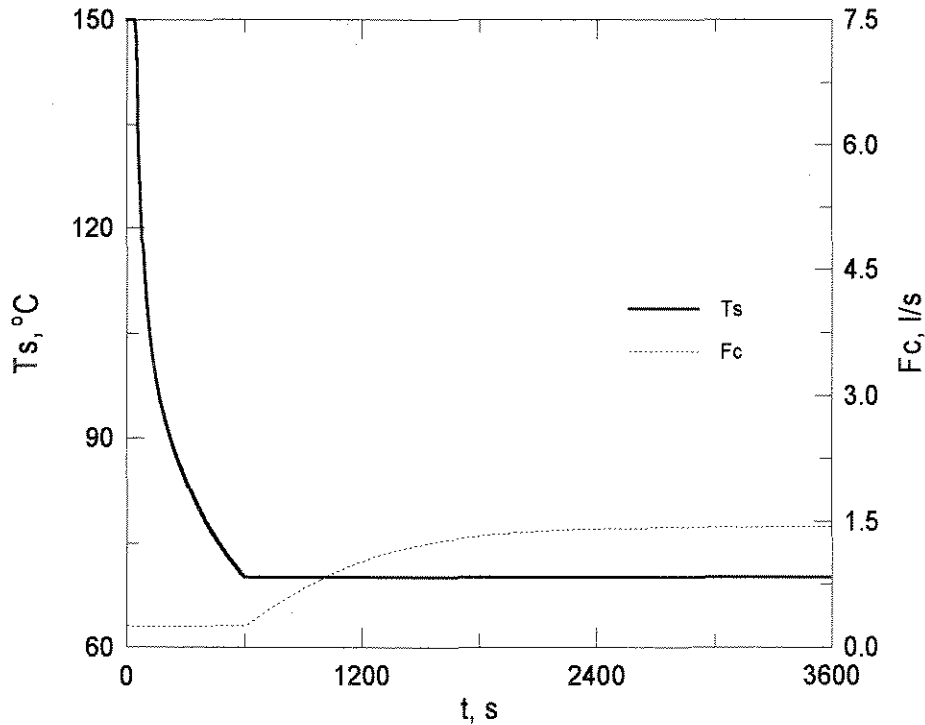


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.41. Resultados da simulação para $NE=1$, $\tau=10$ s e $N=2$.

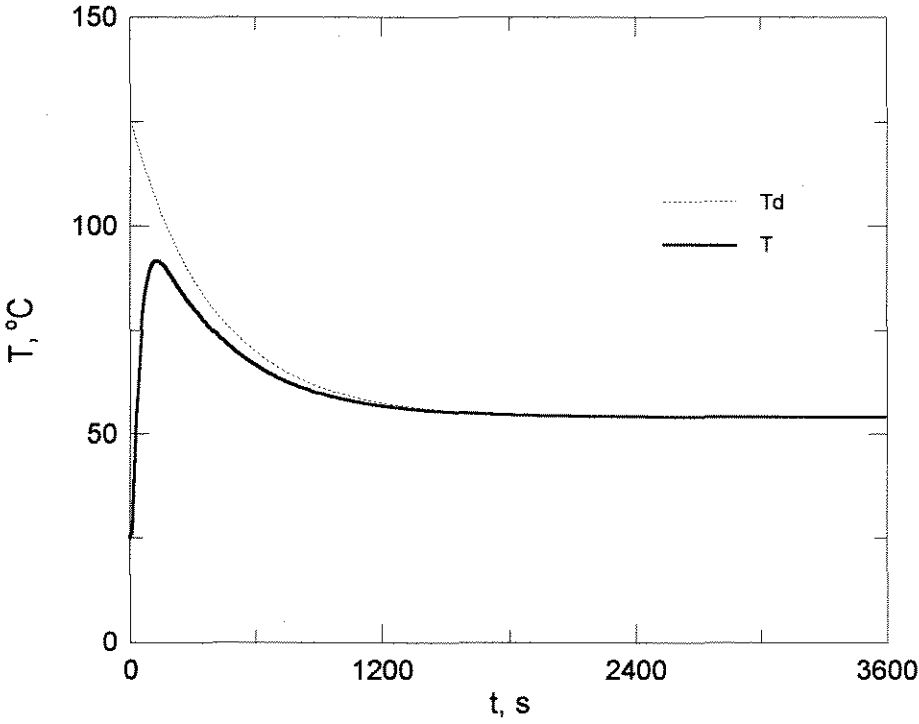


(a) Variável controlada.

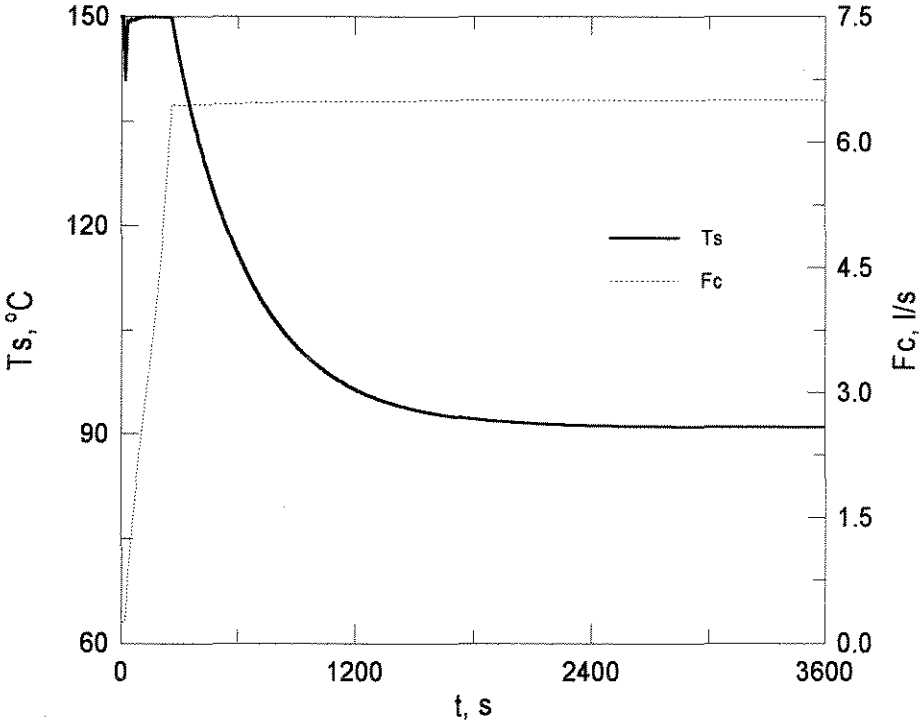


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.42. Resultados da simulação para $NE=1$, $\tau=10$ s e $N=3$.

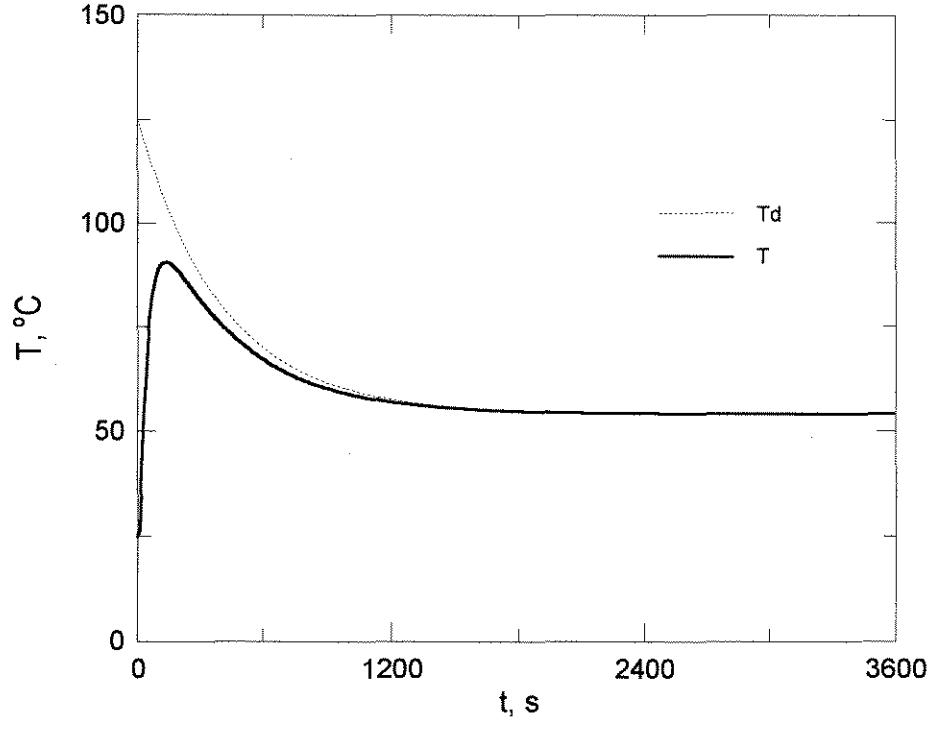


(a) Variável controlada.

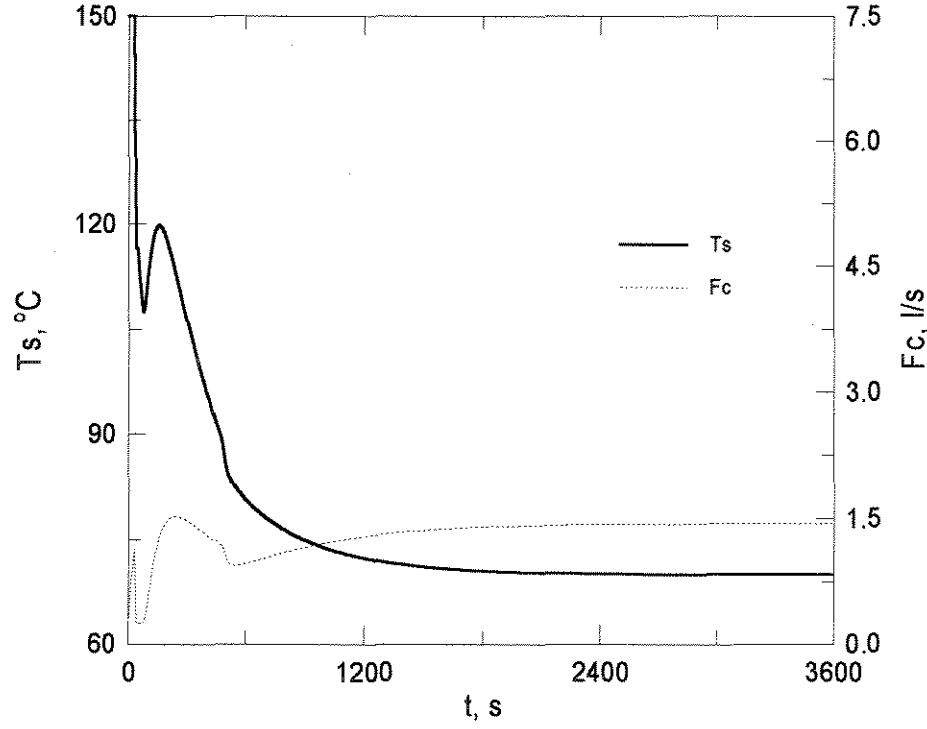


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.43. Resultados da simulação para $NE=2$, $\tau=10 \text{ s}$ e $N=1$.

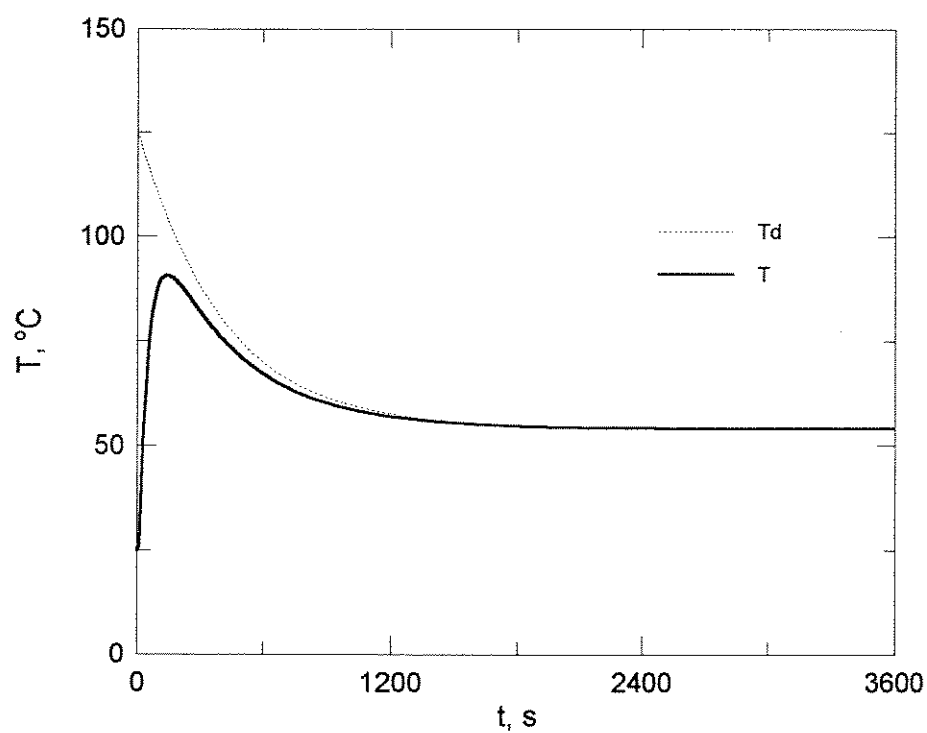


(a) Variável controlada.

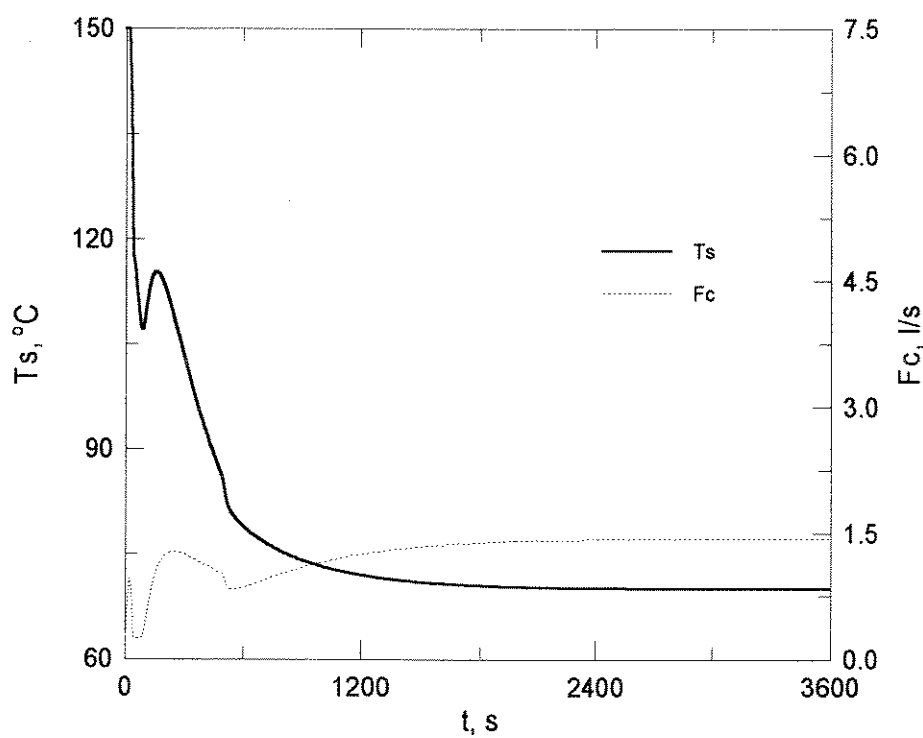


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.44. Resultados da simulação para $NE=2$, $\tau=10$ s e $N=2$.

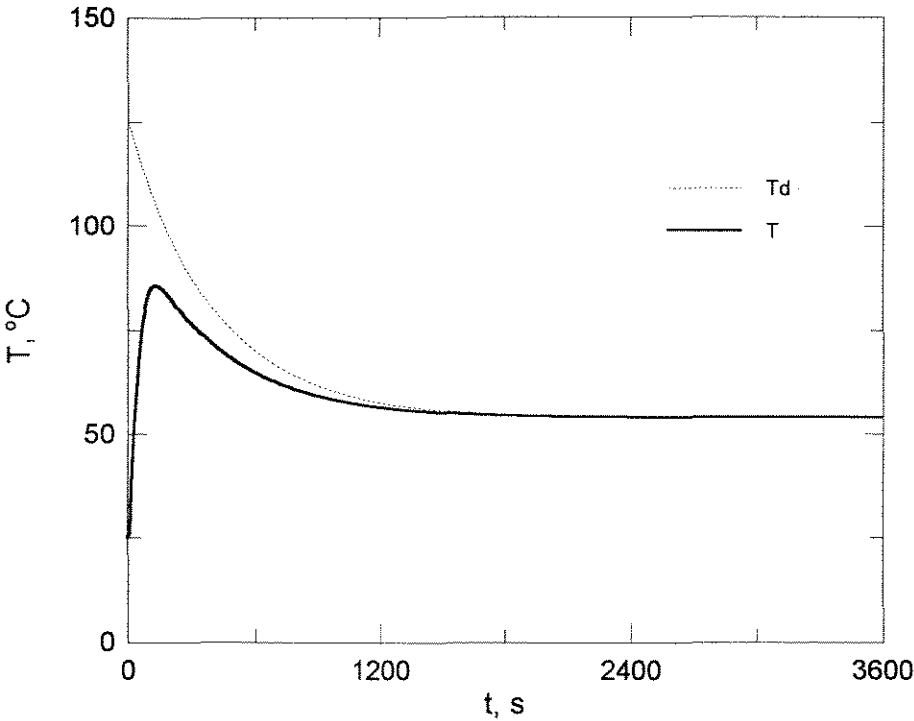


(a) Variável controlada.

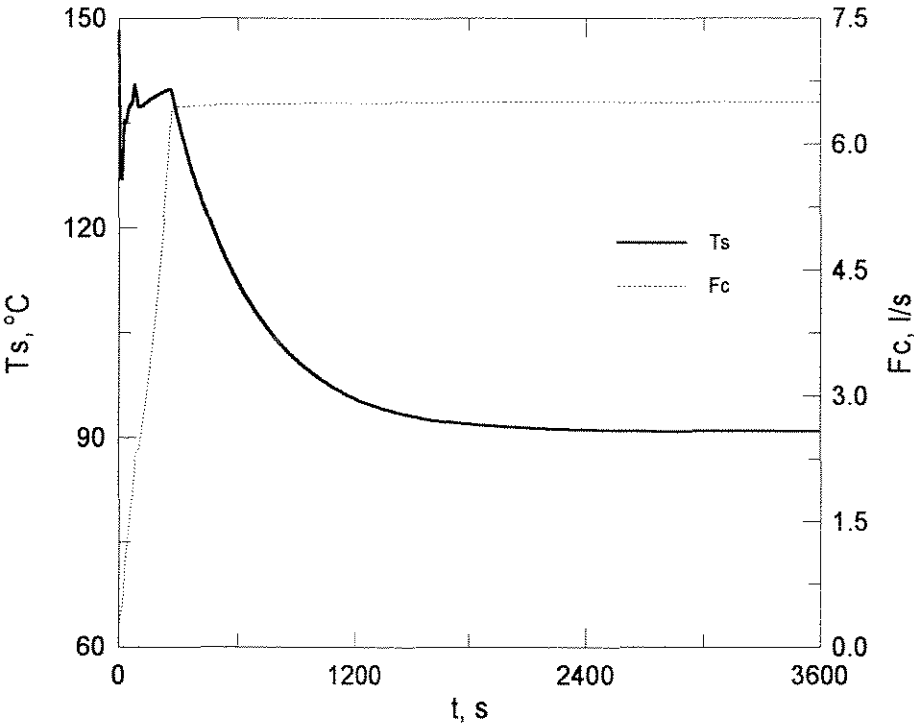


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.45. Resultados da simulação para $NE=2$, $\tau=10$ s e $N=3$.

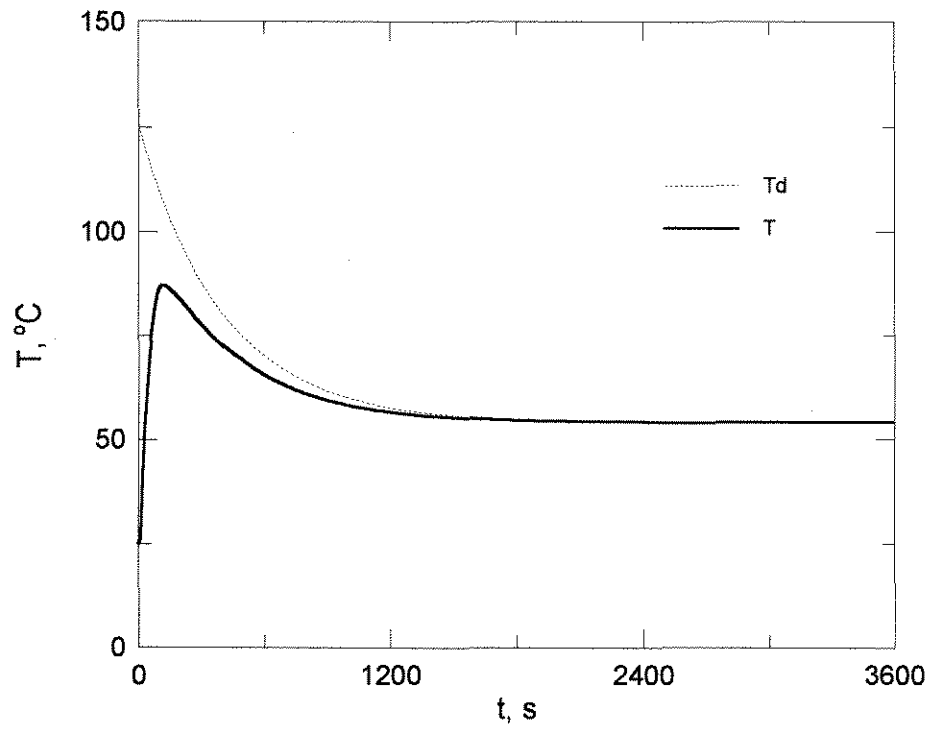


(a) Variável controlada.

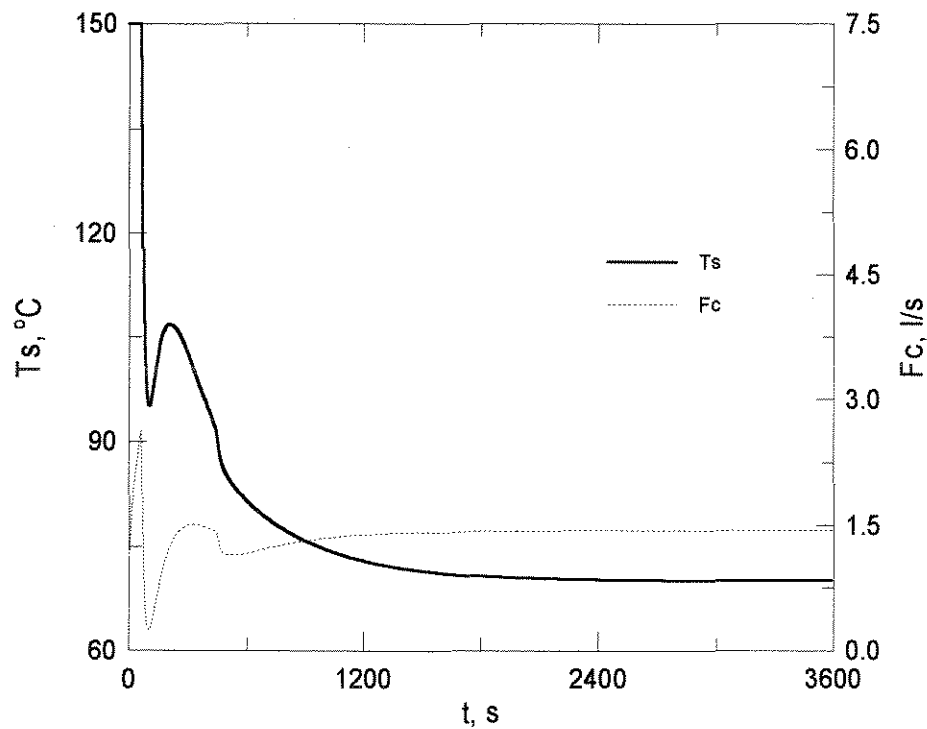


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.46. Resultados da simulação para $NE=3$, $\tau=10$ s e $N=1$.

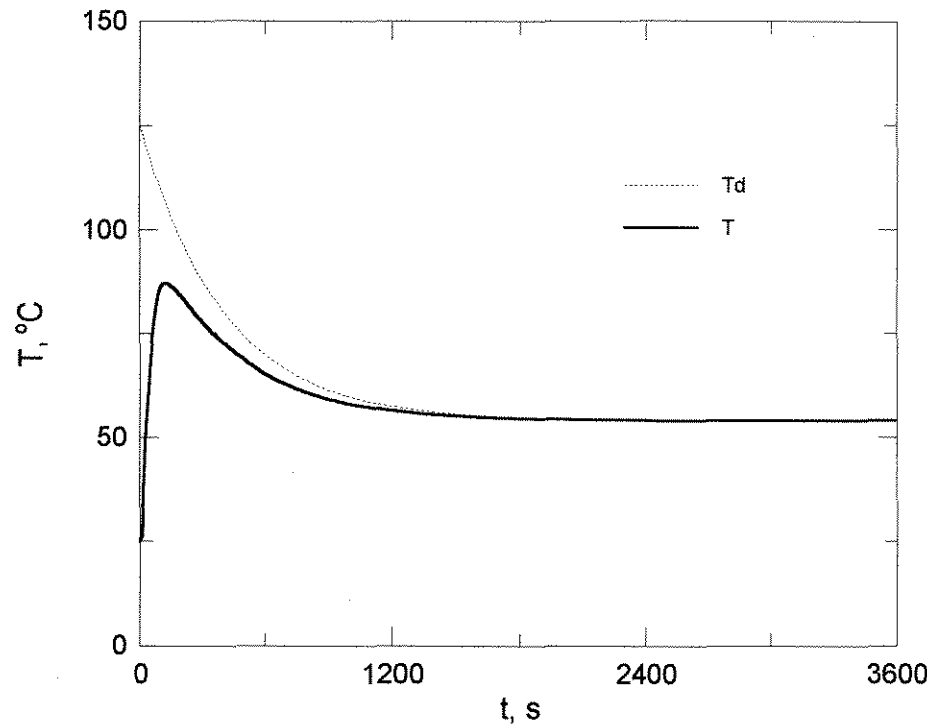


(a) Variável controlada.

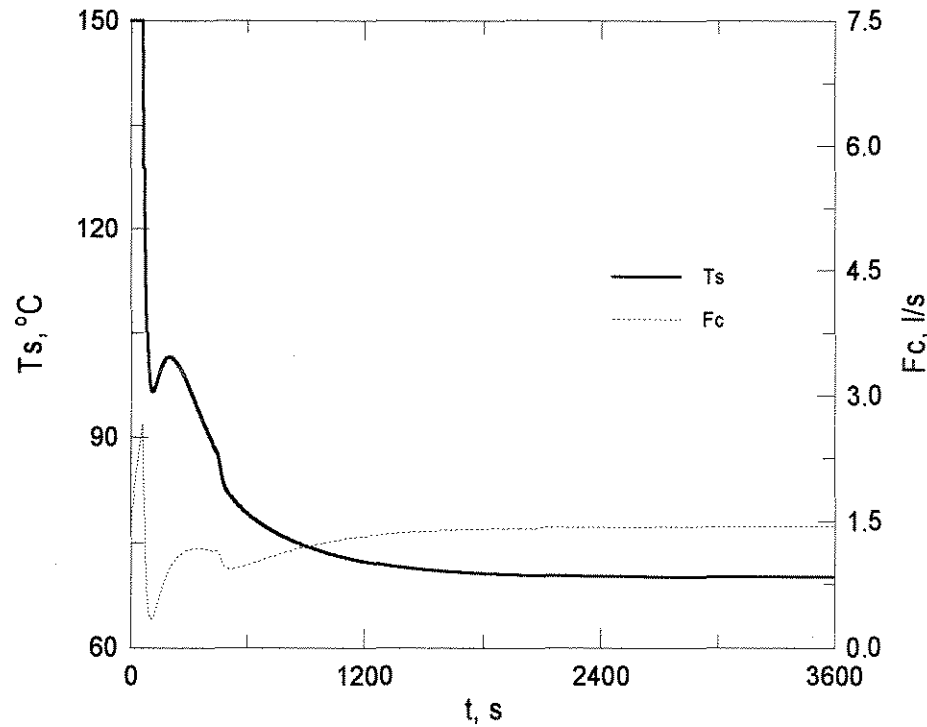


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.47. Resultados da simulação para $NE=3$, $\tau=10$ s e $N=2$.

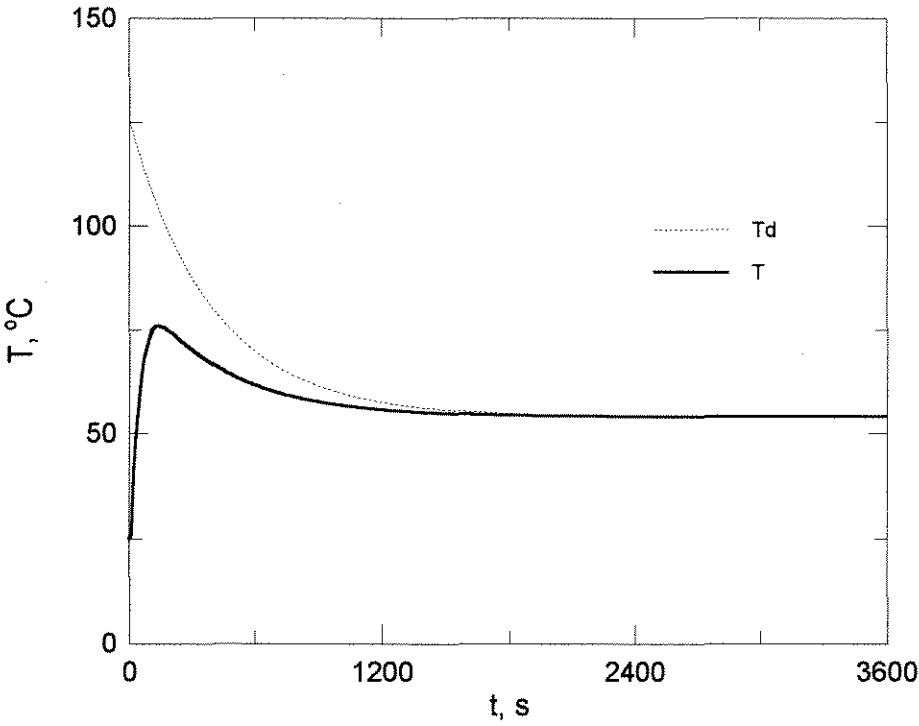


(a) Variável controlada.

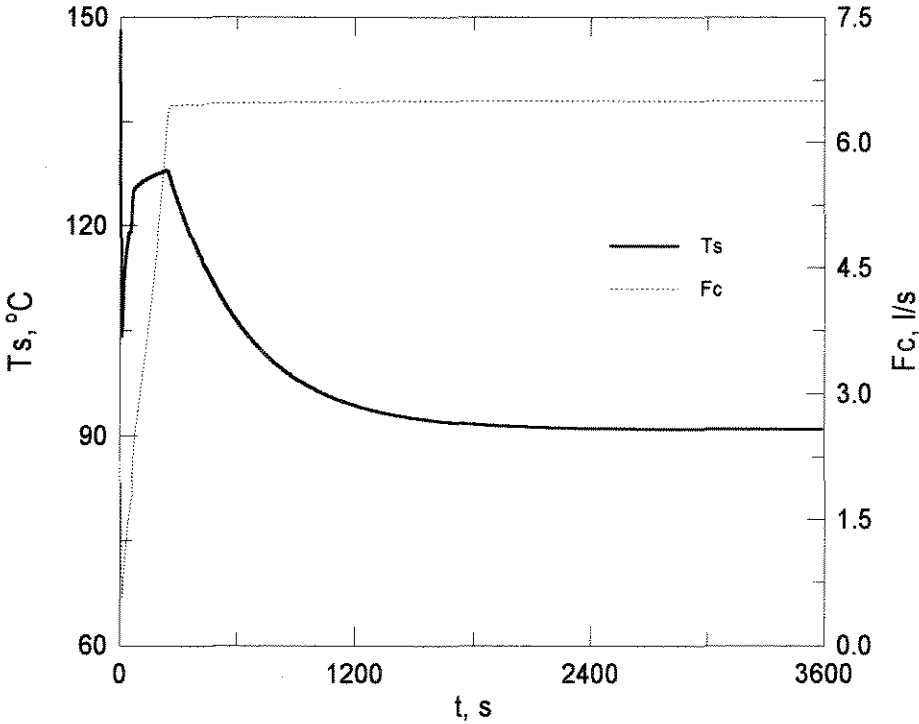


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.48. Resultados da simulação para $NE=3$, $\tau=10$ s e $N=3$.

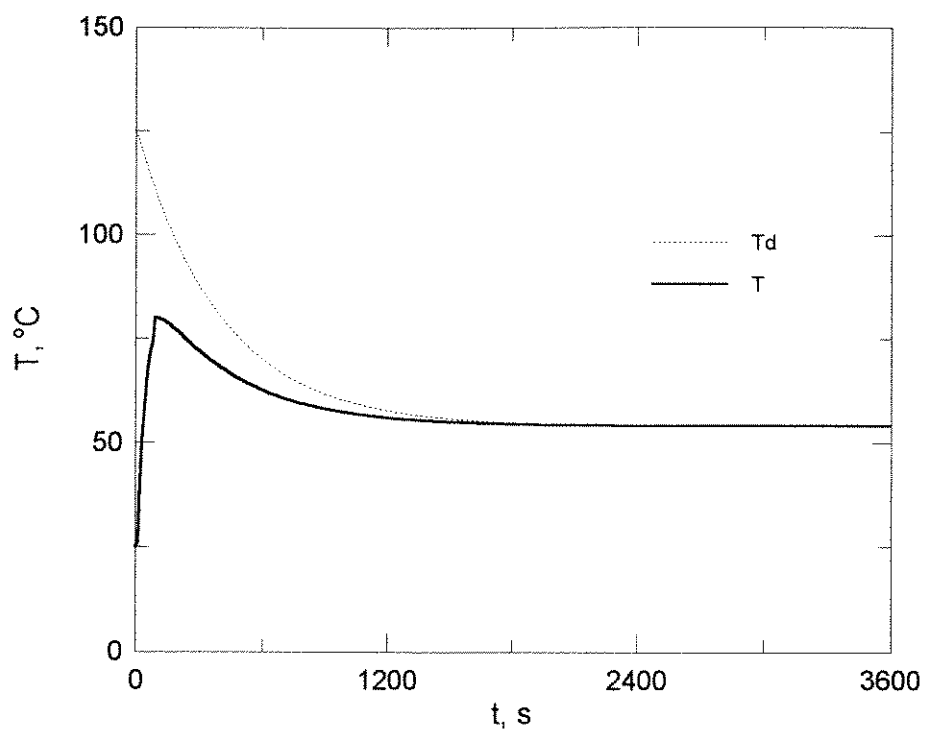


(a) Variável controlada.

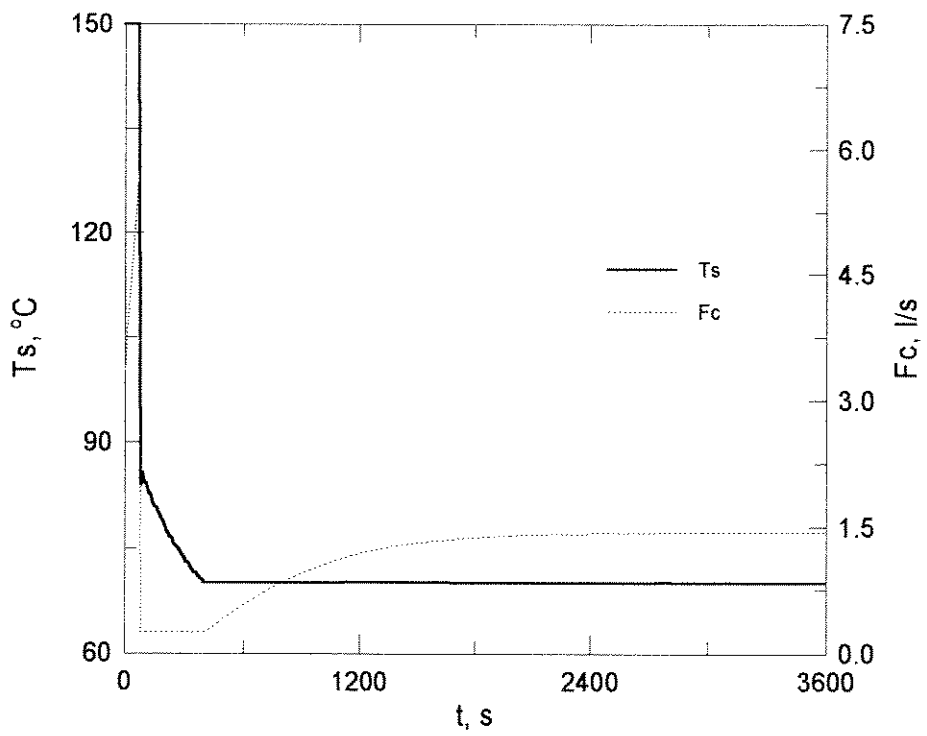


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.49. Resultados da simulação para $NE=5$, $\tau=10$ s e $N=1$.

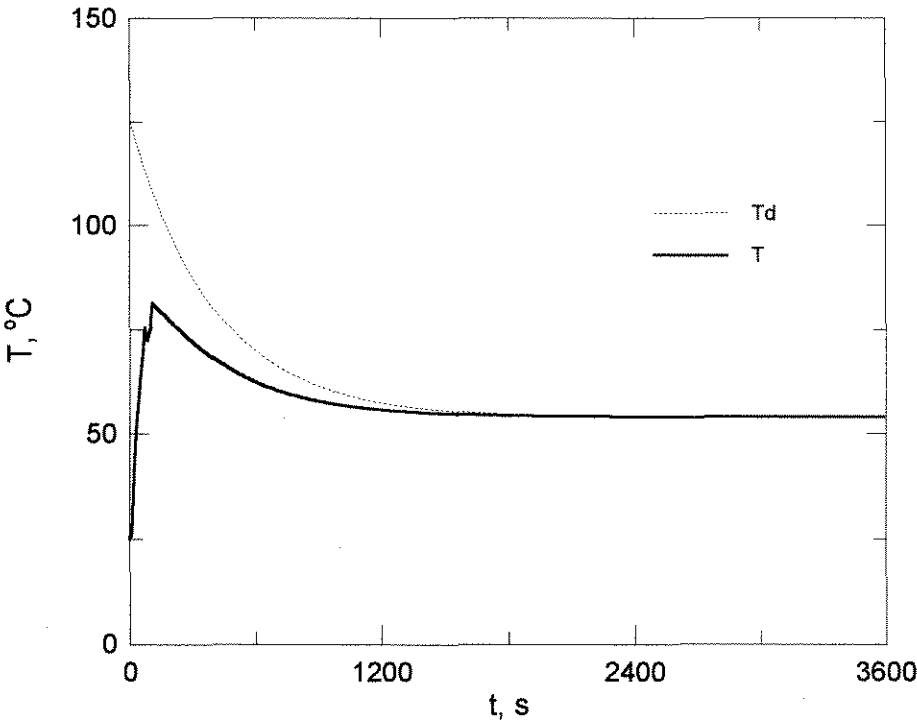


(a) Variável controlada.

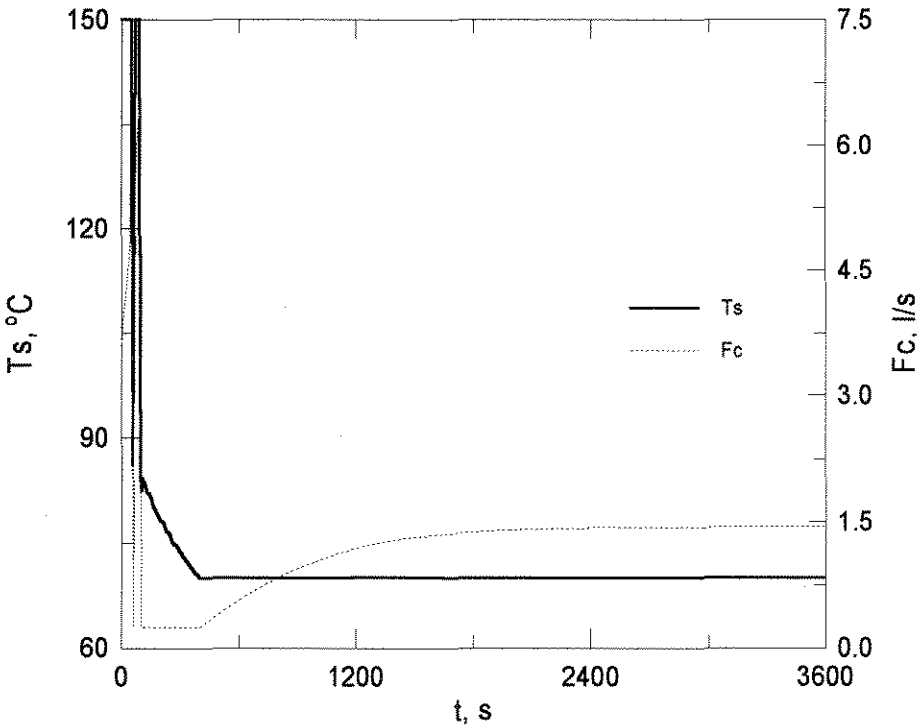


(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.50. Resultados da simulação para $NE=5$, $\tau=10$ s e $N=2$.



(a) Variável controlada.



(b) Variáveis manipuladas.

Figura 4.51. Resultados da simulação para $NE=5$, $\tau=10$ s e $N=3$.

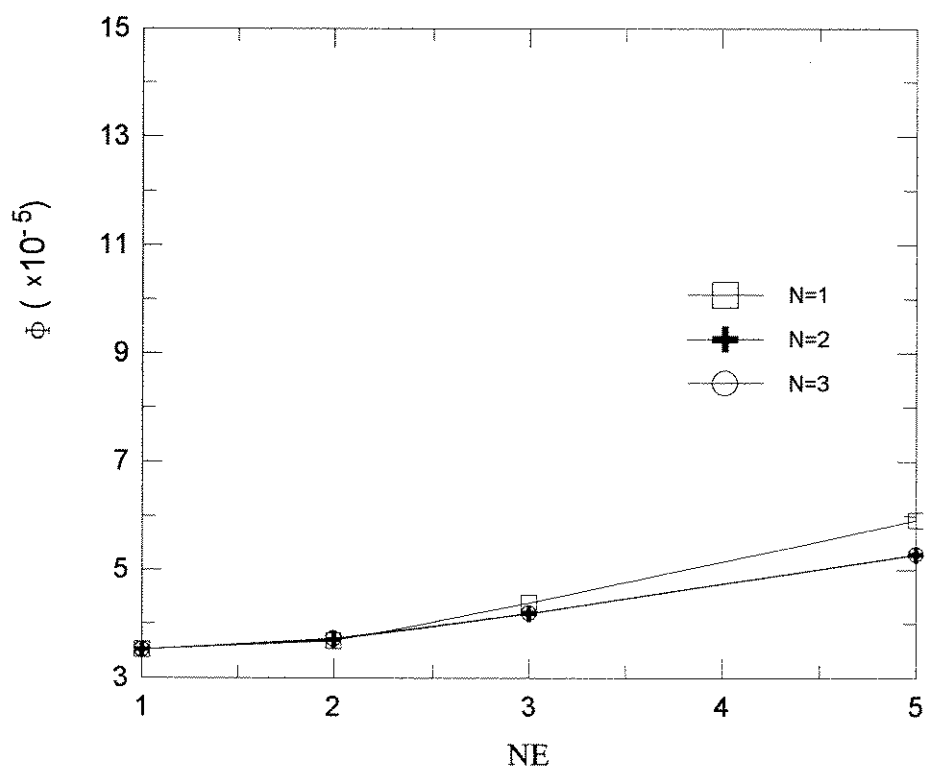


Figura 4.52. Influência de NE e N no desempenho do controlador ($\tau=10$ s).

CAPÍTULO 5

Discussão e Conclusões

5. Discussão e Conclusões

O objetivo básico do presente trabalho é o de avaliar a influência dos parâmetros de sintonização, valores do período de amostragem e dos horizontes de predição e de controle, sobre o desempenho do NMPC para um processo batelada simples. Para tal, foi sempre considerado que os horizontes de controle e de predição são iguais.

Para o sistema em estudo, o aumento do horizonte de predição e do período de amostragem implicaram sempre na deterioração da qualidade da resposta do controle, obtendo-se maiores valores do ISE (figuras 4.13, 4.26 e 4.39).

Através dos resultados, verificou-se que além dos parâmetros acima citados, o grau do polinômio aproximador também tem uma influência considerável sobre o desempenho do NMPC. Para $N=1$, ou seja, um ponto interno de colocação, a trajetória das variáveis manipuladas F_c e T_s , tal como mostra a figura 4.1, é visivelmente diferente da obtida para dois ou mais pontos internos de colocação (figuras 4.2 e 4.3). É interessante observar que o desempenho do NMPC, para este estudo particular, para $N=1$ apresenta uma forte analogia com o desempenho de controladores clássicos PID (ver César, 1992 e Andrade, 1993). Pela análise das figuras 4.1 a 4.3, verificou-se contudo que os casos $N \geq 2$ levam a um melhor desempenho do controlador NMPC não só sob o ponto de vista do controle (menor valor do ISE), mas também sob o ponto de vista econômico (menor consumo de vapor e de água de resfriamento).

Pode-se concluir, para o problema considerado, que o NMPC, dentro de determinadas condições de sintonização, apresenta um excelente desempenho.

O desempenho do NMPC, entretanto, é notado ser deteriorado sempre para pequeno valor de N ($=1$) e para valores elevados de NE (≥ 2) e τ (≥ 20 s).

Neste trabalho, não foram considerados problemas de estabilidade, na medida em que as características do processo não foram alteradas e também não foi analisada a influência do ruído associado à resposta.

As tolerâncias envolvidas nos cálculos da simulação e do controle/otimização do processo não foram variadas aqui, pois os resultados foram considerados satisfatórios tendo-se em vista o objetivo deste estudo.

A análise da influência da condição inicial para T_p (variável de estado não medida), ora estimada pelo modelo ora assumido o valor predito no estágio anterior, não

permite nenhuma conclusão abrangente uma vez que o modelo é considerado perfeito; percebendo-se apenas que se tem obtido boas predições desta variável.

O NMPC demonstra a facilidade de trabalhar com sistema MISO, pois desacopla automaticamente a ação das variáveis manipuladas, evitando a necessidade de recorrer à técnicas como controle paramétrico (Jutan e Uppal, 1984). Também, percebeu-se a habilidade do controlador em trabalhar com restrições de uma maneira explícita sem deteriorar a qualidade da resposta.

Para um estudo futuro do NMPC sugere-se analisar o problema de estabilidade e de robustez, mesmo para um processo simples como o usado aqui. Também, sugere-se aplicá-lo ao caso do reator em batelada exotérmico, o mesmo sistema como citado em César (1992) e Andrade (1993). Neste caso, o NLP aparece associado a um problema de estimativa de parâmetros.

Referências Bibliográficas

- ANDRADE, L.E.V. (1993). *Controle de Reatores de Batelada Exotérmicos pelo Método da Linearização Global*. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - FEQ/UNICAMP.
- BEQUETTE, B.W. (1991a). Nonlinear Control of Chemical Processes: A Review. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 30, 1391-1413.
- BEQUETTE, B.W. (1991b). Nonlinear Predictive Control Using Multi-rate Sampling. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 69, 136-143.
- BIEGLER, L.T. (1984). Solution of Dynamic Optimization Problems by Successive Quadratic Programming and Orthogonal Collocation. *Comput. chem. Engng.*, 8 (3/4), 243-248.
- CAREY, G.F. AND FINLAYSON, B.A. (1975). Orthogonal Collocation on Finite Elements. *Chem. Eng. Sci.*, 30, 587-596.
- CÉSAR F., J.C.L. (1992). *Controle de Reatores Exotérmicos Batelada*. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - FEQ/UNICAMP.
- CHANG, H.C. AND CHEN, L.H. (1984). Bifurcation Characteristics of Nonlinear Systems Under Conventional PID Control. *Chem. Eng. Sci.*, 39, 1127-1142. *Apud* BEQUETTE, B.W. (1991a). Nonlinear Control of Chemical Processes: A Review. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 30, 1391-1413.
- COLEMAN, T.F., GARBOW, B.S. AND MORE, J.J. (1984). Software for Estimating Sparse Jacobian Matrices. *ACM Trans. Math. Soft.*, 10, 329.
- COULSON, J.M. E RICHARDSON, J.F. (1980). *Tecnologia Química*, vol.1, Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa.

- CUTHRELL, J.E. AND BIEGLER, L.T. (1987). On the Optimization of Differential Algebraic Process Systems. *AIChE Journal*, 33 (8), 1257-1270.
- CUTHRELL, J.E. AND BIEGLER, L.T. (1989). Simultaneous Optimization and Solution Methods for Batch Reactor Control Profiles. *Comput. chem. Engng.*, 13 (1/2), 49-62.
- CUTLER, C.R. AND RAMAKER, B.L. (1980). Dynamic Matrix Control - A Computer Control Algorithm. *In Proceedings of the 1980 American Control Conference*, San Francisco, CA; paper WP5-B Apud BEQUETTE, B.W. (1991a). Nonlinear Control of Chemical Processes: A Review. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 30, 1391-1413.
- EATON, J.W. AND RAWLINGS, J.B. (1990). Feedback Control of Chemical Processes Using On-Line Optimization Techniques. *Comput. chem. Engng.*, 14 (45), 469-479.
- EATON, J.W. AND RAWLINGS, J.B. (1992). Model-Predictive Control of Chemical Processes. *Chem. Eng. Sci.*, 47 (4), 705-720.
- EDGAR, T.F. AND HIMMELBLAU, D.M. (1989). *Optimization of Chemical Processes*, McGraw-Hill.
- FINLAYSON, B.A. (1974). Orthogonal Collocation in Chemical Reaction Engineering. *Catal. Rev. - Sci. Eng.*, 10 (1), 69-138.
- FINLAYSON, B.A. (1980). *Nonlinear Analysis in Chemical Engineering*, McGraw-Hill, New York.
- FISHER, D.G. (1991). Process Control: An Overview and Personal Perspective. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 69, 5-25.
- FLETCHER, R. (1990). *Practical Methods of Optimization*, John Wiley & Sons.

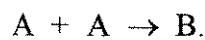
- GARCÍA, C.E., PRETT, D.M. AND MORARI, M. (1989). Model Predictive Control: Theory and Practice - a Survey. *Automatica*, 25 (3), 335-348.
- GILL, P.E., HAMMARLING, S.J., MURRAY, W., SAUNDERS, M.A. AND WRIGHT, M.H. (1986). User's Guide for LSSOL (Version 1.0), Stanford University.
- HALL, G. AND WATT, J.M. (1976). *Modern Numerical Methods for Ordinary Differential Equations*, Clarendon Press, Oxford.
- HERTZBERG, T. AND ASBJORSEN, O.A. (1977). Parameter Estimation in Nonlinear Differential Equations. *Computer Applications in the Analysis of Data and Plants*. Science Press, Princeton.
- JUTAN, A. AND UPPAL, A. (1984). Combined Feedforward-Feedback Servo Control Scheme for an Exothermic Batch Reactor. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, 23, 597-602.
- KRAVARIS, C. AND CHUNG, C.B. (1987). Nonlinear State Feedback Synthesis by Global Input/Output Linearization. *AIChE Journal*, 33 (4), 592-603.
- MICHELSSEN, M.L. AND VILLADSEN, J. (1972). *Chem. Engng. J.*, 4, 64-68.
- MURTAGH, B.A. AND SAUNDERS, M.A. (1993). MINOS 5.4 User's Guide, Stanford University, California.
- NAG (The Numerical Algorithms Group Limited) the NAG Fortran Library Manual, Mark 15, 1991.
- PATWARDHAN, A.A., RAWLINGS, J.B. AND EDGAR, T.F. (1990). Nonlinear Model Predictive Control. *Chem. Eng. Comm.*, 87, 123-141.
- RAY, W.H. AND SZEKELEY, J. (1973). *Process Optimization*, Wiley, New York.

- RENFRO, J.G., MORSHEDI, A.M. AND ASBJORNSEN, O.A. (1987). Simultaneous Optimization and Solution of Systems Described by Differential-Algebraic Equations. *Comput. chem. Engng.*, 11 (5), 503-517.
- RICHALET, J.A., RAULT, A., TESTUD, J.L. AND PAPON, J. (1978). Model Predictive Heuristic Control: Applications to an Industrial Process. *Automatica*, 14, 413-428. *Apud* FISHER, D.G. (1991). Process Control: An Overview and Personal Perspective. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 69, 5-25.
- SEIDER, W.D. AND BRENGEL, D.D. (1991). Nonlinear Analysis in Process Design. *Journal Review - AIChE Journal*, 37 (1), 1-38.
- VILLADSEN, J.V. AND STEWART, W.E. (1967). Solution of Boundary-Value Problems by Orthogonal Collocation. *Chem. Eng. Sci.*, 22, 1483-1501.
- VILLADSEN, J. AND MICHELSEN, M.L. (1978). *Solution of Differential Equation Models by Polynomial Approximation*, Prentice-Hall, New Jersey.

Apêndice A *

Aqui será desenvolvida a resolução de um problema sugerido por Eaton e Rawlings (1990), com o intuito de ressaltar as características principais e a implementação dos métodos da Colocação Ortogonal Global e da Colocação Ortogonal em Elementos Finitos na solução de um problema conhecido em engenharia química.

O problema trata de um reator CSTR isotérmico no qual ocorre uma reação de segunda ordem do tipo:



O reator encontra-se inicialmente num estado estacionário com vazão de alimentação $F=1,3$ l/h e concentração do reagente A $C_A=0,5$ mol/l. Deseja-se obter um novo estado estacionário a partir de uma perturbação na vazão F . A figura A.1 apresenta o reator CSTR juntamente com sua condição inicial e parâmetros.

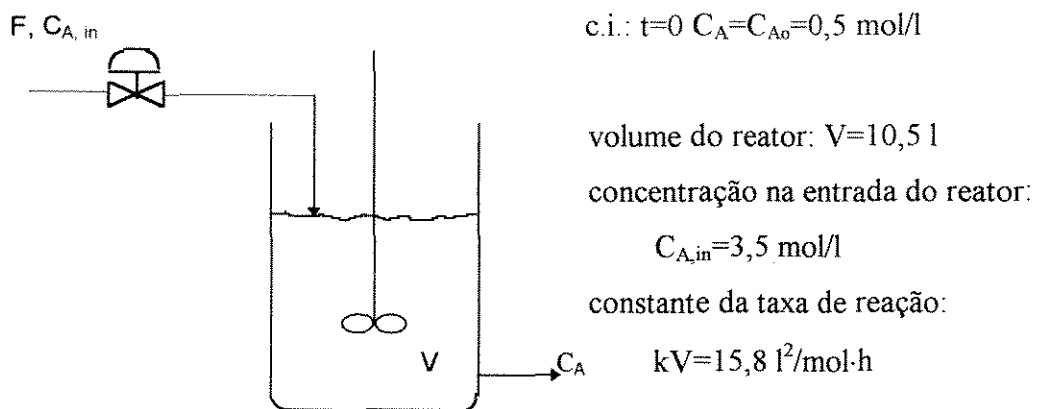


Figura A.1. CSTR isotérmico.

Realizando-se o balanço de massa no reator:

$$\left\{ \begin{array}{c} \text{moles} \\ \text{acumulados} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{c} \text{moles} \\ \text{entram} \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{c} \text{moles} \\ \text{saem} \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{c} \text{moles} \\ \text{reagem} \end{array} \right\}, \quad (\text{A-1})$$

obtêm-se para o modelo matemático:

* Apêndice referente às seções 2.1 e 2.2.

$$\frac{dN_A}{dt} = N_{Ae} - N_A - kVC_A^2 \quad (A-2)$$

$$\frac{VdC_A}{dt} = F(C_{Ae} - C_A) - kVC_A^2 \quad (A-3)$$

$$\frac{VdC_A}{dt} - F(C_{Ae} - C_A) + kVC_A^2 = 0 \quad (A-4)$$

$$\text{c.i.: } t=0 \quad C_A=C_{A0}=0,5 \text{ mol/l.} \quad (A-5)$$

Adimensionalizando a concentração e o tempo entre 0 e 1:

$$\chi_A = \frac{C_A}{C_{A0}} \therefore C_A = \chi_A \cdot C_{A0} \quad (A-6)$$

$$\theta = \frac{t}{t_h} \therefore t = \theta \cdot t_h \quad (A-7)$$

e substituindo-os em (A-4):

$$\frac{VC_{A0}}{t_h} \frac{d\chi_A}{d\theta} - F(C_{A0} - \chi_A C_{A0}) + kV\chi_A^2 C_{A0}^2 = 0 \text{ ou} \quad (A-8)$$

$$\frac{V}{t_h} \frac{d\chi_A}{d\theta} - F\left(\frac{C_{Ae}}{C_{A0}} - \chi_A\right) + kV\chi_A^2 C_{A0} = 0, \quad (A-9)$$

$$\text{com c.i.: } \theta=0: \quad \chi_A=1. \quad (A-10)$$

A aproximação polinomial para a solução deste problema de valor inicial definido sobre um intervalo finito de tempo $\Delta\theta$ pode ser (Biegler, 1984):

$$\chi_A(\theta_i) \cong 1 + \theta_i \sum_{j=1}^N a_j \cdot P_{j-1}(\theta_i). \quad (A-11)$$

De acordo com o procedimento exposto na seção 2.2.1. para a determinação da família de polinômios ortogonais, pode-se concluir que, para o domínio (0, 1), o polinômio ortogonal a ser usado em (A-9) pode ser o de Jacobi, da forma

$$P_N^{0,1}(\theta). \quad (\text{A-12})$$

Aplicando-se o método da Colocação Ortogonal em (A-9), obtém-se

$$\frac{V}{t_h} \sum_{j=1}^{N+2} A_{ij} \cdot \chi_{A_j} - F\left(\frac{C_{A_e}}{C_{A_o}} - \chi_{A_i}\right) + k V \chi_{A_i}^2 C_{A_o} = 0, \quad (\text{A-13})$$

onde N é o número de pontos internos de colocação, A_{ij} é a matriz dos pontos de colocação e $i = 2, \dots, N+2$.

Abrindo o somatório em (A-13) para $N=4$, por exemplo, então:

$$i = 2, \dots, 6$$

(obs.: aqui, χ_{A_i} será representado simplesmente por χ_i)

$i=2$:

$$\begin{aligned} & \frac{V}{t_h} (A_{21} \cdot \chi_1 + A_{22} \cdot \chi_2 + A_{23} \cdot \chi_3 + A_{24} \cdot \chi_4 + A_{25} \cdot \chi_5 + A_{26} \cdot \chi_6) - \\ & F\left(\frac{C_{A_e}}{C_{A_o}} - \chi_2\right) + k V \chi_2^2 C_{A_o} = 0 = \phi_1 \end{aligned} \quad (\text{A-14})$$

$i=3$:

$$\begin{aligned} & \frac{V}{t_h} (A_{31} \cdot \chi_1 + A_{32} \cdot \chi_2 + A_{33} \cdot \chi_3 + A_{34} \cdot \chi_4 + A_{35} \cdot \chi_5 + A_{36} \cdot \chi_6) - \\ & F\left(\frac{C_{A_e}}{C_{A_o}} - \chi_3\right) + k V \chi_3^2 C_{A_o} = 0 = \phi_2 \end{aligned} \quad (\text{A-15})$$

$i=4$:

$$\begin{aligned} & \frac{V}{t_h} (A_{41} \cdot \chi_1 + A_{42} \cdot \chi_2 + A_{43} \cdot \chi_3 + A_{44} \cdot \chi_4 + A_{45} \cdot \chi_5 + A_{46} \cdot \chi_6) - \\ & F\left(\frac{C_{A_e}}{C_{A_o}} - \chi_4\right) + k V \chi_4^2 C_{A_o} = 0 = \phi_3 \end{aligned} \quad (\text{A-16})$$

i=5:

$$\begin{aligned} & \frac{V}{t_h} (A_{51} \cdot \chi_1 + A_{52} \cdot \chi_2 + A_{53} \cdot \chi_3 + A_{54} \cdot \chi_4 + A_{55} \cdot \chi_5 + A_{56} \cdot \chi_6) - \\ & F\left(\frac{C_{A_e}}{C_{A_0}} - \chi_5\right) + k V \chi_5^2 C_{A_0} = 0 = \phi_4 \end{aligned} \quad (A-17)$$

i=6:

$$\begin{aligned} & \frac{V}{t_h} (A_{61} \cdot \chi_1 + A_{62} \cdot \chi_2 + A_{63} \cdot \chi_3 + A_{64} \cdot \chi_4 + A_{65} \cdot \chi_5 + A_{66} \cdot \chi_6) - \\ & F\left(\frac{C_{A_e}}{C_{A_0}} - \chi_6\right) + k V \chi_6^2 C_{A_0} = 0 = \phi_5 \end{aligned} \quad (A-18)$$

e

$$i=1: \quad \chi_1 = 1 \quad (\theta = 0). \quad (A-19)$$

Como o sistema de equações algébricas, (A-14) a (A-19), obtido é não-linear, será usado o método de Newton-Raphson (com a formação do Jacobiano de ordem 5x5) antes de usar Gauss para resolver o sistema acima.

Para aplicar a Colocação Ortogonal em Elementos Finitos ao exemplo proposto anteriormente, parte-se da eq.(A-9) já adimensionalizada em (0,1).

O primeiro passo é dividir o domínio $0 \leq \theta \leq 1$ em NE-elementos e realizar, em cada elemento, uma mudança na variável independente para que ela vá de 0 a 1. Então,

$$z^{(k)} = \frac{\theta - \theta_k}{\theta_{k+1} - \theta_k} = \frac{\theta - \theta_k}{\Delta\theta^{(k)}}, \quad (A-20)$$

para um elemento k, de extensão θ_k à θ_{k+1} , e

$$\begin{aligned} \theta &= z^{(k)} \Delta\theta^{(k)} + \theta_k \\ d\theta &= \Delta\theta^{(k)} dz^{(k)}. \end{aligned} \quad (A-21)$$

Logo, a eq. (A-9) fica:

$$\frac{V}{t_h} \frac{1}{\Delta\theta^{(k)}} \frac{d\chi_A}{dz^{(k)}} - F\left(\frac{C_{A_e}}{C_{A_0}} - \chi_A\right) + k V \chi_A^2 C_{A_0} = 0, \quad (A-22)$$

$$\text{com c.i.: } z^{(1)} = 0 \quad \chi_A = 1. \quad (\text{A-23})$$

Para se garantir a continuidade da função e da sua primeira derivada em cada ponto de interseção (ou nós) entre os subintervalos (ou elementos), faz-se:

$$\chi_{A_{N+2}}^{(k-1)} = \chi_{A_1}^{(k)} \quad ; \quad \chi_{A_{N+2}}^{(k)} = \chi_{A_1}^{(k+1)} \quad (\text{A-24})$$

$$\left. \frac{d\chi_A}{d\theta} \right|_{(k-1)} = \left. \frac{d\chi_A}{d\theta} \right|_{(k)} \quad \text{ou} \quad \frac{1}{\Delta\theta^{(k-1)}} \frac{d\chi_A}{dz^{(k-1)}} = \frac{1}{\Delta\theta^{(k)}} \frac{d\chi_A}{dz^{(k)}} ; \quad (\text{A-25})$$

$$\left. \frac{d\chi_A}{d\theta} \right|_{(k)} = \left. \frac{d\chi_A}{d\theta} \right|_{(k+1)} \quad \text{ou} \quad \frac{1}{\Delta\theta^{(k)}} \frac{d\chi_A}{dz^{(k)}} = \frac{1}{\Delta\theta^{(k+1)}} \frac{d\chi_A}{dz^{(k+1)}} .$$

Aplicando-se a Colocação Ortogonal em (A-22), para cada subintervalo k:

$$\frac{V}{t_h \Delta\theta^{(k)}} \sum_{j=1}^{N+2} \mathbf{A}_{ij} \cdot \chi_{A_j}^{(k)} - F\left(\frac{C_{Ae}}{C_{Ao}} - \chi_{A_i}^{(k)}\right) + k V \chi_{A_i}^{2(k)} C_{Ao} = 0 , \quad (\text{A-26})$$

$$\text{com c.i.: } z_1^{(1)} = 0: \quad \chi_{A,1}^{(1)} = 1 , \quad (\text{A-27})$$

onde NE é número de elementos de tamanhos iguais, ou não, $\chi_{A,i}^{(k)}$ é a solução no ponto de colocação i do elemento k, $\Delta\theta^{(k)}$ é a extensão do elemento k, $k = 1, \dots, NE$ e $i=2, \dots, N+1$ (ou $N+2$, para o último elemento).

Obs.: Não se aplica o método nos pontos de interseção, pois tem-se a condição de continuidade da primeira derivada e da sua função. Para o último elemento, como não se tem uma condição de contorno, aplica-se a colocação ortogonal no ponto $N+2$.

Também, aplicando-se a Colocação Ortogonal em (A-25), tem-se:

$$\frac{1}{\Delta\theta^{(k-1)}} \sum_{j=1}^{N+2} \mathbf{A}_{N+2,j} \cdot \chi_{A_j}^{(k-1)} = \frac{1}{\Delta\theta^{(k)}} \sum_{j=1}^{N+2} \mathbf{A}_{1,j} \cdot \chi_{A_j}^{(k)}$$

e

$$\frac{1}{\Delta\theta^{(k)}} \sum_{j=1}^{N+2} \mathbf{A}_{N+2,j} \cdot \chi_{A_j}^{(k)} = \frac{1}{\Delta\theta^{(k+1)}} \sum_{j=1}^{N+2} \mathbf{A}_{1,j} \cdot \chi_{A_j}^{(k+1)}$$
(A-28)

Abrindo-se os somatórios em (A-26) e (A-28) para NE=4 e N=2, por exemplo, tem-se:

$i = 2, 3$ (ou até 4, para o último elemento) e $k = 1, \dots, 4$
 (obs.: aqui, $\chi_{A,i}^{(k)}$ será representado simplesmente por $\chi_i^{(k)}$)

elemento 1:

$$\begin{aligned} & i=2: \\ & \frac{V}{t_h \Delta\theta^{(1)}} (A_{21} \cdot \chi_1^{(1)} + A_{22} \cdot \chi_2^{(1)} + A_{23} \cdot \chi_3^{(1)} + A_{24} \cdot \chi_4^{(1)}) - \\ & F\left(\frac{C_{A_e}}{C_{A_o}} - \chi_2^{(1)}\right) + k V \chi_2^{(1)2} C_{A_o} = 0 = \phi_1 \end{aligned}$$
(A-29)

$$\begin{aligned} & i=3: \\ & \frac{V}{t_h \Delta\theta^{(1)}} (A_{31} \cdot \chi_1^{(1)} + A_{32} \cdot \chi_2^{(1)} + A_{33} \cdot \chi_3^{(1)} + A_{34} \cdot \chi_4^{(1)}) - \\ & F\left(\frac{C_{A_e}}{C_{A_o}} - \chi_3^{(1)}\right) + k V \chi_3^{(1)2} C_{A_o} = 0 = \phi_2 \end{aligned}$$
(A-30)

nó(1):

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta\theta^{(1)}} (A_{41} \cdot \chi_1^{(1)} + A_{42} \cdot \chi_2^{(1)} + A_{43} \cdot \chi_3^{(1)} + A_{44} \cdot \chi_4^{(1)}) - \\ & \frac{1}{\Delta\theta^{(2)}} (A_{11} \cdot \chi_1^{(2)} + A_{12} \cdot \chi_2^{(2)} + A_{13} \cdot \chi_3^{(2)} + A_{14} \cdot \chi_4^{(2)}) = 0 = \phi_3 \end{aligned}$$
(A-31)

$$\chi_4^{(1)} = \chi_1^{(2)}$$
(A-32)

elemento 2:

$i=2:$

$$\begin{aligned} & \frac{V}{t_h \Delta \theta^{(2)}} (A_{21} \cdot \chi_1^{(2)} + A_{22} \cdot \chi_2^{(2)} + A_{23} \cdot \chi_3^{(2)} + A_{24} \cdot \chi_4^{(2)}) - \\ & F\left(\frac{C_{A_e}}{C_{A_o}} - \chi_2^{(2)}\right) + k V \chi_2^{(2)2} C_{A_o} = 0 = \phi_4 \end{aligned} \quad (A-33)$$

i=3:

$$\begin{aligned} & \frac{V}{t_h \Delta \theta^{(2)}} (A_{31} \cdot \chi_1^{(2)} + A_{32} \cdot \chi_2^{(2)} + A_{33} \cdot \chi_3^{(2)} + A_{34} \cdot \chi_4^{(2)}) - \\ & F\left(\frac{C_{A_e}}{C_{A_o}} - \chi_3^{(2)}\right) + k V \chi_3^{(2)2} C_{A_o} = 0 = \phi_5 \end{aligned} \quad (A-34)$$

nó(2):

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta \theta^{(2)}} (A_{41} \cdot \chi_1^{(2)} + A_{42} \cdot \chi_2^{(2)} + A_{43} \cdot \chi_3^{(2)} + A_{44} \cdot \chi_4^{(2)}) - \\ & \frac{1}{\Delta \theta^{(3)}} (A_{11} \cdot \chi_1^{(3)} + A_{12} \cdot \chi_2^{(3)} + A_{13} \cdot \chi_3^{(3)} + A_{14} \cdot \chi_4^{(3)}) = 0 = \phi_6 \end{aligned} \quad (A-35)$$

$$\chi_4^{(2)} = \chi_1^{(3)} \quad (A-36)$$

elemento 3:

i=2:

$$\begin{aligned} & \frac{V}{t_h \Delta \theta^{(3)}} (A_{21} \cdot \chi_1^{(3)} + A_{22} \cdot \chi_2^{(3)} + A_{23} \cdot \chi_3^{(3)} + A_{24} \cdot \chi_4^{(3)}) - \\ & F\left(\frac{C_{A_e}}{C_{A_o}} - \chi_2^{(3)}\right) + k V \chi_2^{(3)2} C_{A_o} = 0 = \phi_7 \end{aligned} \quad (A-37)$$

i=3:

$$\begin{aligned} & \frac{V}{t_h \Delta \theta^{(3)}} (A_{31} \cdot \chi_1^{(3)} + A_{32} \cdot \chi_2^{(3)} + A_{33} \cdot \chi_3^{(3)} + A_{34} \cdot \chi_4^{(3)}) - \\ & F\left(\frac{C_{A_e}}{C_{A_o}} - \chi_3^{(3)}\right) + k V \chi_3^{(3)2} C_{A_o} = 0 = \phi_8 \end{aligned} \quad (A-38)$$

nó(3):

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta \theta^{(3)}} (A_{41} \cdot \chi_1^{(3)} + A_{42} \cdot \chi_2^{(3)} + A_{43} \cdot \chi_3^{(3)} + A_{44} \cdot \chi_4^{(3)}) - \\ & \frac{1}{\Delta \theta^{(4)}} (A_{11} \cdot \chi_1^{(4)} + A_{12} \cdot \chi_2^{(4)} + A_{13} \cdot \chi_3^{(4)} + A_{14} \cdot \chi_4^{(4)}) = 0 = \phi_9 \end{aligned} \quad (A-39)$$

$$\chi_4^{(3)} = \chi_1^{(4)} \quad (A-40)$$

elemento 4:

i=2:

$$\begin{aligned} & \frac{V}{t_h \Delta \theta^{(4)}} (A_{21} \cdot \chi_1^{(4)} + A_{22} \cdot \chi_2^{(4)} + A_{23} \cdot \chi_3^{(4)} + A_{24} \cdot \chi_4^{(4)}) - \\ & F\left(\frac{C_{A_e}}{C_{A_o}} - \chi_2^{(4)}\right) + k V \chi_2^{(4)^2} C_{A_o} = 0 = \phi_{10} \end{aligned} \quad (A-41)$$

i=3:

$$\begin{aligned} & \frac{V}{t_h \Delta \theta^{(4)}} (A_{31} \cdot \chi_1^{(4)} + A_{32} \cdot \chi_2^{(4)} + A_{33} \cdot \chi_3^{(4)} + A_{34} \cdot \chi_4^{(4)}) - \\ & F\left(\frac{C_{A_e}}{C_{A_o}} - \chi_3^{(4)}\right) + k V \chi_3^{(4)^2} C_{A_o} = 0 = \phi_{11} \end{aligned} \quad (A-42)$$

i=4:

$$\begin{aligned} & \frac{V}{t_h \Delta \theta^{(4)}} (A_{41} \cdot \chi_1^{(4)} + A_{42} \cdot \chi_2^{(4)} + A_{43} \cdot \chi_3^{(4)} + A_{44} \cdot \chi_4^{(4)}) - \\ & F\left(\frac{C_{A_e}}{C_{A_o}} - \chi_4^{(4)}\right) + k V \chi_4^{(4)^2} C_{A_o} = 0 = \phi_{12} \end{aligned} \quad (A-43)$$

e

$$i=1: \quad \chi_1^{(1)} = 1 \quad (z^{(1)}=0). \quad (A-44)$$

Como o sistema de equações algébricas, (A-29) a (A-44), obtido é não-linear, será usado o método de Newton-Raphson (com a formação do Jacobiano de ordem 12x12) antes de usar Gauss ou Decomposição LU para resolver o sistema acima.

A partir de dados fornecidos por Eaton e Rawlings (1990), pôde-se rodar o programa de aplicação do método da Colocação Ortogonal Global e o de aplicação do método da Colocação Ortogonal em Elementos Finitos apresentando os resultados vistos na figura A.2, a qual também contém resultados da aplicação do método Runge-Kutta-Gill para comparação.

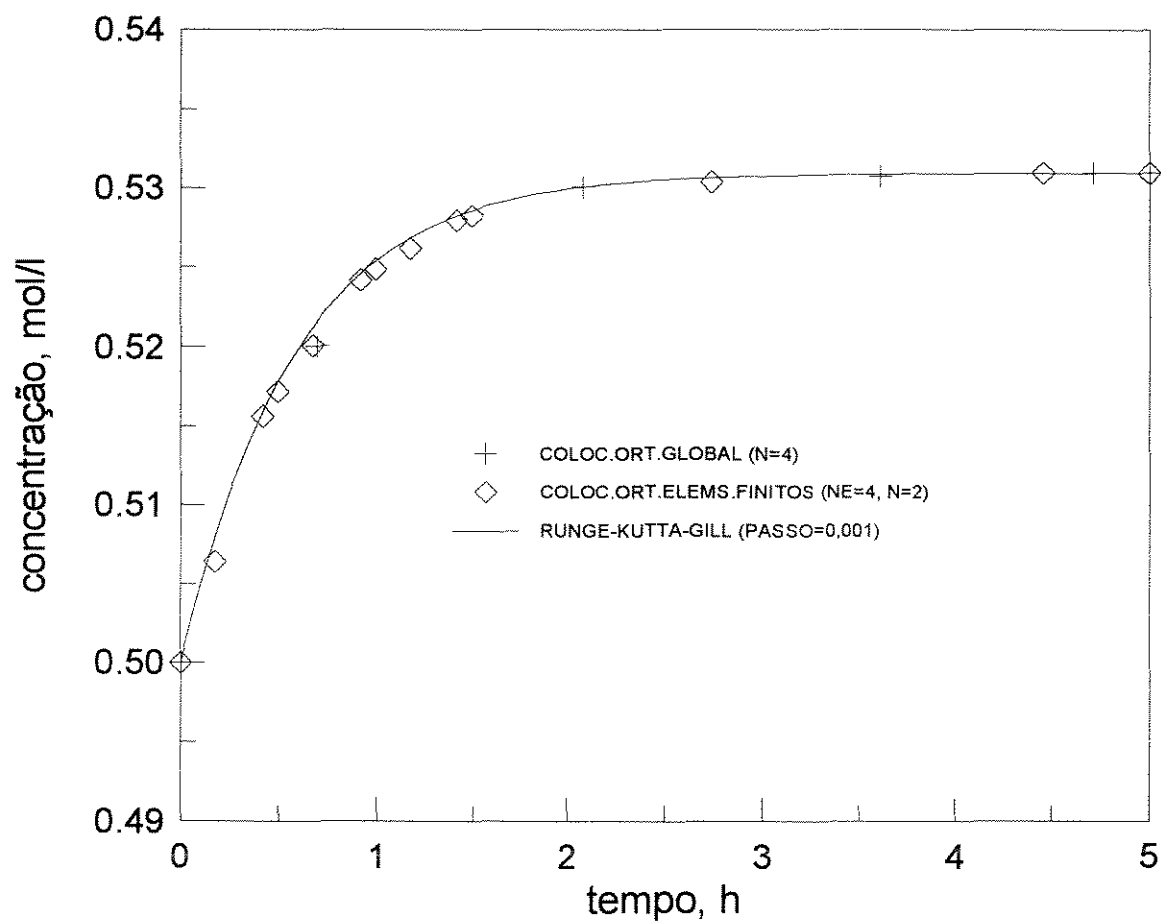


Figura A.2. Resultado dos métodos da Colocação Ortogonal Global ($N=4$), da Colocação Ortogonal em Elementos Finitos ($NE=4$, $N=2$) - para polinômio de Jacobi com $\alpha=0$ e $\beta=1$ - e Runge-Kutta-Gill (passo=0,001); para vazão de 1,5 mol/l e horizonte de tempo de 5 h.

Apêndice B *

São apresentados alguns detalhes sobre a implementação do NMPC ao problema de controle do tanque de aquecimento, visando-se ressaltar a estrutura de algumas matrizes além dos parâmetros necessários para a implementação do mesmo, através dos métodos da Colocação Ortogonal em Elementos Finitos e da Programação Quadrática Sucessiva (SQP).

Uma vez que se trabalha com o método da Colocação Ortogonal em Elementos Finitos, para discretizar as equações diferenciais do modelo precisa-se inicialmente definir o polinômio ortogonal a ser usado na expansão das soluções T e T_p e determinar os pontos de colocação, a matriz dos pontos de colocação e os pesos de quadratura Gaussiana. Para este exemplo, assume-se $NE=2$ e $N=1$.

A aproximação polinomial para o problema de valor inicial definido sobre o intervalo finito de tempo $\Delta\theta$ é como se segue.

Dada a equação diferencial ordinária (3-21) com condição inicial (3-23), sua solução pode ser aproximada por (Biegler, 1984):

$$T(z) \cong 25 + z \cdot a_1 P_0(z). \quad (B-1)$$

Obedecendo o procedimento exposto na seção 2.2.1. para a determinação da família de polinômios ortogonais, pode-se concluir que, para um intervalo $a=0$ e $b=1$, o polinômio ortogonal a ser usado em (B-1) pode ser o de Jacobi, da forma

$$P_N^{0,1}(z). \quad (B-2)$$

Esta conclusão também se aplica para a solução aproximada $T_p(z)$ da eq.(3-22).

Realizadas todas as etapas, descritas nos capítulos 2 e 3, necessárias para a discretização das equações envolvidas no problema a ser resolvido pelo controlador, então este pode ser estabelecido como se segue.

* Apêndice referente ao capítulo 3.

Minimizar a função objetivo de controle:

$$\Phi = \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^3 \omega_i \left\{ \left[54 + 71 \cdot \exp\left(-2,5 \cdot 10^{-3} (t_h(z_i^{(k)} \cdot \Delta\theta^{(k)} + \theta_k) + t_0)\right) \right] - T_i^{(k)} \right\}^2, \quad (\text{B-3})$$

cujas variáveis de decisão são: $F_c^{(k)}$, $T_s^{(k)}$, $T_{p,i}^{(k)}$ e $T_i^{(k)}$,

com: $i = 2, 3$ e $k = 1, 2$,

sujeita a:

(i) Equações do modelo discretizadas:

$$\frac{1}{t_h \Delta\theta^{(k)}} \sum_{j=1}^3 \mathbf{A}_{ij} \cdot T_j^{(k)} - \frac{1}{\rho V c_p} \{ h_p A_p (T_{p_i}^{(k)} - T_i^{(k)}) - F_c^{(k)} \rho_c c_{p_c} (T_i^{(k)} - T_{c_e}) [1 - \exp\{(-U_c^{(k)} A_c) / (F_c^{(k)} \rho_c c_{p_c})\}] \} = 0 \quad (\text{B-4})$$

$$\frac{1}{t_h \Delta\theta^{(k)}} \sum_{j=1}^3 \mathbf{A}_{ij} \cdot T_{p_j}^{(k)} - \frac{1}{c_{p_p} M_p} \{ h_{p_0} A_{p_0} (T_s^{(k)} - T_{p_i}^{(k)}) - h_p A_p (T_{p_i}^{(k)} - T_i^{(k)}) \} = 0 \quad (\text{B-5})$$

$$U_c^{(k)} = \frac{A_1 A_2 F_c^{(k)b}}{A_2 + A_1 F_c^{(k)b}}, \quad (\text{B-6})$$

com: $i = 2, 3$ e $k = 1, 2$.

Os valores de z_i (pontos de colocação), \mathbf{A}_{ij} (matriz dos pontos de colocação) e ω_i (pesos de Quadratura Gaussiana) são determinados através das subrotinas **JCOBI** e **DFOPR** (Villadsen e Michelsen, 1978), para o polinômio ortogonal definido (B-2).

(ii) Condições iniciais e de continuidade das variáveis de estado:

$$z_1^{(1)}=0; \quad T_1^{(1)} = 25 \text{ }^{\circ}\text{C}; \quad T_{p1}^{(1)} = 25 \text{ }^{\circ}\text{C}; \quad (\text{B-7})$$

$$T_3^{(1)} = T_1^{(2)} \quad \text{e} \quad (\text{B-8})$$

$$T_{p3}^{(1)} = T_{p1}^{(2)}. \quad (\text{B-9})$$

(iii) Definição do horizonte de controle (t_c):

$$F_C^{(k)} = F_C^{(k+1)}, \quad (\text{B-10})$$

com $k = t_c, \dots, t_h-1$, para $t_h > t_c$.

(iv) Limites nas variáveis:

- manipuladas:

$$\begin{aligned} 70 &\leq T_s^{(k)} \leq 150 \text{ }^{\circ}\text{C} \\ 2,5 \cdot 10^{-4} &\leq F_C^{(k)} \leq 6,5 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s}, \end{aligned} \quad (\text{B-11})$$

com $k = 1, 2$,

- de estado:

$$\begin{aligned} 0 &\leq T_i^{(k)} \leq \infty \\ 0 &\leq T_p^{(k)} \leq \infty, \end{aligned} \quad (\text{B-12})$$

com $i = 2, 3$ e $k = 1, 2$.

Para a resolução deste problema de controle, precisa-se definir t_c (horizonte de controle) e $\Delta\theta$ (ou τ , período de amostragem) e, a partir deste, t_h (horizonte de predição).

Definindo alguns parâmetros importantes para a implementação do SQP, têm-se:

$$NV = 2 \cdot (2 \cdot 1 + 4) = 12 \quad (\text{B-13})$$

$$NRLIN = 2 \cdot (1 + 1) = 4 \quad (\text{B-14})$$

$$NRNLN = 2 \cdot (1 + 1) = 4. \quad (\text{B-15})$$

E o vetor das variáveis é:

$$\mathbf{v}' = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1' \\ \mathbf{v}_2' \end{bmatrix},$$

com $\mathbf{v}_1' = [F_c^{(1)}, T_s^{(1)}, T_{p_2}^{(1)}, T_{p_3}^{(1)}, T_2^{(1)}, T_3^{(1)}]^T$ e

$$\mathbf{v}_2' = [F_c^{(2)}, T_s^{(2)}, T_{p_2}^{(2)}, T_{p_3}^{(2)}, T_2^{(2)}, T_3^{(2)}]^T. \quad (\text{B-16})$$

Abrindo os somatórios da equação (B-5), tem-se:

$$\begin{aligned} \Phi = & \omega_1 \{ [54 + 71 \cdot \exp(-2,5 \cdot 10^{-3} (t_h(z_1 \Delta \theta^{(1)} + \theta_1) + t_o))] - T_1^{(1)} \}^2 + \\ & \omega_2 \{ [54 + 71 \cdot \exp(-2,5 \cdot 10^{-3} (t_h(z_2 \Delta \theta^{(1)} + \theta_1) + t_o))] - T_2^{(1)} \}^2 + \\ & \omega_3 \{ [54 + 71 \cdot \exp(-2,5 \cdot 10^{-3} (t_h(z_3 \Delta \theta^{(1)} + \theta_1) + t_o))] - T_3^{(1)} \}^2 + \\ & \omega_1 \{ [54 + 71 \cdot \exp(-2,5 \cdot 10^{-3} (t_h(z_1 \Delta \theta^{(2)} + \theta_2) + t_o))] - T_1^{(2)} \}^2 + \\ & \omega_2 \{ [54 + 71 \cdot \exp(-2,5 \cdot 10^{-3} (t_h(z_2 \Delta \theta^{(2)} + \theta_2) + t_o))] - T_2^{(2)} \}^2 + \\ & \omega_3 \{ [54 + 71 \cdot \exp(-2,5 \cdot 10^{-3} (t_h(z_3 \Delta \theta^{(2)} + \theta_2) + t_o))] - T_3^{(2)} \}^2. \end{aligned} \quad (\text{B-17})$$

Abrindo os somatórios das equações (B-4) e (B-5), tem-se:

k=1:

i=2:

$$\frac{1}{t_h \Delta\theta^{(1)}} (A_{21} \cdot T_1^{(1)} + A_{22} \cdot T_2^{(1)} + A_{23} \cdot T_3^{(1)}) - C_1 \{ C_2 (T_{p_2}^{(1)} - T_2^{(1)}) - F_c^{(1)} C_3 (T_2^{(1)} - T_{c_e}) [1 - \exp\{(-U_c^{(1)} A_c) / (F_c^{(1)} C_3)\}] \} = 0 = \text{RNL}(1) \quad (\text{B-18})$$

$$\frac{1}{t_h \Delta\theta^{(1)}} (A_{21} \cdot T_{p_1}^{(1)} + A_{22} \cdot T_{p_2}^{(1)} + A_{23} \cdot T_{p_3}^{(1)}) - C_4 [C_5 (T_s^{(1)} - T_{p_2}^{(1)}) - C_2 (T_{p_2}^{(1)} - T_2^{(1)})] = 0 = \text{RL}(1) \quad (\text{B-19})$$

i=3:

$$\frac{1}{t_h \Delta\theta^{(1)}} (A_{31} \cdot T_1^{(1)} + A_{32} \cdot T_2^{(1)} + A_{33} \cdot T_3^{(1)}) - C_1 \{ C_2 (T_{p_3}^{(1)} - T_3^{(1)}) - F_c^{(1)} C_3 (T_3^{(1)} - T_{c_e}) [1 - \exp\{(-U_c^{(1)} A_c) / (F_c^{(1)} C_3)\}] \} = 0 = \text{RNL}(2) \quad (\text{B-20})$$

$$\frac{1}{t_h \Delta\theta^{(1)}} (A_{31} \cdot T_{p_1}^{(1)} + A_{32} \cdot T_{p_2}^{(1)} + A_{33} \cdot T_{p_3}^{(1)}) - C_4 [C_5 (T_s^{(1)} - T_{p_3}^{(1)}) - C_2 (T_{p_3}^{(1)} - T_3^{(1)})] = 0 = \text{RL}(2) \quad (\text{B-21})$$

k=2:

i=2:

$$\frac{1}{t_h \Delta\theta^{(2)}} (A_{21} \cdot T_1^{(2)} + A_{22} \cdot T_2^{(2)} + A_{23} \cdot T_3^{(2)}) - C_1 \{ C_2 (T_{p_2}^{(2)} - T_2^{(2)}) - F_c^{(2)} C_3 (T_2^{(2)} - T_{c_e}) [1 - \exp\{(-U_c^{(2)} A_c) / (F_c^{(2)} C_3)\}] \} = 0 = \text{RNL}(3) \quad (\text{B-22})$$

$$\frac{1}{t_h \Delta\theta^{(2)}} (A_{21} \cdot T_{p_1}^{(2)} + A_{22} \cdot T_{p_2}^{(2)} + A_{23} \cdot T_{p_3}^{(2)}) - C_4 [C_5 (T_s^{(2)} - T_{p_2}^{(2)}) - C_2 (T_{p_2}^{(2)} - T_2^{(2)})] = 0 = \text{RL}(3) \quad (\text{B-23})$$

i=3:

$$\frac{1}{t_h \Delta\theta^{(2)}} (A_{31} \cdot T_1^{(2)} + A_{32} \cdot T_2^{(2)} + A_{33} \cdot T_3^{(2)}) - C_1 \{ C_2 (T_{p_3}^{(2)} - T_3^{(2)}) - F_c^{(2)} C_3 (T_3^{(2)} - T_{c_e}) [1 - \exp\{(-U_c^{(2)} A_c) / (F_c^{(2)} C_3)\}] \} = 0 = \text{RNL}(4) \quad (\text{B-24})$$

$$\frac{1}{t_h \Delta\theta^{(2)}} (A_{31} \cdot T_{p1}^{(2)} + A_{32} \cdot T_{p2}^{(2)} + A_{33} \cdot T_{p3}^{(2)}) - C_4 [C_5 (T_s^{(2)} - T_{p3}^{(2)}) - C_2 (T_{p3}^{(2)} - T_3^{(2)})] = 0 = \text{RL}(4), \quad (\text{B-25})$$

$$\text{onde: } C_1 = \frac{1}{\rho V c_p}; C_2 = h_p A_p; C_3 = \rho_c c_{p_c}; C_4 = \frac{1}{c_{p_p} M_p} \text{ e } C_5 = h_{p_o} A_{p_o}. \quad (\text{B-26})$$

Os vetores dos limites inferior (**LI**) e superior (**LS**) são definidos como se segue:

- das variáveis:

$$\mathbf{LI} = (2,5 \cdot 10^{-4}, 70, -\infty, -\infty, -\infty, -\infty, 2,5 \cdot 10^{-4}, 70, -\infty, -\infty, -\infty, -\infty)^T, \quad (\text{B-27})$$

com número de elementos = NV = 12 e

$$\mathbf{LS} = (6,5 \cdot 10^{-4}, 150, +\infty, +\infty, +\infty, +\infty, 6,5 \cdot 10^{-4}, 150, +\infty, +\infty, +\infty, +\infty)^T, \quad (\text{B-28})$$

com número de elementos = NV = 12;

- das restrições lineares de igualdade:

$$\mathbf{LI} = \left(\frac{A_{21} \cdot T_{p1}^{(1)}}{t_h \Delta\theta^{(1)}}, \frac{A_{31} \cdot T_{p1}^{(1)}}{t_h \Delta\theta^{(1)}}, \frac{A_{21} \cdot T_{p1}^{(2)}}{t_h \Delta\theta^{(2)}}, \frac{A_{31} \cdot T_{p1}^{(2)}}{t_h \Delta\theta^{(2)}} \right)^T = \mathbf{LS} \quad (\text{B-29})$$

com número de elementos = NRLIN = 4;

- das restrições não-lineares de igualdade:

$$\mathbf{LI} = (0, 0, 0, 0)^T = \mathbf{LS} \quad (\text{B-30})$$

com número de elementos = NRNLN = 4.

Os gradientes das restrições lineares de igualdade, na verdade uma matriz dos coeficientes, de ordem 4x12, apresenta a seguinte estrutura:

$$\begin{bmatrix} 0 & C_{45} & \frac{A_{22}}{t_h \Delta \theta^{(1)}} + C_{452} & \frac{A_{23}}{t_h \Delta \theta^{(1)}} & C_{42} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & C_{45} & \frac{A_{32}}{t_h \Delta \theta^{(1)}} & \frac{A_{33}}{t_h \Delta \theta^{(1)}} + C_{452} & 0 & C_{42} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{A_{21}}{t_h \Delta \theta^{(2)}} & 0 & 0 & 0 & C_{45} & \frac{A_{22}}{t_h \Delta \theta^{(2)}} + C_{452} & \frac{A_{23}}{t_h \Delta \theta^{(2)}} & C_{42} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{A_{31}}{t_h \Delta \theta^{(2)}} & 0 & 0 & 0 & C_{45} & \frac{A_{32}}{t_h \Delta \theta^{(2)}} & \frac{A_{33}}{t_h \Delta \theta^{(2)}} + C_{452} & 0 & C_{42} \end{bmatrix}, \quad (B-31)$$

onde: $C_{45} = -C_4 C_5$; $C_{452} = C_4(C_5 + C_2)$ e $C_{42} = -C_4 C_2$. (B-32)

O Jacobiano das restrições não-lineares de igualdade, uma matriz esparsa de ordem 4x12, apresenta a estrutura diagonal em bloco mostrada a seguir:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial RNL(1)}{\partial F_c^{(1)}} & 0 & C_{12} & 0 & \frac{\partial RNL(1)}{\partial T_2^{(1)}} & \frac{A_{23}}{t_h \Delta \theta^{(1)}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\partial RNL(2)}{\partial F_c^{(1)}} & 0 & 0 & C_{12} & \frac{A_{32}}{t_h \Delta \theta^{(1)}} & \frac{\partial RNL(2)}{\partial T_3^{(1)}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{A_{21}}{t_h \Delta \theta^{(2)}} & \frac{\partial RNL(3)}{\partial F_c^{(2)}} & 0 & C_{12} & 0 & \frac{\partial RNL(3)}{\partial T_2^{(2)}} & \frac{A_{23}}{t_h \Delta \theta^{(2)}} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{A_{31}}{t_h \Delta \theta^{(2)}} & \frac{\partial RNL(4)}{\partial F_c^{(2)}} & 0 & 0 & C_{12} & \frac{A_{32}}{t_h \Delta \theta^{(2)}} & \frac{\partial RNL(4)}{\partial T_3^{(2)}} \end{bmatrix}, \quad (B-33)$$

onde: $C_{12} = -C_1 C_2$. (B-34)

Obs.: as derivadas que aparecem na matriz acima não são apresentadas aqui, mas podem ser facilmente desenvolvidas.

O gradiente da função objetivo, vetor de ordem 12, é o seguinte:

$$\mathbf{GFO} = \left[0, 0, 0, 0, -2\omega_2(T_{d2}^{(1)} - T_2^{(1)}), -2\omega_3(T_{d3}^{(1)} - T_3^{(1)}), 0, 0, 0, 0, -2\omega_2(T_{d2}^{(2)} - T_2^{(2)}), -2\omega_3(T_{d3}^{(2)} - T_3^{(2)}) \right]^T, \quad (B-35)$$

onde:

$$\begin{aligned}
 T_{d_2}^{(1)} &= 54 + 71 \cdot \exp\left[-2,5 \cdot 10^{-3}(t_h(z_2 \Delta\theta^{(1)} + \theta_1) + t_o)\right] \\
 T_{d_3}^{(1)} &= 54 + 71 \cdot \exp\left[-2,5 \cdot 10^{-3}(t_h(z_3 \Delta\theta^{(1)} + \theta_1) + t_o)\right] \\
 T_{d_2}^{(2)} &= 54 + 71 \cdot \exp\left[-2,5 \cdot 10^{-3}(t_h(z_2 \Delta\theta^{(2)} + \theta_2) + t_o)\right] \\
 T_{d_3}^{(2)} &= 54 + 71 \cdot \exp\left[-2,5 \cdot 10^{-3}(t_h(z_3 \Delta\theta^{(2)} + \theta_2) + t_o)\right].
 \end{aligned} \tag{B-36}$$