

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
ÁREA DE CONCENTRAÇÃO
DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

*Modelagem e Otimização de Processos para
Implementação em Tempo Real*

AUTORA: MYLENE CRISTINA ALVES FERREIRA REZENDE
ORIENTADOR: Prof. Dr. RUBENS MACIEL FILHO
CO-ORIENTADORA: Profa. Dra. ALINE CARVALHO DA COSTA

Tese de Doutorado apresentada à Faculdade de Engenharia Química da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Doutora em Engenharia Química.

Campinas – São Paulo

Julho de 2007

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

R339m Rezende, Mylene Cristina Alves Ferreira
Modelagem e otimização de processos para
implementação em tempo real / Mylene Cristina Alves
Ferreira Rezende.--Campinas, SP: [s.n.], 2007.

Orientadores: Rubens Maciel Filho, Aline Carvalho
da Costa.

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

1. Otimização. 2. Algoritmos genéticos. 3.
Modelagem. 4. Controle em tempo real. 5.
Prototipagem rápida. I. Maciel Filho, Rubens. II. Costa,
Aline Carvalho da. III. Universidade Estadual de
Campinas. Faculdade de Engenharia Química. IV.
Título.

Título em Inglês: Modelling and optimization processes for real time
implementation.

Palavras-chave em Inglês: Optimization, Genetic algorithms, Modelling,
Real time control, Rapid prototyping.

Área de concentração: Desenvolvimento de Processos Químicos.

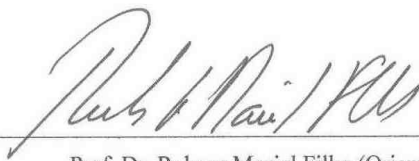
Titulação: Doutor em Engenharia Química

Banca examinadora: Paulo Jorge da Silva Bártolo, Caliane Bastos Borba
Costa, Edson Thomaz e Valdir Apolinário de Freitas.

Data da defesa: 16/07/2007

Programa de Pós-Graduação: Engenharia Química

Tese de Doutorado defendida por Mylene Cristina Alves Ferreira Rezende e aprovada em 16 de Julho de 2007 pela banca examinadora constituída pelos doutores:



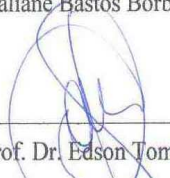
Prof. Dr. Rubens Maciel Filho (Orientador)



Prof. Dr. Paulo Jorge da Silva Bártolo (Titular)



Dra. Caliane Bastos Borba Costa (Titular)



Prof. Dr. Edson Tomaz (Titular)



Dr. Valdir Apolinário de Freitas (Titular)

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

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

Prof. Dr. Rubens Maciel Filho (Orientador)

Ao meu amor, Rodrigo.

Agradecimentos

Tenho muito a agradecer a Deus por ter me dado força e coragem para vencer esta etapa.

Agradeço em especial ao meu marido Rodrigo, por todo o amor e todo cuidado. Por cada sorriso e cada palavra de carinho e de incentivo que tanto bem me fazem. Por me proteger, por acreditar tanto em mim e por seu apoio incondicional em qualquer situação. Por sua generosidade, sua paciência e por seu entusiasmo diante das oportunidades que surgem nas nossas vidas. Por querer sempre o melhor pra mim e não medir esforços para me fazer feliz.

Aos meus pais, José e Elaine, por tudo que me ensinaram, sempre com amor e paciência. Pela presença forte, pela preocupação com meu bem-estar e por toda a dedicação de pais zelosos.

Aos meus irmãos, Márcia e Wendel, por nossa união e pelo conforto em saber que posso sempre contar com eles.

Aos meus sogros, Antonio e Ana Maria, pelo carinho, pela atenção, pelos ensinamentos e orações. Por serem tão amáveis e presentes em minha vida.

Aos meus cunhados Josiane, Luciana e Cristian, Fabiano e Ellen, pela amizade e pelo carinho intensos.

A todos os meus tios, tias, primos e primas e aos do Rodrigo também, pela torcida. A minha querida avó Luci, pelos seus 81 anos de vida, exemplo de serenidade e alegria.

Ao meu orientador Prof. Dr. Rubens Maciel Filho, por todo apoio no direcionamento do trabalho, pelo ensinamento e exemplo ao longo destes anos e também por todo incentivo durante a fase de meu estágio em Portugal. Agradeço pelo constante otimismo na condução do trabalho e por sua amizade e confiança.

À Profa. Dra Maria Regina, por ser tão vibrante com as nossas conquistas.

A minha co-orientadora, Profa. Dra Aline Costa, pela colaboração no trabalho e por ter me atendido quando precisei.

Ao Prof. Dr. Paulo Bártolo pelo estágio no Departamento de Engenharia Mecânica do Instituto Politécnico de Leiria, Portugal.

À Dra. Caliane Costa, pela amizade, por sua disponibilidade e boa vontade nas discussões sobre meu trabalho e por sua valiosa contribuição, além da ajuda em questões que eu não podia resolver quando estava fora de Campinas.

A todos os membros da banca de defesa pelas sugestões.

Aos amigos do Lopca, Delba (e também ao Eduardo), Vanessa, Natascha, Suzi, Cristiane, Agremis, André, Elmer, Amilton, Aline, Elis Regina, Sarita, Edvaldo, Urso, Igor,

Pleyciene, Jéferson, Félix, Nádson, Lamia, Júlio, Betânia, Carol, Maria Cristina, Newton, Paula, Elenise, Mário, Vera, Renata, Batistella, Érica, Patrícia e Leonardo, Érica, Nivea, Alessandra, Alex, Cristiano e Elton, pela amizade, pelas histórias que dividimos e por fazerem do Lopca um ambiente descontraído e agradável. E ao Cristiano e ao Elton também pelo suporte técnico no Lopca.

Aos funcionários da FEQ.

Aos amigos Isa e Marco, Roniane e Jânio, Luciana e Ricardo Maudonnet, que nos acompanham desde o início em Campinas, com sua amizade e torcida.

Aos amigos Chris e Rodi, Eliane e Daniel pela amizade que construímos. Por tantos encontros divertidos e inesquecíveis.

Aos amigos “gaúchos” pelos encontros tão animados.

Aos amigos que foram nos visitar em Leiria: Mariana, Lucielen, Bia, Machado, Miria, Natascha e sua mãe Neiva, e nossos tios Edyr e David e o primo David Ivan, por termos partilhado tão bons momentos.

À Irene Sofia, pela amizade desde o primeiro dia que chegamos em Leiria. Pela companhia diária, por sua atenção e por tudo que nos apresentou e ensinou sobre a cidade. E também a sua família.

Ao Nuno Alves e Isabel e seus filhos Sofia e André, e ao Artur Mateus e Dina e sua filha Joana, pelos bons momentos de convivência em Leiria.

A todos os colegas do DEM, em especial, Ausenda, Henrique, que participaram mais diretamente do trabalho, e os de gabinete, Sérgio Marques, Aires, Luís Oliveira e Cláudia.

À FAPESP pelo apoio financeiro para a realização deste trabalho e por ter me concedido o período de estágio em Portugal.

“Se podes olhar, vê. Se podes ver, repara.”

(José Saramago)

***“O degrau da escada não foi inventado
para repousar, mas apenas para sustentar o pé o tempo necessário para que se
coloque o outro um pouco mais alto.”***

(Aldous Huxley)

Resumo

Algoritmos de controle e otimização podem ser empregados separadamente ou podem ser integrados segundo uma estratégia hierárquica de Integração em Tempo Real para resolver problemas de otimização e controle.

A abordagem da Integração do Controle e da Otimização em Tempo Real pode ser feita basicamente através de estratégias conhecidas como otimização em uma camada ou otimização em duas camadas.

Na estratégia em duas camadas, a camada superior é a da otimização, que tem a função de determinar os *set-points* ótimos das variáveis para o estado estacionário e os enviar para a camada inferior, responsável pelo controle dinâmico. Na estratégia em uma camada, a otimização e o controle são resolvidos simultaneamente em um mesma função objetivo. Neste trabalho as duas abordagens são consideradas no que se refere ao desenvolvimento das ferramentas para suas implementações.

O caso de estudo principal considerado é o reator de lama tubular trifásico, no qual ocorre a reação de hidrogenação de o-cresol formando como produto o 2-metil-ciclohexanol na presença de catalisador à base de níquel (Ni/SO₂). O modelo determinístico que representa o reator, bem como o estudo do comportamento dinâmico do reator, mostrando a influência das variáveis de entrada sobre as variáveis de saída, são apresentados. Também é mostrado o estado estacionário não-otimizado do reator em termos da produtividade do produto formado e da conversão do reagente.

O presente trabalho também apresenta uma aproximação de modelos *Fuzzy Takagi-Sugeno* para representar o sistema a partir do modelo determinístico do reator.

Este reator é caracterizado por um modelo determinístico altamente não-linear e de elevada dimensionalidade, o que representa uma dificuldade para a otimização através de métodos convencionais, que nem sempre levam à convergência. Este fato justifica o uso de um algoritmo evolucionário, como os Algoritmos Genéticos, para resolver o problema de otimização. Os Algoritmos Genéticos são acoplados ao modelo determinístico do reator com o objetivo de se encontrar as condições de alimentação ótimas que conduzem ao estado estacionário caracterizado pelo melhor desempenho do reator em termos da máxima produtividade de 2-metil-ciclohexanol.

Os Algoritmos Genéticos são apresentados sob a forma de codificação binária e de codificação real. Para ambas as formas de codificação, é proposto um estudo dos parâmetros de entrada dos Algoritmos Genéticos através de planejamento fatorial com o objetivo de se determinar aqueles parâmetros que influenciam significativamente o desempenho do Algoritmo Genético na otimização do reator.

As variáveis otimizadas pelos Algoritmos Genéticos são usadas como possíveis variáveis manipuladas e como *set-points* no controle do reator com o objetivo de manter o reator no estado estacionário otimizado. Para tanto é empregado o Controle por Matriz Dinâmica (*Dynamic Matrix Control – DMC*).

Os Algoritmos Genéticos também foram empregados em um outro caso de estudo, a saber, a Biofabricação, na área da Prototipagem Rápida, mais especificamente,. A Prototipagem Rápida consiste na reprodução física de objetos tridimensionais de geometria livre, a partir de um desenho inicial, modelado por auxílio de computador. Uma das vertentes da Prototipagem Rápida é a Biofabricação, em que estruturas para Engenharia de Tecidos, como o *scaffold*, são fabricadas. Esta fabricação necessita de um controle específico da técnica empregada e da otimização do material utilizado e de suas propriedades mecânicas e químicas, o que, no presente trabalho, é feito com o auxílio dos Algoritmos Genéticos.

Abstract

Control and optimization algorithms can be used separately or may be alternatively integrated arranged in a hierarchical strategy, leading to a Real Time Integration in order to solve on-line optimization and control problems.

Integration of Control and Optimization in Real Time can be carried out basically through two main strategies, usually named one-layer approach and two-layer approach.

In the case of two-layer approach, the upper level is the optimization one, which determines the optimal set-points of the variables at the steady-state which are then used in the control of the system. In the one-layer approach, the economical optimization problem and the problem of control are solved simultaneously.

The main case study employed in this work is a three phase catalytic reactor in which the hydrogenation of o-cresol producing 2-methyl-cyclohexanol occurs. The deterministic model that represents the reactor, as well as the dynamic behavior of the reactor, showing the influence of input variables on output variables, is presented. The non-optimized steady-state of the reactor in terms of productivity and reagent conversion is also showed.

This reactor is characterized by a high dimensionality and non-linearity model, which is difficult to be optimized by conventional methods, since not always convergence is achieved. This justifies the use of an evolutionary method, based on the Genetic Algorithms, to deal with this process. In this way, in order to optimize the process, the Genetic Algorithm code is coupled with the rigorous model of the reactor. The aim of the optimization through Genetic Algorithms is the searching of the process inputs that maximizes the productivity of 2-methyl-cyclohexanol subject to maximal conversion of o-cresol.

The Genetic Algorithms are used in binary and real encoding forms. For both, a study of the Genetic Algorithm input parameters through factorial design is proposed in order to determine the significant parameters that have influence on the performance of GA to optimize the reactor.

The variables optimized by Genetic Algorithms are used as possible manipulated variables and as set-points in the control of the reactor with the aim of to maintain the reactor on the optimized steady state. For this, Dynamic Matrix Control is employed.

The present work presents an approximation of Takagi-Sugeno Fuzzy models to the deterministic models.

The Genetic Algorithms were employed in another application, to know, the Biofabrication, in the area of the Rapid Prototyping, specially. Rapid Prototyping consists of a physical replication of three-dimensional objects with free geometry, from an initial design, modeled by computer assistance. On Biofabrication, structures for medical applications to Tissue Engineering, as the scaffold, are fabricated. This fabrication needs a specific control of the employed technique as well as an optimization of the material utilized and of its mechanical and chemical properties, which, in the present work, is made with the use of Genetic Algorithms.

Sumário

LISTA DE FIGURAS	XIX
LISTA DE TABELAS	XXII
NOMENCLATURA	XXIV
CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO.....	1
1.1. OBJETIVOS.....	3
1.2. ORGANIZAÇÃO DA TESE	4
CAPÍTULO 2 – REATOR TRIFÁSICO: DEFINIÇÃO, MODELAGEM E ESTADO ESTACIONÁRIO NÃO-OTIMIZADO.....	7
2.1. DEFINIÇÃO DE REATORES CATALÍTICOS TRIFÁSICOS	7
2.2. REAÇÕES TRIFÁSICAS.....	7
2.3. MODELO MATEMÁTICO DETERMINÍSTICO.....	9
2.4. VARIÁVEIS OPERACIONAIS	14
2.5. GERAÇÃO DE MODELOS <i>FUZZY</i> TAKAGI-SUGENO PARA O REATOR	17
2.5.1. LÓGICA <i>FUZZY</i>	17
2.5.2. MODELOS <i>FUZZY</i> TAKAGI-SUGENO	17
2.5.2. RESULTADOS OBTIDOS PARA A CONVERSÃO DE O-CRESOL	21
2.5.3. RESULTADOS OBTIDOS PARA A PRODUTIVIDADE DE 2-METIL-CICLOHEXANOL	23
2.6. COMPORTAMENTO DINÂMICO DO REATOR.....	25
2.7. ESTADO ESTACIONÁRIO NÃO-OTIMIZADO	30
2.8. CONCLUSÕES	31
CAPÍTULO 3 – PROPOSTA DE OTIMIZAÇÃO DO REATOR TRIFÁSICO POR ALGORITMOS GENÉTICOS.....	32
3.1. OBJETIVO DA OTIMIZAÇÃO DO REATOR	32
3.2. FORMULAÇÃO DO PROBLEMA DE OTIMIZAÇÃO	32
3.3. DESAFIO DA OTIMIZAÇÃO.....	34
3.4. PRINCÍPIOS DA OTIMIZAÇÃO POR ALGORITMOS GENÉTICOS	35
3.5. TRATAMENTO DAS RESTRIÇÕES NOS ALGORITMOS GENÉTICOS	38
3.6. A CODIFICAÇÃO NOS ALGORITMOS GENÉTICOS	40
3.7. CONCLUSÕES.....	40
CAPÍTULO 4 – OTIMIZAÇÃO DO REATOR POR ALGORITMOS GENÉTICOS DE CODIFICAÇÃO BINÁRIA.....	42
4.1. EMPREGO DOS ALGORITMOS GENÉTICOS DE CODIFICAÇÃO BINÁRIA NA OTIMIZAÇÃO DO REATOR USANDO O MODELO RIGOROSO DO PROCESSO	42
4.1.2. ESTUDO DOS PARÂMETROS DO ALGORITMO GENÉTICO DE CODIFICAÇÃO BINÁRIA.....	49
4.1.2.1. PLANEJAMENTO FATORIAL FRACIONÁRIO.....	51
4.1.2.2. PLANEJAMENTO COMPOSTO CENTRAL	55
4.2. CONCLUSÕES.....	61

CAPÍTULO 5 – OTIMIZAÇÃO DO REATOR POR ALGORITMOS GENÉTICOS DE CODIFICAÇÃO REAL	63
5.1. ALGORITMO GENÉTICO DE CODIFICAÇÃO REAL	63
5.2. ESTUDO DOS PARÂMETROS DO AG DE CODIFICAÇÃO REAL	66
5.3. CONCLUSÕES	73
CAPÍTULO 6 – CONTROLE DO REATOR	75
6.1. PRINCÍPIOS DO CONTROLE POR MATRIZ DINÂMICA	75
6.1.1. DESENVOLVIMENTO DO ALGORITMO DMC PARA SISTEMAS SISO	79
6.1.2. DESENVOLVIMENTO DO ALGORITMO DMC PARA SISTEMAS MIMO	86
6.2. CONTROLE DO REATOR EMPREGANDO O DMC SISO QUANDO AS VARIÁVEIS DE ENTRADA DO REATOR SÃO AS ENTRADAS OTIMIZADAS PELO AG	89
6.2.1. CONTROLE DA CONCENTRAÇÃO DE O-CRESOL NA SAÍDA DO REATOR	89
6.2.2. CONTROLE DA TEMPERATURA NA SAÍDA DO REATOR	91
6.3. CONCLUSÕES	92
CAPÍTULO 7 – INTEGRAÇÃO DE PROCESSOS EM TEMPO REAL	93
7.1. INTEGRAÇÃO DE PROCESSOS EM TEMPO REAL	93
7.1.1. INTEGRAÇÃO EM DUAS CAMADAS	96
7.1.2. INTEGRAÇÃO EM UMA CAMADA	99
7.2. CONCLUSÕES	101
CAPÍTULO 8 – APLICAÇÃO DOS AGS NA PROTOTIPAGEM RÁPIDA	103
8.1. PROTOTIPAGEM RÁPIDA E BIOFABRICAÇÃO	103
8.2. PROPRIEDADES DOS <i>SCAFFOLDS</i>	105
8.2.1. O BIOMATERIAL UTILIZADO	105
8.3. MODELAGEM E FORMULAÇÃO DO PROBLEMA DE OTIMIZAÇÃO	106
8.4. IMPLEMENTAÇÃO DO CÓDIGO DO ALGORITMO GENÉTICO PARA RESOLVER O PROBLEMA DA OTIMIZAÇÃO	111
8.5. OTIMIZAÇÃO DO <i>SCAFFOLD</i>	113
8.6. CONCLUSÕES	126
CAPÍTULO 9 – CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	128
9.1. CONCLUSÕES FINAIS	128
9.2. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	130
9.2.1. SINTONIA DOS PARÂMETROS DO CONTROLADOR DMC ATRAVÉS DE AGS	130
9.2.2. IMPLEMENTAÇÃO DA ESTRATÉGIA DE OTIMIZAÇÃO EM UMA CAMADA	132
9.2.3. EMPREGO DE MODELO <i>FUZZY</i> TAKAGI-SUGENO COMO MODELO INTERNO DO CONTROLADOR PREDITIVO	132
9.2.4. EMPREGO DOS AGS NA BIOFABRICAÇÃO POR PROTOTIPAGEM RÁPIDA	132
9.2.5. EMPREGO DOS AGS NA ESTEREOLITOGRAFIA DA PROTOTIPAGEM RÁPIDA	132
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	134
APÊNDICE I – LÓGICA <i>FUZZY</i> OU NEBULOSA	143

Lista de Figuras

Figura 2.1 - Esquema básico de um reator trifásico.	7
Figura 2.2 - Gradientes de Concentração em um Sistema Trifásico (Vasco de Toledo <i>et al.</i> , 2001).	9
Figura 2.3 - Interface do modelo <i>Fuzzy</i> construído para a conversão de o-cresol.	21
Figura 2.4 - Resultado do teste e ajuste do modelo <i>Fuzzy</i> para a conversão de o-cresol. ..	22
Figura 2.5 - Conversão predita pelo Modelo Determinístico versus Conversão predita pelo Modelo <i>Fuzzy</i>	23
Figura 2.6 - Interface do modelo <i>Fuzzy</i> construído para a produtividade de 2-metil-ciclohexanol.	23
Figura 2.7 - Resultado do teste e ajuste do modelo <i>Fuzzy</i> para a produtividade de 2-metil-ciclohexanol	24
Figura 2.8 - Produtividade predita pelo Modelo Determinístico versus Produtividade predita pelo Modelo <i>Fuzzy</i>	25
Figura 2.9 - Efeito da temperatura de alimentação do reator (T_f) sobre a concentração de o-cresol na fase líquida na saída do reator (BI).	29
Figura 2.10 - Efeito da temperatura de alimentação do reator (T_f) sobre a temperatura média de reação na saída do reator (T).	29
Figura 2.11 - Efeito da temperatura de alimentação do fluido refrigerante (T_{rf}) sobre a concentração de o-cresol na fase líquida na saída do reator (BI).	29
Figura 2.12 - Efeito da temperatura de alimentação do fluido refrigerante (T_{rf}) sobre a temperatura média de reação na saída do reator (T).	29
 Figura 3.1 - Espaço de busca - AGs x Métodos Convencionais (Victorino, 2005).	36
Figura 3.2 - Método de aproximação da função penalidade (Deb, 2000).	39
 Figura 4.1 - Representação de uma série binária.	42
Figura 4.2 - Fluxograma do Algoritmo Genético.	46
Figura 4.3 - Evolução da Produtividade quando os parâmetros do AG otimizados pelo método da tentativa e erro são empregados.	47
Figura 4.4 - Gráfico de Pareto de Efeitos (Rezende <i>et al.</i> , 2007)	55
Figura 4.5 - Evolução da Produtividade quando os parâmetros do AG otimizados pelo método do planejamento fatorial são empregados.	59
Figura 4.6 - Comparação entre a produtividade obtida quando valores os parâmetros do AG são otimizados através do planejamento fatorial e quando os parâmetros do AG são otimizados pelo método da tentativa-e-erro.	60
 Figura 5.1 - Gráfico de Pareto de Efeitos (Rezende <i>et al.</i> , 2007).	71
Figura 5.2 - Evolução da Função objetivo ao longo das gerações.	73
 Figura 6.1 - Estrutura básica de um controle preditivo.	76
Figura 6.2 - Comportamento da Variável Controlada (Concentração de o-cresol na saída do reator) após uma perturbação de -5% na temperatura de alimentação do reator.	90

Figura 6. 3 – Comportamento da Variável Manipulada (Temperatura de alimentação do refrigerante) após uma perturbação de -5% na temperatura de alimentação do reator..	90
Figura 6. 4 – Comportamento da Variável Controlada (Temperatura média de reação na saída do reator) após uma perturbação de +5% na temperatura de alimentação do reator.	91
Figura 6. 5 – Comportamento da Variável Manipulada (Temperatura de alimentação do refrigerante) após uma perturbação de +5% na temperatura de alimentação do reator.	91
Figura 7. 1 – Estratégia de otimização em duas camadas.	96
Figura 7. 2 – Esquema da proposta de otimização em duas camadas para o caso do reator.	98
Figura 7. 3 – Controlador DMC atuando no novo <i>set-point</i> da variável controlada determinado pelos AGs.	99
Figura 7. 4 – Estratégia de otimização em uma camada.	99
Figura 8. 1 – <i>Scaffold</i> em alginato.	106
Figura 8. 2 – Contração x Tempo para Alginato 1%.	107
Figura 8. 3 – Contração x Tempo para Alginato 2%.	108
Figura 8. 4 – Contração x Tempo para Alginato 5%.	108
Figura 8. 5 – Módulo de Young em função da composição de Alginato e da Porosidade inicial após 20 minutos.	111
Figura 8. 6 – Módulo de Young em função do alginato na última geração (caso 1: sem restrição).	115
Figura 8. 7 – Módulo de Young em função da porosidade inicial na última geração (caso 1: sem restrição).	115
Figura 8. 8 – Evolução do módulo de Young ao longo das gerações (caso 1: sem restrição).	115
Figura 8. 9 – Maximização do módulo de Young em termos da composição de alginato e da porosidade inicial do melhor indivíduo no decorrer de 30 gerações (caso 1: sem restrição).	116
Figura 8. 10 – Perfis da função objetivo, contração e porosidade final obtidos com os melhores valores das variáveis de otimização em cada geração (caso 1: sem restrição).	116
Figura 8. 11 – Módulo de Young da última geração em função do alginato (caso 2: contração > 25%).	118
Figura 8. 12 – Módulo de Young da última geração em função da porosidade inicial (caso 2: contração > 25%).	118
Figura 8. 13 – Evolução do módulo de Young ao longo das gerações (caso 2: contração > 25%).	118
Figura 8. 14 – Maximização do módulo de Young em termos da composição de alginato e da porosidade inicial do melhor indivíduo no decorrer de 30 gerações (caso 2: contração > 25%).	119
Figura 8. 15 – Perfis da função objetivo, contração e porosidade final obtidos com os melhores valores das variáveis de otimização em cada geração (caso 2: contração > 25%).	119
Figura 8. 16 – Módulo de Young da última geração em função do alginato (caso 3: porosidade final > 80%).	121

Figura 8. 17 – Módulo de Young da última geração em função da porosidade inicial (caso 3: porosidade final > 80%).	121
Figura 8. 18 – Evolução do módulo de Young ao longo das gerações (caso 3: porosidade final > 80%).	121
Figura 8. 19 – Maximização do módulo de Young em termos da composição de alginato e da porosidade inicial do melhor indivíduo no decorrer de 30 gerações (caso 3: porosidade final > 80%).	122
Figura 8. 20 – Perfis da função objetivo, contração e porosidade final obtidos com os melhores valores das variáveis de otimização em cada geração (caso 3: porosidade final > 80%).	122
Figura 8. 21 – Módulo de Young da última geração em função do alginato (caso 4: contração<35% e porosidade final>75%).	124
Figura 8. 22 – Módulo de Young da última geração em função da porosidade inicial (caso 4: contração<35% e porosidade final>75%).	124
Figura 8. 23 – Evolução do módulo de Young ao longo das gerações (caso 4: contração < 35% e porosidade final > 75%).	124
Figura 8. 24 – Maximização do módulo de Young em termos da composição de alginato e da porosidade inicial do melhor indivíduo no decorrer de 30 gerações (caso 4: contração < 35% e porosidade final > 75%).	125
Figura 8. 25 – Perfis da função objetivo, contração e porosidade final obtidos com os melhores valores das variáveis de otimização a cada geração (caso 4: contração < 35% e porosidade final > 75%).	125

Lista de Tabelas

Tabela 2. 1 – Valores-base para a simulação do modelo do reator trifásico (Barreira, 2003).	13
Tabela 2. 2 – Valores das variáveis de entrada (unidades como na Nomenclatura).	16
Tabela 2. 3 – Valores das variáveis de entrada e de saída para uma variação de $\pm 15\%$ e para o ponto central.	18
Tabela 2. 4 – Valores das variáveis de entrada e de saída para uma variação de $\pm 12,5\%$ e para o ponto central.	19
Tabela 2. 5 – Respostas das simulações do modelo determinístico para variações de $\pm 10\%$	20
Tabela 2. 6 – Valores dos fatores nos níveis do planejamento.	26
Tabela 2. 7 – Matriz do Planejamento Fatorial Fracionário 2^{8-4}	26
Tabela 2. 8 – Respostas das Variáveis de Saída.	27
Tabela 2. 9 – Estimativas dos Efeitos	27
 Tabela 3. 1 – Valores mínimos e máximos das variáveis de otimização.	34
 Tabela 4. 1 – Valores dos parâmetros de entrada do AG.	47
Tabela 4. 2 – Solução Ótima (unidades como na seção de Notação) – Método da tentativa-e-erro para determinação dos parâmetros do AG.	48
Tabela 4. 3 – Faixa dos parâmetros de entrada do AG usada no planejamento fatorial.	51
Tabela 4. 4 – Matriz do Planejamento Fatorial Fracionário do tipo 2^{6-1}	52
Tabela 4. 5 – Estimativas dos efeitos dos parâmetros do AG.	54
Tabela 4. 6 – Faixa dos parâmetros de entrada do AG usados no planejamento composto central.	56
Tabela 4. 7 – Planejamento composto central $(2^3)^{1/4}$ com ponto central.	56
Tabela 4. 8 – Coeficientes Codificados do modelo de regressão	57
Tabela 4. 9 – Parâmetros de entrada do AG otimizados.	58
Tabela 4. 10 – Solução Ótima (Unidades como na seção de Notação) – Parâmetros do AG otimizados por planejamento fatorial.	58
 Tabela 5. 1 – Parâmetros do AG real escolhidos pelo método da tentativa-e-erro.	65
Tabela 5. 2 – Comparação entre o AG binário e o AG real quando os parâmetros de entrada dos códigos foram determinados por tentativa-e-erro.	66
Tabela 5. 3 – Níveis dos fatores quantitativos usados na análise estatística dos parâmetros do código AG real.	67
Tabela 5. 4 – Níveis dos fatores qualitativos usados na análise estatística dos parâmetros do código AG real.	68
Tabela 5. 5 – Resultados do planejamento fatorial fracionário 2^{6-1} para o reator trifásico. .	68
Tabela 5. 6 – Estimativas dos efeitos dos fatores dos parâmetros do AG real sobre a produtividade para o planejamento fatorial fracionário com interações a dois fatores (com 95% de confiança).	70
Tabela 5. 7 – Valores de entrada do reator otimizados.	71
 Tabela 8. 1 – Valores dos parâmetros de entrada do código AG	113
Tabela 8. 2 – Casos e condições avaliados	114

Tabela 8. 3 – Resultados da otimização (caso 1: sem restrição)	114
Tabela 8. 4 – Resultados da otimização (caso 2: contração > 25%)	117
Tabela 8. 5 – Resultados da otimização (caso 3: porosidade final > 80%)	120
Tabela 8. 6 – Resultados da otimização (caso 4: contração < 35% e porosidade > 75%) ..	123
Tabela 8. 7 – Valores ótimos do Módulo de Young para os 4 casos apresentados.....	126

Nomenclatura

< >	indica valor absoluto da operação
a	área interfacial, m^{-1}
a, b, c	constantes de aproximação calculadas em função da proporção de alginato
a_i	coeficiente de resposta ao degrau
A	concentração do componente A, $kmol/m^3$
A	Matriz Dinâmica do controlador DMC
A^*	solubilidade do componente A, $kmol/m^3$
A_0	fator pré-exponencial, $kmol/(kg\ catalyst\ s)$
A_1, A_2	fatores pré-exponenciais, m^3/mol
Ag	concentração de H_2 na fase gasosa na saída do reator, $kmol/m^3$
Al	concentração de H_2 na fase líquida na saída do reator, $kmol/m^3$
Agf	concentração de hidrogênio na fase gasosa na alimentação do reator, $kmol/m^3$
Alf	concentração de hidrogênio na fase líquida na alimentação do reator, $kmol/m^3$
B	concentração do componente B, $kmol/m^3$
Bl	concentração de o-cresol na fase líquida na saída do reator, $kmol/m^3$
Blf	concentração de o-cresol na fase líquida na alimentação do reator, $kmol/m^3$
cm_{ed}	valor da saída predita pelo controlador
C	contração do <i>scaffold</i> (adimensional)
C_A	concentração de hidrogênio, $kmol/m^3$
C_B	concentração de o-cresol, $kmol/m^3$
C_p	capacidade calorífica, $kJ/kg\ K$
C_1, C_2, C_3	constantes dependentes da topologia do <i>scaffold</i>
De	difusividade mássica efetiva, m^2/s
D_t	diâmetro do reator;
E	módulo de Young, KPa
E_0	módulo de Young inicial, KPa
E_0, E_1, E_2	energia de ativação
E	vetor dos erros preditos considerando as ações passadas e futuras de controle
E'	vetor dos erros preditos considerando somente as ações passadas de controle
f	fator de supressão

f_{eco}	função objetivo econômico
$f(\vec{x})$	função objetivo
f_{max}	valor da função objetivo da pior solução viável na população
$F(\vec{x})$	função de avaliação
$g(\vec{x})$	restrições
h	coeficiente de transferência de calor, $\text{kJ/m}^2 \text{ s K}$
hi	coeficiente de resposta ao impulso
idum	parâmetro do AG para determinar a população inicial de indivíduos
J	critério de desempenho do controlador DMC
k	constante cinética, kmol/kg-cat.s
k	instante de amostragem para o controle do reator
k_1, k_2, k_3	constantes dependentes da composição de alginato e da porosidade inicial
K	coeficiente de transferência de massa entre fases, cm/s
K_A	constante do equilíbrio de adsorção do hidrogênio, m^3/kmol
K_B	constante do equilíbrio de adsorção do o-cresol, m^3/kmol
L	comprimento do reator, m
li	tamanho do cromossomo
l_i	tamanho do gene
M	matriz triangular
maxgen	número máximo de gerações na evolução do código do AG
N	número de variáveis de otimização
nc	número de restrições
npopsiz	parâmetro do AG que determina o número de indivíduos por geração
NC	Horizonte de Controle
NM	Horizonte de Modelo
NP	Horizonte de Predição
p	p-valor (probabilidade de erro envolvida na aceitação de um efeito como válido)
pcreep	probabilidade de mutação <i>creep</i> no código AG
pcross	probabilidade de cruzamento no código AG

p_{mutate}	probabilidade de mutação <i>jump</i> no código AG
r_p	posição radial da partícula adimensional
R	parâmetro de penalidade
R	constante universal dos gases perfeitos, J/mol K
R_A	taxa de reação, kmol/kg-cat.s
R_p	raio da partícula, m
R_j	parâmetro de penalidade
R_w	taxa de reação, kmol/kg-cat.s
$setp$	valor do <i>set-point</i> desejado no controlador
t	tempo de degradação do <i>scaffold</i> (min)
t_{am}	tempo de amostragem usado na implementação do controlador
T	temperatura, K
T	temperatura média de reação na saída do reator, K
T_f	temperatura de alimentação do reator, K
T_r	temperatura de saída do fluido refrigerante, K
T_{rf}	temperatura de alimentação do fluido refrigerante, K
u	velocidade linear, m/s
u	vetor das variáveis manipuladas
u_g	velocidade linear do gás, m/s
u_l	velocidade linear do líquido, m/s
u_r	velocidade linear do fluido refrigerante, m/s
u_s	vetor das variáveis manipuladas no estado estacionário
$u_{ótimo}$	vetor de valores de entrada ótimos obtidos na camada de otimização
U	coeficiente global de transferência de calor, $\text{kJ/m}^2 \text{ s K}$
V_m	variáveis manipuladas
V_c	variáveis controladas
$\vec{x}$	vetor contendo as variáveis de otimização
x_i^{max}	limites superiores das variáveis de otimização
x_i^{min}	limites inferiores das variáveis de otimização
$\hat{y}$	vetor de variáveis controladas

y_{k+1}^c	valor predito da variável de saída para o instante de amostragem $k + 1$
y_{sp}	valor do <i>set-point</i>
y^P	vetor de predições
w	concentração de catalisador (Kg/m ³)
z	posição axial adimensional no reator

Subscrito

A	componente A
B	componente B
f	alimentação
g	fase gasosa
gl	gás-líquido
l	fase líquida
ls	líquido-sólido
p	partícula
<i>ref</i>	valor de referência usado para adimensionalizar as equações
s	sólido

Sobrescrito

s	superfície da partícula
---	-------------------------

Letras Gregas

ΔH_R	calor de reação, kJ/kmol
Δu	vetor das ações de controle
ε	porosidade
ε_i	precisão requerida para a variável de otimização i
λ	condutividade térmica, kJ/m s K
v	coeficiente estequiométrico
ρ	densidade, kg/m ³
Λ	matriz dos fatores de supressão
α	composição de alginato (adimensional)

ϕ porosidade final do *scaffold* (adimensional)

ϕ_0 porosidade inicial (adimensional)

ς , ϑ , λ constantes de aproximação calculadas em função da composição de alginato

ζ , ψ constantes calculadas em função da composição de alginato

CAPÍTULO 1 – Introdução

Reatores catalíticos trifásicos são sistemas em que as fases líquida e gasosa estão em contato com um catalisador na fase sólida. Para promover a reação química, a fase sólida precisa ser adequadamente molhada e deve entrar em contato com os reagentes em ambas as fases, líquida e gasosa. Este é um problema claro de interações entre reações químicas e transferências de calor e massa. Com o objetivo de representar o fenômeno principal e então ser capaz de descrever o comportamento real, o modelo determinístico deve levar em conta as diferentes fases (modelo heterogêneo). A disponibilidade de um modelo determinístico confiável para estudo do comportamento dinâmico é importante para fins controle e otimização do reator. Para aplicações em tempo real, o modelo deve permitir uma solução rápida e confiável, enquanto mantém as características desejadas de predição do comportamento do sistema.

Modelos *Fuzzy* também podem ser empregados para representar um sistema. Tais modelos são caracterizados por sua rápida implementação e relativa facilidade em tratar sistemas complexos e não-lineares.

O principal caso de estudo empregado neste trabalho é um reator de lama tubular, no qual ocorre a reação de hidrogenação de o-cresol na presença de catalisador a base de níquel (Ni/SO_2), formando 2-metil-ciclohexanol como produto. Este reator é caracterizado por um modelo determinístico altamente não-linear e multidimensional o que representa uma dificuldade de otimização por métodos convencionais.

Problemas não-lineares de alta dimensionalidade podem ser resolvidos por meio de duas classes de método de busca, a saber, métodos determinísticos e estocásticos. Os métodos determinísticos, tais como SQP (*Successive Quadratic Programming*), requerem derivadas de primeira e segunda ordens da função objetivo e/ou restrições, o que os torna não-aplicáveis a problemas descontínuos e não-diferenciáveis. Além do mais, tais métodos são dependentes da estimativa inicial na busca da solução ótima. Por outro lado, métodos estocásticos, tais como os Algoritmos Genéticos (AGs), não necessitam explicitamente da

estrutura matemática da função objetivo e/ou restrições e não requerem um ponto viável inicial, o que tem aumentado a aplicação destes algoritmos em muitos problemas de busca e otimização. Tais algoritmos apresentam-se na forma de codificação binária e de codificação real.

Os algoritmos de controle e otimização podem atuar separadamente ou podem ser integrados com a otimização numa estratégia de Integração em Tempo Real, uma área que tem sido bastante difundida na literatura para resolver problemas de otimização em engenharia.

A Integração de Processos em Tempo Real é uma tarefa importante para viabilizar a operação em níveis de alto desempenho operacional. Procedimentos operacionais convencionais, cujos requerimentos têm seus patamares especificados por procedimentos heurísticos e os controladores são ajustados de forma não-hierárquica com relação à especificação operacional, tendem a falhar para sistemas complexos e não-lineares. Nesta situação, a solução do problema de otimização, acoplada com o projeto e sintonia do controlador (Integração de Processos), pode ser feita dinamicamente e no período de tempo da constante de tempo do processo (em tempo real), passando a ser uma solução necessária para se atingir o nível de desempenho desejado.

A Integração em Tempo Real pode ser feita segundo estratégias conhecidas como estratégia em duas camadas e estratégia em uma camada. Na estratégia em duas camadas, a camada inferior é responsável pelo controle dinâmico. A camada superior determina os *set-points* ótimos das variáveis para o estado estacionário e os envia para a camada inferior, onde são utilizados como *set-points* das variáveis controladas e manipuladas.

Na estratégia em uma camada o problema de otimização econômica é resolvido juntamente com o problema de controle.

Dentre os algoritmos de controle usados nos processos, os mais difundidos têm sido aqueles que utilizam técnicas de controle moderno, como o Controle Preditivo baseado em

Modelo, do tipo Controle por Matriz Dinâmica (*Dynamic Matrix Control* – DMC), que utiliza como modelo interno o modelo de convolução.

Os Algoritmos Genéticos podem ser empregados para resolver problemas de otimização, por exemplo, na área da moderna tecnologia da Prototipagem Rápida. A Prototipagem Rápida é voltada para a concepção de objetos tridimensionais apresentando boa precisão e qualidade. Uma das sub-áreas da Prototipagem Rápida é a Biofabricação, em que estruturas para aplicações na Engenharia de Tecidos, como o *scaffold*, são fabricadas. Esta fabricação necessita de um controle apurado da técnica empregada mas, sobretudo, da otimização do material utilizado e de suas propriedades mecânicas e químicas, o que pode ser efetuado também pelo emprego dos Algoritmos Genéticos e é o segundo caso de estudo desta Tese.

1.1. Objetivos

Dentre os objetivos da tese, destacam-se:

- Estabelecimento do modelo determinístico do reator trifásico;
- Aproximação de modelos *Fuzzy* ao modelo determinístico do reator;
- Otimização das condições de alimentação do reator que conduzam a um estado estacionário otimizado em termos da máxima produtividade de 2-metil-ciclohexanol e máxima conversão de reagentes, em consonância com as restrições ambientais para evitar certas composições dos reagentes não-convertidos;
- Avaliação do método de otimização global por Algoritmos Genéticos sob a forma de codificação binária e real;
- Estudo dos parâmetros de entrada do Algoritmo Genético, tanto no algoritmo de codificação binária quanto no algoritmo de codificação real, com o objetivo de se determinar os parâmetros que exercem maior influência sobre o desempenho de tais algoritmos;
- Comparação entre os algoritmos de codificação binária e real, avaliando-se o tempo computacional gasto, o valor da função objetivo e a viabilidade à Integração em Tempo Real;

- Estudo do controle do reator empregando-se as variáveis de entrada ótimas e as saídas ótimas determinadas pelo algoritmo de otimização;
- Aplicação dos AGs a um caso de estudo da Prototipagem Rápida, que é a otimização das propriedades mecânicas na fabricação de *scaffolds* em alginato, aplicáveis à Biofabricação.

1.2. Organização da Tese

O Capítulo 2 traz uma definição de reatores trifásicos, a apresentação do modelo matemático determinístico do reator de hidrogenação de o-cresol e uma aproximação de modelos *Fuzzy* Takagi-Sugeno ao modelo determinístico, além de apresentar a condição de estado estacionário não-otimizado do reator e o comportamento dinâmico do reator.

No Capítulo 3 é apresentada a proposta de otimização do reator trifásico, definindo a função objetivo e as restrições do processo, bem como o método para a resolução do problema de otimização.

No Capítulo 4, a otimização do processo de hidrogenação do reator trifásico utilizando Algoritmos Genéticos de codificação binária é apresentada. O desempenho dos AGs para otimizar o processo representado pelo modelo rigoroso é estudado, além de ser mostrada a aplicabilidade dos AGs para implementação em Tempo Real. Os parâmetros do AG são avaliados através de um planejamento fatorial com o objetivo de identificar os parâmetros mais significativos para as respostas do AG e, posteriormente, determinar os melhores valores destes parâmetros, por meio de um planejamento composto central.

No Capítulo 5, os AGs de codificação real são empregados para otimizar as condições operacionais que conduzem o reator ao estado estacionário otimizado.

O Capítulo 6 apresenta o controle do reator, tendo como variáveis manipuladas e como *set-points* as variáveis otimizadas pelos AGs. Para o controle do reator é empregado o Controle Preditivo Baseado em Modelo (*Model Predictive Control* – MPC), do tipo

Controle por Matriz Dinâmica (*Dynamic Matrix Control* – DMC) para sistemas monovariáveis (SISO).

No Capítulo 7 é apresentada a idéia da Integração de Processos em Tempo Real através da estratégia de otimização em duas camadas e em uma camada. A formulação da função objetivo do controlador e do otimizador e os algoritmos propostos para resolver o problema de otimização são apresentados.

O Capítulo 8 apresenta uma aplicação dos AGs a um caso de estudo da Prototipagem Rápida, que é a otimização das propriedades mecânicas na fabricação de *scaffolds* em alginato, aplicáveis à Biofabricação.

O Capítulo 9 apresenta as conclusões do trabalho e sugestões para trabalhos futuros.

É importante ressaltar que a revisão bibliográfica é feita ao longo do texto.

CAPÍTULO 2 – Reator Trifásico: Definição, Modelagem e Estado Estacionário Não-Otimizado

Neste capítulo é apresentada uma definição de reatores catalíticos trifásicos, o modelo determinístico do reator de hidrogenação de o-cresol, aproximação de modelos *Fuzzy* Takagi-Sugeno ao modelo determinístico e o estado estacionário não-otimizado do reator.

2.1. Definição de Reatores Catalíticos Trifásicos

Um reator catalítico trifásico é um sistema no qual as fases gasosa e líquida estão em contato com um catalisador na fase sólida. Na maioria das aplicações, a reação ocorre entre um gás dissolvido e um reagente na fase líquida na presença de um catalisador sólido. Em alguns casos, o líquido é um meio inerte e a reação ocorre entre os gases dissolvidos na superfície sólida (Rezende, 2003).

A Figura 2.1 abaixo ilustra a configuração de um reator de lama trifásico.

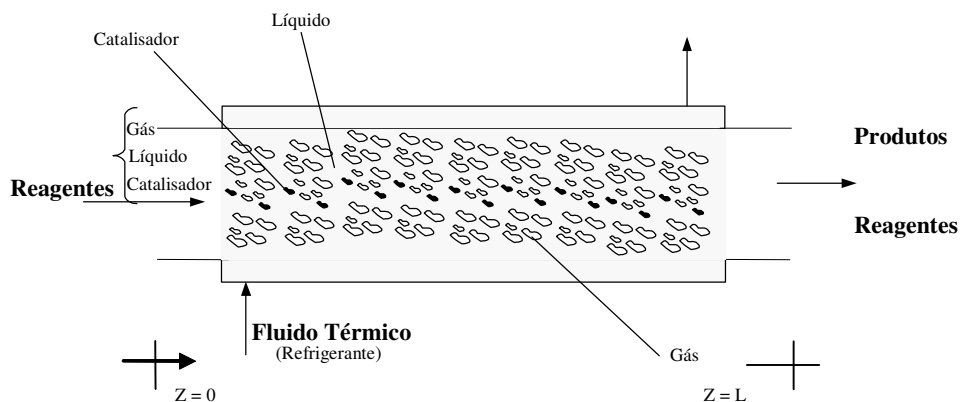
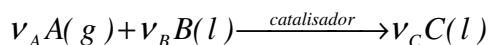


Figura 2.1 - Esquema básico de um reator trifásico.

2.2. Reações Trifásicas

Os sistemas de reações trifásicas encontradas na prática podem ser representados pelo seguinte esquema de reação:



A espécie A é, geralmente, um reagente presente na fase gasosa e a espécie B é um reagente não volátil presente na fase líquida, com a reação ocorrendo na superfície de um catalisador sólido. Em alguns casos, ambas espécies A e B podem estar presentes na fase gasosa.

Para que as espécies A e B possam ser convertidas a produtos sobre os sítios ativos do catalisador, as seguintes etapas precisam ocorrer:

- 1 – Transporte de A do seio da fase gasosa para a interface gás-líquido
- 2 – Transporte de A da interface gás-líquido para o líquido
- 3 – Transporte de A e B do líquido para superfície do catalisador
- 4 – Difusão interna dos reagentes nos poros do catalisador
- 5 – Adsorção dos reagentes sobre os sítios ativos do catalisador
- 6 – Reação das espécies adsorvidas com formação de produtos

No caso de reações reversíveis e produtos voláteis, passos adicionais devem ser considerados, tais como dessorção de produtos e transporte dos produtos no sentido contrário ao dos reagentes.

A Figura 2.2 abaixo representa um esquema com os gradientes de concentração em um sistema catalítico trifásico.

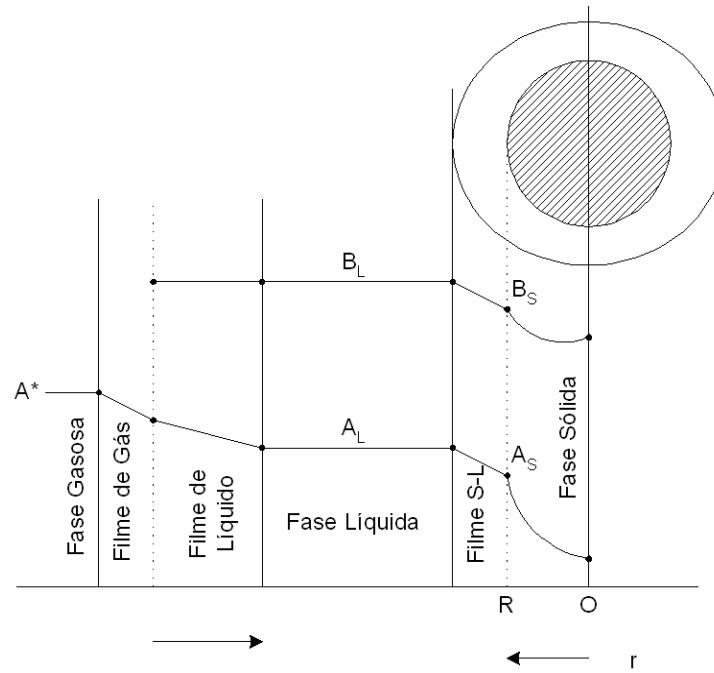
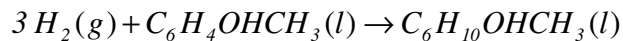


Figura 2.2 - Gradientes de Concentração em um Sistema Trifásico (Vasco de Toledo *et al.*, 2001).

2.3. Modelo Matemático Determinístico

Este trabalho tem como um dos casos de estudo o reator de lama tubular trifásico (conforme geometria apresentada na Figura 2.1) no qual ocorre a reação de hidrogenação do o-cresol formando como produto 2-metil-ciclohexanol na presença de catalisador à base de níquel (Ni/SO₂). O modelo cinético e o modelo matemático dinâmico usados para representar a reação exotérmica que ocorre no reator são descritos aqui.

A estequiometria da reação de hidrogenação do o-cresol é representada da seguinte forma:



O modelo cinético é baseado no modelo proposto por Hichri *et al.* (1991) que considera que o hidrogênio e o o-cresol são adsorvidos em sítios ativos diferentes, sem dissociação do hidrogênio.

A taxa de reação é dada pela Equação 2.1:

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

onde:

C_A = concentração de hidrogênio, kmol/m³;

C_B = concentração de o-cresol, kmol/m³;

k = constante cinética, kmol/kg-cat.s;

K_A = constante do equilíbrio de adsorção do hidrogênio, m³/kmol;

K_B = constante do equilíbrio de adsorção do o-cresol, m³/kmol;

R_A = taxa de reação, kmol/kg-cat.s.

As constantes cinéticas são funções da temperatura, baseadas na Lei de Arrhenius:

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

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

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

Os parâmetros cinéticos para as Equações 2.2–2.4 são: $A=5,4 \times 10^5$ kmol/(kg catalisador.s), $A_1=10,55$ m³/mol, $A_2=7,54 \times 10^{-3}$ m³/mol, $E = 82220$ J/mol, $E_1 = 5003$ J/mol, $E_2 = 16325$ J/mol.

O modelo determinístico usado neste trabalho é o modelo desenvolvido por Vasco de Toledo *et al.* (2001) que considera os balanços de massa e de energia para as fases líquida e gasosa e para a partícula de catalisador, além do balanço para o fluido refrigerante (água).

Para o desenvolvimento de tal modelo foram adotadas as seguintes hipóteses com o intuito de simplificar a formulação do modelo, porém sem comprometer a representação do reator, uma vez que estas hipóteses são adotadas na maioria dos trabalhos encontrados na literatura:

- escoamento empistonado (*plug-flow*) para os fluidos reagente e térmico;
- suspensão (líquido+sólido) homogênea, considerada como um pseudo-fluido;
- pressurizado para não haver mudança de fase;
- reação do tipo $A(g) + vB(l) \rightarrow vC(l)$ acontecendo no catalisador com cinética dependente das concentrações de A e B, sendo v o coeficiente estequiométrico igual a 1/3;
- resistência à difusão na partícula de catalisador não está prevista pelo modelo;
- dispersão radial não é considerada no modelo. Segundo Mariano (2001), desprezar a dispersão radial é uma hipótese comum na literatura.

A seguir são apresentadas as equações dos balanços que constituem o modelo determinístico.

I – Balanços para a fase fluida

- **Balanço de massa do reagente A na fase gasosa:**

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

$$\text{Condições de contorno:} \quad \left. \frac{D_{eg}}{L} \frac{\partial A_g}{\partial z} \right|_{z=0} = u_g (A_g - A_{gf})$$

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

- **Balanço de massa do reagente A na fase líquida:**

$$\varepsilon_l \frac{\partial A_l}{\partial t} = \frac{D_{el}}{L^2} \frac{\partial^2 A_l}{\partial z^2} - \frac{u_l}{L} \frac{\partial A_l}{\partial z} + (K_{gl})_A a_{gl} (A^* - A_l) - (K_{ls})_A a_{ls} (A_l - A_s) \quad (2.6)$$

Condições de contorno:
$$\left. \frac{D_{el}}{L} \frac{\partial A_l}{\partial z} \right|_{z=0} = u_l (A_l - A_{lf})$$

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

- **Balanco de massa do reagente B na fase líquida:**

$$\epsilon_l \frac{\partial B_l}{\partial t} = \frac{D_{el}}{L^2} \frac{\partial^2 B_l}{\partial z^2} - \frac{u_l}{L} \frac{\partial B_l}{\partial z} - (K_{ls})_B a_{ls} (B_l - B_s^s) \quad (2.7)$$

Condições de contorno:
$$\left. \frac{D_{el}}{L} \frac{\partial B_l}{\partial z} \right|_{z=0} = u_l (B_l - B_{lf})$$

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

- **Balanco de energia na fase fluida:**

$$\begin{aligned} (\epsilon_g \rho_g C_{pg} + \epsilon_l \rho_l C_{pl}) \frac{\partial T}{\partial t} = & \frac{(\epsilon_g \lambda_g + \epsilon_l \lambda_l)}{L^2} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} - \frac{(\epsilon_g \rho_g C_{pg} u_g + \epsilon_l \rho_l C_{pl} u_l)}{L} \frac{\partial T}{\partial z} \\ & + h_s a_{ls} (T_s^s - T) - \frac{4U}{D_t} (T - T_r) \end{aligned} \quad (2.8)$$

Condições de contorno:
$$\left. \frac{(\epsilon_g \lambda_g + \epsilon_l \lambda_l)}{L} \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=0} = (\epsilon_g \rho_g C_{pg} u_g + \epsilon_l \rho_l C_{pl} u_l) (T - T_r)$$

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

- **Balanco de energia do fluido refrigerante:**

$$\rho_r C_{pr} \frac{\partial T_r}{\partial t} = - \frac{\rho_r C_{pr} u_r}{L} \frac{\partial T_r}{\partial z} + \frac{4U}{D_t} (T - T_r) \quad (2.9)$$

Condição de contorno: $T_r = T_{rf}, \quad z = 0$

II – Balanços para a fase sólida

- **Balanço de massa para o reagente A na fase sólida:**

$$(1-\varepsilon)\varepsilon_s \frac{\partial A_s}{\partial t} = (K_{ls})_A a_{ls} (A_l - A_s) - \frac{(1-\varepsilon)\rho_s}{A_{ref}} R_W(A_s, B_s, T_s) \quad (2.10)$$

- **Balanço para o reagente B na fase sólida:**

$$(1-\varepsilon)\varepsilon_s \frac{\partial B_s}{\partial t} = (K_{ls})_B a_{ls} (B_l - B_s) - \frac{v(1-\varepsilon)\rho_s}{B_{ref}} R_W(A_s, B_s, T_s) \quad (2.11)$$

- **Balanço de energia na fase sólida:**

$$(1-\varepsilon)\rho_s C_{ps} \frac{\partial T_s}{\partial t} = h_s a_{ls} (T_s - T) + \frac{(1-\varepsilon)\rho_s (-\Delta H_R)}{T_{ref}} R_W(A_s, B_s, T_s) \quad (2.12)$$

A Tabela 2.1 a seguir apresenta os parâmetros de projeto e os coeficientes de transferência de calor e massa empregados para a simulação do modelo determinístico apresentado.

Tabela 2. 1 – Valores-base para a simulação do modelo do reator trifásico (Barreira, 2003).

Parâmetros de projeto e coeficientes de transferência de calor e massa	
$L = 2,0\text{m}$	$(K_{ls})_A a_{ls} = 5,6\text{s}^{-1}$
$D_t = 0,154\text{m}$	$(K_{ls})_B a_{ls} = 3,0\text{s}^{-1}$
$A^* = 1,5 \times 10^{-3} \text{Kmol} / \text{m}^3$	$h_s a_{ls} = 40 \text{KJ} / \text{m}^3 \text{K}$
$w = 150 \text{Kg} / \text{m}^3$	$D_{eA} = 5,16 \times 10^{-8} \text{m}^2 / \text{s}$
$C_{pl} = 2,4 \text{KJ} / \text{Kg} . \text{K}$	$D_{eB} = 9,7 \times 10^{-8} \text{m}^2 / \text{s}$
$C_{pg} = 14 \text{KJ} / \text{Kg} . \text{K}$	$\Delta H_R = -398000 \text{KJ} / \text{Kmol}$
$\rho_l = 400 \text{Kg} / \text{m}^3$	$R_p = 2 \times 10^{-5} \text{m}$
$\rho_g = 0,04 \text{Kg} / \text{m}^3$	$C_{ps} = 0,15 \text{KJ} / \text{Kg} . \text{K}$
$\rho_s = 3400 \text{Kg} / \text{m}^3$	$C_{pr} = 3,4 \text{KJ} / \text{Kg} . \text{K}$
$\lambda_s = 3,47 \times 10^{-4} \text{KJ} / \text{m} . \text{s} . \text{K}$	$U = 0,08 \text{KJ} / \text{m}^2 \text{sK}$

As equações do modelo constituem um sistema de equações diferenciais parciais, as quais são transformadas, através da Colocação Ortogonal, em um conjunto de equações diferenciais ordinárias que, posteriormente, são integradas em relação ao tempo usando a sub-rotina DASSL.

A partir do modelo matemático, as variáveis operacionais do reator podem ser estabelecidas e estudos das condições de estado estacionário do reator podem ser feitos.

2.4. Variáveis operacionais

Para identificar a condição de estado estacionário do reator, é necessário estabelecer as variáveis operacionais e verificar as condições de alimentação e saída do reator.

As variáveis de entrada estudadas no reator são:

ug	velocidade linear do gás (m/s)
ul	velocidade linear do líquido (m/s)
ur	velocidade linear do fluido refrigerante(m/s)
Agf	concentração de hidrogênio na fase gasosa na alimentação (kmol/m ³)
Alf	concentração de hidrogênio na fase líquida na alimentação (kmol/m ³)
Blf	concentração de o-cresol na fase líquida na alimentação (kmol/m ³)
Tf	temperatura de alimentação do reator (K)
Trf	temperatura de alimentação do fluido refrigerante (K)

As variáveis de saída estudadas são:

Ag	concentração de hidrogênio na fase gasosa na saída (kmol/m ³)
Al	concentração de hidrogênio na fase líquida na saída (kmol/m ³)
Bl	concentração de o-cresol na fase líquida na saída (kmol/m ³)
T	temperatura média de reação na saída do reator (K)
Tr	temperatura do fluido refrigerante na saída do reator (K)

A partir das variáveis de entrada e saída, é possível descrever a produtividade do produto formado e a conversão do reagente no reator.

A equação matemática para se obter a produtividade de 2-metil-ciclohexanol pode ser escrita da seguinte maneira:

$$Produtividade = \left(\frac{Concentração * Vazão}{Volume} \right) \Big|_L \quad (2.13)$$

As expressões para a vazão e para o volume do reator trifásico podem ser escritas, respectivamente, da seguinte forma:

$$Vazão = Velocidade * Área = ul * \frac{\pi D^2}{4} \quad (2.14)$$

$$Volume = Área * Comprimento do reator = \frac{\pi D^2}{4} * L \quad (2.15)$$

Com base nas equações acima, a expressão para a produtividade torna-se:

$$Produtividade = Concentração do produto formado * \frac{ul}{L} \quad (2.16)$$

Neste caso de estudo, o produto formado é o componente C, 2-metil-ciclohexanol. Lembrando-se que a reação de formação do 2-metil-ciclohexanol é $A(g) + vB(l) \rightarrow vC(l)$, sabe-se que a quantidade de produto C formado é dada pela quantidade do componente B que é consumido. Considerando-se que toda a quantidade do componente B (o-cresol) que entrou no reator reagiu, formando o produto C (2-metil-ciclohexanol), a concentração do produto C pode ser expressa em termos da concentração do componente B. A concentração de o-cresol na fase líquida (Bl), no tempo zero, é igual à concentração de o-cresol na fase líquida na alimentação (Blf). No tempo final, a concentração de o-cresol na fase líquida (Bl) é igual à concentração de o-cresol na fase líquida na saída do reator (Rezende, 2003). Dessa forma, a concentração do produto [C] pode ser expressa como:

$$[C] = Blf - Bl \quad (2.17)$$

Feitas estas considerações, pode-se reescrever a expressão para a produtividade da seguinte forma:

$$Produtividade = \frac{(Blf - Bl|_L) * ul}{L} \quad (2.18)$$

Para escrever a expressão da conversão, embora na fase sólida exista um pouco de o-cresol (componente B), é adotado o critério da conversão baseada na fase líquida. Assim, a conversão de o-cresol é dada pela diferença entre a concentração de o-cresol na alimentação (Blf) e a concentração de o-cresol na saída do reator (Bl), dividido pela concentração de o-cresol na alimentação do reator (Blf), como descrito pela equação:

$$Conversão = \frac{Blf - Bl|_L}{Blf} \quad (2.19)$$

As condições de alimentação do reator são mostradas na Tabela 2.2 através dos valores das oito variáveis de entrada do reator citadas anteriormente.

Tabela 2. 2 – Valores das variáveis de entrada (unidades como na Nomenclatura).

Variável de entrada	Valor
ul	$8,0 \times 10^{-3}$
ug	1,80
ur	$5,0 \times 10^{-3}$
Agf	$1,5 \times 10^{-3}$
Alf	$1,5 \times 10^{-3}$
Blf	$2,4 \times 10^{-2}$
Tf	540,0
Trf	500,0

Estes valores conduzem a um estado estacionário em que a concentração de o-cresol na fase líquida na saída (Bl) e a temperatura média de reação na saída do reator (T) são, respectivamente, iguais a $0,00130 \text{ Kmol/m}^3$ e 539,11K, a produtividade de 2-metil-ciclohexanol é de $0,44 \times 10^{-4} \text{ Kmol/m}^3\text{s}$ e a conversão de o-cresol de 46% (Rezende *et al.*, 2005).

2.5. Geração de Modelos *Fuzzy* Takagi-Sugeno para o Reator

A partir da descrição do modelo matemático e da identificação das variáveis do reator, foi feito um estudo da aproximação de modelos *Fuzzy* Takagi-Sugeno ao modelo determinístico considerando resultados obtidos para a conversão de o-cresol e para a produtividade de 2-metil-ciclohexanol.

2.5.1. Lógica *Fuzzy*

A característica especial da lógica *Fuzzy* (também referida como lógica nebulosa e em alguns casos por teoria de possibilidades) é a de representar uma forma inovadora de manuseio de informações imprecisas, de forma muito distinta da teoria de probabilidades. A lógica *Fuzzy* provê um método de traduzir expressões verbais, vagas, imprecisas e qualitativas, comuns na comunicação humana em valores numéricos (Shaw e Simões, 1999).

Maiores detalhes da lógica *Fuzzy* ou nebulosa estão descritos no Apêndice I.

2.5.2. Modelos *Fuzzy* Takagi-Sugeno

O modelo Takagi-Sugeno possui uma estrutura baseada em regras. Contudo, os conseqüentes das regras não são conjuntos *Fuzzy* como nos modelos lingüísticos. Esses conseqüentes são formados por funções *crisp* (não-*Fuzzy*) que mapeam as entradas do modelo em sua saída. Essas funções, também denominadas modelos locais, possuem usualmente uma forma afim em seus argumentos (Campello, 2002).

Os modelos nebulosos apresentados a seguir foram construídos considerando-se que o nível de abrangência do modelo construído é de $\pm 15\%$ de variações nas variáveis de entrada do reator em relação ao seu estado estacionário. Foram consideradas as oito variáveis de entrada do reator (já mencionadas anteriormente) e como variáveis de saída consideraram-se a conversão de o-cresol e a produtividade de 2-metil-ciclohexanol. Para a construção dos modelos nebulosos, foi escolhido um planejamento fatorial fracionário do tipo 2^{8-3} , o que corresponde a 33 dados para cada variável. A matriz contendo os valores

Capítulo 2 – Reator Trifásico: Definição, Modelagem e Estado Estacionário Não-Otimizado das variáveis de entrada e de saída para uma variação de $\pm 15\%$ e para o ponto central é apresentada na Tabela 2.3:

Tabela 2. 3 – Valores das variáveis de entrada e de saída para uma variação de $\pm 15\%$ e para o ponto central.

	ug	ul	ur	Agf	Alf	Blf	Tf	Trf	Conversão	Produtividade ($\times 10^4$)
1	1,53	0,0068	0,00425	0,00127	0,00127	0,02000	459,00	575,00	0,23923	0,16268
2	2,07	0,0068	0,00425	0,00127	0,00127	0,02800	621,00	575,00	0,83485	0,79478
3	1,53	0,0092	0,00425	0,00127	0,00127	0,02800	621,00	425,00	0,60079	0,77382
4	2,07	0,0092	0,00425	0,00127	0,00127	0,02000	459,00	425,00	0,04767	0,04385
5	1,53	0,0068	0,00575	0,00127	0,00127	0,02800	459,00	425,00	0,05779	0,05502
6	2,07	0,0068	0,00575	0,00127	0,00127	0,02000	621,00	425,00	0,62516	0,42511
7	1,53	0,0092	0,00575	0,00127	0,00127	0,02000	621,00	575,00	0,77291	0,71107
8	2,07	0,0092	0,00575	0,00127	0,00127	0,02800	459,00	575,00	0,16543	0,21308
9	1,53	0,0068	0,00425	0,00172	0,00127	0,02000	621,00	425,00	0,73148	0,49740
10	2,07	0,0068	0,00425	0,00172	0,00127	0,02800	459,00	425,00	0,07956	0,07574
11	1,53	0,0092	0,00425	0,00172	0,00127	0,02800	459,00	575,00	0,20455	0,26346
12	2,07	0,0092	0,00425	0,00172	0,00127	0,02000	621,00	575,00	0,85839	0,78972
13	1,53	0,0068	0,00575	0,00172	0,00127	0,02800	621,00	575,00	0,88685	0,84428
14	2,07	0,0068	0,00575	0,00172	0,00127	0,02000	459,00	575,00	0,32468	0,22078
15	1,53	0,0092	0,00575	0,00172	0,00127	0,02000	459,00	425,00	0,06146	0,05654
16	2,07	0,0092	0,00575	0,00172	0,00127	0,02800	621,00	425,00	0,70118	0,90311
17	1,53	0,0068	0,00425	0,00127	0,00172	0,02000	459,00	425,00	0,05943	0,04041
18	2,07	0,0068	0,00425	0,00127	0,00172	0,02800	621,00	425,00	0,65398	0,62259
19	1,53	0,0092	0,00425	0,00127	0,00172	0,02800	621,00	575,00	0,75083	0,96707
20	2,07	0,0092	0,00425	0,00127	0,00172	0,02000	459,00	575,00	0,15472	0,14234
21	1,53	0,0068	0,00575	0,00127	0,00172	0,02800	459,00	575,00	0,25780	0,24542
22	2,07	0,0068	0,00575	0,00127	0,00172	0,02000	621,00	575,00	0,83642	0,56877
23	1,53	0,0092	0,00575	0,00127	0,00172	0,02000	621,00	425,00	0,59713	0,54936
24	2,07	0,0092	0,00575	0,00127	0,00172	0,02800	459,00	425,00	0,04675	0,06022
25	1,53	0,0068	0,00425	0,00172	0,00172	0,02000	621,00	575,00	0,89119	0,60601
26	2,07	0,0068	0,00425	0,00172	0,00172	0,02800	459,00	575,00	0,31782	0,30257
27	1,53	0,0092	0,00425	0,00172	0,00172	0,02800	459,00	425,00	0,06371	0,08206
28	2,07	0,0092	0,00425	0,00172	0,00172	0,02000	621,00	425,00	0,72120	0,66351
29	1,53	0,0068	0,00575	0,00172	0,00172	0,02800	621,00	425,00	0,71421	0,67993
30	2,07	0,0068	0,00575	0,00172	0,00172	0,02000	459,00	425,00	0,07647	0,05200
31	1,53	0,0092	0,00575	0,00172	0,00172	0,02000	459,00	575,00	0,21302	0,19598
32	2,07	0,0092	0,00575	0,00172	0,00172	0,02800	621,00	575,00	0,85089	1,09595
33	1,80	0,0080	0,00500	0,00150	0,00150	0,02400	540,00	500,00	0,45861	0,44027

O modelo de Takagi-Sugeno foi o tipo de modelo de inferência proposto e as funções de pertinência do tipo gaussiana foram usadas para construir os modelos.

Os modelos foram treinados e validados com dados de um planejamento fatorial fracionário do tipo 2^{8-3} com uma faixa de variação de $\pm 12,5\%$ com relação ao estado estacionário. A matriz contendo os valores das variáveis de entrada e de saída para uma variação de $\pm 12,5\%$ e para o ponto central é apresentada na Tabela 2.4:

Tabela 2. 4 – Valores das variáveis de entrada e de saída para uma variação de $\pm 12,5\%$ e para o ponto central.

	ug	ul	ur	Agf	Alf	Blf	Tf	Trf	Conversão	Produtividade (x10 ⁴)
1	1,575	0,007	0,004375	0,001312	0,001312	0,021	472,5	562,5	0,26985	0,19834
2	2,025	0,007	0,004375	0,001312	0,001312	0,027	607,5	562,5	0,79699	0,75316
3	1,575	0,009	0,004375	0,001312	0,001312	0,027	607,5	437,5	0,58442	0,71006
4	2,025	0,009	0,004375	0,001312	0,001312	0,021	472,5	437,5	0,07801	0,07372
5	1,575	0,007	0,005625	0,001312	0,001312	0,027	472,5	437,5	0,09168	0,08663
6	2,025	0,007	0,005625	0,001312	0,001312	0,021	607,5	437,5	0,60678	0,44598
7	1,575	0,009	0,005625	0,001312	0,001312	0,021	607,5	562,5	0,73814	0,69754
8	2,025	0,009	0,005625	0,001312	0,001312	0,027	472,5	562,5	0,20576	0,25
9	1,575	0,007	0,004375	0,001687	0,001312	0,021	607,5	437,5	0,69621	0,51172
10	2,025	0,007	0,004375	0,001687	0,001312	0,027	472,5	437,5	0,11923	0,11268
11	1,575	0,009	0,004375	0,001687	0,001312	0,027	472,5	562,5	0,24704	0,30016
12	2,025	0,009	0,004375	0,001687	0,001312	0,021	607,5	562,5	0,81701	0,77207
13	1,575	0,007	0,005625	0,001687	0,001312	0,027	607,5	562,5	0,84689	0,80031
14	2,025	0,007	0,005625	0,001687	0,001312	0,021	472,5	562,5	0,34221	0,25153
15	1,575	0,009	0,005625	0,001687	0,001312	0,021	472,5	437,5	0,09611	0,09082
16	2,025	0,009	0,005625	0,001687	0,001312	0,027	607,5	437,5	0,66564	0,80876
17	1,575	0,007	0,004375	0,001312	0,001687	0,021	472,5	437,5	0,09346	0,0687
18	2,025	0,007	0,004375	0,001312	0,001687	0,027	607,5	437,5	0,62927	0,59466
19	1,575	0,009	0,004375	0,001312	0,001687	0,027	607,5	562,5	0,72797	0,88448
20	2,025	0,009	0,004375	0,001312	0,001687	0,021	472,5	562,5	0,19739	0,18653
21	1,575	0,007	0,005625	0,001312	0,001687	0,027	472,5	562,5	0,28288	0,26732
22	2,025	0,007	0,005625	0,001312	0,001687	0,021	607,5	562,5	0,79632	0,5853
23	1,575	0,009	0,005625	0,001312	0,001687	0,021	607,5	437,5	0,57676	0,54504
24	2,025	0,009	0,005625	0,001312	0,001687	0,027	472,5	437,5	0,07699	0,09355
25	1,575	0,007	0,004375	0,001687	0,001687	0,021	607,5	562,5	0,851	0,62548
26	2,025	0,007	0,004375	0,001687	0,001687	0,027	472,5	562,5	0,33956	0,32088

Capítulo 2 – Reator Trifásico: Definição, Modelagem e Estado Estacionário Não-Otimizado

27	1,575	0,009	0,004375	0,001687	0,001687	0,027	472,5	437,5	0,09926	0,1206
28	2,025	0,009	0,004375	0,001687	0,001687	0,021	607,5	437,5	0,68099	0,64354
29	1,575	0,007	0,005625	0,001687	0,001687	0,027	607,5	437,5	0,68288	0,64533
30	2,025	0,007	0,005625	0,001687	0,001687	0,021	472,5	437,5	0,11514	0,08463
31	1,575	0,009	0,005625	0,001687	0,001687	0,021	472,5	562,5	0,25208	0,23821
32	2,025	0,009	0,005625	0,001687	0,001687	0,027	607,5	562,5	0,81128	0,98571
33	1,800	0,008	0,005000	0,001500	0,001500	0,024	540,0	500,0	0,45861	0,44027

Os dados utilizados para se comparar a predição dos modelos *Fuzzy* e determinístico referem-se a uma matriz de planejamento fatorial fracionário dado por variações de $\pm 10\%$ dos valores das variáveis no estado estacionário. Esta matriz foi usada nas simulações do modelo determinístico e os valores obtidos foram comparados com os valores preditos pelo modelo *Fuzzy* quando alimentado pelos valores desta matriz. A Tabela 2.5 a seguir mostra as respostas das simulações do modelo determinístico e as predições do modelo *Fuzzy*.

Tabela 2. 5 – Respostas das simulações do modelo determinístico para variações de $\pm 10\%$.

	ug	ul	ur	Agf	Alf	Blf	Tf	Trf	Determinístico		<i>Fuzzy</i>	
									Conversão	Produtividade ($\times 10^4$)	Conversão	Produtividade ($\times 10^4$)
1	1,62	0,0072	0,0045	0,00135	0,00135	0,0216	486,0	550,0	0,3027	0,2354	0,272	0,239
2	1,98	0,0072	0,0045	0,00135	0,00135	0,0264	594,0	550,0	0,7492	0,7121	0,718	0,653
3	1,62	0,0088	0,0045	0,00135	0,00135	0,0264	594,0	450,0	0,5619	0,6527	0,558	0,640
4	1,98	0,0088	0,0045	0,00135	0,00135	0,0216	486,0	450,0	0,1224	0,1163	0,141	0,170
5	1,62	0,0072	0,0055	0,00135	0,00135	0,0264	486,0	450,0	0,1391	0,1322	0,151	0,180
6	1,98	0,0072	0,0055	0,00135	0,00135	0,0216	594,0	450,0	0,5841	0,4542	0,577	0,440
7	1,62	0,0088	0,0055	0,00135	0,00135	0,0216	594,0	550,0	0,6972	0,6626	0,674	0,606
8	1,98	0,0088	0,0055	0,00135	0,00135	0,0264	486,0	550,0	0,2506	0,2911	0,222	0,279
9	1,62	0,0072	0,0045	0,00165	0,00135	0,0216	594,0	450,0	0,6534	0,5081	0,652	0,481
10	1,98	0,0072	0,0045	0,00165	0,00135	0,0264	486,0	450,0	0,1710	0,1625	0,169	0,195

Os modelos foram ajustados para cada uma das duas variáveis de saída e estudados o número de regras associadas ao modelo (que é controlado pelo valor do nível de influência), o fator quadrático, o nível de aceitação e o nível de rejeição das regras para cada variável de saída do reator.

Os itens 2.5.2 e 2.5.3 apresentam figuras referentes à interface de ajuste das variáveis de entrada e saída dos modelos nebulosos, ao nível de ajuste dos modelos após o

Capítulo 2 – Reator Trifásico: Definição, Modelagem e Estado Estacionário Não-Otimizado

treinamento e ajuste, além de gráficos que mostram a comparação da predição do modelo *Fuzzy* com relação ao modelo determinístico do reator. O software utilizado para a geração do modelo *Fuzzy* é o Matlab versão 7.0.

2.5.2. Resultados obtidos para a conversão de o-cresol

A Figura 2.3 a seguir mostra uma interface de respostas do modelo *Fuzzy* construído para a conversão de o-cresol.

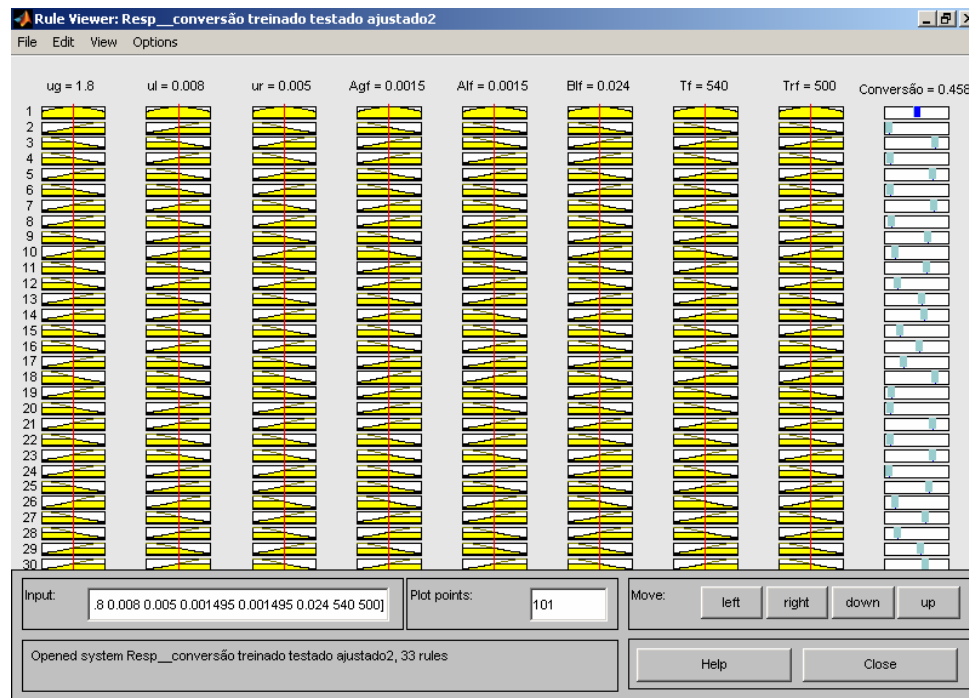


Figura 2. 3 – Interface do modelo *Fuzzy* construído para a conversão de o-cresol.

A Figura 2.4 apresenta o nível de ajuste do modelo testado e ajustado quando a variável de saída é a conversão de o-cresol. Os parâmetros a seguir foram testados e os valores que propiciaram um melhor ajuste foram:

- 1) Nível de influência = 1,35
- 2) Fator quadrático = 1,25
- 3) Faixa de aceitabilidade = 0,5
- 4) Faixa de rejeição = 0,8

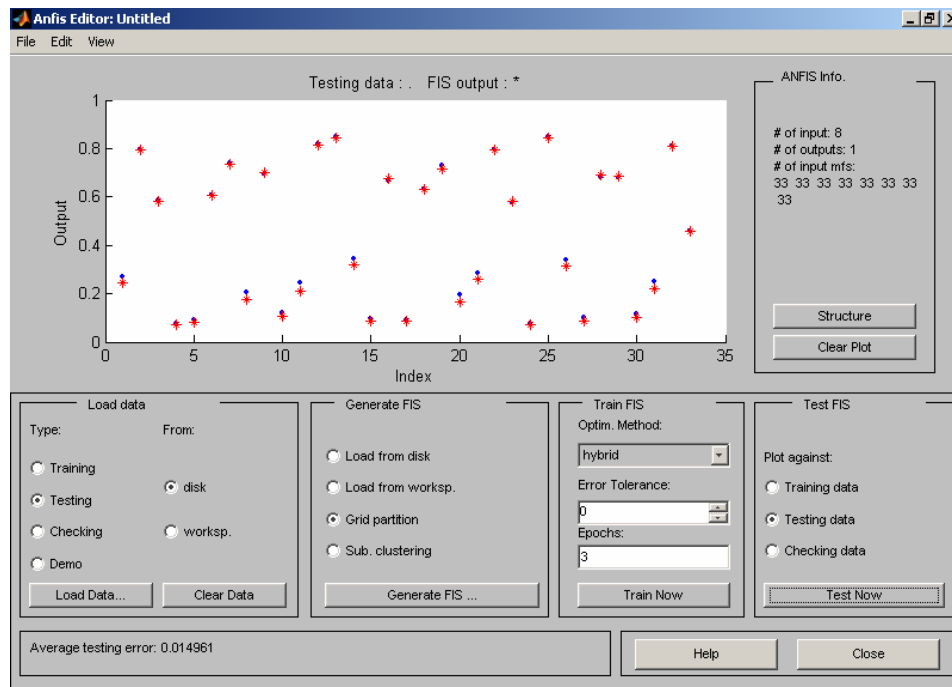


Figura 2. 4 – Resultado do teste e ajuste do modelo *Fuzzy* para a conversão de o-cresol.

É possível perceber que o modelo foi bem ajustado sendo que o erro médio associado ao modelo para a conversão foi de 0,014961, o que representa 3% de erro.

A Figura 2.5 ilustra a conversão obtida pelos dados do modelo determinístico e a predição do modelo *Fuzzy*, mostrando que as predições através do modelo *Fuzzy* estão bem próximas das do modelo determinístico.

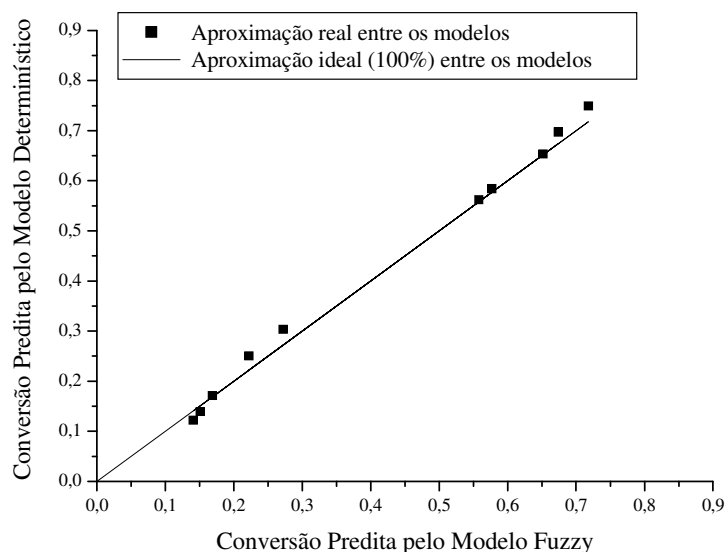


Figura 2. 5 – Conversão predita pelo Modelo Determinístico versus Conversão predita pelo Modelo *Fuzzy*.

2.5.3. Resultados obtidos para a produtividade de 2-metil-ciclohexanol

A Figura 2.6 mostra uma interface de respostas do modelo *Fuzzy* construído para a produtividade de 2-metil-ciclohexanol.

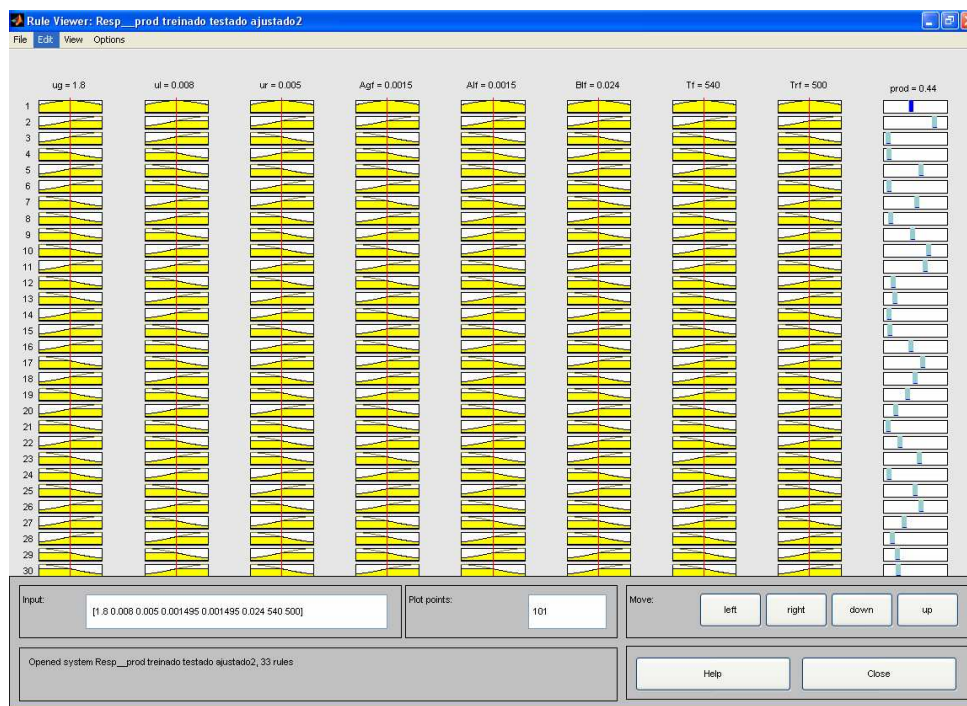


Figura 2. 6 - Interface do modelo *Fuzzy* construído para a produtividade de 2-metil-ciclohexanol.

A Figura 2.7 apresenta o nível de ajuste do modelo testado e ajustado quando a variável de saída é a produtividade de 2-metil-ciclohexanol. Os parâmetros foram testados e alterados para garantir um melhor ajuste e os valores estipulados foram os seguintes:

- 1) Nível de influência = 1,5
- 2) Fator quadrático = 1,25
- 3) Faixa de aceitabilidade = 0,5
- 4) Faixa de rejeição = 0,15

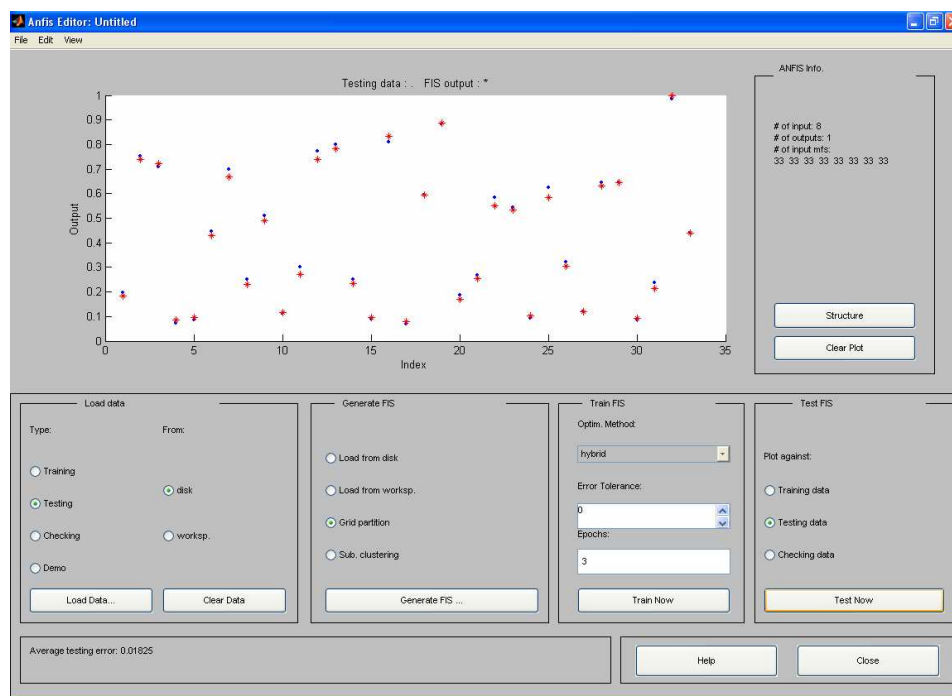


Figura 2. 7 – Resultado do teste e ajuste do modelo *Fuzzy* para a produtividade de 2-metil-ciclohexanol .

É possível perceber que o modelo foi ajustado sendo que o erro médio associado ao modelo para a produtividade foi de $0,01825 \times 10^{-4}$ Kmol/m³s, o que representa 4% de erro.

A Figura 2.8 a seguir mostra a produtividade obtida pelos dados do modelo determinístico e a predição do modelo *Fuzzy*.

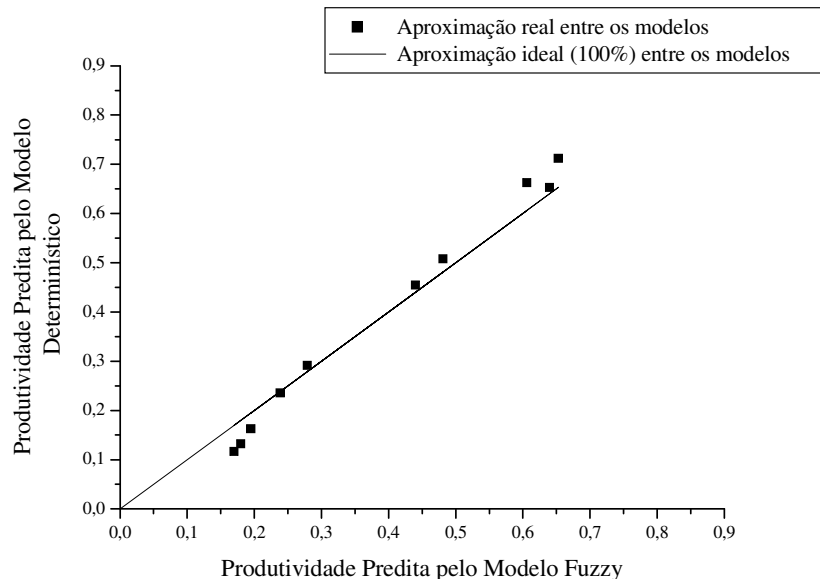


Figura 2. 8 – Produtividade predita pelo Modelo Determinístico versus Produtividade predita pelo Modelo *Fuzzy*.

A Figura 2.8 indica que o modelo *Fuzzy* não apresentou uma boa aproximação do modelo determinístico para o caso da produtividade. Uma melhor aproximação do modelo *Fuzzy* ao modelo determinístico poderia ser obtida através do ajuste dos parâmetros, da escolha da função de pertinência e do número de funções requeridas, sendo uma sugestão para trabalhos futuros.

2.6. Comportamento Dinâmico do Reator

O estudo das variáveis de entrada do reator que influenciam o seu comportamento dinâmico em termos das variáveis de saída é importante para permitir a identificação das variáveis que precisam ser medidas, manipuladas e controladas para constituir estruturas de controle e otimização viáveis para o reator.

Para o estudo da influência das variáveis de entrada sobre as variáveis de saída, é proposta a ferramenta estatística de planejamento fatorial.

Para construir o planejamento fatorial, como respostas serão consideradas as duas mais importantes das cinco variáveis de saída do reator (concentração de o-cresol na fase líquida na saída (Bl) e a temperatura média de reação na saída do reator (T)). A escolha destas duas variáveis deve-se ao fato de que a temperatura de saída do reator é importante para o controle térmico do reator e a concentração de reagentes está relacionada ao controle da conversão de reagentes sendo importante por razões ambientais.

Considerando-se as 8 variáveis de entrada do reator, foi proposto um planejamento fatorial fracionário do tipo 2^{8-4} que requer 16 simulações mais o ponto central, num total de 17 simulações. Os fatores do planejamento fatorial fracionário são as 8 variáveis de entrada e as respostas são as 2 variáveis de saída do reator consideradas.

Os valores do ponto central são os valores das variáveis de entrada apresentados na Tabela 2.2. Os níveis ± 1 são correspondentes a perturbações de $\pm 15\%$ nos valores referentes ao ponto central. A Tabela 2.6 apresenta os valores das 8 variáveis nos níveis do planejamento.

Tabela 2. 6 – Valores dos fatores nos níveis do planejamento.

Fator	Nível -1	Nível 0	Nível +1
ug	1,53	1,8	2,07
ul	$6,80 \times 10^{-3}$	$8,00 \times 10^{-3}$	$9,2 \times 10^{-3}$
ur	$4,25 \times 10^{-3}$	$5,0 \times 10^{-3}$	$5,75 \times 10^{-3}$
Agf	$1,27 \times 10^{-3}$	$1,5 \times 10^{-3}$	$1,72 \times 10^{-3}$
Alf	$1,27 \times 10^{-3}$	$1,5 \times 10^{-3}$	$1,72 \times 10^{-3}$
Blf	$2,0 \times 10^{-2}$	$2,4 \times 10^{-2}$	$2,8 \times 10^{-2}$
Tf	459	540	621
Trf	425	500	575

A matriz do planejamento fatorial fracionário 2^{8-4} , com os valores codificados, gerada pelo *software Statistica*, no módulo *Experimental Design*, é mostrada na Tabela 2.7.

Tabela 2. 7 – Matriz do Planejamento Fatorial Fracionário 2^{8-4} .

Simulação	ug	ul	ur	Agf	Alf	Blf	Tf	Trf
1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1
2	+1	+1	+1	-1	-1	-1	+1	-1
3	+1	+1	-1	+1	-1	-1	-1	+1
4	+1	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1

Capítulo 2 – Reator Trifásico: Definição, Modelagem e Estado Estacionário Não-Otimizado

5	+1	-1	+1	+1	-1	+1	-1	-1
6	+1	-1	+1	-1	+1	-1	-1	+1
7	+1	-1	-1	+1	+1	-1	+1	-1
8	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	+1
9	-1	+1	+1	+1	+1	-1	-1	-1
10	-1	+1	+1	-1	-1	+1	-1	+1
11	-1	+1	-1	+1	-1	+1	+1	-1
12	-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1	+1
13	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	+1
14	-1	-1	+1	-1	+1	+1	+1	-1
15	-1	-1	-1	+1	+1	+1	-1	+1
16	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
17	0	0	0	0	0	0	0	0

As simulações mostradas na Tabela 2.7 foram realizadas utilizando-se do modelo determinístico do reator (Eqs. 2.5-2.12) e os valores das duas variáveis de saída obtidos no estado estacionário, são mostrados na Tabela 2.8.

Tabela 2. 8 – Respostas das Variáveis de Saída.

Simulação	BI	T
1	0,00408	632,1844
2	0,00803	578,6490
3	0,01626	493,5823
4	0,02607	452,3844
5	0,02479	450,5919
6	0,01512	504,0776
7	0,00536	572,9185
8	0,00465	627,1196
9	0,01901	451,1554
10	0,02304	496,5358
11	0,00803	590,8805
12	0,00462	625,3069
13	0,00237	621,2800
14	0,01072	569,0457
15	0,01890	504,7533
16	0,01872	451,2427
17	0,01299	539,1183

As estimativas dos efeitos principais de cada fator sobre cada resposta, dadas pelo *Statistica*, são mostradas na Tabela 2.9, sendo os efeitos significativos (com 95% de confiança) destacados em negrito.

Tabela 2. 9 – Estimativas dos Efeitos

Fatores	BI	T
ug	-0,000131	0,1634
ul	0,001064	2,4562
ur	0,000569	-1,8335

Agf	-0,001521	1,6231
Alf	-0,000251	0,2430
Blf	0,003849	3,1604
Tf	-0,014256	126,6326
Trf	-0,003961	48,4965

Através da Tabela 2.9, nota-se que as variáveis de entrada que têm maior influência sobre Bl são: ul, Agf, Blf, Tf e Trf. Para a variável de saída T, nota-se que as variáveis de entrada que exercem maior influência são ul, ur, Agf, Blf, Tf e Trf, sendo que o efeito de Tf e Trf é acentuadamente mais forte do que o das demais variáveis.

Como já mencionado, o reator está inicialmente no estado estacionário e as perturbações são aplicadas no tempo igual a zero. Os valores das variáveis Bl (concentração de o-cresol na fase líquida na saída do reator) e T (temperatura média de reação na saída do reator) são medidas na saída do reator ($z = L$) para cada instante de amostragem. Em $z = L$ e no tempo zero, o processo está em estado estacionário (com $Bl = 0,0130 \text{ Kmol/m}^3$ and $T = 539,11\text{K}$). A partir deste estado estacionário, perturbações de $\pm 10\%$ e $\pm 25\%$ são impostas na temperatura de alimentação do reator (Tf) e na temperatura de alimentação do fluido refrigerante (Trf) e os valores de Bl e T em $z = L$ a cada instante de amostragem são calculados pelo modelo do reator, até que o sistema atinja um novo estado estacionário em torno de 1000 s.

Considerando que o maior efeito sobre ambas as saídas advém da temperatura de alimentação do reator, as Figuras 2.9 e 2.10 ilustram esta conclusão mostrando o comportamento dinâmico do reator em termos da concentração de o-cresol na fase líquida na saída do reator (Bl) e da temperatura média de reação na saída do reator (T), quando perturbações de $\pm 10\%$ são impostas para a temperatura de alimentação do reator. Perturbações de $\pm 25\%$ também são mostradas a fim de aumentar a faixa de confiança do estudo. Como a temperatura de alimentação de fluido refrigerante (Trf) também exerce influência forte sobre T e é a segunda variável de maior influência sobre Bl, os perfis de Bl e T, quando ocorrem perturbações de $\pm 10\%$ e $\pm 25\%$ em Trf, também são apresentados graficamente através das Figuras 2.11 e 2.12.

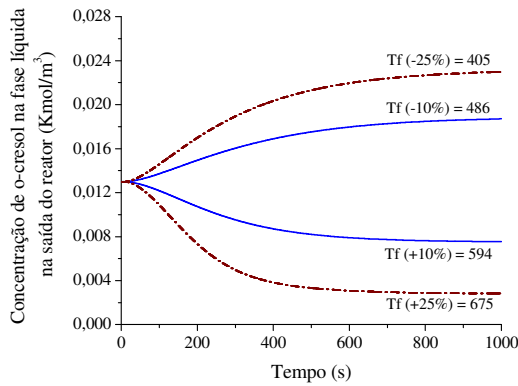


Figura 2. 9 – Efeito da temperatura de alimentação do reator (Tf) sobre a concentração de o-cresol na fase líquida na saída do reator (Bl).

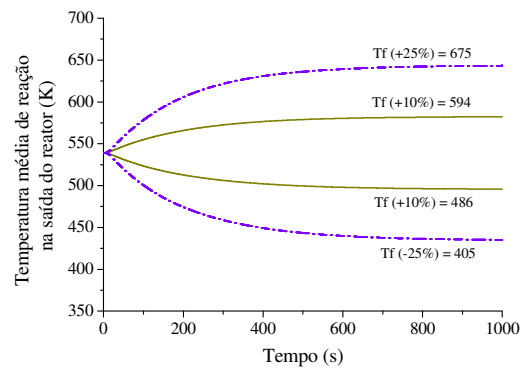


Figura 2. 10 – Efeito da temperatura de alimentação do reator (Tf) sobre a temperatura média de reação na saída do reator (T).

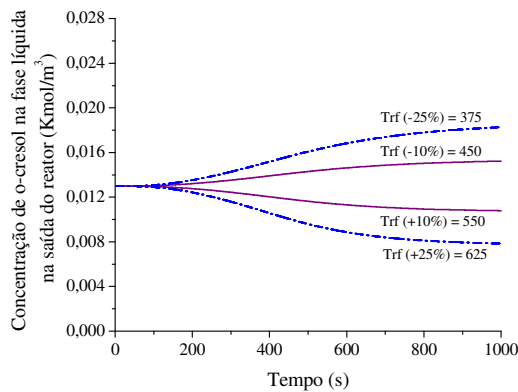


Figura 2. 11 – Efeito da temperatura de alimentação do fluido refrigerante (Trf) sobre a concentração de o-cresol na fase líquida na saída do reator (Bl).

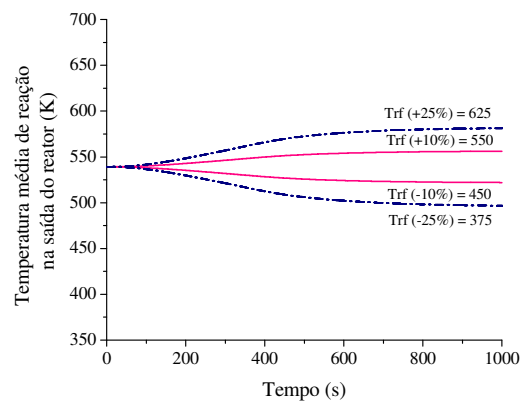


Figura 2. 12 – Efeito da temperatura de alimentação do fluido refrigerante (Trf) sobre a temperatura média de reação na saída do reator (T).

Através das Figuras 2.9 e 2.10, é possível perceber a influência de Tf sobre Bl e T. A Figura 2.9 mostra que o efeito de Tf sobre Bl é negativo, isto é, um aumento em Tf representa uma diminuição em Bl. Um aumento na temperatura de alimentação do reator (Tf) favorece uma diminuição na concentração de o-cresol na fase líquida na saída (Bl) que significa um maior consumo de o-cresol ao longo do tempo e, conseqüentemente, uma maior conversão de o-cresol na saída do reator. A Figura 2.10 mostra que o efeito de Tf sobre T é positivo, uma vez que um aumento em Tf causa um aumento em T. Quando o efeito simples de Tf sobre T é avaliado, verifica-se que um aumento na temperatura de

Capítulo 2 – Reator Trifásico: Definição, Modelagem e Estado Estacionário Não-Otimizado

alimentação do reator (T_f) favorece um aumento na temperatura média de reação na saída do reator (T).

As Figuras 2.11 e 2.12 mostram a influência de Trf sobre Bl e T . A Figura 2.11 mostra que o efeito de Trf sobre Bl é negativo, pois um aumento em Trf provoca uma diminuição em Bl . Assim, uma diminuição na concentração de o-cresol na fase líquida na saída (Bl), o que significa um maior consumo de o-cresol ao longo do tempo e, conseqüentemente, uma maior conversão de o-cresol na saída do reator, é favorecida por um aumento na temperatura de alimentação de fluido refrigerante. A Figura 2.12 mostra que o efeito simples de Trf sobre T é positivo, o que implica dizer que um aumento na temperatura média de reação na saída do reator (T) é favorecido pelo aumento na temperatura de alimentação de fluido refrigerante (Trf).

As Figuras 2.9 e 2.11 mostram, graficamente, que Bl sofre influência de ambas T_f e Trf . Assim, caso ocorram perturbações em T_f , uma forma de controle da variável de saída Bl poderia ser manipular Trf ou vice-versa. Analisando-se, agora, as Figuras 2.10 e 2.12, também se verifica, graficamente, que T sofre influência de ambas T_f e Trf . Da mesma forma, caso ocorram perturbações em T_f , uma forma de controle da variável de saída T poderia ser manipular Trf ou vice-versa. Estas estruturas são tipicamente usadas em controle de reatores.

A irreversibilidade da reação de hidrogenação fica clara neste estudo. A Figura 2.9 permite verificar que, quando uma perturbação positiva é imposta para a temperatura de alimentação do reator (por exemplo, +10%), o processo atinge um novo estado estacionário no qual a concentração de o-cresol é menor do que aquela do estado estacionário prévio (no tempo igual a zero). Este é um resultado da cinética da reação: quanto maior a temperatura média de reação, maior a taxa de reação e maior o consumo de reagentes.

2.7. Estado Estacionário Não-Otimizado

Como mostrado até agora, as condições de alimentação conduzem o reator a um estado estacionário com relativamente baixas produtividade e conversão de reagentes. Este

Capítulo 2 – Reator Trifásico: Definição, Modelagem e Estado Estacionário Não-Otimizado

estado estacionário é dito estado estacionário não-otimizado e caracterizado pela seguinte condição:

- Produtividade de 2-metil-ciclohexanol = $0,44 \times 10^{-4}$ Kmol/m³s
- Conversão de o-cresol de 46%.

A necessidade de operação do reator com alto nível de desempenho motiva a proposta de uma otimização das condições de alimentação que conduzam o reator ao um estado estacionário otimizado, traduzido em termos de máxima produtividade do produto formado e máxima conversão de reagentes. A forma como postular o problema de otimização e o método escolhido para resolver o problema de otimização são detalhados nos próximos Capítulos.

2.8. Conclusões

Este capítulo mostrou uma definição geral de reatores trifásicos. Foi apresentado o caso de estudo principal do trabalho que é o reator de lama tubular trifásico no qual ocorre a reação de hidrogenação do o-cresol formando como produto o 2-metil-ciclohexanol na presença de catalisador a base de níquel (Ni/SO₂). O modelo determinístico deste reator e as variáveis operacionais foram mostradas. Uma aproximação de modelos *Fuzzy* Takagi-Sugeno ao modelo determinístico considerando resultados obtidos para a conversão de o-cresol e para a produtividade de 2-metil-ciclohexanol foi apresentada. Um estudo do comportamento do reator em termos da concentração de o-cresol na fase líquida na saída (BI) e a temperatura média de reação na saída do reator (T) foi apresentado. Foi também mostrada a condição de estado estacionário não-otimizada do reator em termos de conversão de o-cresol e da produtividade de 2-metil-ciclohexanol.

O Capítulo a seguir mostra uma proposta para melhoria do estado estacionário do reator através de um método de otimização por Algoritmos Genéticos.

CAPÍTULO 3 – Proposta de Otimização do Reator Trifásico por Algoritmos Genéticos

Este capítulo apresenta a proposta de otimização do reator trifásico por Algoritmos Genéticos. A função objetivo e as restrições do processo são definidas, bem como o método proposto para a resolução do problema de otimização.

3.1. Objetivo da Otimização do Reator

O Capítulo 2 apresentou um estudo do reator trifásico mostrando as condições de operação e o desempenho do reator em termos da produtividade do produto resultante da reação e em termos da conversão de reagentes. Foi apresentado um determinado conjunto de condições de alimentação que originaram um estado estacionário com baixa produtividade de 2-metil-ciclohexanol e baixa conversão de o-cresol. Desta forma, o objetivo da otimização é encontrar as condições operacionais que conduzam o reator a um estado estacionário otimizado.

3.2. Formulação do problema de otimização

Otimizar um processo significa encontrar um conjunto de valores que maximizem ou minimizem uma determinada função objetivo e que obedeçam a um conjunto de restrições (igualdade e/ou desigualdade).

De um modo geral, problemas de otimização de reatores trifásicos são postulados considerando uma função objetivo motivada pela lucratividade ou por outra variável de interesse para o processo, mas sujeita à restrições ambientais e operacionais.

Neste trabalho, como 2-metil-ciclohexanol é um produto de valor comercial, a função objetivo considerada é a maximização da produtividade de 2-metil-ciclohexanol, cuja expressão foi descrita anteriormente pela Equação 2.18.

Uma vez que a produtividade é fortemente dependente da conversão de o-cresol (vide Equação 2.19), a imposição de uma restrição sobre essa variável é considerada. Como do ponto de vista econômico e ambiental é requerido que haja pouco o-cresol não convertido na saída do reator, postula-se que a conversão de o-cresol seja maior que 90%.

Em um problema de programação não-linear (PNL), pelo menos uma das equações que compõem o problema de otimização (seja a função objetivo ou uma restrição qualquer) é não linear. O problema tem a seguinte forma geral:

$$\begin{aligned}
 \text{Minimizar} \quad & f(\vec{x}) & x \in R^n \\
 \text{Sujeito a} \quad & h_j(\vec{x}) = 0 & j = 1, 2, \dots, m_1 \\
 & g_j(\vec{x}) \geq 0 & j = 1, 2, \dots, m_2
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

Onde $f(\vec{x})$ é a função objetivo, $h_j(\vec{x})$ é o conjunto de restrições de igualdade e $g_j(\vec{x})$ é o conjunto de restrições de desigualdade.

Para este caso de estudo, o problema de otimização fica então postulado com uma única função objetivo sujeita a uma restrição de desigualdade, às equações do modelo matemático e aos limites operacionais das variáveis, como mostrado na Equação 3.2:

$$\begin{aligned}
 \text{Maximize:} \quad & \text{Produtividade } (\vec{x}) \\
 \text{Sujeito a:} \quad & \text{Equações do Modelo (Eqs 2.5-2.12)} \\
 & \text{Conversão} > 90\% \\
 & x_i^{\min} \leq x \leq x_i^{\max}
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

Nestas equações, $(\vec{x})$ é composto pelas variáveis de otimização que são as oito variáveis de entrada do reator (ul, ug, ur, Agf, Alf, Blf, Tf, Trf) e $[x_i^{min}, x_i^{max}]$ é a faixa de variação permitida para estas variáveis de otimização.

Os valores mínimos e máximos permitidos para as variáveis de otimização são apresentados na Tabela 3.1 a seguir:

Tabela 3. 1 – Valores mínimos e máximos das variáveis de otimização.

Valores mínimos	Variáveis de Otimização	Valores máximos
$4,195 \times 10^{-3}$	ul	$1,1805 \times 10^{-2}$
1,08	ug	2,52
$3,0 \times 10^{-3}$	ur	$7,0 \times 10^{-3}$
$2,392 \times 10^{-3}$	Agf	$6,08 \times 10^{-3}$
$7,5 \times 10^{-4}$	Alf	$2,25 \times 10^{-3}$
$9,732 \times 10^{-3}$	Blf	$3,827 \times 10^{-2}$
459,0	Tf	621,0
425,0	Trf	575,0

Para definir os valores mínimos e máximos das variáveis de otimização, as variáveis com a mesma ordem de magnitude tiveram a mesma faixa de variação. As variáveis de velocidade (gás, líquido e refrigerante) tiveram variações de $\pm 40\%$ em torno das condições de alimentação. As variáveis de concentração (concentração de hidrogênio na fase gasosa e na fase líquida e concentração de o-cresol na fase líquida) tiveram variações de $\pm 50\%$ em relação às condições de alimentação. As variáveis de temperatura (reagentes e refrigerante) tiveram variações de $\pm 15\%$ em torno das condições de alimentação. As faixas foram escolhidas de forma que as variáveis pudessem atingir valores que tivessem significado físico.

3.3. Desafio da otimização

A otimização do reator trifásico é um desafio uma vez que o modelo matemático que descreve seu comportamento dinâmico (Eqs 2.5-2.12) é um modelo rigoroso caracterizado por uma alta dimensionalidade e uma alta não-linearidade, o que faz com que

a solução do problema de otimização através de algoritmos convencionais nem sempre leve à convergência.

Rezende (2003) e Rezende *et al.* (2004) mostraram que o método baseado em gradiente, SQP, não convergiu para condições ótimas neste mesmo reator. Como alternativa ao modelo rigoroso do reator, os autores usaram modelos estatísticos gerados por planejamento fatorial como uma forma de diminuir a complexidade do modelo completo e possibilitar empregar o algoritmo SQP. O presente trabalho usa o modelo rigoroso do reator e propõe como alternativa o emprego dos Algoritmos Genéticos, métodos de otimização evolucionária, para resolver o problema de otimização.

3.4. Princípios da Otimização por Algoritmos Genéticos

Os Algoritmos Genéticos são métodos de busca e otimização inspirados na teoria de Darwin de sobrevivência do indivíduo mais adaptado.

Em 1858 Darwin apresentou a teoria da evolução através da seleção natural. Em 1900, surgiu o princípio básico de Genética Populacional, no qual a variabilidade entre indivíduos em uma população de organismos que se reproduzem sexualmente é produzida pela mutação e pela recombinação genética. Nos anos 1930 e 1940, esse princípio foi desenvolvido por biólogos e matemáticos. Nos anos 1950 e 1960, foram desenvolvidas simulações computacionais de sistemas genéticos. Em 1975, Holland publicou o livro *Adaptation in Natural and Artificial Systems* (Holland, 1975), uma importante referência sobre Algoritmos Genéticos e nos anos 1980, Goldberg (1989) conseguiu o primeiro sucesso em aplicação industrial dos Algoritmos Genéticos.

Na natureza, os animais competem entre si por recursos como comida, água e refúgio. Aqueles que não obtêm êxito na competição tendem a ter um número reduzido de descendentes, portanto, há menor probabilidade de seus genes serem propagados ao longo de sucessivas gerações. A combinação entre os genes dos indivíduos que perduram na espécie pode produzir um novo indivíduo mais adaptado às características de seu meio ambiente. Os Algoritmos Genéticos utilizam uma analogia ao fenômeno de evolução da

natureza. Nesses algoritmos cada indivíduo representa uma possível solução para um dado problema. A cada indivíduo é atribuído uma função de avaliação dependendo da resposta dada ao problema por este indivíduo. Aos mais adaptados, é dada a oportunidade de se reproduzir mediante cruzamentos com outros indivíduos da população, produzindo descendentes com características de ambas as partes. Se um Algoritmo Genético for desenvolvido corretamente, a população (conjunto de possíveis soluções) evoluirá a uma solução ótima ou suas cercanias para o problema proposto. Existem alguns operadores genéticos que contribuem para a evolução, como a seleção/reprodução, o cruzamento (*crossover*) e a mutação. Dentre os componentes de um Algoritmo Genético, podem ser citados o espaço de busca (Figura 3.1), onde são consideradas todas as possibilidades de solução de um dado problema, e a função de avaliação, uma maneira de avaliar os membros do espaço de busca.

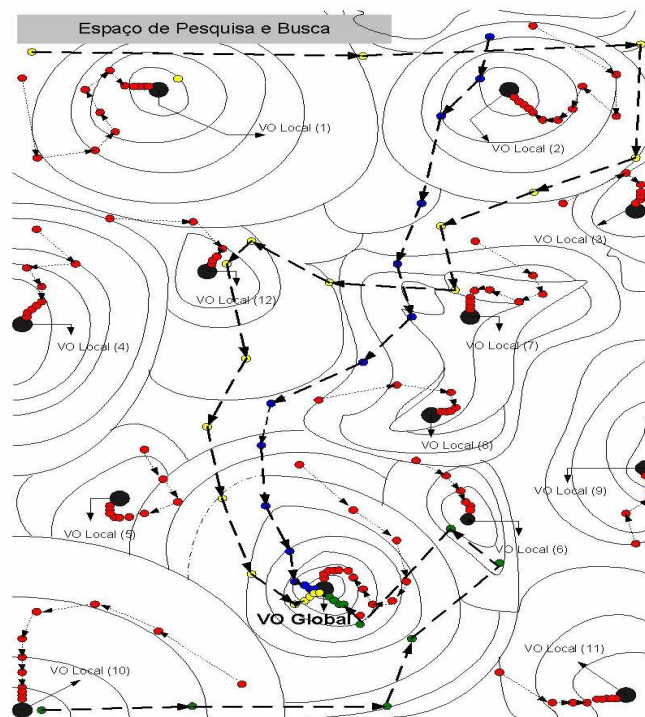


Figura 3. 1 – Espaço de busca – AGs x Métodos Convencionais (Victorino, 2005).

Os AGs, em relação a métodos clássicos de otimização (por exemplo, SQP), têm como vantagem o fato de não requererem manipulação da estrutura matemática da função objetivo e/ou restrições e não requererem estimativa inicial (Deb, 2000; Lebreiro e

Acevedo, 2004; Costa, 2006). Tais características têm aumentado a aplicação dos AGs em vários problemas de otimização.

Basicamente, o código de um AG começa com uma população de cromossomos, que são um conjunto de soluções para o problema de otimização. Cada solução é avaliada por uma função de avaliação que associa um valor a cada uma destas soluções, a fim de determinar a melhor delas. Neste ponto, são aplicados os operadores genéticos, responsáveis por promover a evolução das soluções. Este procedimento é repetido ao longo de iterações (ou gerações) até que um critério de terminação seja satisfeito.

Os operadores genéticos classificam-se em três tipos: seleção, cruzamento e mutação. O operador de seleção escolhe as melhores soluções na população. A seleção por torneio, em que os indivíduos são escolhidos aleatoriamente para participar de um torneio que seleciona os indivíduos mais adaptados de acordo com o valor do *fitness* (Deb, 1999), e a roleta probabilística (*roulette wheel*), em que para cada indivíduo da população é associado um espaço na roleta, o qual é proporcional ao *fitness* do indivíduo, são dois operadores de seleção bastante comuns. O operador de cruzamento consiste na troca de algumas partes dos cromossomos pais objetivando a troca de informações entre as soluções “pais” para gerar as soluções “descendentes”. Quando apenas um ponto de cruzamento é escolhido no cromossomo para trocar informação genética, este é o chamado cruzamento em um ponto; quando a escolha do ponto de cruzamento é múltipla e aleatória, este é o chamado cruzamento uniforme. O operador de mutação faz trocas aleatórias nos genes de alguns cromossomos, contribuindo para aumentar a diversidade da população.

Os critérios de parada de um AG podem ser encontrados com uma certa variedade na literatura. Para citar dois deles, o trabalho de Dudek (2004) usa um AG que termina quando o número máximo de gerações é atingido. No trabalho de Lebreiro e Acevedo (2004), o operador de mutação é usado como direcionador para definir quando a busca deve ser parada, dado um critério de convergência.

3.5. Tratamento das Restrições nos Algoritmos Genéticos

A maior parte dos problemas de otimização envolve algum tipo de restrição que deve ser satisfeita pela solução ótima. Na literatura podem ser encontrados alguns métodos para o tratamento das restrições nos problemas de otimização.

Os AGs empregam, na maior parte das suas aplicações de problemas de otimização com restrição, o método da função penalidade. Este método é usado para manipulação de restrições, onde a função de ajuste $F(\vec{x})$ é definida como a soma da função objetivo e um termo de penalidade $f(\vec{x})$ o qual depende da violação da restrição $\langle g_j(\vec{x}) \rangle$, como descrito abaixo (Deb, 2000):

$$F(\vec{x}) = f(\vec{x}) + \sum_{j=1}^J R_j \langle g_j(\vec{x}) \rangle^2 \quad (3.3)$$

Este método envolve parâmetros de penalidade R_j usados para prejudicar as soluções inviáveis. Uma forma de determinar os parâmetros de penalidade que direcionem a busca para uma região viável é através do método da tentativa e erro.

A determinação da solução ótima de $F(\vec{x})$ depende dos valores dos parâmetros de penalidade R_j . A inserção destes parâmetros pode “distorcer” a função objetivo: valores altos desses parâmetros conduzem o ótimo de $F(\vec{x})$ a um valor próximo do ótimo restrito verdadeiro, mas a distorção da função objetivo pode ser tão grande que $F(\vec{x})$ tenha soluções ótimas locais; para valores baixos dos parâmetros de penalidade, a distorção da função objetivo é pequena, mas o ótimo de $F(\vec{x})$ pode estar distante do ótimo restrito verdadeiro.

Diante desse fato, Deb (2000) propõe um método de manipulação de restrições que não requer nenhum parâmetro de penalidade.

A necessidade de um parâmetro de penalidade é fazer a violação da restrição da mesma ordem de magnitude do valor da função objetivo. No método proposto por Deb (2000), parâmetros de penalidade não são necessários, pois as soluções nunca são comparadas em termos de ambos, valores da função objetivo e informação de violação de restrição. Este método é baseado na habilidade dos AGs de comparação de soluções aos pares usando o operador de seleção por torneio, durante o qual os seguintes critérios são sempre enfatizados: (i) quando duas soluções viáveis são comparadas aquela com melhor valor da função objetivo é escolhida, (ii) quando uma solução viável e uma inviável são comparadas, a solução viável é escolhida, (iii) quando duas soluções inviáveis são comparadas, aquela com menor violação da restrição é escolhida.

A função de avaliação proposta pelo método de manipulação de restrições, para um problema de minimização, está descrita a seguir:

$$F(\vec{x}) = \begin{cases} f(\vec{x}) & \text{se } g_j(\vec{x}) \geq 0 \forall j = 1, 2, \dots, nc, \\ f_{\max} + \sum_{j=1}^{nc} \langle g_j(\vec{x}) \rangle, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (3.4)$$

Graficamente, o método proposto pode ser ilustrado da seguinte maneira:

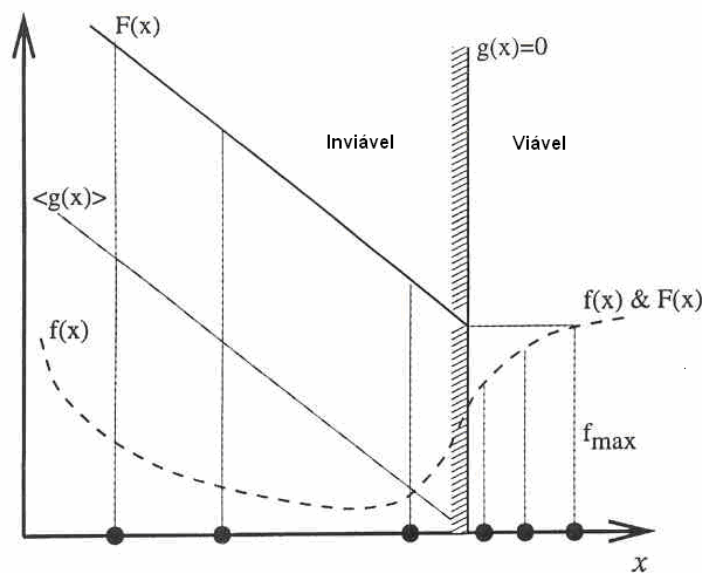


Figura 3. 2 – Método de aproximação da função penalidade (Deb, 2000)

A Figura 3.2 ilustra graficamente o método da função penalidade para um problema de minimização. Na região viável, ($g(x) > 0$), o *fitness* do indivíduo é o próprio valor da função objetivo ($F(x) = f(x)$). Na região inviável, ($g(x) < 0$), como o indivíduo viola a restrição, o *fitness* $F(x)$ é igual ao valor da pior solução viável (f_{max}) (dado pelo prolongamento da reta horizontal da região viável, para a inviável) somado à magnitude da violação da restrição.

O método de manipulação das restrições sem o uso de parâmetros de penalidade sugerido por Deb (2000) foi utilizado para tratar a restrição do problema de otimização apresentado neste trabalho.

3.6. A codificação nos Algoritmos Genéticos

A etapa de codificação é uma das mais importantes no projeto de um Algoritmo Genético. Em muitos Algoritmos Genéticos, o método de codificação é baseado em representações de séries binárias de um número, mas em muitos outros casos, os próprios números são usados na chamada codificação real. O presente trabalho propõe o emprego das duas formas de codificação no AG usado para resolver o problema de otimização do reator.

3.7. Conclusões

A proposta de otimização do reator trifásico foi apresentada neste capítulo. Como função objetivo foi sugerida a maximização da produtividade de 2-metil-ciclohexanol sujeita à restrição ambiental da conversão de o-cresol maior que 90%. Foi mostrado que o desafio da otimização do reator se dá pelo fato de o seu modelo matemático ser caracterizado por uma alta dimensionalidade e não-linearidade. A dificuldade em otimizar este reator por métodos de otimização convencionais motivou a escolha dos Algoritmos Genéticos como métodos de otimização alternativos. Para tratar a restrição postulada no problema de otimização, foi proposto o emprego de um método que não se utiliza de parâmetros de penalidade. Foi explicitado que a codificação nos AGs é uma importante etapa na construção do algoritmo e pode ser feita na forma de séries binárias ou números

reais. O próximo capítulo apresenta a resolução do problema de otimização do reator empregando os AGs de codificação binária.

CAPÍTULO 4 – Otimização do Reator por Algoritmos Genéticos de Codificação Binária

A otimização do processo de hidrogenação do reator trifásico utilizando Algoritmos Genéticos de codificação binária é apresentada neste capítulo. O desempenho dos AGs para otimizar o processo representado pelo modelo rigoroso é estudado. A aplicabilidade dos AGs para implementação em tempo real é discutida. Os parâmetros do AG são avaliados através de um planejamento fatorial com o objetivo de identificar os parâmetros mais significativos para as respostas do AG. Os parâmetros significativos são então estudados por meio de um planejamento composto central a fim de determinar os seus melhores valores que provêm a solução ótima.

4.1. Emprego dos Algoritmos Genéticos de codificação binária na otimização do reator usando o Modelo Rigoroso do processo

Esta etapa do trabalho apresenta a otimização do reator catalítico trifásico através do uso dos AGs de codificação binária acoplados ao modelo matemático rigoroso do reator caracterizado por não-linearidades e alta dimensionalidade (Eqs. 2.5-2.12), fato que representa uma dificuldade para métodos de otimização determinísticos e, que motiva o emprego de um método evolucionário como o AG.

4.1.1. A codificação binária

Segundo Deb (1998), em um Algoritmo Genético de codificação binária, todo cromossomo (conjunto de genes) é codificado em uma série binária de tamanho fixo. Para um problema com N variáveis (genes) a representação é a seguinte:

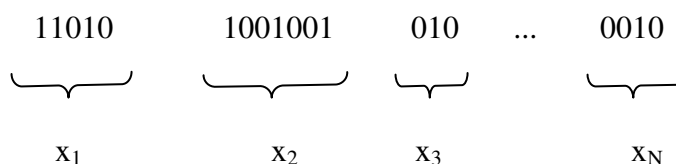


Figura 4. 1 – Representação de uma série binária.

O tamanho do gene é calculado baseado na faixa em que a variável correspondente pode variar e na precisão requerida para esta variável, como mostra a Equação 4.2:

$$l_i = \log_2 \left(\frac{x_i^{max} - x_i^{min}}{\varepsilon_i} \right) \quad (4.2)$$

onde ε_i é a precisão requerida para a variável i e x_i^{max} e x_i^{min} são, respectivamente, seus limites superior e inferior.

O tamanho total do cromossomo corresponde ao somatório dos tamanhos de cada gene:

$$l_i = \sum_{i=1}^N l_i \quad (4.3)$$

Aplicando-se a Equação (4.2) para determinar o tamanho de cada gene para cada uma das variáveis do caso de estudo considerado neste trabalho, tem-se:

- Para a variável ul :

$$l_i = \log_2 \left(\frac{1,1805 \times 10^{-2} - 0,4195 \times 10^{-2}}{0,001 \times 10^{-2}} \right) = \log_2(761) \approx 10$$

- Para a variável ug :

$$l_i = \log_2 \left(\frac{2,52 - 1,08}{0,0001} \right) = \log_2(14400) \approx 14$$

- Para a variável ur :

$$l_i = \log_2 \left(\frac{7 \times 10^{-3} - 3 \times 10^{-3}}{0,01 \times 10^{-3}} \right) = \log_2(400) \approx 9$$

- Para a variável Agf :

$$l_i = \log_2 \left(\frac{2,392 \times 10^{-3} - 0,608 \times 10^{-3}}{0,01 \times 10^{-3}} \right) = \log_2(178) \approx 8$$

- Para a variável Alf:

$$l_i = \log_2 \left(\frac{2,25 \times 10^{-3} - 0,75 \times 10^{-3}}{0,01 \times 10^{-3}} \right) = \log_2(150) \approx 8$$

- Para a variável Blf:

$$l_i = \log_2 \left(\frac{3,827 \times 10^{-2} - 0,9732 \times 10^{-2}}{0,001 \times 10^{-2}} \right) = \log_2(2853) \approx 12$$

- Para a variável Tf:

$$l_i = \log_2 \left(\frac{621,0 - 459,0}{0,01} \right) = \log_2(16200) \approx 14$$

- Para a variável Trf:

$$l_i = \log_2 \left(\frac{575,0 - 425,0}{0,01} \right) = \log_2(15000) \approx 14$$

O tamanho total do cromossomo é, então, $li = \sum_{i=1}^8 l_i = 89$

4.1.2. O código binário usado para a otimização

O Algoritmo Genético usado neste trabalho é basicamente o código de AG binário em Fortran desenvolvido por David Carroll, versão 1.7a (Carroll, 2007), com algumas modificações para a adaptação ao caso de estudo do reator e para o tratamento da restrição.

O código computacional começa com uma população aleatória de indivíduos com diferentes genes (variáveis de otimização). Esta população aleatória inicial de indivíduos é ditada pelo valor de um parâmetro do AG chamado *idum*: a mesma população inicial é gerada toda vez que o código é executado com o mesmo valor assumido para *idum* (Costa

et al., 2007). O operador de seleção usado é a seleção por torneio, já mencionada anteriormente.

A rotina do AG pode aplicar mutação *jump*, mutação *creep* e cruzamento em um ponto ou uniforme. Mutação *jump* atua no cromossomo (genótipo) e mutação *creep* age no indivíduo decodificado (fenótipo) (Costa *et al.*, 2005).

Niching e a escolha do número de descendentes por par de pais são opções do código. Os métodos de *niching* permitem que o AG seja capaz de localizar múltiplas soluções de boa qualidade e mantê-las em uma mesma população. Uma opção para o uso de micro-AG e a ferramenta do elitismo são também parte do código. A técnica de micro-AG usa uma população muito pequena (micro-população) que converge em direção a um único indivíduo representando o melhor resultado obtido com esta população particular. Uma vez que a convergência é atingida, o melhor indivíduo é preservado e a micro-população é reiniciada com novos indivíduos (Costa, 2006). Elitismo consiste em passar os melhores indivíduos, de acordo com o valor do *fitness*, sem serem modificados pelos operadores genéticos de uma geração para a outra. O código de Carroll está restrito a elitismo de apenas um indivíduo.

O código do AG usado neste trabalho contém os seguintes parâmetros que podem ser escolhidos e alterados de acordo com o problema de otimização específico:

- *Microga*: é igual a 0 para execução do código sem utilização de *micro-AG* ou igual a 1 para utilização de *micro-AG*.
- *Npopsiz*: determina o número de indivíduos da população a cada geração (iteração).
- *Pmutate*: probabilidade de mutação *jump*.
- *Maxgen*: número máximo de gerações.
- *Idum*: parâmetro que determina a população inicial de indivíduos. No código *idum* é o número aleatório que inicia a execução do AG e deve ser um inteiro negativo.
- *Pcross*: probabilidade de cruzamento.
- *Pcreep*: probabilidade de mutação *creep*.
- *Iunifr*: 0 para cruzamento em um ponto e 1 para cruzamento uniforme.

- *Iniche*: 0 quando se opta por não usar o *niching* e 1 para uso do *niching*.
- *Nchild*: determina se o número de descendentes por par de pais é 1 ou 2.
- *Ielite*: 0 para não-elitismo e 1 quando o elitismo é desejado.

Para o caso de estudo do reator, optou-se pelo emprego do cruzamento uniforme, mutação *jump* e *creep*, dois descendentes por par de pais, elitismo e *niching*. Como critério de parada foi escolhido o número máximo de gerações atingido.

O fluxograma abaixo ilustra o AG empregado neste trabalho para o caso de estudo do reator trifásico:

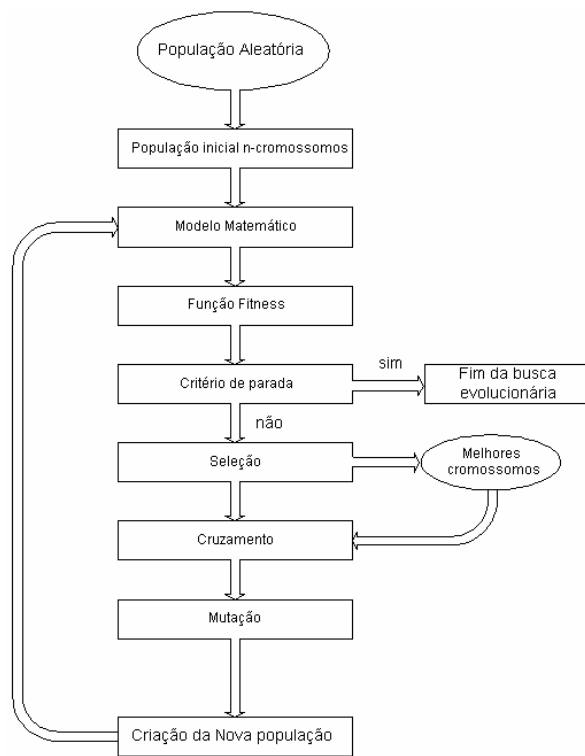


Figura 4. 2 – Fluxograma do Algoritmo Genético.

No código do AG, há um considerável número de parâmetros de entrada que precisam ser estipulados. O bom desempenho do AG está diretamente relacionado com a escolha de valores adequados para estes parâmetros.

Para resolver o problema de otimização do reator usando os Algoritmos Genéticos, a escolha dos parâmetros do AG foi, inicialmente, baseada em valores sugeridos pela literatura (Carroll, 2005; Deb, 1998, 1999). A partir destes valores e através do método da

tentativa e erro, extensivas simulações foram realizadas variando-se os valores dos parâmetros do AG para determinação dos melhores valores que levam à obtenção de maior produtividade de 2-metil-ciclohexanol sujeita a restrição ambiental da conversão maior que 90%. A Tabela 4.1 mostra os parâmetros do AG que foram considerados no método da tentativa e erro e os valores que resultaram no melhor valor da função objetivo sem violação da restrição.

Tabela 4. 1 – Valores dos parâmetros de entrada do AG.

Parâmetros de Entrada do AG	Valores
Tamanho da população por geração	50
Número máximo de gerações	50
Probabilidade de cruzamento	0,80
Probabilidade de mutação <i>jump</i>	0,05
Probabilidade de mutação <i>creep</i>	0,04
Número aleatório que inicia a população no código AG	-1000

A Figura 4.3 a seguir mostra a evolução, ao longo das gerações, da produtividade do melhor indivíduo de cada geração quando o conjunto de parâmetros de entrada do AG da Tabela 4.1 são empregados:

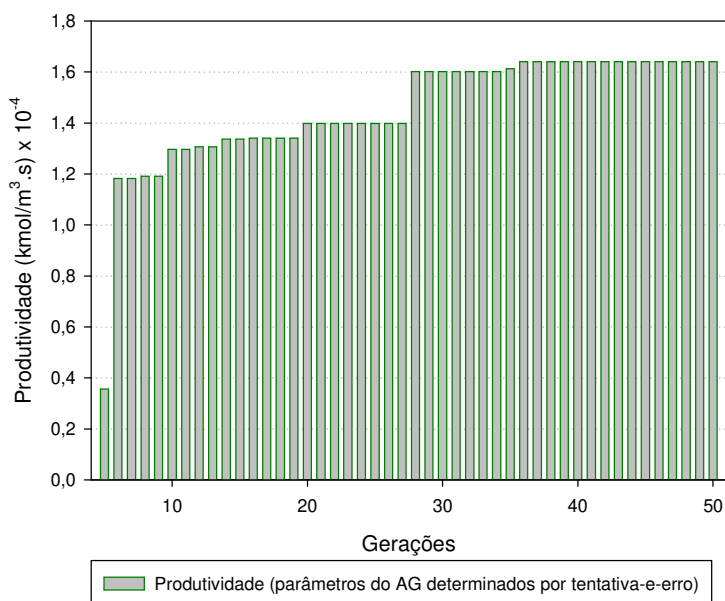


Figura 4. 3 – Evolução da Produtividade quando os parâmetros do AG otimizados pelo método da tentativa e erro são empregados.

Os valores apresentados na Tabela 4.1 impuseram uma evolução conduzindo a um indivíduo que permitiu um estado estacionário ótimo cuja produtividade é de $1,65 \times 10^{-4}$ Kmol/m³s com 90% de conversão de o-cresol. Este estado estacionário ótimo está associado aos valores ótimos das variáveis de otimização mostrados na Tabela 4.2.

Tabela 4. 2 – Solução Ótima (unidades como na seção de Notação) – Método da tentativa-e-erro para determinação dos parâmetros do AG.

Variáveis de Otimização	Valores Ótimos
ul	$9,551 \times 10^{-3}$
ug	2,451
ur	$4,182 \times 10^{-3}$
Agf	$2,343 \times 10^{-3}$
Alf	$7,971 \times 10^{-4}$
Blf	$3,808 \times 10^{-2}$
Tf	620,21
Trf	565,66

Os resultados obtidos com a otimização por AG mostram uma melhoria de 275% na produtividade e 95% na conversão, uma vez que no estado estacionário não-otimizado a produtividade é de $0,44 \times 10^{-4}$ Kmol/m³s e a conversão de 0,46, como mostrado no Capítulo 2.

É importante enfatizar que a produtividade de 2-metil-ciclohexanol de $0,44 \times 10^{-4}$ Kmol/m³s e a conversão de o-cresol de 46% são valores no estado estacionário em uma condição operacional não-otimizada. O estado estacionário do reator com uma produtividade de $1,65 \times 10^{-4}$ (kmol de 2-metil-ciclohexanol)/(m³s) e 90% de conversão de o-cresol refere-se a uma condição operacional otimizada. Comparando-se ambas as condições, estado estacionário não-otimizado e estado estacionário otimizado, é possível ver a melhoria na produtividade ($1,65 \times 10^{-4}$ (kmol de 2-metil-ciclohexanol)/(m³s)) e na conversão (0,46 de conversão de o-cresol versus 0.90 conversão de o-cresol).

É possível notar a habilidade do AG para encontrar as entradas do reator que não violam a restrição da conversão e que garantem uma melhor produtividade mesmo usando um

modelo matemático multivariável e não-linear. Este cenário não foi atingido quando o algoritmo SQP foi acoplado ao mesmo modelo rigoroso do reator, como mostra o trabalho de Rezende *et al.* (2004). Este fato mostra que os AGs são robustos e eficientes para encontrar condições ótimas em um problema de otimização.

É também importante ressaltar que o código do AG demandou um tempo computacional de quatro minutos, em um processador Pentium 4, 3.4 GHz, 2.0 GB RAM, para encontrar a melhor produtividade no estado estacionário. Este é um importante aspecto a ser considerado em aplicações em tempo real da estratégia de otimização por AGs acoplados ao modelo não-linear e multivariável. Recentemente, Costa *et al.* (2007) propuseram um método para definir os parâmetros do AG para cada caso particular que pode ser usado com vantagens sobre os procedimentos de tentativa-e-erro.

4.1.2. Estudo dos Parâmetros do Algoritmo Genético de Codificação Binária

Como já foi dito, o emprego dos AGs na otimização do processo requer a escolha de um número de parâmetros do código relativamente grande. Na seção anterior, os parâmetros do AG foram escolhidos pelo método da tentativa-e-erro, que é um método que consome elevado tempo e não se tem garantia de sucesso. A fim de diminuir o esforço computacional, garantir um alto desempenho da busca do AG e assegurar que a solução ótima seja encontrada, um estudo dos parâmetros do AG é proposto. A idéia é empregar um planejamento fatorial, procedimento sistemático que detecta os parâmetros que exercem maior influência sobre o desempenho do código e, portanto direciona a busca a uma solução ótima para o problema do reator trifásico. Comparado ao método de tentativa-e-erro, o método da escolha dos parâmetros pelo planejamento fatorial tem a importante vantagem de reduzir o tempo computacional uma vez que otimizações futuras passariam a considerar apenas os parâmetros estatisticamente significativos para a busca do valor ótimo. A etapa seguinte é determinar, através de um planejamento composto central, os melhores valores dos parâmetros do AG que conduzem à melhor solução.

Inicialmente é importante identificar quais os parâmetros do Algoritmo Genético podem ser estudados. Montero *et al.* (2005) mostraram que os mais relevantes aspectos dos

AGs são a construção de uma população inicial, a avaliação de cada indivíduo pela função *fitness*, a seleção dos pais para a próxima geração, o cruzamento destes pais para gerar os descendentes e a mutação para aumentar a diversidade. Além destes, há outros importantes parâmetros a serem considerados na construção de um AG. O tamanho da população é um importante parâmetro, uma vez que população pequena implica em uma pequena cobertura do espaço de busca e, por outro lado, uma população grande assegura uma melhor cobertura do espaço de busca, evitando com maior probabilidade a obtenção de soluções locais. Outros importantes parâmetros de construção de um AG são as taxas de cruzamento e mutação. Uma taxa de cruzamento baixa evita que estruturas com alta aptidão sejam substituídas. A taxa de mutação é usualmente baixa uma vez que, embora mutações sejam importantes para prevenir que a população sofra perda de diversidade genética, elas podem ocasionar perda de informação genética de uma área de busca promissora. Um outro importante parâmetro de um AG é o número de gerações, sendo que quanto maior esse número maior a probabilidade de obtenção do ótimo global.

Alguns códigos de AG consideram como parâmetro de construção do algoritmo um número aleatório que determina a população inicial de indivíduos. Carroll (1996) mostrou um sistema de *laser* em que o número aleatório que inicia a população de indivíduos pode fazer uma grande diferença em quão rapidamente o AG encontra a potência ótima do laser. Muitos outros autores consideram o número aleatório que inicia a população de indivíduos como um parâmetro de estudo na construção de um AG (Angira, 2006; Costa *et al.*, 2007, Shopova e Vaklieva-Bancheva, 2006; Sarkar e Modak, 2003, etc.).

Vários trabalhos na literatura sugerem valores para os parâmetros de entrada do AG. Katare *et al.* (2004) usaram os operadores de cruzamento e mutação com probabilidades de 0,85 e 0,05, respectivamente. Leboreiro e Acevedo (2002) estudaram a sintonia dos parâmetros do AG aplicado à sistemas de destilação e mostraram que os melhores resultados foram obtidos com uma população de 25 a 50 indivíduos, probabilidade de mutação entre 0,005 e 0,01 e probabilidade de cruzamento em torno de 0,6.

Com base nos valores dos parâmetros sugeridos pela literatura, a seção seguinte mostra o estudo dos parâmetros do AG a fim de se identificar os parâmetros mais significativos no desempenho do AG, para o caso de otimização do reator trifásico de hidrogenação do o-cresol.

4.1.2.1. Planejamento Fatorial Fracionário

Com o objetivo de se detectar os parâmetros mais significativos que influenciam no desempenho do AG, um planejamento fatorial é proposto.

Os parâmetros a serem estudados, considerando o código de Carroll adaptado para este trabalho, são o tamanho da população (*npopsiz*), a probabilidade de mutação *jump* (*pmutate*), o número máximo de gerações (*maxgen*), a probabilidade de mutação *creep* (*pcreep*), a probabilidade de cruzamento (*pcross*) e a população inicial de indivíduos (*idum*). Estes parâmetros são os fatores do planejamento fatorial. A resposta do planejamento fatorial é a variável de interesse no problema de otimização: a produtividade de 2-metil-ciclohexanol (função objetivo). A Tabela 4.3 mostra a faixa dos fatores estudada. Os valores do ponto central são baseados nas sugestões da literatura e os níveis ± 1 são dados por uma variação de $\pm 30\%$ nos valores do ponto central.

Tabela 4. 3 – Faixa dos parâmetros de entrada do AG usada no planejamento fatorial.

Parâmetro	Nível -1	Ponto Central (0)	Nível +1
<i>npopsiz</i>	35	50	65
<i>pmutate</i>	0,035	0,05	0,065
<i>maxgen</i>	35	50	65
<i>idum</i>	-1300	-1000	-700
<i>pcross</i>	0,49	0,70	0,91
<i>pcreep</i>	0,028	0,04	0,052

Para analisar os parâmetros do AG, foi construído um planejamento fatorial, usando o *software* Statistica (StatSoft v. 7.0), através do módulo *Experimental Design*. Uma vez que o número total de fatores é seis, 2⁶ ou sessenta e quatro simulações são requeridas para um planejamento fatorial completo. Contudo, é possível usar um número menor de

simulações através de um planejamento fatorial fracionário. Foi escolhido um planejamento fatorial fracionário 2^{6-1} que requer trinta e duas simulações mais o ponto central (totalizando trinta e três simulações). Apenas um ponto central é usado já que não há erros experimentais envolvidos.

A matriz do planejamento contendo as trinta e três simulações é apresentada na Tabela 4.4. A última coluna consta do melhor *fitness* obtido na última geração para cada uma das trinta e três simulações. Indivíduos viáveis foram encontrados em todas as simulações, fato garantido pelo uso do método de manipulação da restrição. Assim, a função *fitness* para o melhor indivíduo é o valor da produtividade.

Tabela 4. 4 – Matriz do Planejamento Fatorial Fracionário do tipo 2^{6-1} .

Simulação	npopsiz	pmutate	maxgen	idum	pcross	pcreep	Produtividade x10 ⁴ (kmol/m ³ s)
1	35	0,0350	35	-1300	0,4900	0,0280	1,51
2	65	0,0350	35	-1300	0,4900	0,0520	1,61
3	35	0,0650	35	-1300	0,4900	0,0520	1,49
4	65	0,0650	35	-1300	0,4900	0,0280	1,47
5	35	0,0350	65	-1300	0,4900	0,0520	1,61
6	65	0,0350	65	-1300	0,4900	0,0280	1,80
7	35	0,0650	65	-1300	0,4900	0,0280	1,58
8	65	0,0650	65	-1300	0,4900	0,0520	1,56
9	35	0,0350	35	-700	0,4900	0,0520	1,63
10	65	0,0350	35	-700	0,4900	0,0280	1,68
11	35	0,0650	35	-700	0,4900	0,0280	1,17
12	65	0,0650	35	-700	0,4900	0,0520	1,54
13	35	0,0350	65	-700	0,4900	0,0280	1,59
14	65	0,0350	65	-700	0,4900	0,0520	1,58
15	35	0,0650	65	-700	0,4900	0,0520	1,36
16	65	0,0650	65	-700	0,4900	0,0280	1,68
17	35	0,0350	35	-1300	0,9100	0,0520	1,35
18	65	0,0350	35	-1300	0,9100	0,0280	1,63
19	35	0,0650	35	-1300	0,9100	0,0280	1,41
20	65	0,0650	35	-1300	0,9100	0,0520	1,46
21	35	0,0350	65	-1300	0,9100	0,0280	1,74

22	65	0,0350	65	-1300	0,9100	0,0520	1,73
23	35	0,0650	65	-1300	0,9100	0,0520	1,53
24	65	0,0650	65	-1300	0,9100	0,0280	1,51
25	35	0,0350	35	-700	0,9100	0,0280	1,33
26	65	0,0350	35	-700	0,9100	0,0520	1,39
27	35	0,0650	35	-700	0,9100	0,0520	1,24
28	65	0,0650	35	-700	0,9100	0,0280	1,46
29	35	0,0350	65	-700	0,9100	0,0520	1,41
30	65	0,0350	65	-700	0,9100	0,0280	1,79
31	35	0,0650	65	-700	0,9100	0,0280	1,61
32	65	0,0650	65	-700	0,9100	0,0520	1,60
33	50	0,0500	50	-1000	0,7000	0,0400	1,65

A partir da matriz do planejamento da Tabela 4.4, foram obtidas as estimativas dos efeitos dos parâmetros do AG mostradas na Tabela 4.5.

A Tabela 4.5 apresenta na última coluna o p-valor, que é a probabilidade de erro envolvida na aceitação de um efeito como válido. A prática comum é considerar 95% de confiança em um resultado, ou seja, para um efeito ser considerado estatisticamente significativo, o p-valor correspondente deve ser menor que 0,05 (Costa *et al.*, 2007). Embora a análise de p-valor tenha sido usada para avaliar a significância dos efeitos, em um trabalho de simulação o p-valor não tem significado físico, uma vez que não há erros experimentais envolvidos.

Na Tabela 4.5, os parâmetros significativos (com 95% de confiança) estão em negrito e são considerados os parâmetros mais importantes no caso estudado. Estes parâmetros são o tamanho de população (**npopsiz**), probabilidade de mutação *jump* (**pmutate**) e o número máximo de gerações (**maxgen**). Pode ser visto também que as interações entre os parâmetros não são importantes.

Tabela 4. 5 – Estimativas dos efeitos dos parâmetros do AG.

	Efeito x 10 ⁴	p
Média/Interc.	1,53	0,000000
(1)npopsiz	0,12	0,013065
(2)pmutate	-0,11	0,023864
(3)maxgen	0,14	0,004647
(4)idum	-0,06	0,182059
(5)pcross	-0,04	0,326823
(6)pcreep	-0,05	0,209621
1 x 2	-0,01	0,822501
1 x 3	-0,02	0,665519
1 x 4	0,05	0,229848
1 x 5	-0,001	0,964173
1 x 6	-0,01	0,731280
2 x 3	0,004	0,916547
2 x 4	0,01	0,731280
2 x 5	0,04	0,370193
2 x 6	0,04	0,340844
3 x 4	0,003	0,940330
3 x 5	0,06	0,157625
3 x 6	-0,06	0,165437
4 x 5	-0,01	0,845803
4 x 6	-0,01	0,709075
5 x 6	-0,04	0,326823

A Figura 4.4 apresenta o gráfico de Pareto com as estimativas dos efeitos das variáveis estudadas no planejamento fatorial.

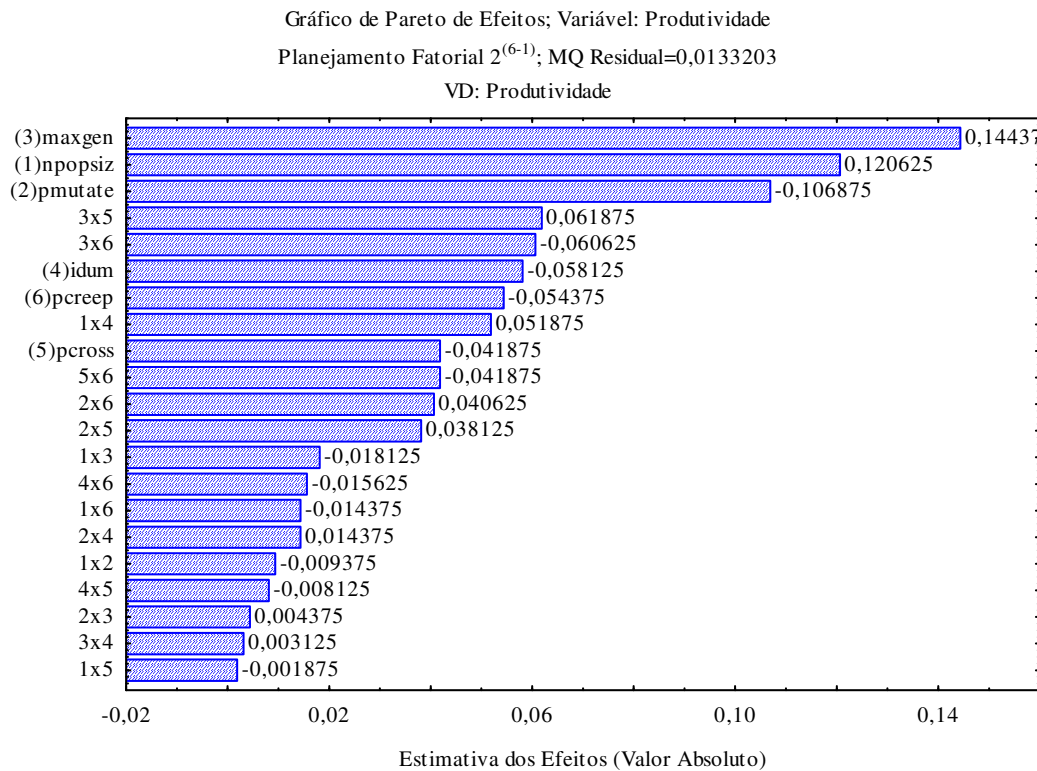


Figura 4. 4 – Gráfico de Pareto de Efeitos (Rezende *et al.*, 2007)

Como pode ser visto na Figura 4.4, os efeitos do número de gerações e do tamanho da população no AG sobre a produtividade do reator são positivos, isto é, quanto maior o número de gerações e maior o número de indivíduos na população, maior é a produtividade do indivíduo mais evoluído. O efeito da probabilidade de mutação *jump* sobre a produtividade é negativo, ou seja, quanto menor o seu valor, maior a produtividade do indivíduo mais evoluído.

Tendo sido definidos os parâmetros mais importantes do AG para a otimização do reator trifásico, a próxima etapa é determinar os melhores valores destes parâmetros, dentro de uma faixa de valores estipulada, que conduzam ao melhor valor da função objetivo.

4.1.2.2. Planejamento Composto Central

A fim de se determinar os melhores valores dos parâmetros significativos do AG, é proposto o emprego de um planejamento composto central.

Considerando os três parâmetros definidos pelo planejamento fatorial fracionário como sendo os mais importantes parâmetros do AG, foi realizado um planejamento composto central $(2^3)^{1/4}$ com ponto central. Os fatores deste planejamento são, então, npopsiz, pmutate e maxgen e a produtividade é a resposta observada. O planejamento composto central permite a obtenção de coeficientes de regressão e de um modelo empírico quadrático que pode ser usado para determinar a região ótima dos parâmetros estudados.

A Tabela 4.6 mostra a faixa dos parâmetros do AG usados no planejamento composto central.

Tabela 4. 6 – Faixa dos parâmetros de entrada do AG usados no planejamento composto central

Parâmetro	Nível -1,68*	Nível -1	Ponto Central (0)	Nível +1	Nível +1,68*
npopsiz	25	35	50	65	75
pmutate	0,0248	0,035	0,05	0,065	0,0752
maxgen	25	35	50	65	75

*(2^3)^{1/4}

O planejamento composto central $(2^3)^{1/4}$ com ponto central requer quinze simulações, como mostra a Tabela 4.7. Para realizar as simulações apresentadas na Tabela 4.7, os valores dos parâmetros não-significativos do AG (idum, pcross e pcreep) foram estipulados no valor do ponto central da Tabela 4.3.

Tabela 4. 7 – Planejamento composto central $(2^3)^{1/4}$ com ponto central

Simulação	npopsiz	pmutate	maxgen	Produtividade x 10 ⁴ (kmol/m ³ s)
1	35	0,035	35	1,67
2	35	0,035	65	1,70
3	35	0,065	35	1,53
4	35	0,065	65	1,53
5	65	0,035	35	1,49
6	65	0,035	65	1,66
7	65	0,065	35	1,43

8	65	0,065	65	1,63
9	25	0,05	50	1,66
10	75	0,05	50	1,59
11	50	0,025	50	1,84
12	50	0,075	50	1,66
13	50	0,05	25	1,58
14	50	0,05	75	1,65
15	50	0,05	50	1,65

A Tabela 4.8 traz os coeficientes codificados do modelo de regressão e os p-valores. Os termos significativos ($p < 0,05$) apresentam-se em negrito. Nota-se que apenas o coeficiente linear de *pmutate* é significativo na faixa operacional estudada.

Tabela 4. 8 – Coeficientes Codificados do modelo de regressão

	Coeficientes	p
Média/Interc.	1,666143	0,000003
(1)Npopsiz (L)	-0,024729	0,259687
Npopsiz (Q)	-0,031179	0,334868
(2)Pmutate (L)	-0,051456	0,045734
Pmutate (Q)	0,013015	0,674721
(3)Maxgen (L)	0,037910	0,108916
Maxgen (Q)	-0,034714	0,288293
1L x 2L	0,027500	0,328785
1L x 3L	0,042500	0,155451
2L x 3L	0,000000	1,000000

Na Tabela 4.8 é possível observar que o efeito da probabilidade de mutação *jump* (*pmutate*) sobre a produtividade é negativo, ou seja, quanto menor a probabilidade de mutação *jump*, maior a produtividade do indivíduo mais evoluído. Desta forma, o melhor valor do parâmetro mais significativo do AG (*pmutate*) é 0,0248 que é o menor valor na faixa operacional estudada.

A Tabela 4.9 mostra os valores dos parâmetros do AG quando o valor do parâmetro significativo (probabilidade de mutação *jump* (*pmutate*)) é o ótimo determinado pelo

planejamento composto central e os valores dos parâmetros não-significativos do AG (idum, pcross e pcreep) são os valores do ponto central da Tabela 4.3.

Tabela 4. 9 – Parâmetros de entrada do AG otimizados.

Parâmetros de entrada do AG	Valores otimizados
npopsiz	50
pmutate	0,0248
maxgen	50
idum	-1000
pcross	0,70
pcreep	0,04

No estudo dos parâmetros do AG foram realizadas 48 simulações, sendo 33 simulações para o planejamento fatorial fracionário e 15 simulações para o planejamento composto central. Para cada simulação, foi necessário um tempo computacional em torno de 3 a 5 minutos, dependendo do conjunto de parâmetros empregados em cada simulação, considerando um processador Pentium 4, 2.8 GHz, 512 MB RAM.

O próximo passo é realizar a otimização do reator trifásico através do AG acoplado ao modelo completo (Eqs 2.5-2.12) a fim de se encontrar o valor real da produtividade que é obtida quando são usados os parâmetros de entrada do AG nos valores ótimos determinados pelo planejamento fatorial. Assim, utilizando-se dos valores dos parâmetros de entrada do AG otimizados, apresentados na Tabela 4.9, o AG acoplado ao modelo completo do reator encontrou o conjunto ótimo de valores das variáveis de otimização, mostrado na Tabela 4.10 e que levou a uma produtividade de $1,84 \times 10^{-4}$ (kmol de 2-metil-ciclohexanol)/(m³s) e 90% de conversão de o-cresol.

Tabela 4. 10 – Solução Ótima (Unidades como na seção de Notação) – Parâmetros do AG otimizados por planejamento fatorial.

Variáveis de otimização	Valores ótimos
ul	$1,07 \times 10^{-2}$
ug	2,41
ur	$3,0 \times 10^{-3}$
Agf	$2,38 \times 10^{-3}$

Alf	$2,0 \times 10^{-3}$
Blf	$3,81 \times 10^{-2}$
Tf	620,66
Trf	564,48

O tempo computacional requerido para esta otimização foi de quatro minutos em um processador Pentium 4, 3.4 GHz, 2.0 GB RAM, um valor relativamente baixo lembrando que o AG foi acoplado a um modelo não-linear e multivariável. Este é um importante aspecto a ser considerado e coloca os AGs como métodos de otimização com potencialidade para aplicações em tempo real, para o caso de estudo tratado.

A Figura 4.5 a seguir mostra a evolução da produtividade ao longo das gerações quando os parâmetros de entrada do AG são os otimizados pelo planejamento fatorial.

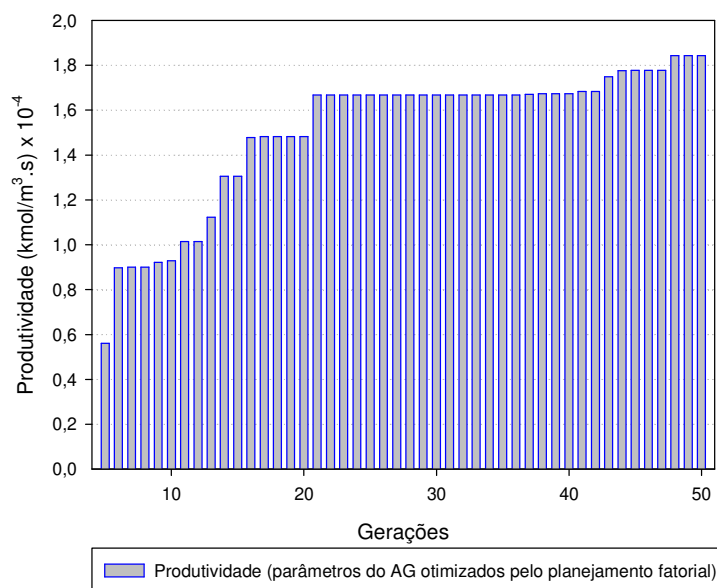


Figura 4. 5 – Evolução da Produtividade quando os parâmetros do AG otimizados pelo método do planejamento fatorial são empregados.

Comparando-se o valor da função objetivo obtido quando os parâmetros do AG são otimizados usando a técnica de planejamento fatorial e o valor da função objetivo obtido quando os parâmetros do AG são otimizados pelo método da tentativa-e-erro, é possível perceber uma melhoria de 11,5% na função objetivo ($1,84 \times 10^{-4}$ kmol/m³.s versus $1,65 \times 10^{-4}$ kmol/m³.s). A Figura 4.6 a seguir ilustra essa comparação.

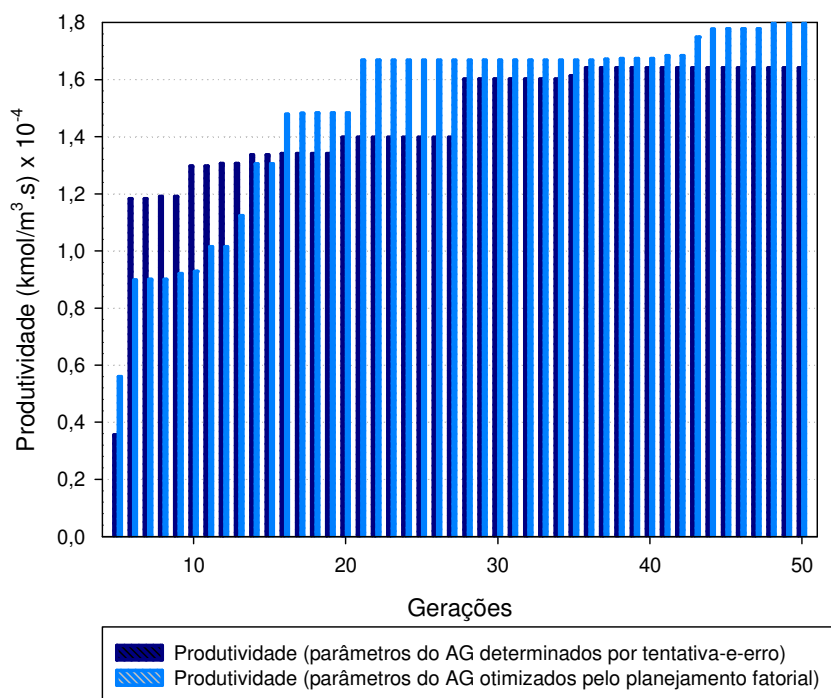


Figura 4. 6 – Comparação entre a produtividade obtida quando valores os parâmetros do AG são otimizados através do planejamento fatorial e quando os parâmetros do AG são otimizados pelo método da tentativa-e-erro.

Mais ainda, comparando-se o valor da função objetivo obtido quando os parâmetros do AG são otimizados usando a técnica de planejamento fatorial e o valor da função objetivo obtido quando os parâmetros do AG não-otimizados são empregados, verifica-se uma melhoria de 318% na função objetivo ($1,84 \times 10^{-4}$ kmol/m³s versus $0,44 \times 10^{-4}$ kmol/m³s), o que confirma a técnica do planejamento fatorial como uma importante ferramenta a ser empregada na otimização dos parâmetros do AG.

Comparando-se as Tabelas 4.10 e 2.1, diferenças significantes podem ser observadas em alguns valores operacionais para as condições otimizadas por meio da técnica de planejamento fatorial e para as condições otimizadas por meio do método da tentativa-e-erro, respectivamente, o que vem reafirmar a necessidade de procedimentos de otimização para a obtenção de alto desempenho operacional. É importante mencionar que ambos os conjuntos de condições operacionais são fisicamente consistentes.

4.2. Conclusões

Neste capítulo a otimização do reator de hidrogenação de lama trifásico foi considerada. A não-linearidade e a alta dimensionalidade do modelo matemático que descreve o reator motivaram o emprego do AG, um método evolucionário, na otimização, uma vez que modelos com estas características representam uma dificuldade para métodos de otimização baseados em gradiente. O código do AG foi usado acoplado ao modelo matemático não-linear do reator. Extensivas simulações preliminares mostraram que os AGs melhoram a produtividade de 2-metil-ciclohexanol sujeita à restrição ambiental da conversão de o-cresol. O alto tempo computacional, típico de métodos evolucionários, não foi observado nesta aplicação, fato que coloca o AG como sendo um método apropriado para implementação em tempo real para este caso de estudo.

Foi observado que os AGs requerem que seja estipulado um número de parâmetros de entrada que influenciam no desempenho do algoritmo. Para se determinar os parâmetros mais importantes do AG, um planejamento fatorial fracionário foi proposto. Em seguida, para encontrar os melhores valores destes parâmetros do AG, um planejamento composto central foi usado.

O procedimento de otimização do reator, empregando-se os parâmetros otimizados do AG, permitiu encontrar os oito melhores valores das variáveis operacionais de entrada do reator que conduziram a um estado estacionário otimizado em termos de uma produtividade máxima de 2-metil-ciclohexanol sujeita a uma conversão mínima de o-cresol.

O próximo capítulo apresenta a otimização do reator trifásico empregando AGs de codificação real.

CAPÍTULO 5 – Otimização do Reator por Algoritmos Genéticos de Codificação Real

Esta etapa do trabalho emprega os AGs de codificação real para otimizar as condições de alimentação que conduzem o reator a um estado estacionário otimizado, da mesma forma como foi feito empregando-se os AGs de codificação binária.

5.1. Algoritmo Genético de codificação real

A forma mais comum de codificação dos AGs encontrada na literatura é a codificação binária, porém há a codificação real em que todos os genes em um cromossomo são representados pelos números reais. Alguns autores consideram que é mais adequado representar os genes diretamente como valores reais, uma vez que, quando se emprega séries binárias, os procedimentos de decodificação para números reais podem acarretar perda de precisão dependendo do número de bits usados (Baskar *et al.*, 2003; Deb, 1999).

O Algoritmo Genético de codificação real usado neste trabalho é baseado no código desenvolvido em linguagem Fortran por Yedder (2006) para resolver um problema de minimização, mas que não envolve restrições. Para o uso do código foram feitas as modificações necessárias à adaptação ao caso de estudo do reator trifásico, como por exemplo:

1. Definição do número de variáveis de otimização e dos seus limites operacionais.
2. Formulação da função objetivo a ser minimizada e da restrição.
3. Implementação do método de manipulação de restrição.
4. Escolha dos parâmetros de entrada do código adequados.

O princípio de funcionamento do código de otimização do AG real é praticamente o mesmo do código do AG binário. Além da forma da codificação em si, a maior diferença está no tipo de operadores genéticos que o código AG real emprega em relação ao empregado no AG binário.

O operador de seleção usado no código do AG real é do tipo roleta probabilística (*roulette wheel*), em que, para cada indivíduo da população, é associado um espaço na roleta, o qual é proporcional ao *fitness* do indivíduo. Indivíduos com maior porção na roleta têm maior probabilidade de serem selecionados como pais para as próximas gerações (Arumugam *et al.*, 2005).

Os operadores de cruzamento avaliados são o cruzamento do tipo multi-pontos (denotado por *multip*) com um número de pontos de cruzamento igual a quatro, determinado por tentativa-e-erro, e o cruzamento do tipo *SBX* (*simulated binary crossover*) em que a disseminação de soluções filhas em torno das soluções pais pode ser controlada usando um índice de distribuição, que foi determinado ser igual a 2, por tentativa-e-erro. Com o operador de cruzamento *SBX* qualquer região próxima arbitrária pode ser buscada, desde que haja suficiente manutenção da diversidade entre as soluções pais viáveis (Deb, 2000).

O operador de mutação pode ser do tipo não uniforme ou do tipo mutação gaussiana. Mutação não-uniforme (denotada por *nonuni*) é um operador de mutação dinâmica especial que melhora a sintonia de um único elemento e reduz a desvantagem de mutação aleatória da codificação real (Michalewicz, 1992). Mutação gaussiana (denotada por *varnor*) consiste na adição de um valor aleatório a partir de uma distribuição gaussiana para cada elemento de um vetor de indivíduos para criar uma nova descendência (Hussain, 1998).

Operadores de mutação e cruzamento não são aplicados a todos os indivíduos, sendo suas frequências controladas por uma probabilidade de cruzamento (P_c) e uma probabilidade de mutação (P_m).

Neste código computacional, as opções de *niching* e elitismo são incluídas. Definições destas duas ferramentas já foram apresentadas no Capítulo 4.

Utilizando-se da mesma formulação do problema de otimização do reator trifásico resolvida pelos AGs de codificação binária, é proposta agora a resolução por AGs de codificação real. Utilizando-se dos mesmos valores determinados pelo método da tentativa-e-erro nos AGs de codificação binária para o tamanho da população, o número de gerações e para as probabilidades de cruzamento e mutação, procedeu-se à otimização do reator empregando o AG real. Os tipos de seleção, cruzamento e mutação usados neste caso também foram determinados pelo método da tentativa-e-erro. Os valores e tipos de parâmetros do AG real empregados na otimização do reator são apresentados na Tabela 5.1 a seguir:

Tabela 5. 1 – Parâmetros do AG real escolhidos pelo método da tentativa-e-erro.

Parâmetro do AG real	Valores escolhidos
popsiz	50
maxgen	50
pc	0,80
pm	0,05
types	roleta
typec	multi-pontos
typem	não-uniforme

Os valores e os tipos de parâmetros de entrada do código AG real, mostrados na Tabela 5.1, foram os que permitiram a obtenção do melhor valor da função objetivo sem violação da restrição.

Na literatura, há vários trabalhos que comparam o desempenho do AG de codificação binária e real para diferentes problemas de otimização. Boozarjomehry e Masoori (2007) usaram ambas as formas de codificação para a modelagem cinética de vários sistemas de reações e os resultados obtidos mostraram que, apesar da facilidade de implementação, o AG de codificação real tem pior desempenho comparado ao AG de codificação binária.

No presente trabalho, comparação feita quando os parâmetros do AG real foram escolhidos pelo método da tentativa-e-erro e têm os mesmos valores para o binário, é apresentada na Tabela 5.2 a seguir:

Tabela 5. 2 – Comparação entre o AG binário e o AG real quando os parâmetros de entrada dos códigos foram determinados por tentativa-e-erro.

	Binário	Real
Produtividade (Kmol/m ³ s)	1,65x10 ⁻⁴	1,22x10 ⁻⁴
Tempo computacional (min)	3	5

Na Tabela 5.2 pode ser visto que o AG de codificação binária mostra-se mais eficiente na otimização do reator, além do tempo computacional requerido ter sido menor, usando-se o mesmo processador, o que é um importante fator para a aplicação em tempo real.

Na próxima seção é proposto um estudo para detectar quais os parâmetros do código que têm mais relevância no seu desempenho, visando eliminar variações nos parâmetros não significativos e, assim, facilitar a manipulação do código AG real em aplicações futuras.

5.2 . Estudo dos Parâmetros do AG de codificação real

Para o estudo dos parâmetros do AG de codificação real, é também proposto o emprego de um planejamento fatorial que identifique os parâmetros estatisticamente significativos do código.

Dentre os parâmetros do código do AG real citados na Tabela 5.1, é necessário estudar os seguintes parâmetros quantitativos:

- npopsiz (tamanho da população)
- maxgen (número máximo de gerações)
- Pc (probabilidade de cruzamento)

- Pm (probabilidade de mutação)

E os seguintes parâmetros qualitativos:

- Typec (tipo de cruzamento)
- Typem (tipo de mutação)

A resposta do planejamento fatorial é mais uma vez a produtividade de 2-metil-ciclohexanol (função objetivo).

Para analisar a influência dos parâmetros do AG sobre a função objetivo, foi construído um planejamento fatorial. A Tabela 5.3 mostra os níveis dos fatores quantitativos usados no planejamento fatorial. Como já foi dito antes, os valores do nível zero (ponto central) são baseados em valores e equações sugeridos na literatura.

Para se determinar os valores de npopsiz e pm foram usadas as seguintes equações (Deb, 2000):

$$\text{npopsiz} = 10 * \text{número de variáveis de otimização} = 10 * 8 = 80 \quad (5.1)$$

$$\text{pm} = 1 / \text{número de variáveis de otimização} = 1 / 8 = 0.125 \quad (5.2)$$

Tabela 5. 3 – Níveis dos fatores quantitativos usados na análise estatística dos parâmetros do código AG real.

Parâmetro do AG (fator quantitativo)	Nível (-)	Ponto Central	Nível (+)
(1) npopsiz	64	80	96
(2) maxgen	40	50	60
(3) Pc	0,64	0,80	0,96
(4) Pm	0,10	0,125	0,15

Os fatores typec e typem são considerados fatores qualitativos no planejamento fatorial. Fatores qualitativos são fatores que assumem valores contínuos, mas sim determinados tipos de atributos. A Tabela 5.4 mostra os níveis dos fatores qualitativos usados no planejamento fatorial.

Tabela 5. 4 – Níveis dos fatores qualitativos usados na análise estatística dos parâmetros do código AG real.

Parâmetro do AG (fator qualitativo)	Nível (-)	Nível (+)
(5) typec	sbx	multip
(6) typem	nonuni	varnor

Os tipos de cruzamento e mutação associados aos níveis (+) e (-) , são opções de tipos de operadores dadas pelo código do AG real usado neste trabalho, conforme definições já apresentadas.

Como o número de fatores a serem analisados é igual a seis, poderia ser gerado um planejamento fatorial completo do tipo 2^6 , que requer sessenta e quatro simulações. No entanto, é possível gerar um planejamento fatorial fracionário do tipo 2^{6-1} que reduz o número de simulações para trinta e dois, além de quatro simulações do ponto central, requeridas pelo *software Statistica* (totalizando trinta e seis simulações).

A planilha, mostrada na Tabela 5.5, contém as trinta e seis simulações necessárias para se proceder à análise dos parâmetros do AG real. A última coluna refere-se ao melhor valor da função de avaliação na última geração para cada simulação. É importante lembrar que, uma vez que o método de manipulação da restrição é usado no problema de otimização, indivíduos viáveis são obtidos. Assim, a função de avaliação para o melhor indivíduo é o valor da produtividade (função objetivo).

Tabela 5. 5 – Resultados do planejamento fatorial fracionário 2^{6-1} para o reator trifásico.

Simulações	npopsiz	maxgen	Pc	Pm	typec	typem	Produtividade x 10^4 (Kmol/m ³ s)
1	64	40	0,64	0,10	-1	-1	1,424923
2	96	40	0,64	0,10	-1	1	1,227468
3	64	60	0,64	0,10	-1	1	1,233618
4	96	60	0,64	0,10	-1	-1	1,424923
5	64	40	0,96	0,10	-1	1	0,974902
6	96	40	0,96	0,10	-1	-1	0,871991
7	64	60	0,96	0,10	-1	-1	1,121153

8	96	60	0,96	0,10	-1	1	0,974902
9	64	40	0,64	0,15	-1	1	1,198361
10	96	40	0,64	0,15	-1	-1	0,865833
11	64	60	0,64	0,15	-1	-1	0,865833
12	96	60	0,64	0,15	-1	1	1,335519
13	64	40	0,96	0,15	-1	-1	0,854199
14	96	40	0,96	0,15	-1	1	0,843818
15	64	60	0,96	0,15	-1	1	0,843818
16	96	60	0,96	0,15	-1	-1	0,923729
17	64	40	0,64	0,10	1	1	1,210146
18	96	40	0,64	0,10	1	-1	1,244694
19	64	60	0,64	0,10	1	-1	1,245954
20	96	60	0,64	0,10	1	1	1,210146
21	64	40	0,96	0,10	1	-1	1,380034
22	96	40	0,96	0,10	1	1	1,282908
23	64	60	0,96	0,10	1	1	1,282908
24	96	60	0,96	0,10	1	-1	1,380035
25	64	40	0,64	0,15	1	-1	1,407136
26	96	40	0,64	0,15	1	1	1,142728
27	64	60	0,64	0,15	1	1	1,143843
28	96	60	0,64	0,15	1	-1	1,407136
29	64	40	0,96	0,15	1	1	1,284729
30	96	40	0,96	0,15	1	-1	1,372017
31	64	60	0,96	0,15	1	-1	1,372017
32	96	60	0,96	0,15	1	1	1,285247
33 (C)	80	50	0,8	0,125	-1	-1	0,850719
34 (C)	80	50	0,8	0,125	1	-1	1,401577
35 (C)	80	50	0,8	0,125	-1	1	0,868171
36 (C)	80	50	0,8	0,125	1	1	1,143311

A Tabela 5.6 apresenta as estimativas dos efeitos dos parâmetros e os efeitos das interações entre os parâmetros. Os parâmetros estatisticamente significativos encontram-se em negrito.

Tabela 5. 6 – Estimativas dos efeitos dos fatores dos parâmetros do AG real sobre a produtividade para o planejamento fatorial fracionário com interações a dois fatores (com 95% de confiança).

Fator	Efeito	p
Média/Interc.	1,163901	0,000000
(1)npopsiz	-0,003155	0,945488
(2)maxgen	0,029056	0,531829
(3)Pc	-0,096241	0,052026
(4)Pm	-0,084046	0,084872
(5)typec	0,249594	0,000043
(6)typem	-0,051520	0,247929
1 x 2	0,107217	0,032969
1 x 3	-0,019234	0,677743
1 x 4	0,028916	0,533773
1 x 5	0,002923	0,949491
1 x 6	0,019456	0,674255
2 x 3	0,010846	0,814349
2 x 4	-0,003016	0,947890
2 x 5	-0,028694	0,536878
2 x 6	-0,010938	0,812793
3 x 4	0,022889	0,621407
3 x 5	0,174755	0,001748
3 x 6	-0,019834	0,668350
4 x 5	0,106300	0,034266
4 x 6	0,044180	0,346225
5 x 6	-0,084550	0,067876

A Tabela 5.6 mostra os efeitos dos fatores e os valores de p-valor. Pode-se verificar que o efeito mais significativo é o tipo de cruzamento (typec). As interações npopsiz x maxgen, Pc x typec, Pm x typec também aparecem como significativas. Os resultados dessas interações mostram a influência do tipo de cruzamento (typec), o mais importante efeito, associado às probabilidades de cruzamento e mutação (Pc e Pm, respectivamente) e mostram também que o tamanho da população (npopsiz) e o número de gerações (maxgen) precisam ser focados e que seus valores precisam ser extensivamente investigados nas próximas otimizações com AG de codificação real para o caso de estudo do reator.

Com o objetivo de ilustrar e reforçar os resultados apresentados na Tabela 5.6, a Figura 5.1 mostra o gráfico de Pareto com as estimativas dos efeitos dos parâmetros do AG real e da interação entre eles.

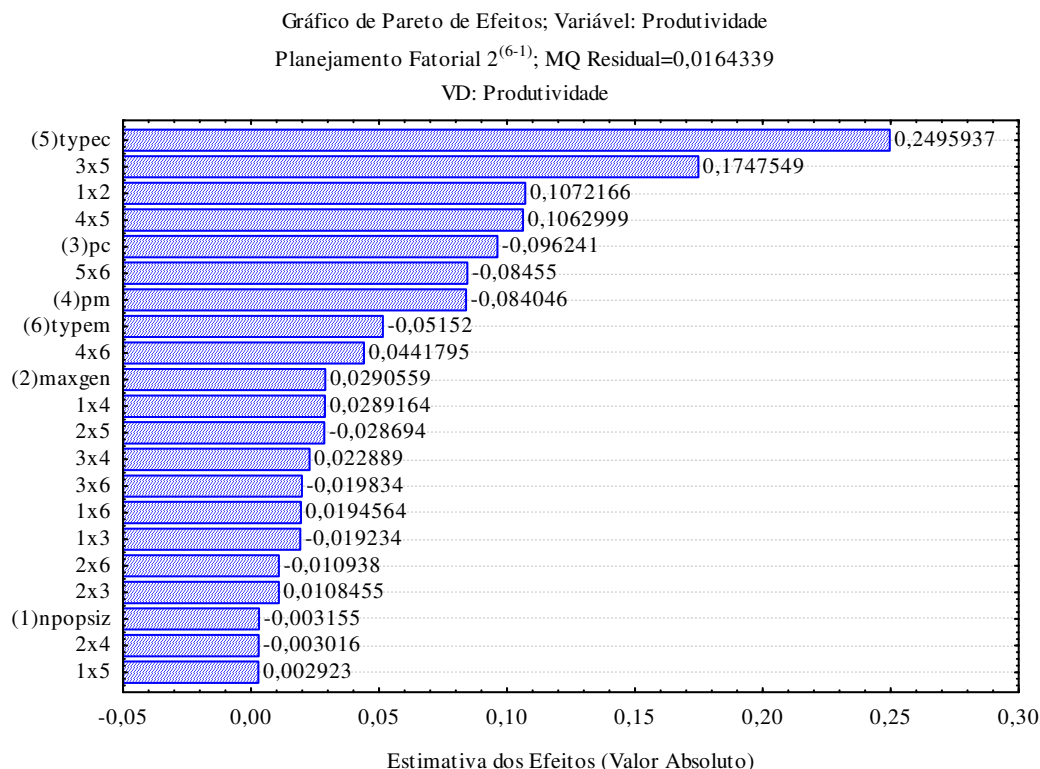


Figura 5. 1 – Gráfico de Pareto de Efeitos (Rezende *et al.*, 2007).

Utilizando-se da análise dos parâmetros estatisticamente significativos do AG de codificação real, o próximo passo é realizar a otimização do reator trifásico por AG usando o modelo completo (Eqs 2.5-2.12) a fim de se encontrar o valor real da produtividade quando os parâmetros de entrada do AG real são os valores estabelecidos de acordo com os pelos efeitos dos parâmetros apresentados na Tabela 5.6. Para realizar esta otimização foi utilizado um processador Pentium 4, 3.4GHz, 2 GB RAM, tendo sido consumido um tempo de processamento de seis minutos.

Os valores de entrada ótimos do reator obtidos através da otimização por AG de codificação real estão apresentados na Tabela 5.7.

Tabela 5. 7 – Valores de entrada do reator otimizados.

Variável	Valores otimizados
ul	$7,5884 \times 10^{-3}$
ug	2,0999
ur	$4,7191 \times 10^{-3}$

Agf	$2,2459 \times 10^{-3}$
Alf	$1,6507 \times 10^{-3}$
Blf	$3,5778 \times 10^{-2}$
Tf	619,21
Trf	564,92

Os valores apresentados na Tabela 5.7 conduziram a um estado estacionário otimizado com uma produtividade de 2-metil-ciclohexanol igual a $1,25 \times 10^{-4}$ kmol/m³ s e uma conversão de o-cresol igual a 0,92. Vale a pena lembrar que no estado estacionário não-otimizado do reator a produtividade obtida era de $0,44 \times 10^{-4}$ kmol/m³ s e a conversão de 0,46, como mostrado no Capítulo 2. Comparando-se estes resultados, nota-se uma melhoria do estado estacionário otimizado pelo AG de codificação real de 2,8 vezes na produtividade e de 2 vezes na conversão em relação ao estado estacionário não-otimizado do reator.

A Figura 5.2 a seguir mostra a evolução da função objetivo ao longo das gerações quando o AG de codificação real é usado para otimizar as condições operacionais de entrada do reator garantindo um estado estacionário otimizado. A escala do eixo y do gráfico da Figura 5.2 inicia em 0,7 para permitir melhor visualização da evolução da produtividade ao longo das gerações.

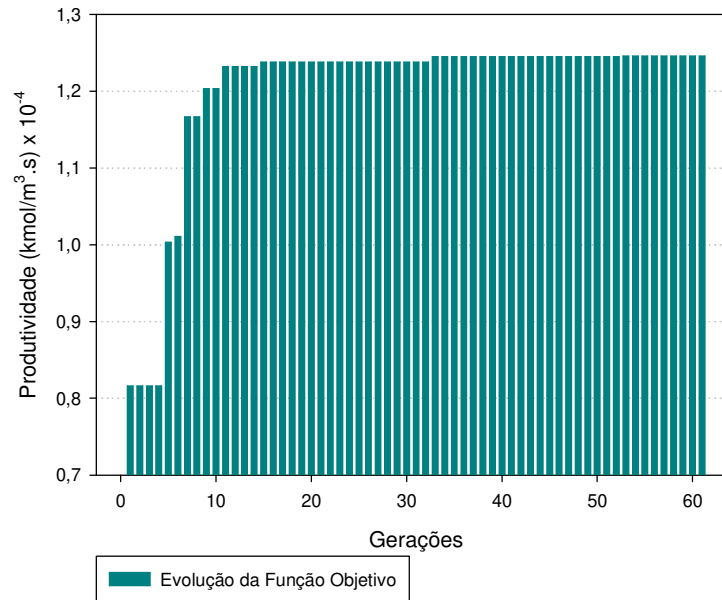


Figura 5. 2 – Evolução da Função objetivo ao longo das gerações.

5.3 . Conclusões

Este capítulo mostrou o emprego dos AGs de codificação real para encontrar as condições de entrada que conduzem o reator a um estado estacionário otimizado. A implementação dos AGs de codificação real foi efetuada, avaliando-se o tempo computacional gasto, o valor da função objetivo e a viabilidade à Integração em Tempo Real em comparação aos AGs de codificação binária. Foi verificado que os AGs de codificação real requerem um elevado número de parâmetros de ajuste, os quais foram estudados através de um planejamento fatorial, que identificou os parâmetros mais significativos para o desempenho do algoritmo na otimização do reator. Este estudo foi importante para eliminar variações nos parâmetros não-significativos, facilitando a implementação dos AGs de codificação real em aplicações futuras.

O próximo capítulo apresenta o controle do reator levando em conta as variáveis de entradas otimizadas.

CAPÍTULO 6 – Controle do Reator

Neste capítulo é apresentado o controle do reator quando as variáveis de entrada são as entradas otimizadas pelos AGs determinadas no Capítulo 4. Para o controle do reator é empregado um tipo de Controle Preditivo Baseado em Modelo (*Model Predictive Control* – MPC), o Controle por Matriz Dinâmica (*Dynamic Matrix Control* – DMC) para sistemas monovariáveis (SISO).

6.1. Princípios do Controle por Matriz Dinâmica

Cutler e Ramaker (1979) apresentaram os detalhes de um algoritmo de controle multivariável sem restrições, denominado *Dynamic Matrix Control* (DMC) durante o encontro anual da Sociedade Americana de Engenharia Química – *AIChE* – em 1979. Desde então, várias modificações foram feitas no algoritmo original principalmente para lhe conferir habilidades para lidar com restrições e não linearidades (Meleiro, 2002).

O Controle Preditivo Baseado em Modelo (*Model Predictive Control* – MPC) usa um modelo dinâmico do processo como parte do controlador. A formulação básica de um MPC consiste da computação *on-line* das ações de controle futuras que minimizem os erros futuros preditos ao longo de um horizonte de predição (NP) sujeitas a restrições nas variáveis de entrada e saída (González *et al.*, 2006).

O modelo do processo permite prever as saídas (variáveis controladas) a partir de determinadas entradas (variáveis manipuladas). As ações de controle são calculadas de forma a se ter o valor das saídas o mais próximo possível do valor desejado (Silva, 1997). A abordagem MPC foi desenvolvida para lidar com problemas de controle multivariáveis complexos onde existam significativas interações entre as entradas (variáveis manipuladas) e as saídas (variáveis controladas).

O controle preditivo, comparado ao controle clássico, apresenta algumas vantagens, tais como a possibilidade de controlar processos multivariáveis, de ser utilizado com restrições de igualdade e desigualdade, tanto nas saídas do processo quanto nas variáveis

manipuladas, além do emprego em sistemas com respostas incomuns, como respostas inversas e respostas com tempo morto.

A identificação do modelo é fundamental na implementação da estratégia MPC. Em geral, os modelos são desenvolvidos a partir de testes experimentais em malha aberta. A maioria das aplicações industriais utiliza modelos dinâmicos discretos na forma de resposta ao degrau ou ao impulso (Seborg, 1999).

A Figura 6.1 representa a estrutura básica de um controle preditivo. No instante de amostragem k , o controlador recebe informação sobre o estado atual do sistema quando, baseado no modelo do processo, calcula as ações de controle futuras. A trajetória de entradas futuras é, então, determinada segundo um critério de otimização, e a primeira ação de controle é implementada até a próxima amostragem.

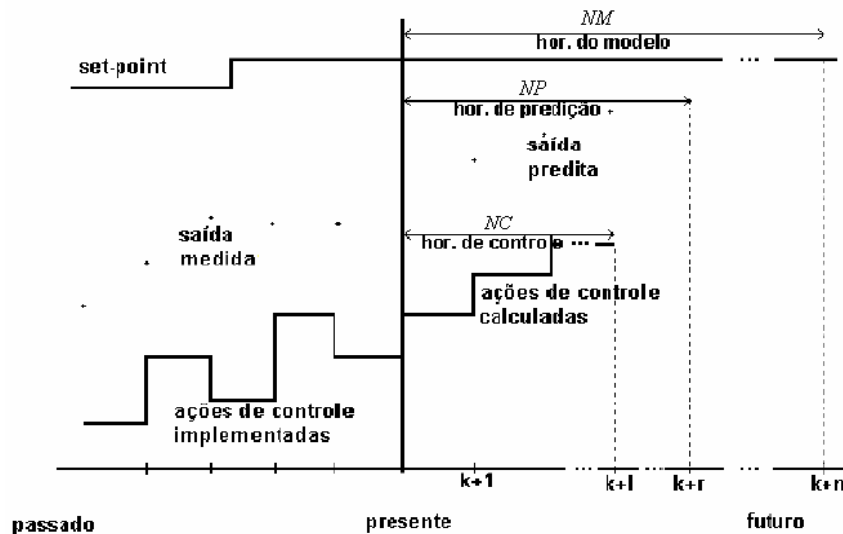


Figura 6. 1 – Estrutura básica de um controle preditivo.

O controle DMC faz uso de um modelo linear, chamado modelo de convolução, que é obtido a partir do comportamento dinâmico do sistema frente a perturbações degrau nas variáveis de entrada. As entradas ótimas no DMC são determinadas a partir de um problema de mínimos quadrados. O algoritmo DMC calcula as futuras mudanças nas variáveis manipuladas que fazem com que as variáveis controladas sigam um caminho

ótimo (*set-point*). Este caminho ótimo é determinado pela otimização de uma função objetivo.

O controlador DMC pode ser aplicado tanto para sistemas monovariáveis (SISO) quanto para sistemas multivariáveis (MIMO).

O algoritmo DMC é baseado no cálculo de NC (Horizonte de Controle) valores futuros das variáveis manipuladas, de uma minimização de NP (Horizonte de Predição) valores futuros do quadrado da diferença entre o *set-point* e as saídas preditas pelo modelo de convolução com NM (Horizonte de Modelo) valores de saída obtidos pela resposta degrau da variável manipulada.

O Horizonte de Modelo (NM), o Horizonte de Predição (NP), o Horizonte de Controle (NC) e o fator de supressão (f) são parâmetros a serem ajustados, a fim de se obter um bom desempenho do controlador. O fator de supressão é incorporado à função objetivo para penalizar as ações de controle.

A definição da estratégia de controle de um reator depende do seu objetivo operacional. O estudo do controle de reatores químicos pode ter vários objetivos, tais como, garantir a segurança de operação do reator, a qualidade do produto desejado e a economia de operação do reator.

Dependendo da função objetivo a ser minimizada (quadrática ou linear) e das restrições (igualdade ou desigualdade), o algoritmo DMC apresenta alguns variantes da metodologia original. São eles, o LDMC, o QDMC e o NLDMC/NLQDMC.

O LDMC (*Linear DMC*) resolve o problema da otimização como um problema de Programação Linear (PL) que minimiza o erro absoluto entre a trajetória desejada e a predita. O LDMC suporta restrições, explicitamente, tanto nas saídas controladas quanto nas entradas manipuladas. O QDMC (*Quadratic DMC*) resolve o problema da otimização como um problema de Programação Quadrática (QP), que minimiza o erro quadrático entre

a trajetória desejada e a predita. Havendo restrições de desigualdade, o problema que poderia ser resolvido por mínimos quadrados passa a ser um problema de Programação Quadrática. O NLDMC (*non linear* DMC) e o NQLDMC (*non linear quadratic* DMC) utilizam-se dos mesmos conceitos das duas técnicas citadas anteriormente, porém, introduzindo a aplicação de uma modelagem não linear.

A seguir é apresentado o desenvolvimento do algoritmo DMC para sistemas monovariáveis (SISO) e multivariáveis (MIMO) (Rezende, 2003; Meleiro, 2002).

Como já foi dito, o algoritmo DMC usa um modelo de convolução discreto, baseado na resposta ao degrau, para representar o processo. Neste modelo, a variável de saída (controlada) se relaciona com a variável de entrada (manipulada) através dos coeficientes de resposta ao degrau a_i .

Em cada instante de amostragem, o valor da resposta ao degrau da variável de saída é medido e é chamado de coeficiente de resposta ao degrau a_i . A diferença entre os dois coeficientes de resposta ao degrau sucessivos é chamada de coeficiente de resposta ao impulso e é dado por:

$$h_i = a_i - a_{i-1} \quad (6.1)$$

Assim, o valor predito da variável de saída $\hat{y}$ no instante de amostragem k , pode ser descrito da seguinte forma:

$$\hat{y}_k = \sum_{i=1}^{NM} h_i u_{k-i} \quad (6.2)$$

onde NM é o chamado horizonte de modelo, correspondente ao número de coeficientes da resposta ao impulso necessário para representar 90-95% da resposta estacionária do sistema.

6.1.1. Desenvolvimento do Algoritmo DMC para Sistemas SISO

O algoritmo DMC para sistemas SISO utiliza o modelo descrito pela equação (6.2).

Reescrevendo-se a equação (6.2) para o instante de amostragem $k+1$, tem-se:

$$\hat{y}_{k+1} = \sum_{i=1}^{NM} h_i u_{k+1-i} \quad (6.3)$$

Subtraindo-se a equação (6.3) de (6.2), obtém-se:

$$\hat{y}_{k+1} - \hat{y}_k = \sum_{i=1}^{NM} h_i (u_{k+1-i} - u_{k-i}) \quad (6.4)$$

Definindo-se $\Delta u_k = u_k - u_{k-1}$, a equação (6.4) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\hat{y}_{k+1} = \hat{y}_k + \sum_{i=1}^{NM} h_i \Delta u_{k+1-i} \quad (6.5)$$

O modelo de convolução representado pela equação (6.5) pode ser estendido para considerar um horizonte de predição de NP instantes futuros:

$$\hat{y}_{k+j} = \hat{y}_{k+j-i} + \sum_{i=1}^{NM} h_i \Delta u_{k+1-i} \quad \text{para } j = 1, \dots, NP \quad (6.6)$$

onde NP é o chamado horizonte de predição.

O algoritmo DMC corrige a predição do modelo dado pela equação (6.6) através de uma estratégia de realimentação, comparando o valor predito da saída, no instante de

amostragem k , com o seu valor medido. O desvio calculado entre os dois valores é utilizado para corrigir as futuras predições.

Por exemplo, no instante de amostragem $k+1$, tem-se:

$$y_{k+1}^c = \hat{y}_{k+1} + (y_k - \hat{y}_k) \quad (6.7)$$

onde y_k é o valor medido da variável de saída no instante de amostragem k e y_{k+1}^c é o valor predito da variável de saída para o instante de amostragem $k+1$.

Generalizando para os NP instantes futuros:

$$y_{k+j}^c = \hat{y}_{k+j} + (y_{k+j-1}^c - \hat{y}_{k+j-1}) \quad \text{para } j=1, \dots, NP \quad (6.8)$$

Nota-se que para o instante $k+j$ com $j=1$, o termo y_{k+j-1}^c da equação (6.8) é correspondente ao termo y_k (valor medido da saída) da equação (6.7).

Para o instante $k+2$, a equação (6.8) torna-se:

$$y_{k+2}^c = \hat{y}_{k+2} + (y_{k+1}^c - \hat{y}_{k+1}) = \hat{y}_{k+2} + (\hat{y}_{k+1} + (y_k - \hat{y}_k) - \hat{y}_{k+1}) = \hat{y}_{k+2} + (y_k - \hat{y}_k) \quad (6.9)$$

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

$$y_{k+NP}^c = \hat{y}_{k+NP} + (y_k - \hat{y}_k) \quad (6.10)$$

As predições para os instantes $k+1$ até $k+NP$, são corrigidas pela diferença entre o valor medido e o valor predito da saída do processo no instante atual de amostragem, k .

Combinando-se as equações (6.6) e (6.8), obtém-se:

$$y_{k+j}^c = y_{k+j-1}^c + \sum_{i=1}^{NM} h_i \Delta u_{k+j-i} \quad \text{para } j=1, \dots, NP \quad (6.11)$$

Para o instante $k+1$ a equação (6.11) acima pode ser reescrita como:

$$y_{k+1}^c = y_k^c + \sum_{i=1}^{NM} h_i \Delta u_{k+1-i} = y_k + \sum_{i=1}^{NM} h_i \Delta u_{k+1-i} = y_k + h_1 \Delta u_k + h_2 \Delta u_{k-1} + \dots + h_{NM} \Delta u_{k+1-NM} \quad (6.12)$$

Como os valores de Δu_{k-1} , Δu_{k-2} , ..., Δu_{k-NM} são conhecidos, podem ser agrupados em um único termo, tal como descrito abaixo:

$$S_1 = \sum_{i=2}^{NM} h_i \Delta u_{k+1-i} \quad (6.13)$$

Assim, pode-se reescrever a equação (6.12) que se torna:

$$y_{k+1}^c = y_k + h_1 \Delta u_k + S_1 \quad (6.14)$$

Repetindo-se o procedimento anterior para o instante de amostragem $k+2$, tem-se:

$$y_{k+2}^c = y_{k+1}^c + h_1 \Delta u_{k+1} + h_2 \Delta u_k + \dots + h_{NM} \Delta u_{k+2-NM} \quad (6.15)$$

Pode-se agrupar novamente os termos conhecidos em um único termo:

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

E reescrever a equação (6.15):

$$y_{k+2}^c = y_{k+1}^c + h_1 \Delta u_{k+1} + h_2 \Delta u_k + S_2 \quad (6.16)$$

Substituindo-se a equação (6.14) na equação (6.16), tem-se:

$$y_{k+2}^c = y_k + (h_1 + h_2)\Delta u_k + h_1\Delta u_{k+1} + S_1 + S_2 \quad (6.17)$$

Definindo-se termos genéricos:

$$P_i = \sum_{m=1}^i S_m \quad (6.18)$$

$$S_m = \sum_{i=m+1}^{NM} h_i \Delta u_{k+m-i} \quad (6.19)$$

$$a_i = \sum_{j=1}^i h_j \quad (6.20)$$

Dessa forma, pode-se escrever, para o instante $k+j$, a seguinte equação:

$$y_{k+j}^c = y_k + a_j \Delta u_k + a_{j-1} \Delta u_{k+1} + \dots + a_1 \Delta u_{k+j-1} + P_j \quad (6.21)$$

Esta equação (6.21) também pode ser escrita na forma matricial a seguir:

$$\begin{bmatrix} y_{k+1}^c \\ y_{k+2}^c \\ \vdots \\ y_{k+NP-1}^c \\ y_{k+NP}^c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ a_2 & a_1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{NP-1} & a_{NP-2} & \cdots & a_1 & 0 \\ a_{NP} & a_{NP-1} & \cdots & a_2 & a_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta u_k \\ \Delta u_{k+1} \\ \vdots \\ \Delta u_{k+NP-2} \\ \Delta u_{k+NP-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} y_k + P_1 \\ y_k + P_2 \\ \vdots \\ y_k + P_{NP-1} \\ y_k + P_{NP} \end{bmatrix} \quad (6.22)$$

ou ainda:

$$(y^c)_{NP \times 1} = (M)_{NP \times NP} (\Delta u)_{NP \times 1} + (y^P)_{NP \times 1} \quad (6.23)$$

onde M ($NP \times NP$) é a matriz triangular e y^P ($NP \times 1$) é o vetor de predições dados pela equação (6.22). Este vetor contém as predições feitas para o horizonte de predição levando-se em conta apenas as ações de controle tomadas no passado.

Definindo-se o valor desejado como y^d , igual ao valor do *set point*, y_{sp} , obtém-se a seguinte notação matricial:

$$\begin{bmatrix} y_{k+1}^d \\ y_{k+2}^d \\ \vdots \\ y_{k+NP-1}^d \\ y_{k+NP}^d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_{spk} \\ y_{spk} \\ \vdots \\ y_{spk} \\ y_{spk} \end{bmatrix} \quad (6.24)$$

Subtraindo-se a equação (6.23) da equação (6.24) e definindo-se $e_k = y_{spk} - y_k$, vem:

$$E = -M\Delta u + E' \quad (6.25)$$

onde se tem que:

$$E = \begin{bmatrix} y_{k+1}^d - y_{k+1}^c \\ y_{k+2}^d - y_{k+2}^c \\ \vdots \\ y_{k+NP-1}^d - y_{k+NP-1}^c \\ y_{k+NP}^d - y_{k+NP}^c \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad E' = \begin{bmatrix} e_k - P_1 \\ e_k - P_2 \\ \vdots \\ e_k - P_{NP-1} \\ e_k - P_{NP} \end{bmatrix} \quad (6.26)$$

Para que a saída predita seja igual à desejada, $E = 0$ e, conseqüentemente:

$$\Delta u = M^{-1} E' \quad (6.27)$$

A solução dada pela equação (6.27) é obtida a partir de um sistema determinado, de solução única e é baseada na imposição de que a variável controlada seja igual à trajetória

desejada ao longo de um Horizonte de Controle, NC , o que é fisicamente impossível, muitas vezes.

A estratégia DMC consiste em obter um sistema indeterminado reduzindo a dimensão do vetor Δu de acordo com o tamanho do Horizonte de Controle. Para isso, considera-se que $\Delta u_{k+j} = 0$ para $j \geq NC$, sendo que $NC > NP$.

Com base nessas considerações, pode-se reescrever a equação (6.22):

$$\begin{bmatrix} y_{k+1}^c \\ y_{k+2}^c \\ \vdots \\ y_{k+NP-1}^c \\ y_{k+NP}^c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 & 0 & \cdots & 0 \\ a_2 & a_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{NP-1} & a_{NP-2} & \cdots & a_{NP-NC} \\ a_{NP} & a_{NP-1} & \cdots & a_{NP-NC+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta u_k \\ \Delta u_{k+1} \\ \vdots \\ \Delta u_{k+NC-2} \\ \Delta u_{k+NC-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} y_k + P_1 \\ y_k + P_2 \\ \vdots \\ y_k + P_{NP-1} \\ y_k + P_{NP} \end{bmatrix} \quad (6.28)$$

ou ainda,

$$(y^c)_{NP \times 1} = (A)_{NP \times NC} (\Delta u)_{NC \times 1} + (y^P)_{NP \times 1} \quad (6.29)$$

Na equação (6.29), a matriz A ($NP \times NC$) é chamada de Matriz Dinâmica que relaciona as entradas com as saídas do processo e através dela é possível calcular analiticamente o vetor ótimo de ações de controle (através da solução de um problema de mínimos quadrados). Observa-se que a matriz dinâmica A é formada pelas primeiras NC colunas da matriz M .

Aquele sistema que não apresenta solução única deve ser resolvido segundo um critério de otimização. O algoritmo DMC calcula o vetor Δu para minimizar o seguinte critério de desempenho:

$$J = (E^T E) \quad (6.30)$$

Cuja solução ótima é dada por:

$$\Delta u = (A^T - A)^{-1} A E' \quad (6.31)$$

A equação (6.31) fornece uma solução que representa um problema de otimização sem restrição o que pode provocar ações de controle muitas bruscas. Porém, isto pode ser evitado pela inclusão de um índice de desempenho modificado que incorpora restrições aos movimentos da variável manipulada, segundo a equação abaixo:

$$J = (E^T E) + (\Lambda \Delta u)^T (\Lambda \Delta u) \quad (6.32)$$

onde $\Lambda(NC \times NC)$ é uma matriz dos fatores de supressão, de dimensão $NC \times NC$, cujos elementos são:

$$\begin{aligned} \lambda_{ij} &= f \quad \text{se } i=j & \text{onde } f \text{ é o fator de supressão} \\ \lambda_{ij} &= 0 \quad \text{se } i \neq j \end{aligned}$$

A lei de controle resultante da função objetivo descrita pela equação (6.32) é dada por:

$$\Delta u = (A^T A + \Lambda^T \Lambda)^{-1} A^T E' \quad (6.33)$$

A equação (6.33) gera as ações de controle para todo o Horizonte de Controle (de k a $k+NC$), porém, apenas a primeira ação de controle, Δu_k , é implementada. Dessa forma, tem-se que o valor da variável manipulada, no instante k , é calculado como se segue:

$$u_k = u_{k-1} + \Delta u_k \quad (6.34)$$

A solução fornecida pela equação (6.33) é calculada a cada instante de amostragem, determinando um novo valor para a variável manipulada dado pela equação (6.34). Um programa computacional escrito em Fortran é utilizado para os estudos de implementação e avaliação de desempenho do controlador DMC.

6.1.2. Desenvolvimento do Algoritmo DMC para Sistemas MIMO

No caso de sistemas MIMO, todas as entradas influenciam todas as saídas do processo, resultando em um sistema com muitas interações.

A seguir é apresentado o desenvolvimento do algoritmo DMC para o caso MIMO. Para um processo com V_m variáveis manipuladas e V_c variáveis controladas, a representação do modelo de convolução é dada por:

$$\begin{aligned}
 \hat{y}_{1,k} &= \sum_{i=1}^{NM} h_{1,1,i} u_{1,k-i} + \sum_{i=1}^{NM} h_{1,2,i} u_{2,k-i} + \dots + \sum_{i=1}^{NM} h_{1,V_m,i} u_{V_m,k-i} \\
 \hat{y}_{2,k} &= \sum_{i=1}^{NM} h_{2,1,i} u_{1,k-i} + \sum_{i=1}^{NM} h_{2,2,i} u_{2,k-i} + \dots + \sum_{i=1}^{NM} h_{2,V_m,i} u_{V_m,k-i} \\
 &\vdots \\
 &= \\
 &\vdots
 \end{aligned} \tag{6.35}$$

$$\hat{y}_{V_c,k} = \sum_{i=1}^{NM} h_{V_c,1,i} u_{1,k-i} + \sum_{i=1}^{NM} h_{V_c,2,i} u_{2,k-i} + \dots + \sum_{i=1}^{NM} h_{V_c,V_m,i} u_{V_m,k-i}$$

Em notação compacta, a equação (6.35) torna-se:

$$\hat{y}_k = \sum_{i=1}^{NM} H_i u_{k-i} \tag{6.36}$$

De forma análoga à equação (6.5):

$$\hat{y}_{k+1} = \hat{y}_k + \sum_{i=1}^{NM} H_i u_{k+1-i} \tag{6.37}$$

Ampliando-se a equação (6.37) para NP instantes futuros, o modelo de convolução torna-se:

$$\hat{y}_{k+j} = \hat{y}_{k+j-1} + \sum_{i=1}^{NM} H_i u_{k+j-i} \quad \text{para } j = 1, \dots, NP \quad (6.38)$$

Corrigindo as previsões de forma análoga ao procedimento descrito pela equação (6.8), tem-se:

$$y_{k+j}^c = \hat{y}_{k+j} + (y_{k+j-1}^c - \hat{y}_{k+j-1}) \quad \text{para } j = 1, \dots, NP \quad (6.39)$$

onde, no instante $k+1$, y_{k+j-1}^c é igual ao valor medido y_k .

Substituindo-se a equação (6.35) na equação (6.36), tem-se:

$$y_{k+j}^c = \hat{y}_{k+j-1} + \sum_{i=1}^{NM} H_i \Delta u_{k+j-i} \quad \text{para } j = 1, \dots, NP \quad (6.40)$$

Repetindo-se o procedimento descrito para os sistemas monovariáveis, obtém-se a forma multivariável da equação (6.28):

$$\begin{bmatrix} y_{k+1}^c \\ y_{k+2}^c \\ \vdots \\ y_{k+NP-1}^c \\ y_{k+NP}^c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_1 & 0 & \cdots & 0 \\ A_2 & A_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{NP-1} & A_{NP-2} & \cdots & A_{NP-NC} \\ A_{NP} & A_{NP-1} & \cdots & A_{NP-NC+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta u_k \\ \Delta u_{k+1} \\ \vdots \\ \Delta u_{k+NC-2} \\ \Delta u_{k+NC-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} y_k + P_1 \\ y_k + P_2 \\ \vdots \\ y_k + P_{NP-1} \\ y_k + P_{NP} \end{bmatrix} \quad (6.41)$$

onde,

$$A_i = \sum_{j=1}^i H_j \quad \text{para } i = 1, \dots, NP \quad (6.42)$$

$$S_m = \sum_{i=m+1}^{NM} H_i \Delta u_{k+m-i} \quad \text{para } m = 1, \dots, NP \quad (6.43)$$

$$P_i = \sum_{m=1}^i S_m \quad \text{para } i = 1, \dots, NP \quad (6.44)$$

A equação (6.41) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$(y^c)_{NP.V_c \times I} = (M)_{NP.V_c \times NC.V_m} (\Delta u)_{NC.V_m \times I} + (y^P)_{NP.V_c \times I} \quad (6.45)$$

A versão multivariável da equação (5.25) pode ser escrita de forma semelhante:

$$E = -M\Delta u + E' \quad (6.46)$$

M e Δu estão definidos na equação (6.45) e E e E' são dados por:

$$E = \begin{bmatrix} y_{k+1}^d - y_{k+1}^c \\ y_{k+2}^d - y_{k+2}^c \\ \vdots \\ y_{k+NP-1}^d - y_{k+NP-1}^c \\ y_{k+NP}^d - y_{k+NP}^c \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad E' = \begin{bmatrix} e_k - P_1 \\ e_k - P_2 \\ \vdots \\ e_k - P_{NP-1} \\ e_k - P_{NP} \end{bmatrix} \quad (6.47)$$

onde $e_k = y_{spk} - y_k$

Como no caso SISO, o algoritmo DMC calcula o vetor Δu para minimizar o seguinte critério de desempenho:

$$J = (E^T E) + (\Lambda \Delta u)^T (\Lambda \Delta u) \quad (6.48)$$

cuja lei de controle resultante da minimização da função objetivo descrita pela equação (6.48) é:

$$\Delta u = (A^T A + \lambda^T \lambda)^{-1} A^T E' \quad (6.49)$$

Os valores das variáveis manipuladas no instante k são calculados da seguinte forma:

$$u_k = u_{k-1} + \Delta u_k \quad (6.50)$$

6.2. Controle do Reator empregando o DMC SISO quando as variáveis de entrada do reator são as entradas otimizadas pelo AG

A otimização por AGs de codificação binária desenvolvida no Capítulo 4 gerou o conjunto de variáveis de entrada que levou o reator a um estado estacionário otimizado de máxima produtividade com a restrição da conversão maior que 90%. Neste estado estacionário as variáveis controladas BI (concentração de o-cresol na fase líquida na saída do reator) e T (temperatura média de reação na saída do reator) têm os valores de 0,00379 Kmol/m³ e 648,57 K, respectivamente. Estes valores são, portanto, os *set-points* das variáveis controladas a serem alimentados ao controlador DMC. Os valores de entrada otimizados são os valores apresentados no capítulo da otimização por AG binário (Tabela 4.10).

6.2.1. Controle da Concentração de o-cresol na saída do reator

A justificativa do controle da concentração de o-cresol na fase líquida na saída do reator (BI) é que esta variável está relacionada à conversão do componente líquido. Assim, para a máxima conversão do componente líquido, a função do controle seria sustentar BI em valor baixo, manipulando as variáveis de entrada que exercem influência sobre BI segundo o estudo do comportamento dinâmico. Medidas de concentração *on-line* podem ser obtidas através de um infravermelho próximo com bom desempenho no ambiente industrial (Tresmondi, 2003). Um tempo de amostragem de 100s é usado neste trabalho, sendo este um valor normalmente usado na prática industrial.

A partir do estudo do comportamento dinâmico do reator apresentado no Capítulo 2, considerando B_I como sendo a variável controlada e T_{rf} (temperatura de alimentação de fluido refrigerante) a variável manipulada, quando uma perturbação de -5% em T_f (temperatura de alimentação do reator) (perturbação de carga) ocorre no sistema, o controlador DMC atua fazendo com que a variável controlada atinja o *set-point* de $0,00379 \text{ Kmol/m}^3$.

Como estimativas iniciais dos parâmetros do controlador DMC, foram considerados os valores encontrados no trabalho de Rezende (2003) e Rezende *et al.* (2004), que empregaram o DMC para controlar a concentração de o-cresol na saída do reator em um estado estacionário não-otimizado. A partir destas estimativas iniciais, foram realizadas extensivas simulações de forma a localizar o melhor conjunto de parâmetros do controlador, representado por: $NM=4$, $NP=3$, $NC=1$ e $f=0,000025$. O comportamento das variáveis controlada e manipulada foi analisado qualitativamente, através da observação gráfica, como mostram as Figuras 6.2 e 6.3.

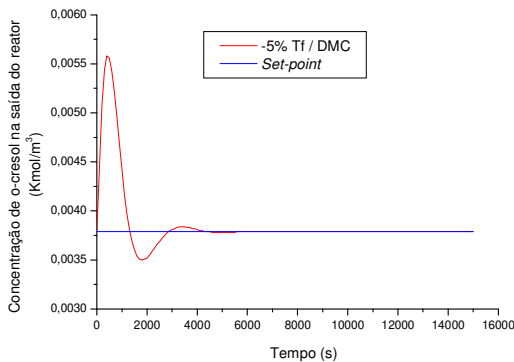


Figura 6. 2 – Comportamento da Variável Controlada (Concentração de o-cresol na saída do reator) após uma perturbação de -5% na temperatura de alimentação do reator.

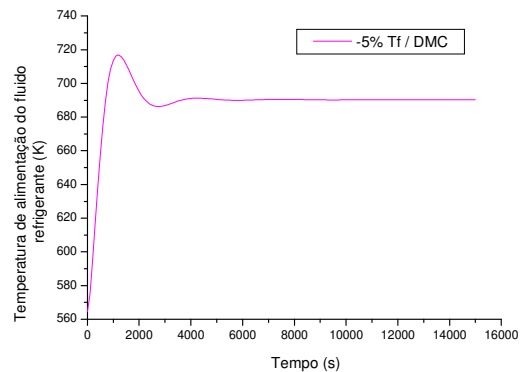


Figura 6. 3 – Comportamento da Variável Manipulada (Temperatura de alimentação do refrigerante) após uma perturbação de -5% na temperatura de alimentação do reator.

A Figura 6.2 mostra um *overshoot* na variável controlada. A resposta é oscilatória, mas com um bom amortecimento até atingir o *set-point* desejado, em torno de 4000s. A Figura 6.3 mostra que a variável manipulada sai de um estado estacionário, atinge um valor de 690,25K, quando estabiliza em um novo estado estacionário. Os resultados mostram o bom desempenho do controlador para a estrutura de controle considerada.

6.2.2. Controle da Temperatura na saída do reator

O controle da temperatura média de reação na saída do reator (T) significa promover o controle térmico que é importante para a eficiência e segurança da operação do reator. Um tempo de amostragem de 30s é usado neste trabalho, valor empregado em aplicações de controle de temperatura.

Baseando-se no estudo do comportamento dinâmico do reator apresentado no Capítulo 2, considerando T como sendo a variável controlada e Trf a variável manipulada, quando uma perturbação de +5% em T_f (perturbação de carga) ocorre no sistema, a função do controlador DMC é fazer com que a variável controlada atinja o *set-point* de 648,57 K.

Da mesma forma, foram consideradas como estimativas iniciais dos parâmetros do controlador DMC, os valores encontrados no trabalho de Rezende (2003) e Rezende *et al.* (2004) que empregaram o DMC para controlar a temperatura média de reação na saída do reator em um estado estacionário não-otimizado. A partir destas estimativas iniciais, foram realizadas extensivas simulações de forma a localizar o melhor conjunto de parâmetros do controlador que conduziu a um desempenho do DMC. O melhor conjunto de parâmetros encontrado tem os seguintes valores: $NM=14$, $NP=13$, $NC=1$ e $f=2,0$. O comportamento das variáveis controlada e manipulada foi analisado qualitativamente, através da observação gráfica, como mostram as Figuras 6.4 e 6.5.

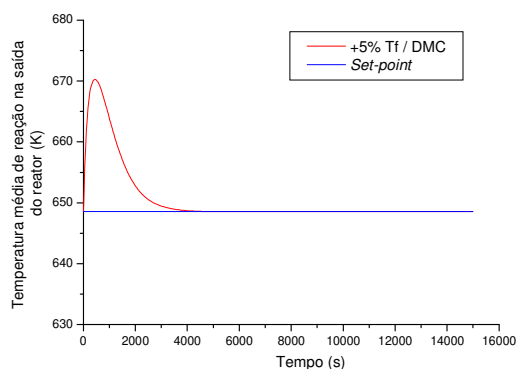


Figura 6. 4 – Comportamento da Variável Controlada (Temperatura média de reação na saída do reator) após uma perturbação de +5% na temperatura de alimentação do reator.

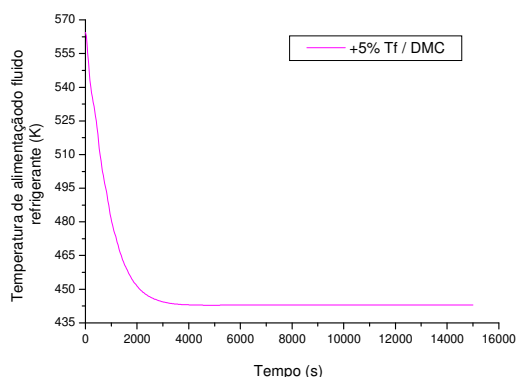


Figura 6. 5 – Comportamento da Variável Manipulada (Temperatura de alimentação do refrigerante) após uma perturbação de +5% na temperatura de alimentação do reator.

A Figura 6.4 mostra um *overshoot* na variável controlada que atinge o *set-point* desejado num tempo de 4000s e permanece no *set-point* sem oscilações. A Figura 6.5 mostra que a variável manipulada sai de um estado estacionário, atinge um valor de 442,95K, quando estabiliza em um novo estado estacionário. Os resultados mostram o bom desempenho do controlador para a estrutura de controle considerada.

6.3. Conclusões

Os valores ótimos das variáveis manipuladas e os *set points* das variáveis controladas foram determinados pelos AGs e enviados para o controlador DMC com o objetivo de promover o controle da concentração de o-cresol na saída e o controle térmico do reator. Foi verificado que o controlador DMC atua com bom desempenho fazendo com que as variáveis controladas permaneçam nos *set-points* desejados.

CAPÍTULO 7 – Integração de Processos em Tempo Real

Este capítulo trata da Integração de Processos em Tempo Real através da estratégia de otimização em duas camadas e em uma camada. A formulação da função objetivo do controlador e do otimizador e os algoritmos propostos para resolver o problema de otimização são apresentados.

7.1. Integração de Processos em Tempo Real

A Integração de Processos Químicos em Tempo Real é uma estratégia de operação muito interessante devido aos benefícios que pode trazer em termos de segurança e produtividade, além do desenvolvimento e a aplicação de muitas ferramentas que direcionam ao entendimento dos mecanismos que ocorrem no processo.

Em Otimização em Tempo Real (*Real Time Optimization – RTO*), medidas do processo são usadas para atualizar os parâmetros do modelo do processo em tempo real. O modelo atualizado é então usado na formulação de um problema de otimização dinâmico que é resolvido sequencialmente. O sistema de controle resultante pode ser usado para atualizar trajetórias do sistema em intervalos que permitam a solução do problema de otimização dinâmico. Em uma das várias aplicações, a estrutura de otimização em camadas hierárquicas, consistindo de uma camada superior de otimização em tempo real e de uma camada inferior de controle, é usada para prover a regulação da trajetória ótima (Guay e Peters, 2006).

Na estrutura de controle hierárquica popular, o otimizador em tempo real é primeiro usado para computar os pontos operacionais ótimos em intervalos regulares. Os valores ótimos obtidos via RTO são então passados para a estrutura de camada inferior de controle de processo avançado para implementação. Exceto pelo fato de que as duas camadas consistem de tecnologias bem estabelecidas, sua integração completa permanece problemática em aplicação. Isto porque a camada RTO somente calcula novos *set-points* quando a planta estabiliza em novo ponto de operação. Portanto, durante o intervalo entre sucessivas execuções RTO, a presença de perturbações externas pode causar uma mudança

nos valores ótimos, conduzindo a uma operação subótima da planta. Também o fato de que cada camada frequentemente emprega modelos do processo diferentes pode gerar um conflito entre os valores de referência (*set-point*) e as previsões do controle avançado (Adetola e Guay, 2006). Em função disto, Adetola e Guay (2006) propuseram a estrutura que realiza a tarefa integrada do sistema de otimização em tempo real/controlador avançado. A formulação consiste de problemas de otimização em duas fases que são resolvidos a cada tempo de amostragem. A primeira fase (RTO) calcula o valor ótimo que maximiza uma função objetivo econômica e a segunda fase (MPC) resolve o problema de controle ótimo dinâmico que regula a saída para o valor desejado calculado pelo RTO. Através de exemplos de simulação, foi mostrada a aplicabilidade do controlador proposto.

Neste trabalho será apresentada a abordagem da integração do controle e otimização em tempo real, através das estratégias conhecidas como otimização em uma camada ou otimização em duas camadas.

Na estratégia em duas camadas, a camada inferior é responsável pelo controle dinâmico. A camada superior determina os *set points* ótimos das variáveis para o estado estacionário e os envia para a camada inferior. A maioria das aplicações de controle multivariável implementadas na indústria utiliza esta estratégia (Zanin, 2001).

A estratégia em uma camada, ou controlador otimizador, é importante para a otimização do processo e consiste em resolver o problema de otimização econômica juntamente com o problema de controle (Zanin *et al.*, 2002).

Melo *et al.* (2005) usaram o procedimento de integração em tempo real envolvendo o controle e a otimização numa estratégia em duas camadas para o mesmo reator catalítico trifásico empregado neste trabalho. Como algoritmo de otimização, foi usado um algoritmo de Levenberg-Marquardt modificado e como algoritmo de controle, um controlador avançado baseado no DMC com restrições. Os resultados mostraram que, através da estrutura em duas camadas, o reator foi mantido em uma conversão de o-cresol desejada no valor de 0,717.

Schiavon Jr. e Corrêa (2000) apresentaram uma formulação alternativa para a estrutura em tempo real de controle e otimização não-linear em uma camada aplicada a uma coluna de destilação binária. Os valores de saída do processo, a cada tempo de amostragem, eram alimentados em uma estrutura de controle/otimização, a qual fornecia os novos valores das variáveis manipuladas, já consideradas as melhores condições do processo. As variáveis de otimização eram mudanças no *set-point* e ações de controle. As saídas estacionárias futuras e as ações de controle estacionárias futuras tinham ambas uma formulação diferente da estrutura em uma camada convencional, sendo calculadas a partir da matriz dos ganhos inversos do processo. Foram consideradas funções econômicas lineares e não lineares. Para resolver o problema (PNL) foram usados algoritmos de QDMC e SQP. Os resultados obtidos pelos autores mostraram um bom desempenho da estratégia proposta.

Zanin (2001) comparou as estratégias em uma e em duas camadas aplicadas a um conversor de uma unidade de craqueamento catalítico em leito fluidizado e concluiu que a estratégia em uma camada forneceu bons resultados nas simulações com as condições normais e as perturbações típicas da operação do conversor.

Nas aplicações das estratégias de Integração de Processos em Tempo Real, o controlador normalmente usado é um controlador preditivo linear multivariável. Quanto à otimização, é necessário o emprego de um algoritmo robusto cuja convergência para condições ótimas leve em conta a obtenção da resposta em um tempo relativamente curto e com um esforço computacional baixo (Rezende *et al.*, 2006). A otimização em tempo real apresenta baixo desempenho quando um otimizador local é usado acoplado a modelos não-lineares, podendo ser o desempenho melhorado pelo uso de um otimizador global no procedimento de otimização em tempo real. Embora a otimização global, em algumas aplicações, demande maior tempo computacional, avanços constantes nestes métodos de otimização têm permitido o seu emprego na otimização em tempo real (Lacks, 2003).

No presente trabalho, é proposta a resolução do problema de controle através do Controlador Preditivo baseado em Modelo do tipo DMC e do problema de otimização através dos Algoritmos Genéticos.

7.1.1. Integração em Duas Camadas

Na estratégia em duas camadas, o ponto de operação ótimo é calculado pela camada de otimização e o resultado traduzido como *set-point* das entradas selecionadas como manipuladas para a camada de controle dinâmico (González *et al.*, 2006).

A Figura 7.1 a seguir ilustra a estratégia em duas camadas:

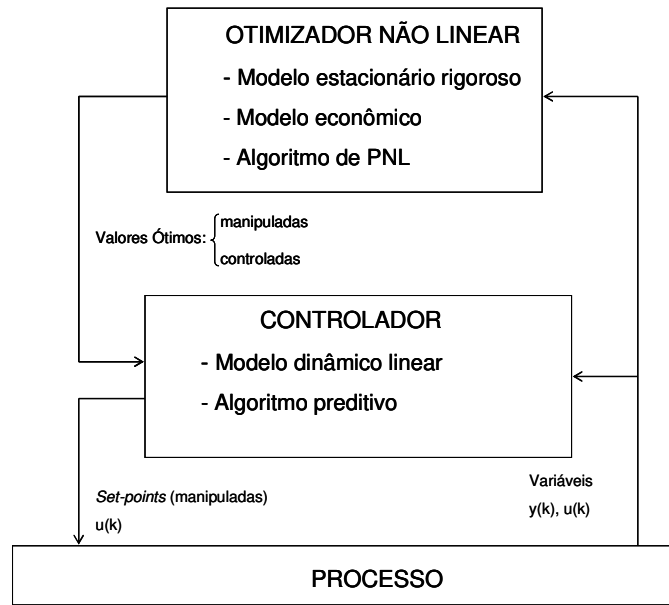


Figura 7. 1 – Estratégia de otimização em duas camadas.

- Camada da Otimização

Neste trabalho a função objetivo econômico da otimização é dada pela maximização da produtividade de 2-metil-ciclohexanol sujeita a restrições (Equação 7.1):

$$\underset{x}{\text{Maximize}} \quad f_{eco} = \text{Produtividade} = \frac{(Blf - Bl|_L) * ul}{L}$$

$$\text{Sujeita a :} \quad \text{Conversão} = \frac{Blf - Bl|_L}{Blf} > 0.90 \quad (7.1)$$

Eqs do modelo rigoroso (Eqs 2.5-2.12)

$$x_i^{max} \leq x \leq x_i^{min} \quad (\text{Tabela 3.1})$$

Para o caso de estudo do reator, a função objetivo econômico de máxima produtividade de 2-metil-ciclohexanol não é definida em termos de valor comercial.

A camada da otimização é responsável por maximizar a função objetivo, mantendo as variáveis do reator dentro de seus limites operacionais e disponibilizar os valores ótimos das variáveis manipuladas para a camada do controle.

O problema da otimização foi resolvido pelos Algoritmos Genéticos e apresentado no Capítulo 4. Os AGs mostraram-se robustos e eficazes, uma vez que encontraram o conjunto ótimo de possíveis variáveis manipuladas que conduziram o reator ao estado estacionário otimizado, traduzido em termos de máxima produtividade de 2-metil-ciclohexanol e máxima conversão de o-cresol, empregando-se um tempo computacional passível de utilização em aplicação em tempo real.

- Camada do Controle

O problema de controle é formulado segundo a função objetivo do controle DMC convencional descrita no Capítulo 6, incluindo-se os valores de entrada desejados como um novo termo que penaliza a distância que o sistema está da condição desejada (González *et al.*, 2006) :

$$\text{Minimize}_{\Delta u} J = [(-A\Delta u + E')^T (-A\Delta u + E')] + (\Lambda\Delta u)^T (\Lambda\Delta u) + (u(k + NC - 1) - u_{\text{ótimo}})$$

$$\text{Sujeita a} \quad \Delta u_{min} \leq \Delta u(k + j) \leq \Delta u_{max} \quad (7.2)$$

$$u_{min} \leq u(k + j) \leq u_{max} \quad j = 0, 1, \dots, NC - 1$$

onde $u_{\text{ótimo}}$ refere-se aos valores de entrada ótimos obtidos pela camada de otimização.

Como pode ser visto, a função objetivo da camada de controle é composta pelas parcelas do controle dinâmico e da otimização no estado estacionário. Os dois primeiros termos referem-se aos erros das variáveis controladas dinamicamente e à supressão dos movimentos das variáveis manipuladas, respectivamente, e o terceiro termo refere-se à diferença entre os valores das variáveis manipuladas a serem implementadas e os seus valores estacionários determinados pela camada da otimização (Zanin, 2001). Assim, a camada de controle desempenha a função de conduzir o processo ao seu ótimo operacional.

A Figura 7.2 a seguir apresenta um esquema que mostra as variáveis de entrada otimizadas pelos AGs que geram as saídas no estado estacionário otimizado. Essas variáveis são, respectivamente, as possíveis variáveis manipuladas e os novos *set-points* das variáveis controladas que são enviados para a camada de controle.

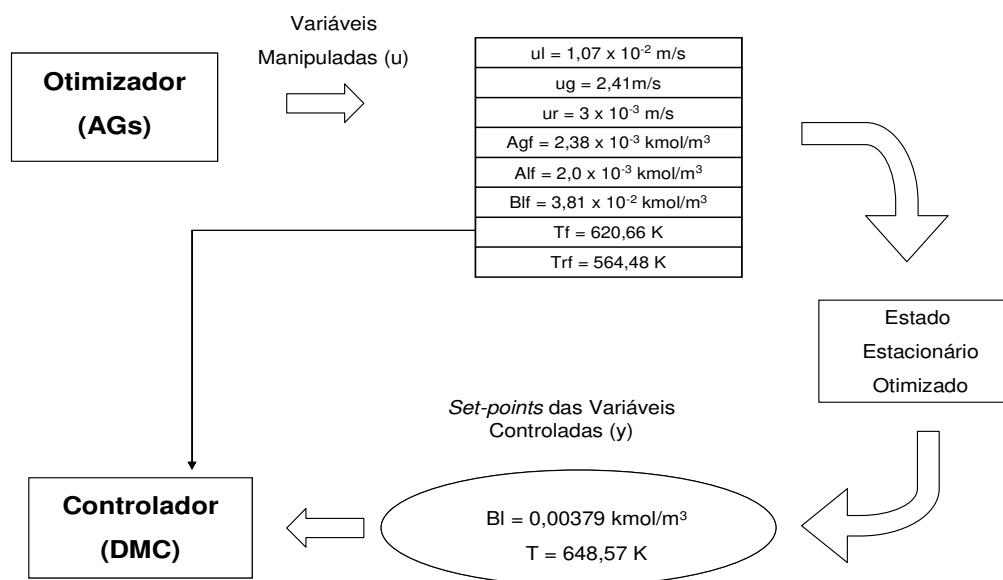


Figura 7. 2 – Esquema da proposta de otimização em duas camadas para o caso do reator.

A Figura 7.3 mostra o controlador DMC atuando neste novo *set-point*, por exemplo, da variável controlada temperatura média de reação na saída do reator.

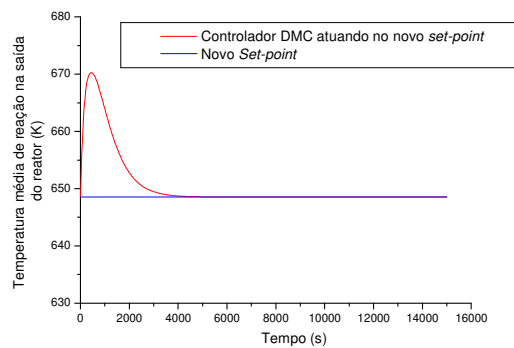


Figura 7. 3 – Controlador DMC atuando no novo *set-point* da variável controlada determinado pelos AGs.

7.1.2. Integração em Uma Camada

Tanto o cálculo das ações de controle pela camada de controle quanto o cálculo do ponto ótimo de operação pela camada de otimização envolvem a solução de um problema de otimização. Uma forma de integração entre estas duas camadas é resolver os dois problemas em um único problema de otimização, configurando a chamada estrutura de integração em uma camada. A Figura 7.2 representa o esquema da estratégia em uma camada:

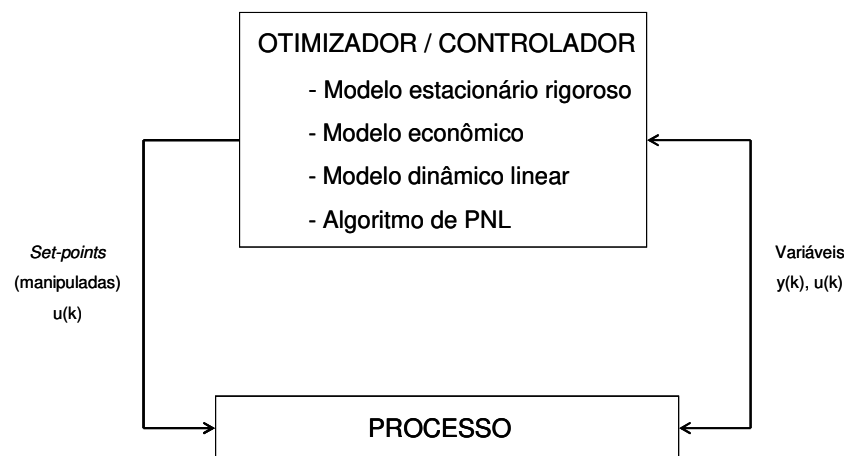


Figura 7. 4 – Estratégia de otimização em uma camada.

- Camada da Otimização/Controle

Na camada de otimização e controle, o problema de otimização não-linear no estado estacionário é resolvido simultaneamente com o controle preditivo. A função objetivo da camada de otimização e controle consiste da função objetivo do controlador DMC convencional adicionada à função objetivo econômico do otimizador, como mostra a Equação 7.3:

$$\begin{aligned}
 &\underset{x,u,\Delta u}{\text{Minimize}} \quad J = [(-A\Delta u + E')^T (-A\Delta u + E')] + (\Lambda\Delta u)^T (\Lambda\Delta u) + f_{eco} \\
 &\text{Sujeita a} \quad \text{Restrições do Modelo Econômico} \quad (7.3) \\
 &\quad \text{Eqs do Modelo Rigoroso (Eqs 2.5-2.12)} \\
 &\quad u_s^{\min} \leq u \leq u_s^{\max} \\
 &\quad x^{\min} \leq x \leq x^{\max} \\
 &\quad \Delta u_{\min} \leq \Delta u(k+j) \leq \Delta u_{\max} \\
 &\quad u_{\min} \leq u(k+j) \leq u_{\max} \quad j=0,1,\dots,NC-1
 \end{aligned}$$

onde f_{eco} é a função objetivo econômico, u_s é o vetor das variáveis manipuladas no estado estacionário e x é o vetor das variáveis de entrada do reator. As demais variáveis aparecem na seção de Notação.

Na Equação 7.3 os dois primeiros termos são os mesmos utilizados na formulação do algoritmo DMC e o terceiro termo é referente à função objetivo econômico responsável pela otimização estacionária do processo. Todos os três termos agora constituem a função objetivo da estratégia de otimização em uma camada.

A estratégia em uma camada é proposta como um trabalho futuro. O algoritmo de otimização em uma camada para o caso de estudo do reator trifásico está sendo construído em linguagem Fortran, a partir da formulação apresentada acima. Porém, dificuldades na integração entre os algoritmos DMC e Algoritmos Genéticos têm sido encontradas. Como a modelagem, a otimização e o controle do reator foram estudados separadamente, permitindo um maior conhecimento do mesmo, e por se tratar de um reator importante para

a prática industrial, a integração entre o controle e a otimização em tempo real é de suma importância, justificando a integração em tempo real segundo a estratégia em uma camada como uma interessante proposta para trabalhos futuros.

7.2. Conclusões

A Integração de Processos em Tempo Real através da estratégia de otimização em duas camadas e em uma camada foram discutidas, além da formulação da função objetivo do controlador e do otimizador e dos algoritmos propostos para resolver o problema de otimização.

CAPÍTULO 8 – Aplicação dos AGs na Prototipagem Rápida

A Prototipagem Rápida é uma tecnologia moderna, voltada para a concepção de objetos tridimensionais de boa precisão e qualidade. Uma das vertentes da Prototipagem Rápida é a Biofabricação em que estruturas para Engenharia de Tecidos, como o *scaffold*, são fabricadas. Esta fabricação necessita de um controle apurado não só da técnica empregada, mas, sobretudo, do material utilizado e de suas propriedades mecânicas e químicas. Diante disto, este capítulo apresenta como caso de estudo a otimização por AGs de propriedades mecânicas para a fabricação de *scaffolds* em alginato aplicados na Engenharia de Tecidos.

8.1. Prototipagem Rápida e Biofabricação

A Prototipagem Rápida consiste na reprodução física de objetos tridimensionais de geometria livre, a partir de um projeto inicial (*design*), modelado por auxílio de computador. A Prototipagem Rápida é uma tecnologia moderna que une métodos e equipamentos adequados a fim de oferecer, como principais atrativos, alta qualidade e redução de custos de produtos manufaturados (Rezende, 2006).

A Biofabricação é uma nova classe da Prototipagem Rápida para aplicações médicas e biomédicas (Mendes *et al.*, 2003). A Biofabricação voltada para a Engenharia de Tecidos tem sido uma área bastante crescente. Atualmente, esforços têm sido feitos no sentido de se desenvolver sistemas de Prototipagem Rápida específicos para a produção de estruturas de suporte, também conhecidas como *scaffolds*, para a Engenharia de Tecidos.

A Engenharia de Tecidos é um campo que aplica princípios de engenharia e das ciências da vida visando o desenvolvimento de substitutos biológicos que ajudam a recuperar, manter e melhorar a função dos tecidos. Trata-se de uma importante vertente da ciência moderna e vários estudos têm sido desenvolvidos no sentido de se descobrir novos materiais e métodos de aplicação.

A Engenharia de Tecidos tipicamente envolve a construção de estruturas de tecidos pela combinação de células e biomateriais, sejam sintéticos ou naturais, com o objetivo final da substituição e recuperação das funções fisiológicas perdidas nos órgãos degradados ou não-saudáveis (Tsang e Bhatia, 2004). Além disto, abrange questões como a arquitetura em pequenas dimensões, estruturas mecânicas, propriedades de superfícies, produtos da degradação do material aplicado e a composição do tecido e as alterações destes fatores com o tempo seja *in vitro* e/ou *in vivo* (Bártolo *et al.*, 2007, Hutmacher *et al.*, 2004; Reece e Patrick, 1998).

No início, a Engenharia de Tecidos contava apenas com processos convencionais para a fabricação de *scaffolds*, tais como, *freeze drying*, *fiber bonding*, *melt moulding* (Leong, 2003). Estas técnicas têm suas limitações, já que são laboriosas, envolvem solventes tóxicos, não garantem uma distribuição uniforme de poros nem interconectividade entre os mesmos.

Nos últimos 20 anos, houve uma revolução das técnicas de concepção de tecidos humanos. A Engenharia de Tecidos passou a ser amparada pela Prototipagem Rápida. Desta maneira, materiais para aplicações médicas são construídos tendo como vantagens a habilidade de se produzir objetos volumétricos de geometria simples e/ou complexa com precisão de ordem micrométrica, reprodutibilidade e repetibilidade, alta porosidade, boa interconectividade, boa rigidez mecânica, e custos mais baixos, podendo ser aplicados na fabricação de dispositivos e soluções para reconstituição de tecidos moles ou duros.

A recuperação de órgãos debilitados requer um novo tecido, composto por um conjunto de células novas, que deve crescer no local afetado, respeitando as mesmas propriedades mecânicas, químicas e biológicas originais, deve possuir habilidade para desempenhar funções similares às do tecido em substituição e deve apresentar boa capacidade de regeneração e de execução de suas funções vitais. Para que as novas células possam crescer e se desenvolver, o novo tecido necessita de matrizes de suporte, conhecidas como *scaffolds*, que devem ser biocompatíveis e cujos produtos de degradações não devem gerar respostas de rejeição ou de toxicidade.

Em sendo estruturas tridimensionais, os *scaffolds* servem de suporte e estímulo para o crescimento de novos tecidos. Os *scaffolds* devem ser não-tóxicos, biocompatíveis e biodegradáveis, uma vez que serão implantados no corpo do paciente.

8.2. Propriedades dos *Scaffolds*

Basicamente, os *scaffolds* devem satisfazer vários atributos biológicos, químicos e mecânicos. No que diz respeito a propriedades químicas, os estudos são feitos para a identificação e adequação da adesão das células às paredes do *scaffold*, para as características da microporosidade e da quantidade de poros. Em termos biológicos, os *scaffolds* proporcionam as condições e ambiente adequados para o crescimento do novo tecido a partir das células implantadas no próprio *scaffold*. A caracterização mecânica tem como objetivo, dentre outros aspectos, conhecer a rigidez mecânica do *scaffold*, a sua macroporosidade e o comportamento dos *scaffolds* mediante às solicitações a que está sujeito o hospedeiro.

8.2.1. O biomaterial utilizado

No presente caso de estudo, o alginato, um biomaterial natural, é o material considerado para a construção de *scaffolds*. O alginato é um polissacarídeo copolímero de ácidos manurônicos e gulurônicos, de origem nas algas pardas marinhas, biodegradável, não-tóxico, isto é, a taxa de rejeição deste material pelo organismo humano é pequena. Em relação às condições mecânicas, os *scaffolds* devem possuir adequadas propriedades mecânicas, de modo a criar um ambiente de esforços que venha proporcionar o crescimento do novo tecido; devem possuir uma taxa de degradação adequada e ajustada à taxa de regeneração do novo tecido e devem ainda possuir arquiteturas apropriadas (topologia, dimensão, distribuição e interconectividade entre poros) (Almeida, 2006, Bártolo *et al.*, 2007).

Com base em estudos experimentais sobre o comportamento mecânico dos alginatos, e com o objetivo de atender aos requisitos mecânicos exigidos para o bom desempenho do *scaffold*, um modelo de simulação computacional e de otimização é

proposto, em que, a partir de parâmetros relacionados com a construção do *scaffold*, a rigidez mecânica deste ao longo do tempo possa ser predita. Este modelo apresenta equações que descrevem o comportamento mecânico através de fatores como a contração do material (biodegradação) com o decorrer do tempo, a porosidade, e o módulo de Young o qual proporciona um dimensionamento sobre a rigidez mecânica do material.

Além da técnica de fabricação empregada, os materiais constituem o quesito mais importante para o qual se deve atentar desde o início de uma aplicação de *scaffolds* para a Engenharia de Tecidos. O presente trabalho estuda os *scaffolds* construídos em alginato (material do tipo hidrogel) ilustrados na Figura 8.1. Sendo assim, e objetivando-se a caracterização do alginato e a sua aplicação como o material-base para a construção de *scaffolds*, este trabalho é voltado à manipulação de dados que traduzem o comportamento físico deste hidrogel, além de, matematicamente, equacionar seu perfil mecânico ao longo do tempo e em termos de outros fatores de extrema relevância, como a composição do material e a porosidade do *scaffold*.

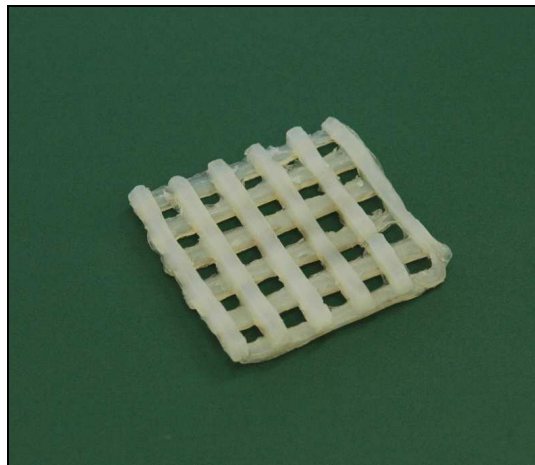


Figura 8. 1 – *Scaffold* em alginato

8.3. Modelagem e Formulação do Problema de Otimização

O estudo da degradação do alginato inicia-se a partir de um experimento em que a contração do alginato ao longo do tempo é determinada em relação a diferentes

composições de alginato. As Figuras 8.2 a 8.4 mostram as curvas obtidas da contração em função do tempo para três composições de alginato em cloreto de cálcio (1%, 2% e 5%).

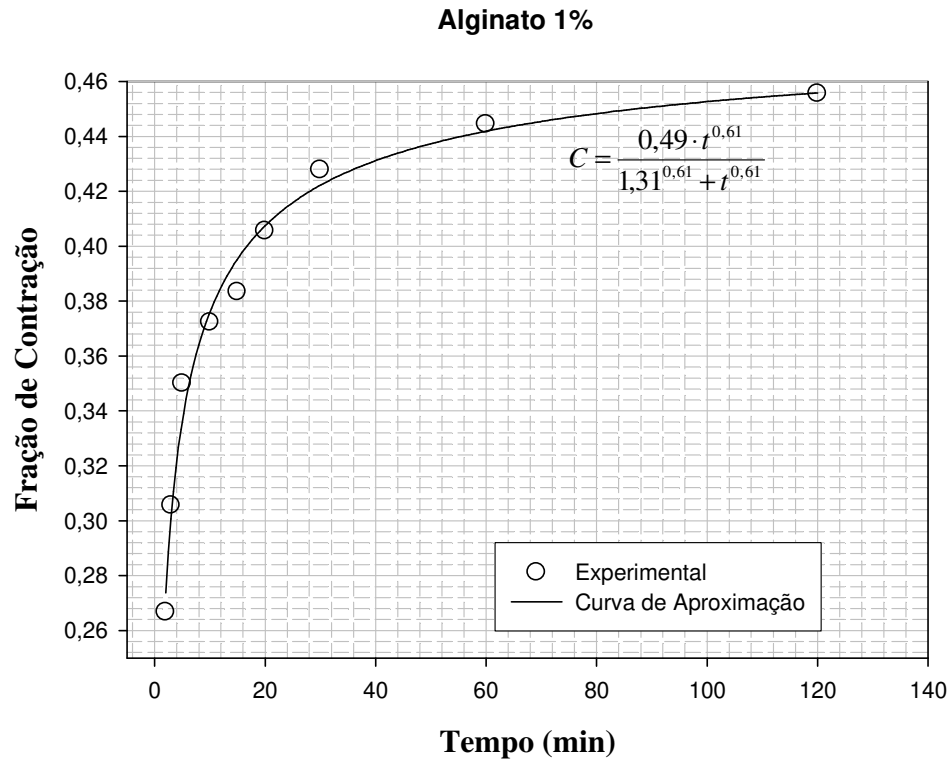


Figura 8. 2 – Contração x Tempo para Alginato 1%.

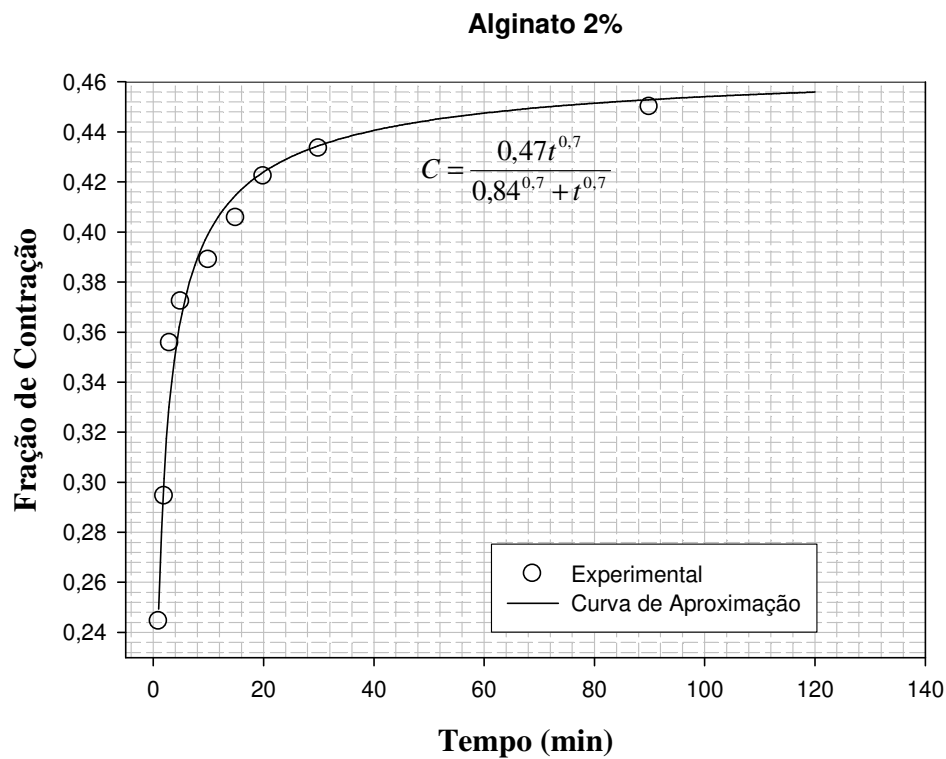


Figura 8. 3 – Contração x Tempo para Alginate 2%.

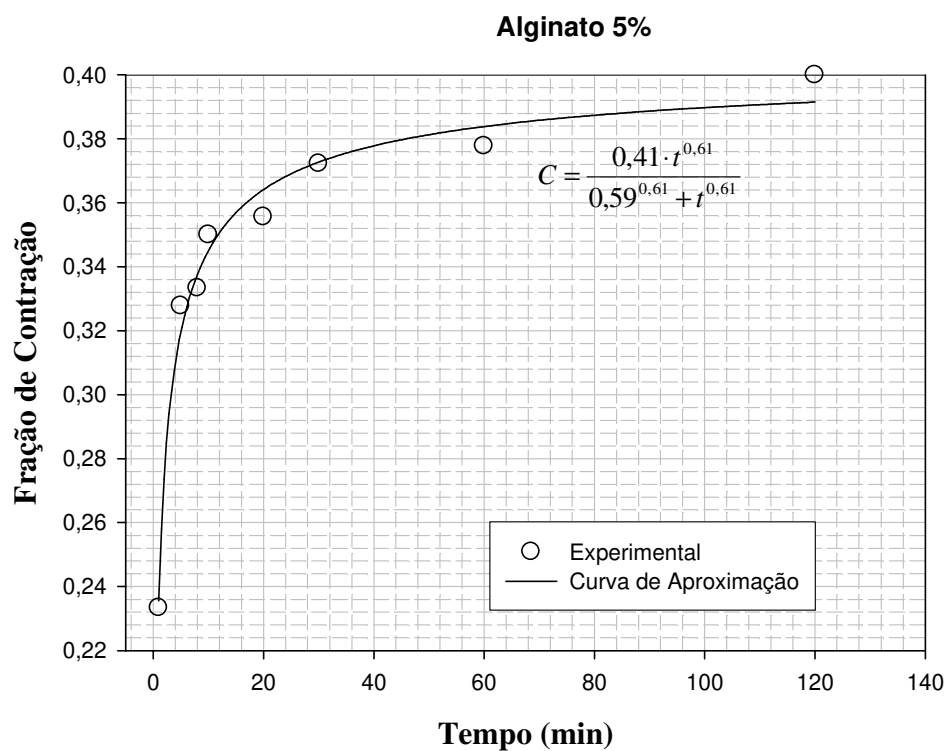


Figura 8. 4 – Contração x Tempo para Alginate 5%.

Uma relação entre a contração do alginato em função do tempo foi obtida experimentalmente para as três diferentes proporções de alginato: 1%, 2% e 5%, obtidas através de mistura de soluções com 1g, 2g e 5g de alginato, respectivamente, em 100 ml de água com uma solução de CaCl_2 0,3 Molar (Rezende *et al.*, 2007).

Através de ajustes realizados por software matemático, obteve-se uma equação representativa da contração em função do tempo e de cada solução de alginato.

A equação que modela a contração é representada por uma curva sigmoidal com 3 parâmetros, como na Equação (8.1):

$$C(\alpha, t) = \frac{\zeta(\alpha) \cdot t^{\vartheta(\alpha)}}{\lambda(\alpha)^{\vartheta(\alpha)} + t^{\vartheta(\alpha)}} \quad (8.1)$$

onde, t é o tempo de degradação do *scaffold*, e “ ζ , ϑ , λ ” são as constantes de aproximação calculadas em função da composição de alginato, α .

A porosidade final ϕ é calculada em termos da composição de alginato e da porosidade inicial do *scaffold* e da contração como mostra a equação a seguir:

$$\phi(\phi_0, \alpha, t) = \phi_0 + \zeta(\phi_0, \alpha) \cdot C(\alpha, t) + \psi(\phi_0, \alpha) \cdot C^2(\alpha, t) \quad (8.2)$$

em que ϕ_0 é a porosidade inicial, ζ e ψ são calculadas em função da composição de alginato e C é a contração.

Considerando-se a contração volumétrica e constante ao longo do tempo, a macroporosidade ϕ assumida varia em função do volume contraído enquanto a geometria dos poros mantém-se constante.

É importante ressaltar que após um determinado período de tempo, a degradação natural do biomaterial reduz as propriedades mecânicas do *scaffold*, ou seja, reduz o módulo de Young. Entretanto, o objetivo é determinar quais são os valores ótimos do par [quantidade de alginato (% alg), porosidade inicial (ϕ_0)] para a fabricação de um *scaffold* que, após um determinado período de tempo, garantam a maximização da função objetivo dada pelo módulo de Young. De acordo com os valores da composição de alginato e porosidades iniciais do *scaffold* em fabricação, pode-se obter diferentes valores do módulo de Young.

É natural que com a degradação do *scaffold*, o módulo de Young diminua. Entretanto, o objetivo é que o *scaffold*, após um determinado tempo, possua o máximo módulo de Young possível, o que significa ter a máxima propriedade mecânica assegurada.

O módulo de Young E é dado por uma expressão que relaciona diretamente o módulo de Young inicial e a porosidade final do *scaffold* e indiretamente, a composição do alginato e a porosidade inicial do *scaffold*, como mostra a Equação (8.3):

$$E(\phi_0, \alpha, t) = E_0(\phi_0, \alpha) + k_1(\phi_0, \alpha) \cdot \phi(\phi_0, \alpha, t) + k_2(\phi_0, \alpha) \cdot \phi(\phi_0, \alpha, t)^2 + k_3(\phi_0, \alpha) \cdot \phi(\phi_0, \alpha, t)^3 \quad (8.3)$$

onde: E_0 é o módulo de Young inicial (KPa),

k_1, k_2, k_3 são constantes dependentes da composição de alginato e da porosidade inicial

ϕ é a porosidade final do *scaffold*

Neste sentido, torna-se fundamental a formulação de um problema de otimização para a determinação das características ideais para a construção do *scaffold*.

Assim, o problema pode ser postulado como mostra a equação 8.4 a seguir:

$$\underset{[\alpha, \phi_0]}{\text{Maximize}} \quad E(\phi_0, \alpha, t) \quad (8.4)$$

Sujeita a Restrições de desigualdade

$$0.01 \leq \alpha \leq 0.08$$

$$0.30 \leq \phi_0 \leq 0.80$$

A Figura 8.5 mostra o comportamento do módulo de Young em função da quantidade de alginato e da porosidade inicial após 20 minutos.

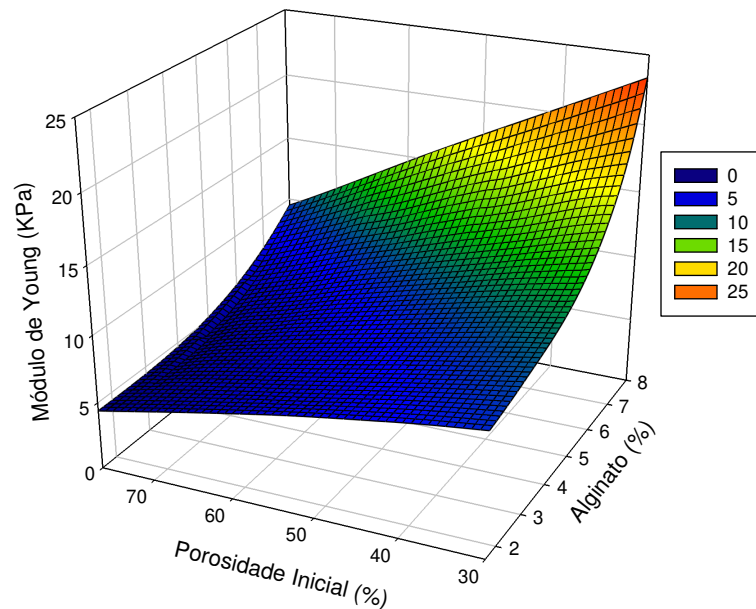


Figura 8. 5 – Módulo de Young em função da composição de Alginato e da Porosidade inicial após 20 minutos.

8.4. Implementação do código do Algoritmo Genético para resolver o problema da otimização

O código do Algoritmo Genético empregado nesta parte do trabalho é o código binário em Fortran apresentado no Capítulo 4, com as devidas modificações para a adequação a este caso de estudo.

Os tipos de operadores genéticos usados foram a seleção por torneio, cruzamento uniforme e mutação *creep* e *jump*. Também foram empregadas as ferramentas de *niching* e elitismo, também já definidas no Capítulo 4.

De acordo com a Equação 4.2, para este caso de estudo, o tamanho do gene para cada variável de otimização é:

- Para a variável “composição de alginato” :

$$l_i = \log_2 \left(\frac{8,0 \times 10^{-2} - 1,0 \times 10^{-2}}{0,1 \times 10^{-2}} \right) = \log_2(70) \approx 7$$

- Para a variável “porosidade inicial” :

$$l_i = \log_2 \left(\frac{8,0 \times 10^{-1} - 3,0 \times 10^{-1}}{0,1 \times 10^{-1}} \right) = \log_2(50) \approx 6$$

Portanto, o tamanho total do cromossomo é: $l_i = \sum_{i=1}^2 l_i = 13$

Os parâmetros de entrada do AG foram escolhidos pelo método da tentativa-e-erro, tendo sido efetuadas várias simulações partindo-se de valores e correlações sugeridos na literatura e variando-se os parâmetros de entrada do AG, verificando-se a influência dos mesmos sobre o desempenho do AG. Os nomes dos parâmetros de entrada do AG e seus significados também podem ser encontrados no Capítulo 4.

Para os valores das probabilidades de mutação *jump* e *creep* (*pmutate* e *pcreep*, respectivamente), partiu-se da seguinte correlação (Costa *et al.*, 2007):

$$pcreep = pmutate = \frac{1}{l_i} = \frac{1}{13} = 0,077$$

Para o tamanho da população (*npopsiz*) partiu-se da expressão (Deb, 2000):

$$npopsiz = 10 \times N = 10 \times 2 = 20 \text{ sendo, } N \text{ é o número de variáveis de otimização.}$$

Porém, foi verificado que um aumento do tamanho da população para cinquenta indivíduos conduz a uma melhoria no valor da função objetivo.

Para o número de gerações (maxgen), foi observado que, acima de trinta gerações, o valor da função objetivo não se altera, justificando a escolha das trinta gerações.

Os melhores valores obtidos para os parâmetros de entrada do Algoritmo Genético estão mostrados na Tabela 8.1 e são utilizados para todos os casos considerados nas simulações apresentadas no item 8.5.

Tabela 8. 1 – Valores dos parâmetros de entrada do código AG

Parâmetros de entrada	Valores
npopsiz	50
maxgen	30
pcross	0,6
pmutate	0,077
pcreep	0,077
idum	-1000

O modelo matemático dado pelas equações 8.1 a 8.3 foi acoplado ao Algoritmo Genético a fim de se determinar os valores ótimos para a proporção de alginato e a porosidade inicial do *scaffold* que garantam o máximo módulo de Young após um determinado período de tempo.

8.5. Otimização do *scaffold*

Como já foi citado, o objetivo da otimização é determinar o par (Alginato, Porosidade inicial) que maximize a função objetivo dada pelo módulo de Young para um determinado tempo de contração. Respeitando-se a faixa de valores obtida experimentalmente, mesmo sendo possível, através da equação aproximada, extrapolar valores além dos 120 minutos mostrados nas Figuras 8.2 a 8.4, foi fixado um tempo arbitrário de 20 minutos, onde ocorre uma maior variação em termos de contração.

Para o estudo da otimização, primeiramente, foi avaliado um caso em que não se considera qualquer restrição no problema, de modo a se observar a tendência de escolha dos valores do par desejado para a fabricação do *scaffold*.

Posteriormente, foram analisados casos com restrições apenas na contração C , apenas na porosidade final ϕ e, por fim, nas duas variáveis simultaneamente.

A seguir, a Tabela 8.2 apresenta os casos de otimização considerados, com e sem restrições. Em todos os casos é empregado o método de manipulação de restrições apresentado no item 3.5.

Tabela 8. 2 – Casos e condições avaliados

Caso	Condição
1	Sem restrição
2	Contração > 25%
3	Porosidade Final > 80%
4	Contração < 35% e Porosidade Final > 75%

Caso 1 – Sem restrição

Os resultados obtidos com a otimização, quando nenhuma restrição é considerada, são os melhores valores do par de variáveis de otimização (alginate, porosidade inicial) que maximizam a função objetivo (módulo de Young), além dos valores obtidos para a contração e a porosidade final como mostra a Tabela 8.3.

Tabela 8. 3 – Resultados da otimização (caso 1: sem restrição)

Variáveis de otimização	Alginate inicial (%)	8,00
	Porosidade inicial (%)	30,00
Função objetivo	Módulo de Young (KPa)	23,38
Saída	Contração (%)	16,24
	Porosidade Final (%)	59,17

As Figuras 8.6 e 8.7 mostram que, para a maximização do módulo de Young sem restrição, a composição de alginate tende para valores mais próximos do limite superior, enquanto que, para a porosidade inicial, a tendência é para valores mais próximos do limite inferior. As figuras ilustram a busca do Algoritmo Genético em toda a faixa de variação.

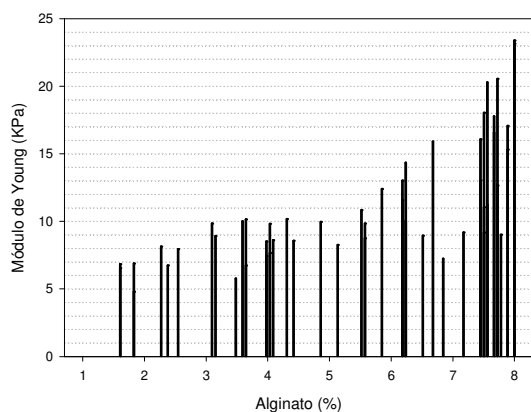


Figura 8. 6 – Módulo de Young em função do alginato na última geração (caso 1: sem restrição)

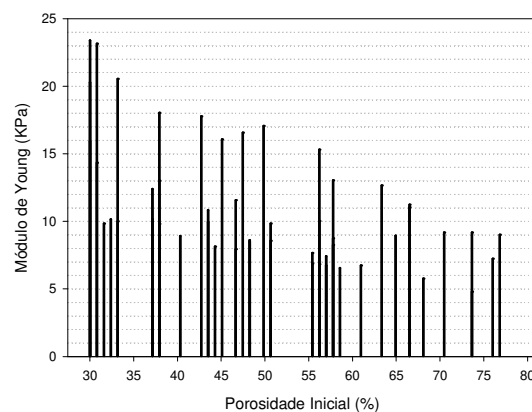


Figura 8. 7 – Módulo de Young em função da porosidade inicial na última geração (caso 1: sem restrição)

A Figura 8.8 ilustra a evolução da função objetivo ao longo das 30 gerações.

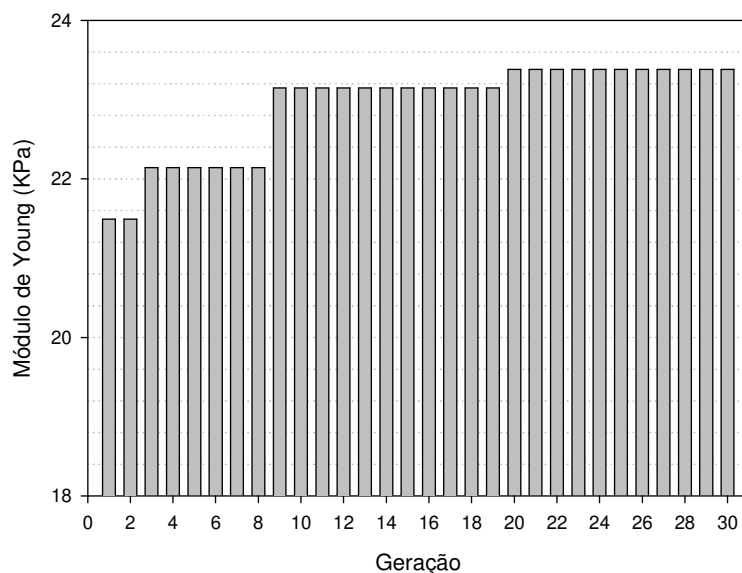


Figura 8. 8 – Evolução do módulo de Young ao longo das gerações (caso 1: sem restrição).

A Figura 8.9 mostra como o módulo de Young evolui, geração a geração, através da combinação do melhor par (Alginato, Porosidade Inicial), assim como o valor máximo obtido na última geração.

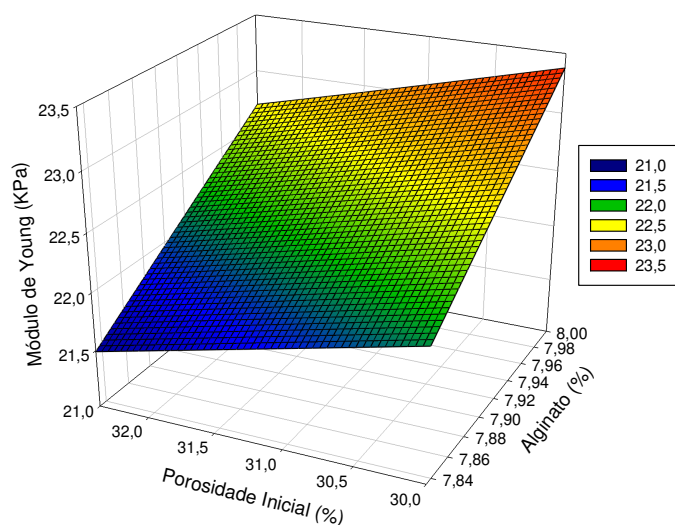


Figura 8. 9 – Maximização do módulo de Young em termos da composição de alginato e da porosidade inicial do melhor indivíduo no decorrer de 30 gerações (caso 1: sem restrição).

A Figura 8.10 apresenta o perfil obtido para a função objetivo, a partir da melhor combinação das variáveis de otimização em cada geração e, mostra também, a contração e porosidade final dependentes desta combinação.

Os valores obtidos na última geração são os valores apresentados na Tabela 8.2.

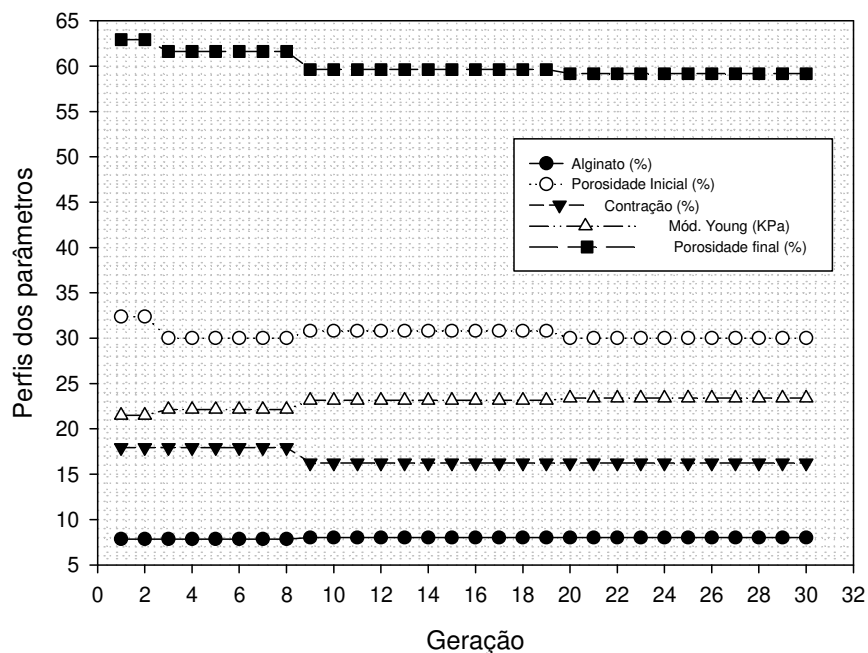


Figura 8. 10 – Perfis da função objetivo, contração e porosidade final obtidos com os melhores valores das variáveis de otimização em cada geração (caso 1: sem restrição).

Caso 2 – Contração > 25%

Neste caso, a maximização da função objetivo está sujeita a uma restrição da contração maior que 25%. Os resultados obtidos são os melhores valores do par de variáveis de otimização (alginato, porosidade inicial) que maximizam a função objetivo (módulo de Young), sem violar a restrição, como apresenta a Tabela 8.4. São também apresentados os valores obtidos para a contração e para a porosidade final.

Tabela 8. 4 – Resultados da otimização (caso 2: contração > 25%)

Variáveis de otimização	Alginato inicial (%)	7,06
	Porosidade inicial (%)	30,00
Função objetivo	Módulo de Young (KPa)	17,52
Restrição	Contração (%)	25,22
Saída	Porosidade Final (%)	70,97

As Figuras 8.11 e 8.12 mostram a busca do AG por indivíduos em toda a faixa de variação permitida para as variáveis de otimização e o Módulo de Young de cada indivíduo da população da última geração. Para este caso, em que há uma restrição na contração, os maiores valores do Módulo de Young ocorrem para maiores composições de alginato, como mostra a Figura 8.11 e para menores valores de porosidade inicial, como mostra a Figura 8.12, sendo que o máximo Módulo de Young da última geração ocorre quando ambos, composição de alginato e porosidade inicial são iguais a 7,06% e 30%, respectivamente. O máximo Módulo de Young da última geração corresponde a solução ótima do problema de otimização uma vez que foi adotado, como critério de parada, o número máximo de gerações atingido. Os valores negativos indicam os indivíduos que violaram a restrição da contração > 25%.

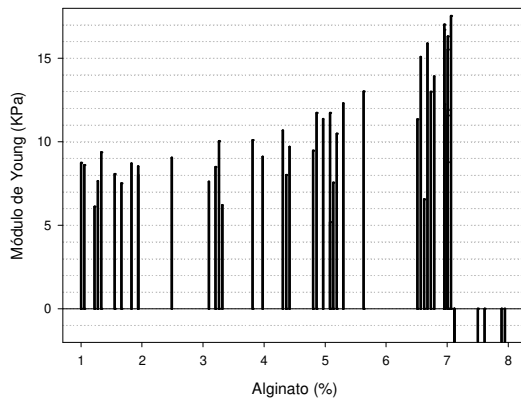


Figura 8. 11 – Módulo de Young da última geração em função do alginato (caso 2: contração > 25%)

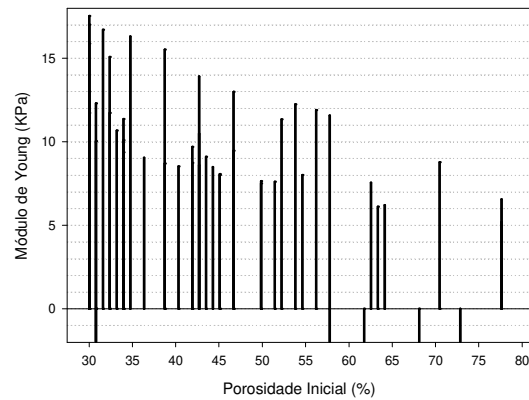


Figura 8. 12 – Módulo de Young da última geração em função da porosidade inicial (caso 2: contração > 25%)

A Figura 8.13 ilustra a evolução da função objetivo (módulo de Young) ao longo das 30 gerações.

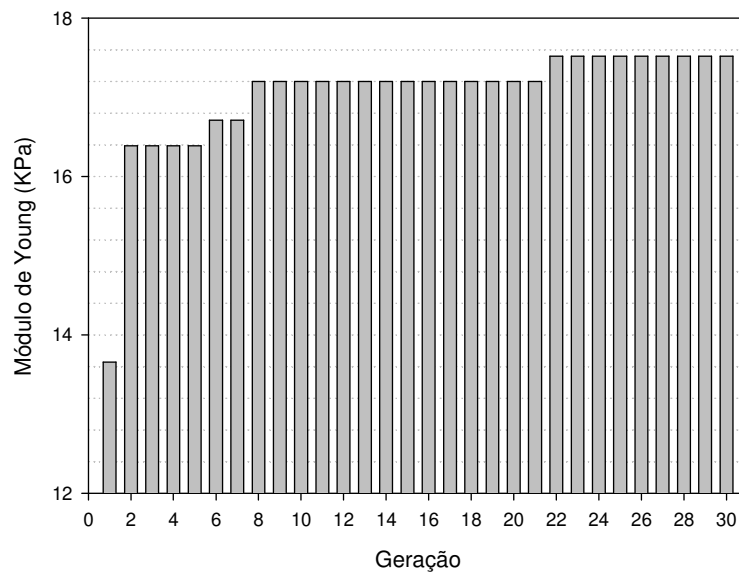


Figura 8. 13 – Evolução do módulo de Young ao longo das gerações (caso 2: contração > 25%).

A Figura 8.14 mostra os melhores valores obtidos para o módulo de Young quando os melhores conjuntos das variáveis de otimização (alginato, porosidade inicial) são encontrados a cada geração, sem violar a restrição da contração > 25%.

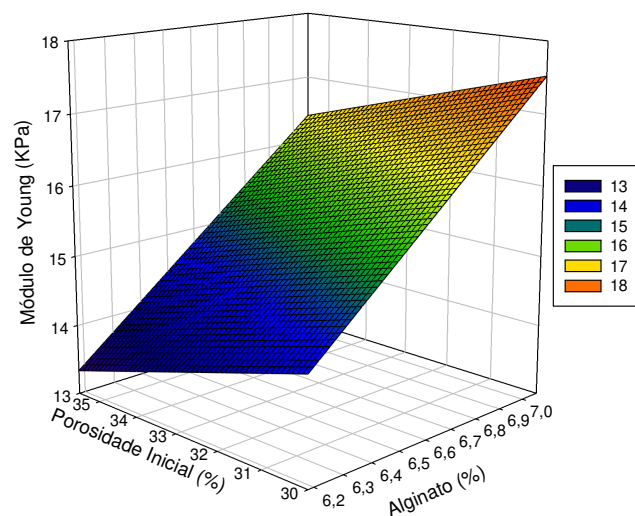


Figura 8. 14 – Maximização do módulo de Young em termos da composição de alginato e da porosidade inicial do melhor indivíduo no decorrer de 30 gerações (caso 2: contração > 25%).

A Figura 8.15 mostra o perfil de maximização da função objetivo (módulo de Young) obtido com os melhores valores de alginato e porosidade inicial a cada geração. Também é mostrado o perfil de porosidade final obtido quando a maximização do módulo de Young está sujeita a uma contração maior que 25%, após o tempo de 20 minutos.

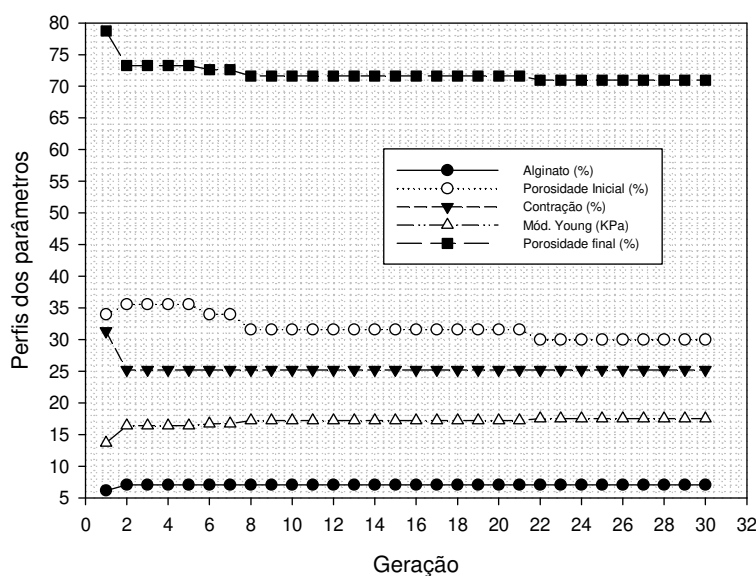


Figura 8. 15 – Perfis da função objetivo, contração e porosidade final obtidos com os melhores valores das variáveis de otimização em cada geração (caso 2: contração > 25%).

O caso 3, a seguir, considera a imposição de uma restrição sobre a porosidade final, deixando livre a contração.

Caso 3 – Porosidade final > 80%

Para este caso, a maximização da função objetivo está sujeita a uma restrição da porosidade final maior que 80%.

Os resultados obtidos são os melhores valores do par de variáveis de otimização (alginato, porosidade inicial) que maximizam a função objetivo (módulo de Young), sem violar a restrição da porosidade final, como apresenta a Tabela 8.5. São também apresentados os valores obtidos para a contração.

Tabela 8. 5 – Resultados da otimização (caso 3: porosidade final > 80%)

Variáveis de otimização	Alginato inicial (%)	5,79
	Porosidade inicial (%)	32,38
Função objetivo	Módulo de Young (KPa)	12,99
Restrição	Porosidade Final (%)	80,01
Saída	Contração (%)	33,29

As Figuras 8.16 e 8.17 mostram a busca do AG por indivíduos em toda a faixa de variação permitida para as variáveis de otimização e o Módulo de Young de cada indivíduo da população da última geração. O máximo Módulo de Young da última geração ocorre quando ambos, composição de alginato e porosidade inicial são iguais a 5,79% e 32,38%, respectivamente. Os valores negativos indicam os indivíduos que violaram a restrição da porosidade final > 80%.

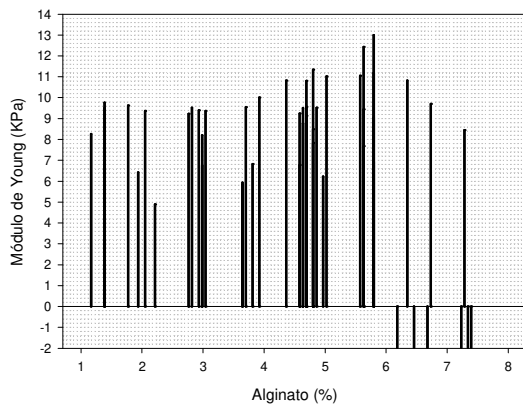


Figura 8. 16 – Módulo de Young da última geração em função do alginato (caso 3: porosidade final > 80%).

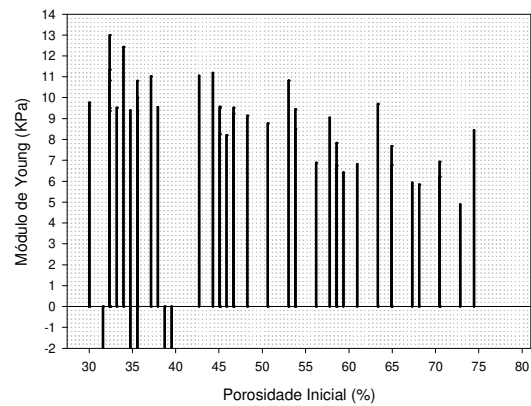


Figura 8. 17 – Módulo de Young da última geração em função da porosidade inicial (caso 3: porosidade final > 80%).

A Figura 8.18 ilustra a evolução da função objetivo (módulo de Young), ao longo das 30 gerações.

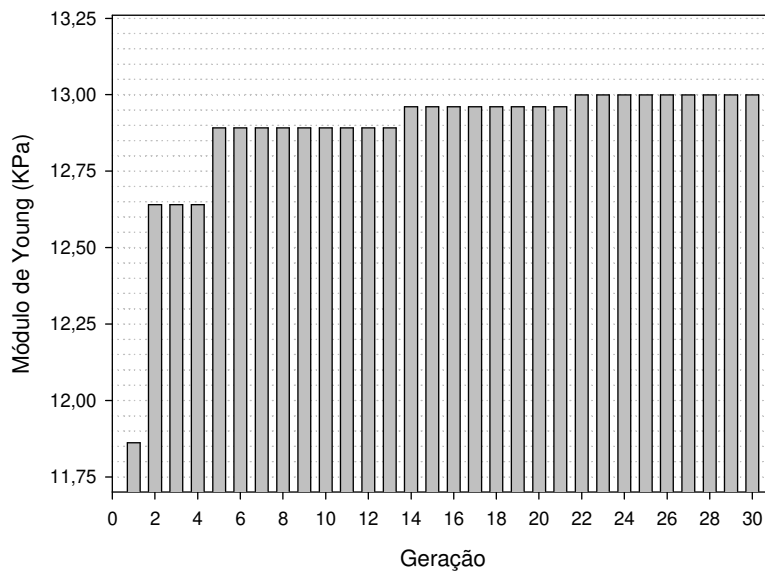


Figura 8. 18 – Evolução do módulo de Young ao longo das gerações (caso 3: porosidade final > 80%).

A Figura 8.19 mostra os melhores valores obtidos para o módulo de Young quando os melhores conjuntos das variáveis de otimização (alginato, porosidade inicial) são encontrados a cada geração, sem violar a restrição da porosidade final > 80%.

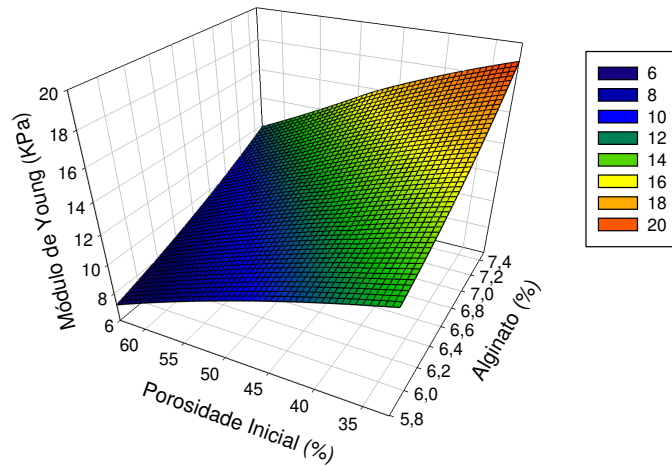


Figura 8. 19 – Maximização do módulo de Young em termos da composição de alginato e da porosidade inicial do melhor indivíduo no decorrer de 30 gerações (caso 3: porosidade final > 80%).

A Figura 8.20 mostra o perfil de maximização da função objetivo (módulo de Young) obtido com os melhores valores de alginato e porosidade a cada geração. O perfil da porosidade final mostra que os melhores valores são obtidos sem violação da restrição da porosidade final maior que 80%. Também é mostrado o perfil de contração obtido quando a maximização do módulo de Young está sujeita a uma porosidade final maior que 80%, após o tempo de 20 minutos.

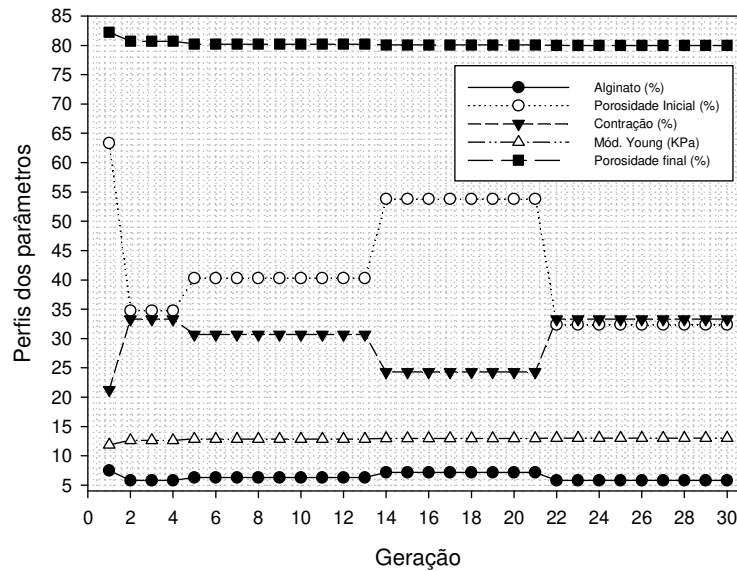


Figura 8. 20 – Perfis da função objetivo, contração e porosidade final obtidos com os melhores valores das variáveis de otimização em cada geração (caso 3: porosidade final > 80%).

O caso 4, a seguir, considera um problema em que são impostas restrições para ambas, contração e porosidade final.

Caso 4 – Contração < 35% e Porosidade Final > 75%

Este caso considera a maximização da função objetivo sujeita a duas restrições de desigualdade: restrição da contração menor que 35% e restrição da porosidade final maior que 75%.

Os resultados obtidos são os melhores valores do par de variáveis de otimização (alginato, porosidade inicial) que maximizam a função objetivo (módulo de Young), sem violar a restrição qualquer uma das duas restrições, como apresenta a Tabela 8.6.

Tabela 8. 6 – Resultados da otimização (caso 4: contração < 35% e porosidade > 75%)

Variáveis de otimização	Alginato inicial (%)	7,45
	Porosidade inicial (%)	47,46
Função objetivo	Módulo de Young (KPa)	15,51
Restrições	Contração (%)	21,78
	Porosidade Final (%)	75,03

As Figuras 8.21 e 8.22 mostram a busca do AG por indivíduos em toda a faixa de variação permitida para as variáveis de otimização e o Módulo de Young de cada indivíduo da população na última geração. Para este caso, em que são consideradas as duas restrições, os maiores valores do Módulo de Young ocorrem para composições de alginato entre 7% e 8%, como mostra a Figura 8.21 e para valores de porosidade inicial entre 40% e 60%, como mostra a Figura 8.22, sendo que o máximo Módulo de Young da última geração ocorre quando ambos, composição de alginato e porosidade inicial são iguais a 7,45% e 47,46%, respectivamente. Os valores negativos indicam os indivíduos que violaram a restrição da contração < 35% e da porosidade final > 75%.

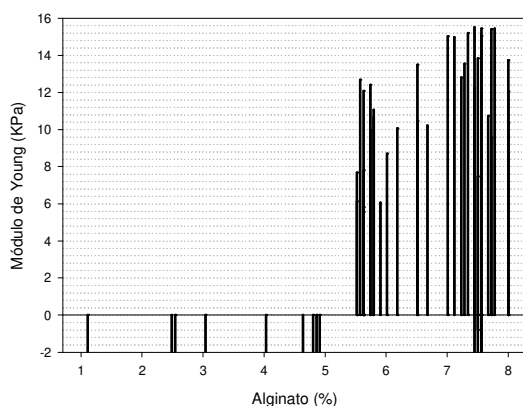


Figura 8. 21 – Módulo de Young da última geração em função do alginato (caso 4: contração < 35% e porosidade final > 75%).

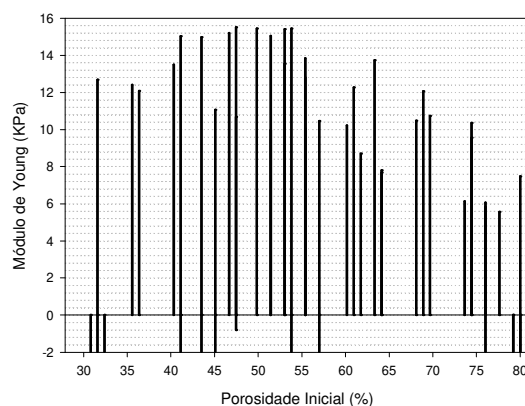


Figura 8. 22 – Módulo de Young da última geração em função da porosidade inicial (caso 4: contração < 35% e porosidade final > 75%).

A Figura 8.23 ilustra a evolução da função objetivo (módulo de Young), ao longo das gerações.

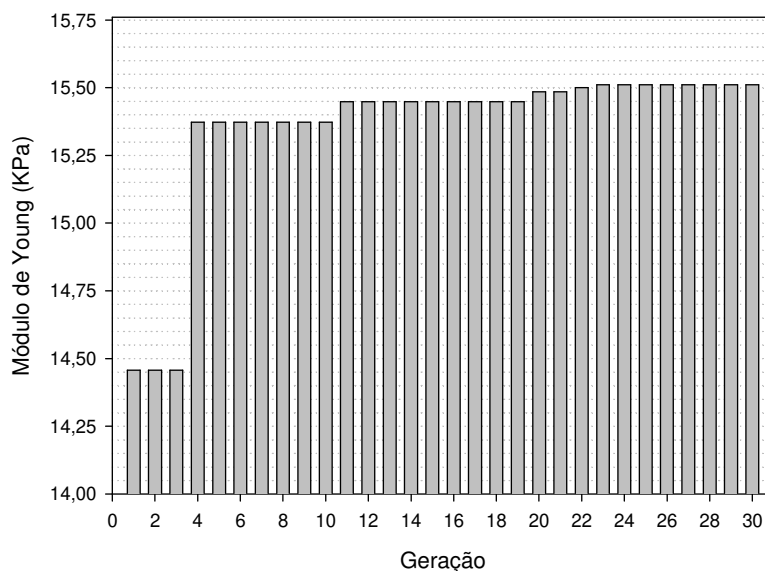


Figura 8. 23 – Evolução do módulo de Young ao longo das gerações (caso 4: contração < 35% e porosidade final > 75%).

A Figura 8.24 mostra os melhores valores obtidos para o módulo de Young quando os melhores conjuntos das variáveis de otimização (alginato, porosidade inicial) são encontrados a cada geração, sem violar as restrições da contração menor que 35% e da porosidade final maior que 75%.

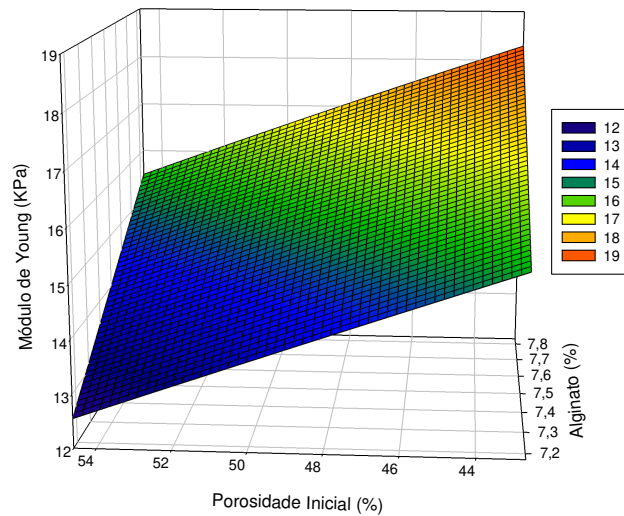


Figura 8. 24 – Maximização do módulo de Young em termos da composição de alginato e da porosidade inicial do melhor indivíduo no decorrer de 30 gerações (caso 4: contração < 35% e porosidade final > 75%).

A Figura 8.25 mostra o perfil de maximização da função objetivo (módulo de Young) obtido com os melhores valores de alginato e porosidade inicial a cada geração. O perfil da porosidade final mostra que os melhores valores são obtidos sem violação da restrição da porosidade maior que 75% e o perfil da contração comprova que a solução ótima é obtida sem violação da restrição da contração menor que 35%.

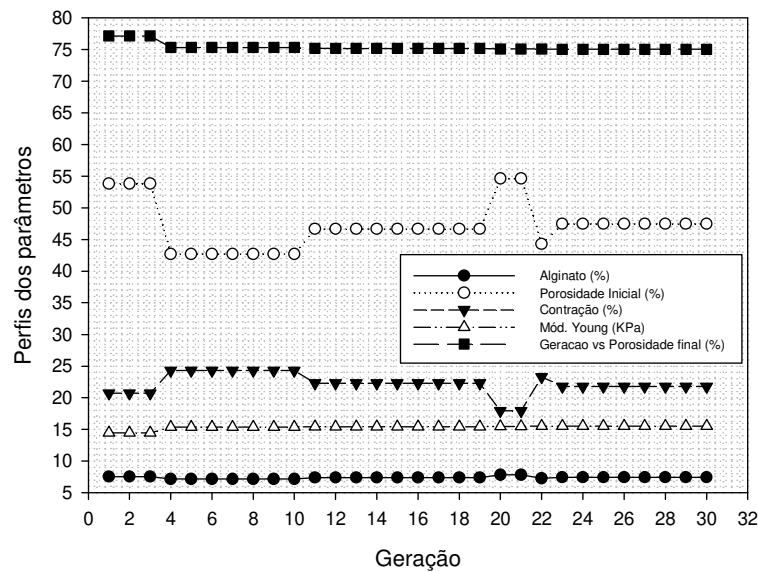


Figura 8. 25 – Perfis da função objetivo, contração e porosidade final obtidos com os melhores valores das variáveis de otimização a cada geração (caso 4: contração < 35% e porosidade final > 75%).

A Tabela 8.7 apresenta um resumo dos cinco casos apresentados acima com os valores ótimos da composição de alginato e da porosidade inicial que conduziram à maximização do módulo de Young, considerando-se diferentes restrições no problema de otimização.

Tabela 8. 7 – Valores ótimos do Módulo de Young para os 4 casos apresentados.

Caso	Restrição	Alginato (%)	Porosidade inicial (%)	Módulo de Young (KPa)
1	Sem restrição	8,00	30,00	23,38
2	Contração > 25%	7,06	30,00	17,52
3	Porosidade Final > 80%	5,79	32,38	12,99
4	Contração < 35% e Porosidade Final > 75%	7,45	47,46	15,51

O estudo desenvolvido neste capítulo é importante para se encontrar as condições ótimas da composição de alginato e de porosidade inicial que devem ser consideradas na construção do *scaffold* para garantir a maximização do módulo de Young sujeita a restrições, após um determinado tempo da fabricação. O *scaffold* a ser implantado em um paciente deve exercer sua função de suporte físico para o crescimento do tecido e propiciar que o tecido possa ocupar o seu espaço e retomar as funções até então desempenhadas pelo *scaffold*. Além disto, o *scaffold* precisa possuir e manter as propriedades mecânicas adequadas, as quais são fundamentalmente dependentes da área do implante.

8.6. Conclusões

Este capítulo apresentou o emprego dos Algoritmos Genéticos como método de otimização de matrizes de suporte em hidrogel (*scaffolds*), baseando-se em modelos mecânicos obtidos experimentalmente. Através dos AGs foram encontrados os valores ótimos da composição de alginato e porosidade inicial do *scaffold* que permitiram a maximização do módulo de Young, sujeito a diferentes restrições. Os AGs mostraram ser uma importante ferramenta para inferir características de *scaffolds* ideais.

CAPÍTULO 9 – Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros

9.1. Conclusões Finais

Um dos casos de estudo apresentados neste trabalho foi o reator de hidrogenação trifásico, caracterizado por um modelo matemático determinístico não-linear e multidimensional, o que representa uma dificuldade de otimização por métodos convencionais.

Utilizando-se de um estudo da lógica *Fuzzy*, também chamada de lógica nebulosa, foi apresentado um estudo da aproximação de modelos *Fuzzy* Takagi-Sugeno ao modelo determinístico a partir de dados obtidos para a produtividade de 2-metil-ciclohexanol e para a conversão de o-cresol.

Com o objetivo de otimizar o reator, os Algoritmos Genéticos foram acoplados ao modelo determinístico do reator, para encontrar as condições de alimentação ótimas que conduziram ao estado estacionário caracterizado pelo melhor desempenho do reator em termos da máxima produtividade do produto formado (2-metil-ciclohexanol) sujeita a restrição de conversão mínima do reagente.

Foram empregados os AGs, tanto na codificação binária quanto na codificação real. Os AGs, sob ambas as formas de codificação, conseguiram obter a solução ótima para o estado estacionário do reator, mesmo tendo sido usado um modelo não-linear e de alta dimensionalidade, confirmando a eficiência dos AGs para resolver problemas de otimização.

Os parâmetros estatisticamente significativos do AG de codificação binária foram determinados por meio de um planejamento fatorial fracionário. Definidos os parâmetros estatisticamente significativos, foi feito um planejamento composto central para encontrar os valores ótimos destes parâmetros. Os resultados obtidos, quando se empregou os parâmetros do AG otimizados, mostraram-se bastante superiores aos resultados obtidos com os parâmetros do AG não-otimizados.

Para os AGs de codificação real, também foi feito um estudo dos parâmetros estatisticamente significativos do código, determinando-se aqueles que exercem influência sobre o desempenho do AG na busca pela solução ótima. Este estudo foi importante para eliminar os parâmetros não-significativos, facilitando a implementação dos AGs de codificação real em aplicações futuras.

O AG binário mostrou-se superior ao AG real no que diz respeito à maximização da função objetivo e menor tempo computacional. O tempo computacional gasto na otimização por AGs foi baixo, o que os coloca como uma técnica com potencial aplicação em tempo real.

As abordagens de otimização em uma e em duas camadas foram consideradas no que se refere ao desenvolvimento das ferramentas para suas implementações.

Os valores ótimos das variáveis manipuladas e os *set-points* das variáveis controladas foram determinados pelos AGs e enviados para o controlador DMC. As variáveis controladas (concentração de o-cresol na saída do reator e temperatura de saída do reator) retornam ao *set-point* otimizado pelo AGs quando perturbações de carga ocorrem.

Para a estratégia em uma camada, verificou-se que a função objetivo do controlador/otimizador envolve parcelas do controle dinâmico e da otimização econômica e pode ser resolvida por AGs.

Os AGs também foram empregados em um caso de estudo de otimização de matrizes de suporte em hidrogel (*scaffolds*), baseando-se em modelos mecânicos obtidos experimentalmente. Através dos AGs, foram encontradas as propriedades mecânicas ótimas dos *scaffolds*, o que coloca os AGs como uma importante ferramenta para inferir características de *scaffolds* ideais.

9.2. Sugestões para Trabalhos Futuros

9.2.1. Sintonia dos parâmetros do Controlador DMC através de AGs

A sintonia dos parâmetros de um controlador preditivo tem sido reportada por vários pesquisadores. Sistemáticos procedimentos de ajuste por tentativa-e-erro já foram propostos.

Outras estratégias de sintonia têm sido concentradas em aspectos específicos, tais como sintonia para a estabilidade, robustez e desempenho do controlador. Embora alguns desses métodos proporcionem um projeto completo do controlador, eles também requerem ferramentas de análises sofisticadas e um conhecimento avançado em conceitos de controle para sua implementação. Assim, existe a necessidade de desenvolvimento de estratégias de sintonia mais simples para o ajuste dos parâmetros (Shridar e Cooper, 1997).

Rodrigues, J.A.D. *et al.* (2005) empregaram a metodologia do planejamento fatorial completo para determinar um conjunto ótimo de parâmetros de um Controlador Preditivo Generalizado (GPC) aplicado a um bioreator de penicilina, estimando a influência dos parâmetros de projeto do controlador na Integral do Erro Absoluto entre a variável controlada e o *set-point* (IAE). Os parâmetros de controle analisados foram os horizontes de predição e controle, o fator de supressão, o parâmetro da trajetória de referência e o parâmetro da ação integral. O estudo mostrou que o parâmetro do controlador de maior influência sobre a resposta do sistema foi o fator de supressão.

A sintonia do controlador preditivo DMC é um desafio em virtude do número de parâmetros de ajuste que afetam o desempenho em malha fechada. Os parâmetros de ajuste são o horizonte de modelo (NM), o horizonte de predição (NP), o horizonte de controle (NC) e o fator de supressão (f) e o tempo de amostragem (tam). O primeiro passo na sintonia do DMC é a seleção de um conjunto apropriado de parâmetros de ajuste dentre os disponíveis do DMC. Limitações práticas frequentemente restringem a disponibilidade do tempo de amostragem como um parâmetro de ajuste (Aström e Wittenmark, 1989).

No presente trabalho são considerados como parâmetros de ajuste, o horizonte de modelo (NM), o horizonte de predição (NP), o horizonte de controle (NC) e o fator de supressão (f). No Capítulo 6, foram apresentadas estruturas de controle quando os parâmetros do DMC foram escolhidos pelo método da tentativa-e-erro. A seguir é mostrado o emprego dos AGs como método para sintonia dos parâmetros do DMC.

Considerando os quatro parâmetros de ajuste do DMC citados acima, a proposta é empregar os AGs com o objetivo de encontrar o conjunto ótimo destes parâmetros que minimize uma determinada função objetivo, sujeita a restrições.

Como função objetivo, pode ser considerada a minimização do quadrado da diferença entre a saída predita e a saída medida. O horizonte de modelo deve ser maior que o de predição e o horizonte de predição maior que o de controle sendo, portanto, considerados restrições do problema de otimização. Os limites inferiores e superiores dos parâmetros são baseados nos valores encontrados no trabalho de Rezende (2003) e Rezende *et al.* (2004).

Assim, por exemplo, para o controle da concentração de o-cresol na fase líquida na saída do reator, o problema de otimização pode ser postulado da seguinte forma:

$$\begin{array}{ll}
 \text{Minimize} & (cmed(1)-setp(1))^{**2} \\
 \text{Sujeito a} & NM > NP \\
 & NP > NC \\
 & 1 < NM < 6 \\
 & 1 < NP < 5 \\
 & 1 < NC < 5 \\
 & 0,00001 < f < 0,00005
 \end{array} \tag{9.1}$$

Onde *cmed* é o valor da saída predita e *setp* é o valor do *set-point* desejado.

Para encontrar o melhor conjunto de parâmetros do DMC que minimizem a função objetivo sujeita a restrições, propõe-se empregar o AG de codificação binária apresentado no Capítulo 4.

9.2.2. Implementação da Estratégia de Otimização em Uma Camada

Sugere-se como trabalho futuro, implementar a estratégia de otimização em uma camada através da definição apresentada no Capítulo 7, bem como da formulação da função objetivo do controlador/otimizador e dos algoritmos propostos para resolver o problema de otimização.

9.2.3. Emprego de modelo *Fuzzy* Takagi-Sugeno como modelo interno do controlador preditivo

A partir do estudo da aproximação de modelos *Fuzzy* Takagi-Sugeno ao modelo determinístico apresentado no Capítulo 2, sugere-se a obtenção de uma maior aproximação do modelo *Fuzzy* ao modelo determinístico através de um melhor ajuste dos parâmetros e da escolha apropriada da função de pertinência e do número de funções requeridas.

Uma vez construídos o modelo *Fuzzy*, sugere-se o emprego de tal modelo como modelo interno do controlador preditivo.

9.2.4. Emprego dos AGs na Biofabricação por Prototipagem Rápida

Como trabalho futuro, sugere-se a aplicação dos Algoritmos Genéticos na otimização topológica de *scaffolds* visando a obtenção de propriedades mecânicas ótimas.

O estudo da degradação de diferentes biomateriais para a construção de *scaffolds*, além do já iniciado para o alginato.

9.2.5. Emprego dos AGs na Estereolitografia da Prototipagem Rápida

A Estereolitografia, uma das técnicas da Prototipagem Rápida, é um processo de manufatura que utiliza *laser* UV para criar sucessivas seções cruzadas de um objeto 3D dentro de um líquido fotopolimérico. O conceito básico da Estereolitografia é a manufatura de camadas nas quais estruturas tridimensionais são compostas pelo método aditivo de

material, camada a camada, em 2D (superfícies fatiadas), obtidas da triangularização e fatiamento de um objeto volumétrico criado em sistema CAD. Algumas das principais variáveis de entrada deste sistema são a composição de fotoiniciador na resina polimérica e a potência do laser. Com o auxílio dos Algoritmos Genéticos, encontrando-se os valores ótimos para estas variáveis, pode-se obter um melhor cenário para a Estereolitografia e, conseqüentemente, produzir-se objetos com melhor qualidade e com custos mais reduzidos.

Referências Bibliográficas

ADETOLA, V., GUAY, M. Adaptive output feedback extremum seeking receding horizon control of linear systems. *Journal of Process Control*, 16, 521–533, 2006.

ALMEIDA, H.A. Design and optimisation of scaffolds for tissue engineering, Lisboa, Portugal: Instituto Superior Técnico, 2006, Tese (Mestrado).

ANGIRA, R., BABU, B.V. Optimization of process synthesis and design problems: A modified differential evolution approach. *Chemical Engineering Science*, 61, 4707-4721. 2006.

ARUMUGAM, M.S., RAO, M.V.C., PALANIAPPAN, R. New hybrid genetic operators for real coded genetic algorithm to compute optimal control of a class of hybrid systems, *Applied Soft Computing*, 6, 38-52, 6, 2005.

ASTRÖM, J.A. WITTENMARK, B. *Adaptive Control*, Addison-Wesley Publishing Company, 1989.

BARREIRA, M.N., VASCO DE TOLEDO, E.C., MACIEL FILHO, R., ENRIQUE, M.G. Use of Different Numerical Solution Approaches for a Three-Phase Slurry Catalytic Reactor Model, *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, 1, A53, 2003.

BARTASSON, M.C. *Modelagem e simulação de um processo de copolimerização pelo uso de lógica nebulosa e modelo determinístico*. Campinas, SP: Universidade Estadual de Campinas, 2005, Tese (Mestrado).

BÁRTOLO, P.J., ALMEIDA, H.A., REZENDE, R.A., LAOUI, T., BIDANDA, B. Advanced Processes To Fabricate Scaffolds For Tissue Engineering, in *Virtual Prototyping & Biomanufacturing in Medical Applications*, Editado por B. Bidanda e P.J. Bártole, Springer (*in press*), 2007.

BÁRTOLO, P.J., ALMEIDA, H.A., LAOUI, T. Rapid Prototyping and Manufacturing for Tissue Engineering Scaffolds, *International Journal of Materials and Product Technology* (in press), 2007.

BASKAR, S., SUBBARAJ, P., RAO, M.V.C. Hybrid real coded genetic algorithm solution to economic dispatch problem. *Comp. and Electrical Eng.*, 29, 407-419, 2003.

BOOZARJOMEHRY, R.B., MASOORI M. Which method is better for the kinetic modeling: Decimal encoded or Binary Genetic Algorithm?. *Chemical Engineering Journal* 130, 29-37, 2007.

CAMPELLO, R.J.G.B. *Arquiteturas e Metodologias para Modelagem e Controle de Sistemas Complexos Utilizando Ferramentas Clássicas e Modernas*. Campinas, SP: Faculdade de Engenharia Elétrica, Universidade Estadual de Campinas, 2002, Tese (Doutorado).

CARROLL, D.L. Genetic Algorithms and Optimizing Chemical Oxygen-Iodine Lasers. *Developments in Theoretical and Applied Mechanics*, v. XVIII, School of Engineering, pp. 411-424, 1996.

CARROLL, D.L. Carroll's FORTRAN Genetic Algorithm Driver, Em: <http://cuaerospace.com/carroll/ga.html> último acesso em 04 de Abril, 2007.

COSTA, C.B.B., MACIEL FILHO, R. Evaluation of optimization techniques and control variable formulations for a batch cooling crystallization process, *Chem, Eng, Science*, v. 60, p. 5312-5322, 2005.

COSTA, C.B.B. *Modelagem detalhada e otimização de processos de cristalização*. Campinas, SP: Universidade Estadual de Campinas, 2006, Tese (Doutorado).

COSTA, C.B.B. , RIVERA, E.A.C , REZENDE, M.C.A.F. , WOLF MACIEL, M.R., MACIEL FILHO, R. Prior Detection of Genetic Algorithm Significant Parameters: Coupling Factorial Design Technique to Genetic Algorithm. *Chemical Engineering Science*, v. 62, p. 4780-4801, 2007.

CUTLER, C.R., RAMAKER, B.L. Dynamic matrix control: a computer control algorithm, In: *AIChE 86th National Meeting*, paper 51-B, Houston, April, 1979.

DEB, K. Genetic algorithm in search and optimization: the technique and applications. In: *Proceedings of International Workshop on Soft Computing and Intelligent Systems*, Machine Intelligence Unit, Indian Statistical Institute, Calcutta, India, pp. 58-87, 1998.

DEB, K. An introduction to genetic algorithms. *Sadhana-Academy Proceedings in Engineering Sciences*, 24, 293-315 Part 4-5, 1999.

DEB, K. An efficient constraint handling method for genetic algorithms, *Computer Methods in Applied Mechanics Engineering*, 186, 311-338, 2000.

DUDEK, G. Unit commitment by genetic algorithm with specialized search operators. *Electric Power Systems Research*, 72, 299-308, 2004.

GOLDBERG, D.E. *Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning* Addison-Wesley Publishing Company, INC, 1989.

GONZÁLEZ, A.H., ODLOAK, D., MARCHETTI, J.L. Predictive control applied to heat-exchanger networks, *Chemical Engineering and Processing*, 45, 661-671, 2006.

GUAY, M., PETERS, N. Real-time dynamic optimization of nonlinear systems: A flatness-based approach. *Computers and Chemical Engineering*, 30, 709–721, 2006.

HICHRI, H., ARMAND, A., ANDRIEU, J. Kinetics and slurry type reactor modelling during catalytic hydrogenation of o-cresol on Ni/SiO₂. *Chem. Eng. Process.*, v. 30, p. 133-140, 1991.

HOLLAND, J.H. *Adaptation in Natural and Artificial Systems*, University of Michigan Press, 1975.

HUSSAIN, T.S. Em: <http://neo.lcc.uma.es/cEA-web/documents/hussain98.pdf> último acesso em 22 de Fevereiro de 2007.

HUTMACHER, D.W., SITTINGER, M., RISBUD, M.V. *Scaffold-based tissue engineering: rationale for computer-aided design and solid free-form fabrication systems. Trends in Biotechnology*, 22 (7), 354-362, July 2004.

KATARE, S., BHAN, A., CARUTHERS, J.M., NICHOLAS DELGASS, W., VENKATASUBRAMANIAN, V. A hybrid genetic algorithms for efficient parameter estimation of large kinetic models. *Computers and Chemical Engineering*, 28, 2569-2581, 2004.

LACKS, D.J. Real-Time Optimization in Nonlinear Chemical Processes: Need For Global Optimizer. *AIChE Journal*. v.49, no.11, 2003.

LEBOREIRO, J., ACEVEDO, J. Mejorando la eficiencia de un algoritmo genetico para la optimización de procesos usando simuladores comerciales. *Información Tecnológica*, 13, 125-135, 2002.

LEBOREIRO, J., ACEVEDO, J. Processes synthesis and design of distillation sequences using modular simulations: a genetic algorithm framework, *Comps. and Chem. Eng.*, v. 28, p. 1223-1236, 2004.

LEONG, K.F., CHEAH, C.M., CHUA, C-K. Solid freeform fabrication of three-dimensional scaffolds for engineering replacement tissues and organs. *Biomaterials*, 24, 2363-2378, 2003.

LIMA, N.M.N. *Modelagem e Controle Híbrido Preditivo por Lógica Fuzzy de Processos de Polimerização*. Campinas, SP: Universidade Estadual de Campinas, 2006, Tese (Mestrado).

MARIANO, A., *Modelagem determinística de reatores de lama catalíticos trifásicos: aplicação para reatores de hidrogenação*. Campinas, SP: Universidade Estadual de Campinas, 2003, Tese (Mestrado).

MELEIRO, L.A.C. *Projeto e Aplicação de Controladores baseados em Modelos Lineares, Neurais e Nebulosos*. Campinas, SP: Universidade Estadual de Campinas, 2002, Tese (Doutorado).

MELO, D.N.C., VASCO DE TOLEDO, E.C., SANTOS, M.M., HASAN, S.D.M., WOLF MACIEL, M.R., MACIEL FILHO, R. Off-line optimization and control for real time integration of a three-phase hydrogenation catalytic reactor, *Computers and Chemical Engineering* 29, 2485–2493, 2005.

MENDES, A., LAGOA, R., BÁRTOLO, P.J., Rapid Prototyping System for Tissue Engineering, *Proceedings of Advanced Research in Virtual and Rapid Prototyping*, School of Technology and Management, Polytechnic Institute of Leiria, Portugal, ISBN 972 99023 05, 2003.

MICHALEWICZ, Z. *Genetic Algorithms + Data Structures = Evolution Programs*, Springer Verlag, NY, 1992.

MONTERO, G., RODRÍGUES, E., MONTENEGRO, R., ESCOBAR, J.M., GONZÁLEZ-YUSTE, J.M. Genetic algorithms for an improved parameter estimation with local refinement of tetrahedral meshes in a wind model. *Advances in Engineering Software*, 36, 3-10, 2005.

REECE, G.P., PATRICK, C.W.Jr. Tissue engineered construct design principles. *Frontiers in Tissue Engineering*, 166-196, 1998.

REZENDE, M.C.A.F. *Controle e Otimização de um Reator de Hidrogenação Trifásico*. Campinas, SP: Universidade Estadual de Campinas, 2003, Tese (Mestrado).

REZENDE, M.C.A.F., COSTA, A. C., MACIEL FILHO, R. Control and Optimization of a Three Phase Industrial Hydrogenation Reactor. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, v. 2, A21, 2004.

REZENDE, M.C.A.F, COSTA, A.C., MACIEL FILHO, R. Optimization for Real Time Process Integration of a Three Phase Hydrogenation Reactor by Genetic Algorithms, 7th *World Congress of Chemical Engineering*, Glasgow, 2005.

REZENDE, M.C.A.F, COSTA, A.C., MACIEL FILHO, R., REZENDE, R.A. Algorithms for real-time integrated optimization and control: one layer approach. *International Symposium on Advanced Control of Chemical Processes (ADCHEM)*, Gramado, RS, 2, 833-838, 2006.

REZENDE, M.C.A.F, COSTA, A.C., MACIEL FILHO, R., BÁRTOLO, P.J.S., REZENDE, R.A. A systematic procedure to set up the genetic algorithm parameters for large scale systems: application to a three-phase catalytic reactor. *Chemical Engineering Transactions*, v.11, 827-832, 2007.

REZENDE, M.C.A.F., COSTA, C.B.B., COSTA, A.C., WOLF MACIEL, M.R., MACIEL FILHO, R. Optimization of a Large Scale Industrial Reactor by Genetic Algorithms. *Chemical Engineering Science*, doi:10.1016/j.ces.2007.09.001, 2007.

REZENDE, R.A. *Análise de Parâmetros Físicos e Operacionais no Fenômeno da Cura Localizada do Processo Termolitográfico da Prototipagem Rápida*. Campinas, SP: Universidade Estadual de Campinas, 2006, Tese (Mestrado).

REZENDE, R.A., BÁRTOLO, P.J., MENDES, A., MACIEL FILHO, R. Experimental Characterisation of The Alginate Gelification Process for Rapid Prototyping, *Chemical Engineering Transactions*, v.11, 509-514, 2007.

RODRIGUES, J.A.D., TOLEDO, E.C.V., MACIEL FILHO, R. A tuned approach of the predictive-adaptative GPC controller applied to a fed-batch bioreactor using complete factorial design, *Computers and Chemical Engineering*, 26, 1493-1500, 2002.

SARKAR, D., MODAK, J.M. Optimisation of fed-batch bioreactors using genetic algorithms. *Chemical Engineering Science*, 58, 2283-2296, 2003.

SCHIAVON Jr. A.L., CORRÊA, R.G. Applications of an alternative formulation for one-layer real time optimization, *Braz. J. Chem. Eng.* vol. 17, n.4-7, São Paulo, 2000.

SEBORG, D.E. *Advances in Control*, Springer Verlag, Capítulo: A Prespective on Advanced Strategies for Process Control (Revisited), 1999.

SHOPOVA, E.G., VAKLIEVA-BANCHEVA, N.G. BASIC – A genetic algorithm for engineering problems solution. *Computers and Chemical Engineering*, 30, 1293–1309, 2006.

SHRIDHAR, R., COOPER, D.J. A Tuning Strategy for Unconstrained SISO Model Predictive Control, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 36, 729-746, 1997.

SILVA, G.A.S. *Análise do Comportamento de Modelos Dinâmicos com Ruído Caótico, utilizando Controle baseado em Lógica Nebulosa*. São José dos Campos, SP: Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE), 2001, Tese (Mestrado).

SILVA, J.E.L. *Simulação e Controle Preditivo Linear (com Modelo de Convolução) e Não-Linear (com Modelo Baseado em Redes Neurais Artificiais) de Colunas Recheadas de Absorção com Reação Química*. Campinas, SP. Universidade Estadual de Campinas, 1997, Tese (Mestrado).

TRESMONDI, A. *Integração de Processos Químicos em Tempo Real: Aplicação para o Processo de Oxidação de Cumeno*. Campinas, SP: Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), 2003. Tese (Doutorado).

TSANG, V.L., BHATIA, S.N. Three-dimensional tissue fabrication. *Advanced Drug Delivery Reviews*, 56, 1635-1647, 2004.

VASCO DE TOLEDO, E.C., SANTANA, P.L., WOLF MACIEL, M.R., MACIEL FILHO, R. Dynamic Modelling of a three-phase catalytic slurry reactor. *Chemical Engineering Science*, 56, 6055-6061, 2001.

VICTORINO, I.R.S. *Otimização de um Processo Industrial de Produção de Álcool Cíclico Utilizando Algoritmos Genéticos*. Campinas, SP: Universidade Estadual de Campinas, (2005), Tese (Doutorado).

YEDDER, A.B.H. FORTRAN Genetic Algorithm Driver. Em: <http://cermics.enpc.fr/~benhaj/corps.html> último acesso em 04 de Abril de 2007.

ZADEH, L.A. Outline of a new approach to the analysis of complex systems and decision processes, *IEEE Trans. Systems, Man and Cybernetics* SMC-3, 28-44

ZANIN, A.C. *Implementação Industrial de um Otimizador em Tempo Real*, São Paulo, SP: Universidade de São Paulo, 2001, Tese (Doutorado).

ZANIN, A.C., TVRZSKÁ DE GOUVÊA, M., ODLOAK, D. Integrating real-time optimization into the model predictive controller of the FCC system. *Control Engineering Practice* 10, 819–831, 2002.

Apêndice I – Lógica *Fuzzy* ou Nebulosa

A lógica *Fuzzy* ou Nebulosa pode ser usada para a modelagem, estimação e controle de processos. A modelagem descreve um processo em termos matemáticos de modo a ser possível prever o seu comportamento dinâmico ou estacionário. No campo de modelagem, a lógica *Fuzzy* pode ser usada com vantagem sobre os modelos fenomenológicos devido à sua rápida implementação e relativa facilidade em tratar sistemas complexos e não-lineares. Na parte de controle de processos, um controlador baseado em lógica *Fuzzy* pode ser projetado para comportar-se conforme o raciocínio “dedutivo” isto é, o processo que as pessoas utilizam para inferir conclusões, baseado em informações que elas já conhecem (Shaw e Simões, 1999).

A modelagem *Fuzzy* advém das idéias originais de Zadeh (1973) a respeito da representação de sistemas complexos através de um conjunto de declarações condicionais, denominado algoritmo comportamental *Fuzzy*. Este tipo de algoritmo foi desenvolvido para descrever relações entre variáveis linguísticas com o propósito específico da representação aproximada do comportamento de processos de natureza humana (Campello, 2002).

I.1. Sistema de Lógica *Fuzzy*

Um sistema de lógica *Fuzzy* pode ser expresso matematicamente como uma combinação linear de funções de base *Fuzzy*, e é um aproximador como uma função universal não linear. Um sistema *Fuzzy* possui quatro componentes: regras, *fuzzificador*, máquina de inferência, e *defuzzificador*. A Figura 1 descreve um sistema de lógica *Fuzzy* amplamente usado em controladores nebulosos.

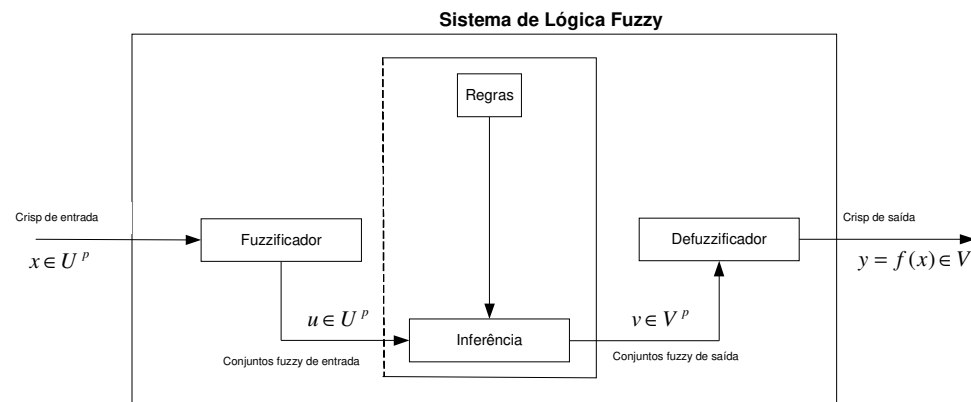


Figura I. 1 – Sistema de lógica *Fuzzy* (Bartasson, 2005).

Em um sistema de múltiplas entradas (x) e múltiplas saídas (y), pode-se aplicar um conjunto de possíveis sinais de entradas, de forma a se obter as respectivas saídas. As operações de teoria de conjuntos fornecem um mapeamento entrada-saída, uma combinação desses x versus y sinais definidos por conjuntos, análogo às funções de transferência da teoria de sistemas lineares.

Um sistema nebuloso de múltiplas entradas e múltiplas saídas pode ser caracterizado por um conjunto de regras da forma:

Se $\text{var}_1 = A$ <conectivo^t> $\text{var}_2 = B$ <conectivo^t> ... **Então** $\text{var}_{01} = C$ <conectivo^t> ... <conectivo^s>

Se $\text{var}_1 = D$ <conectivo^t> $\text{var}_2 = E$ <conectivo^t> ... **Então** $\text{var}_{01} = F$ <conectivo^t> ... <conectivo^s>

.....

.....

onde A , B , C , D e E e F são conjuntos *fuzzy*, <conectivo^t> representa o operador de intersecção *fuzzy*, e <conectivo^s> representa o operador de união *fuzzy*, escolhidos para se expressar a inferência *Fuzzy* desejada. A escolha do método para combinar conjuntos associados as variáveis do sistema tem grande importância na estrutura do controlador (Shaw e Simões, 1999).

Uma base de regras *Fuzzy* é uma representação com potencial interessante por ser proveniente de ambos os tipos de dados: numéricos ou conhecimentos lingüísticos. Uma variável lingüística é expressa por meio de rótulos (*labels*) de conjuntos nebulosos. Por exemplo, a temperatura de um reator pode ser uma variável lingüística assumindo os rótulos: baixa, média e alta. Tais rótulos podem ser descritos matematicamente por conjuntos nebulosos. Para dados, um sistema de lógica *Fuzzy* é unicamente um método de aproximação capaz de incorporar ambos tipos de conhecimento em uma maneira matemática unificada.

Uma vez que as regras tenham sido estabelecidas, o sistema de lógica *Fuzzy* pode ser visto como um mapeador de entradas em saídas, sendo que, a partir de sinais de entrada, o sistema mapeia sinais de saída, e este mapeamento pode ser expresso quantitativamente como $y = f(x)$, sendo que, podem ser obtidas fórmulas implícitas para um mapeamento não linear entre x e y (Bartasson, 2005).

As partes que compõem um sistema *Fuzzy* serão descritas a seguir.

I.1.1. Fuzzificação

Fuzzificação é um mapeamento do domínio de números reais (em geral discretos) para o domínio nebuloso. Isso representa a atribuição de valores lingüísticos, descrições vagas ou qualitativas, definidas por funções de pertinência às variáveis de entrada.

A *fuzzificação* é necessária para ativar as regras que, em termos de variáveis lingüísticas, possuem conjuntos nebulosos associados a elas.

A interface de *fuzzificação* usa funções de pertinência contidas na base de conhecimento, convertendo os sinais de entrada em pertinências contidas em um intervalo $[0,1]$ que pode estar associado a rótulos lingüísticos. Desta forma, as variáveis de entrada são normalizadas em um universo de discurso padronizado. Estas entradas *crisp* são transformadas em conjuntos nebulosos.

A *fuzzificação* é, então, um pré-processamento de categorias ou classes dos sinais de entrada. Quando um sistema nebuloso é aplicado na área de controle em um processo contínuo, os valores discretos (não-*Fuzzy*) das variáveis de entrada podem ser provenientes de sensores das grandezas físicas ou de dispositivos de entrada computadorizados. Um fator de escala pode ser usado para converter os valores reais de entrada para outros que sejam cobertos pelos universos de discursos pré-definidos para cada variável de entrada.

I.1.2. Regras

A base de conhecimento representa o modelo do sistema a ser controlado, sendo constituída pela base de dados (funções de pertinência lingüísticas) e pela base de regras *Fuzzy* lingüísticas. A base de dados fornece as definições numéricas necessárias às funções de pertinência usadas no conjunto de regras *Fuzzy*.

I.1.3. Mecanismo de Inferência *Fuzzy*

O processo de inferência gera ações de controle empregando implicações *Fuzzy* e regras de inferência da lógica *Fuzzy*. Também tem a capacidade de simular tomadas de decisão baseada nos conceitos nebulosos.

Existem normalmente três tipos de mecanismos de inferência em modelos de sistemas nebulosos (Lima, 2006):

- Modelo ‘clássico’ ou ‘lingüístico’, que envolve o modelo de Mamdani Min e o de Larsen,
- Modelo de interpolação, também chamado de modelo ‘*nebuloso* paramétrico’ ou ‘*nebuloso* funcional’, que compreende o modelo de Takagi-Sugeno.
- Modelo relacional, baseado em equações relacionais.

Os modelos clássicos são linguisticamente interpretáveis e proporcionam transparência durante a fase de desenvolvimento. Contudo, a obtenção automática de um conjunto de regras lingüísticas que proporcione uma representação quantitativa e qualitativamente adequada de um dado sistema de interesse a partir de dados desse sistema

não é uma tarefa trivial. Nos modelos Takagi-Sugeno, a solução desse problema é facilitada pela ausência de termos linguísticos associados às regras, o que por outro lado compromete a interpretabilidade das mesmas. Devido à sua característica estrutural constituída de uma composição de diferentes modelos locais, o que usualmente permite aproximações precisas através de um número reduzido de parâmetros, os modelos Takagi-Sugeno têm se mostrado particularmente interessantes para aplicações em controle. Os modelos relacionais constituem uma alternativa intermediária entre os modelos clássicos e os modelos de interpolação, apresentando características importantes tanto sob aspectos numéricos quanto linguísticos (Campello, 2002).

I.1.3.1. Modelo de Takagi-Sugeno

Os modelos *Fuzzy* do tipo Takagi-Sugeno são constituídos por um conjunto de M regras do seguinte formato:

$$L^{(l)} : \text{Se } x_1 \text{ é } F_1^l \text{ e } \dots \text{ e } x_n \text{ é } F_n^l, \text{ então } y^l = c_0^l + c_1^l x_1 + \dots + c_n^l x_n$$

Onde F_i^l são conjuntos nebulosos, c_i são parâmetros reais estimados, y^l é um sistema de saída devido à regra L^l , e $l = 1, 2, \dots, M$. Ou seja, os modelos Takagi-Sugeno consideram regras cuja parte SE é nebulosa, porém a parte ENTÃO é *crisp* – a saída é uma combinação linear de variáveis de entrada (Silva, 2001).

I.1.4. Defuzzificação

Na *defuzzificação*, o valor da variável lingüística de saída inferida pelas regras *Fuzzy* é traduzido num valor discreto. O objetivo é obter um único valor numérico discreto que melhor represente os valores nebulosos inferidos da variável lingüística de saída, ou seja, a distribuição de possibilidades. Assim, a *defuzzificação* é uma transformação inversa que traduz a saída do domínio nebuloso para o domínio discreto.