GLAUCE FREITAS DE SOUZA

**INTEGRAÇÃO DA OTIMIZAÇÃO EM TEMPO REAL COM
CONTROLE PREDITIVO**

SÃO PAULO

2007

GLAUCE FREITAS DE SOUZA

**INTEGRAÇÃO DA OTIMIZAÇÃO EM TEMPO REAL COM
CONTROLE PREDITIVO**

Dissertação apresentada à Escola
Politécnica da Universidade de São
Paulo para obtenção do título de Mestre
em Engenharia

SÃO PAULO

2007

GLAUCE FREITAS DE SOUZA

**INTEGRAÇÃO DA OTIMIZAÇÃO EM TEMPO REAL COM
CONTROLE PREDITIVO**

Dissertação apresentada à Escola
Politécnica da Universidade de São
Paulo para obtenção do título de Mestre
em Engenharia

Área de Concentração:
Engenharia Química

Orientador: Professor Titular
Dr. Darci Odloak

SÃO PAULO

2007

Este exemplar foi revisado e alterado em relação à versão original, sob responsabilidade única do autor e com a anuência de seu orientador.

São Paulo, 08 de maio de 2007.

Assinatura do autor_____

Assinatura do orientador_____

FICHA CATALOGRÁFICA

Souza, Glauce Freitas de
Integração da otimização em tempo real com controle predi-
tivo / G.F. de Souza. – ed.rev. – São Paulo, 2007.
133 p.

Dissertação (Mestrado) – Escola Politécnica da Universidade
de São Paulo. Departamento de Engenharia Química.

1.Controle de processos 2.Controle preditivo 3.Otimização
não linear 4.Programação não linear 5.Engenharia química
I.Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento
de Engenharia Química II.t.

DEDICATÓRIA

Aos meus amores desta vida e da outra.

AGRADECIMENTOS

Ao CNPq pelo suporte financeiro.

Ao meu orientador Prof. Dr. Darci Odloak, pela paciência e tempo dedicado ao longo da realização deste trabalho.

Aos amigos do LSCP pelo excelente convívio nestes dois anos.

As minhas irmãs Flávia e Jéssica, pela ajuda e paciência, aturando meu mau humor durante todos os anos de graduação e pós.

Aos meus pais Márcio e Nanci, pelo amor, amizade, estímulo, apoio nestes 30 anos, criando um lar harmonioso que me propiciou todo bem estar para atingir os meus objetivos.

Ao meu companheiro Daniel pelo incentivo, apoio, amor e por acreditar sempre em mim, mesmo quando eu mesma não acreditava, por ser o meu porto seguro nestes anos de mudança.

À minha filha Catarina por ser a criança maravilhosa que é, pelas aulas assistidas com paciência, pelo amor e carinho.

“Whether you think you can or
you can’t either way you are
right”

Henry Ford
1863 – 1947

RESUMO

Este trabalho tem como objetivo principal o desenvolvimento de uma estratégia de integração da otimização com o controle preditivo multivariável em uma camada. Os problemas de controle e otimização econômica são resolvidos simultaneamente em um mesmo algoritmo. A função objetivo econômica foi inserida no controlador na sua forma diferencial, ou seja, o gradiente da função objetivo econômica. O método foi testado por simulação para o caso do sistema reator regenerador da UFCC (Unit of Fluid Catalytic Cracker). Esta dissertação descreve a estratégia de otimização integrada ao controlador preditivo cuja função objetivo incorpora componentes dinâmicos e estáticos. Para a determinação das condições ótimas do processo no estado estacionário do conversor (unidade de craqueamento catalítico) foi utilizado um modelo empírico do processo. A melhor trajetória para conduzir o processo para o seu ponto ótimo de operação, maximizando lucro ou produto de maior valor agregado, desde que não sejam violadas as restrições de processo, é predita utilizando um modelo dinâmico, obtido através de dados de testes em degrau em um modelo rigoroso. Este modelo linear possibilitou a obtenção das funções de transferência do processo e o modelo em variáveis de estado. O ponto ótimo que é obtido na execução deste algoritmo, leva em consideração a não violação das restrições das variáveis manipuladas e controladas do processo, tanto para o estado estacionário como para o transiente do problema. O problema de otimização não linear resultante é resolvido através de uma rotina de programação quadrática da biblioteca do Matlab.

Uma segunda alternativa apresentada para a estratégia de otimização deste trabalho, é a inclusão do gradiente reduzido na função objetivo do controlador quando são observadas violações das restrições das variáveis controladas. Os resultados simulados através de um modelo não linear rigoroso (Moro&Odloak,1995) mostram um bom desempenho dos algoritmos aqui desenvolvidos tanto com relação aos benefícios econômicos como na estabilização da unidade.

ABSTRACT

This dissertation aims to develop a strategy to integrate the optimization problem of the plant into the model predictive controller in a one layer strategy, for the real time optimization or online optimization. The control and the optimization of the process are computed simultaneously in the same algorithm. The gradient of the economic objective function is included in the cost function of the controller instead of in its regular form. Thereby, this work describes a predictive control strategy, which can be classified as a one layer strategy and whose objective function has to be optimized obeying constraints, which incorporates dynamic and static components. The optimal conditions of the process in the steady state are defined through the use of an empirical process model. Furthermore, the best trajectory to be followed in order to reach the optimal conditions, without violating the constraints, maximizing profit or the production of its more valuable product, is predicted through the use of the dynamic model, that can be obtained through a plant step test. As a result transfer function and state space models are obtained. The optimal operation point is achieved through the execution of the proposed algorithm. Therefore, the solution to the optimization/control problem will always be in a feasible region, in other words, without violating the process manipulated or controlled variable constraints for both stationary and transient states of the problem. The non-linear optimization problem resulted from the implementation of the proposed algorithm is solved through the quadratic programming routine from the Matlab library.

The second online optimization strategy proposed in this work is one that considers the reduced gradient method algorithm modified to evaluate the predicted trajectory. As a result, any violation of the manipulated or controlled variable constraints is prevented and this variable is not considered in the next step of the calculation of the predicted trajectory or even in the search direction of the optimization. Finally the simulations results obtained through the use of a nonlinear rigorous model (Moro&Odloak,1995) presents good performance for the algorithms here proposed, not only related to economic benefits, but also in order to stabilize the unit.

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1-1 - Esquema simplificado da estratégia de otimização em duas camadas	20
Figura 1-2 - Esquema simplificado da estratégia de otimização em uma camada	22
Figura 2-1 - Otimização em três camadas (estrutura clássica).....	27
Figura 2-2 - Otimização em duas camadas (Gouvêa,1997)	28
Figura 2-3 - Otimização em uma camada (Gouvêa, 1997).....	31
Figura 6-1 – Representação esquemática do modelo Kellogg para a unidade FCC	64
Figura 6-2 - Variáveis manipuladas para operação do FCC com maximização da produção de GLP com diferentes pesos da importância da otimização.	76
Figura 6-3 - Variáveis controladas para operação do FCC com maximização da produção de GLP com diferentes pesos da importância da otimização.	79
Figura 6-4 - Função objetivo para operação do FCC com maximização da produção de GLP com diferentes pesos da importância da otimização.	80
Figura 6-5 – Comparação entre os perfis das variáveis manipuladas na simulação com o modelo linear frente a simulação com o modelo rigoroso do processo.....	82
Figura 6-6 - Comparação entre os perfis das variáveis controladas na simulação com o modelo linear frente a simulação com o modelo rigoroso do processo.....	85
Figura 6-7 – Comparação entre os perfis da produção de GLP na simulação com o modelo linear frente a simulação com o modelo rigoroso do processo.	86
Figura 7-1 – Contorno circular da função objetivo e a restrição linear para o exemplo de GRG, Edgar (2001)	88
Figura 7-2 - Variáveis manipuladas para operação do FCC com maximização da produção de GLP em simulação rigorosa do uso do gradiente completo comparado com o uso do gradiente reduzido.....	93
Figura 7-3 - Variáveis manipuladas para operação do FCC com maximização da produção de GLP em simulação rigorosa do uso do gradiente completo comparado com o uso do gradiente reduzido.....	95

Figura 7-4 - Função objetivo econômica para operação do FCC com maximização da produção de GLP em simulação rigorosa do uso do gradiente completo comparado com o uso do gradiente reduzido.....	96
Figura 7-5 – Perfil das variáveis manipuladas frente a alteração da estratégia de otimização.....	100
Figura 7-6 – Perfil das variáveis controladas frente a alteração da estratégia de otimização.....	103
Figura 7-7 – Perfil da Função objetivo GLP durante a mudança de estratégia da otimização.....	104
Figura 7-8 - Perfil da Função objetivo lucro durante a mudança de estratégia da otimização.....	105
Figura 8-1 - Variáveis manipuladas para operação do FCC com otimização da produção de gasolina.	110
Figura 8-2 - Variáveis controladas para operação do FCC com otimização da produção de gasolina.	113
Figura 8-3 - Gráfico da função objetivo econômica – maximização da produção de gasolina	114

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 6-1 Restrições de processo	68
Tabela 6-2 Constantes do modelo de caracterização do rendimento em GLP.....	71
Tabela 6-3 Constantes do modelo de conversão volumétrica	71
Tabela 8-1 Autovalores para o Hessiano da função objetivo econômica da maximização da produção de gasolina.....	123
Tabela 8-2 Autovalores para o Hessiano da função objetivo econômica da maximização da produção do GLP.....	124

RELAÇÃO DE SIGLAS

letras arábicas

A_{est}	... estimativa da severidade
API	... densidade em °API
$A_{v_{TCV}}$	... área de passagem da válvula TCV
c_{TCV}	... abertura da válvula TCV
$CONVV$	... conversão em % volumétrica
$D20$	... densidade 20/4 da carga
$D60$	... densidade 60/60 da carga
f_{eco}	... função objetivo econômica
FSF	... fator de caracterização da carga
$F1$	... constante para o cálculo de CONVV
$F2$	... constante para o cálculo de CONVV
$GLNV$	... rendimento volumétrico da gasolina
$GLPV$	... rendimento volumétrico do GLP
J	... função objetivo do controlador MPC
K_p	... ganho do processo
ODV	... rendimento volumétrico do óleo decantado
PA	... ponto de anilina
P_{otim}	... peso da função objetivo econômica
P_{GLP}	... preço do GLP
P_{GLN}	... preço do GLN
P_{LCO}	... preço do LCO
P_{OD}	... preço do OD
$PEMVF$	... ponto de ebulição da carga
Q	... matriz de pesos positiva definida
R	... matriz de pesos positiva definida
$ratio$	... razão de ar alimentada no 1º estágio do regenerador
R_{ai}	... vazão de ar alimentada no conversor FCC

R_{aii}	... vazão de ar alimentado no $i^{\text{ésimo}}$ estágio do regenerador
R_{tf}	... vazão de gasóleo alimentada no conversor FCC
$RAZCO$	... relação entre catalisador e óleo
S	... teor de enxofre da carga
SEV	... severidade da reação para fins de controle
TCV	... válvula de catalisador regenerado
T_{dii}	... temperatura da fase diluída do $i^{\text{ésimo}}$ estágio do regenerador
T_{dig}	... temperatura da fase diluída geral do regenerador
TNB	... teor de nitrogênio básico
T_{fp}	... temperatura da carga
T_{rgi}	... temperatura da fase densa do $i^{\text{ésimo}}$ estágio do regenerador
T_{rx}	... temperatura do “riser”
$u_{\max}$	... valor superior para a variável manipulada
$u_{\min}$	... valor inferior para a variável manipulada
u^{SP}	... é o “setpoint” / “target” (valor desejado) para a variável manipulada
u_1	... variável manipulada vazão total de ar no regenerador
u_2	... variável manipulada abertura da válvula do catalisador regenerado
u_3	... variável manipulada vazão de carga
u_4	... variável manipulada temperatura da carga
$y_{\max}$	... valor superior para a variável controlada
$y_{\min}$	... valor inferior para a variável controlada
y_1	... variável controlada temperatura no primeiro estágio do regenerador
y_2	... variável controlada temperatura no segundo estágio do regenerador
y_3	... variável controlada severidade
y_4	... variável controlada temperatura na saída do reator

y^{SP} ... “setpoint” / “target” (valor desejado) para a variável controlada

símbolos gregos

β_i ... relação molar entre CO₂ e CO no $i^{\text{ésimo}}$ estágio do regenerador

Δu ... vetor de variações nas variáveis manipuladas

$\Delta u_{\max}$... vetor de variações máximas nas variáveis manipuladas

$\Delta u_{\min}$... vetor de variações mínimas nas variáveis manipuladas

NOMENCLATURA

DCS	...	Distributed Control System
FCC	...	Fluid Catalytic Cracking
GLP	...	Gás Liquefeito de Petróleo
GLN	...	Gasolina
KT	...	Kuhn-Tucker
LCO	...	Óleo Leve de Reciclo
MPC	...	Model Predictive Control
OD	...	Óleo Decantado
ODE	...	Ordinary Differential Equation
PID	...	Proporcional Integral e Derivativo
PL	...	Programação Linear
PNL	...	Programação não linear
PQ	...	Programação Quadrática
RTO	...	Real Time Optimization
QDMC	...	Quadratic Model Predictive Control
SEV	...	Severidade da reação de craqueamento (conversão)
SMB	...	Simulated Moving Bed
UFCC	...	Unit of Fluid Catalytic Cracker
VARICOL	...	Multicolumn continuous separation process

SUMÁRIO

CAPÍTULO 1. INTRODUÇÃO	19
1.1. <i>Necessidade do Otimizador/Controlador.....</i>	<i>19</i>
1.2. <i>Otimização em controle de processos.....</i>	<i>20</i>
1.3. <i>Motivação.....</i>	<i>22</i>
1.4. <i>Apresentação da dissertação.....</i>	<i>23</i>
1.5. <i>Objetivos do trabalho</i>	<i>24</i>
CAPÍTULO 2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	26
2.1. <i>Estratégias de otimização em tempo real com controle preditivo</i>	<i>26</i>
CAPÍTULO 3. CONTROLE PREDITIVO	33
3.1. <i>Formulação do modelo em variáveis de estado.....</i>	<i>34</i>
3.2. <i>Filtro de Kalman para estimativa de estado de sistemas em variáveis de estado.....</i>	<i>39</i>
3.3. <i>MPC (Model Predictive Control) convencional.....</i>	<i>43</i>
3.4. <i>MPC convencional em duas camadas</i>	<i>46</i>
CAPÍTULO 4. INTEGRAÇÃO DO CONTROLE PREDITIVO À OTIMIZAÇÃO	50
4.1. <i>Algoritmo MPC com otimização em duas camadas.....</i>	<i>50</i>
4.2. <i>Algoritmo MPC com otimização em três camadas.....</i>	<i>53</i>
4.3. <i>MPC com otimização em uma camada.....</i>	<i>54</i>
CAPÍTULO 5. ALGORITMO PROPOSTO COM OTIMIZAÇÃO SIMPLIFICADA	58
CAPÍTULO 6. APLICAÇÃO DO ALGORITMO PROPOSTO NA OTIMIZAÇÃO DO FCC	63
6.1. <i>A unidade FCC – descrição do processo.....</i>	<i>63</i>
6.2. <i>O problema de controle na unidade FCC.....</i>	<i>66</i>
6.3. <i>Modelos.....</i>	<i>69</i>
6.4. <i>Objetivos da otimização e controle.....</i>	<i>70</i>
6.4.1. <i>O modelo para cálculo dos objetivos econômicos.....</i>	<i>70</i>
6.5. <i>Aplicação do algoritmo ao FCC.....</i>	<i>74</i>
6.5.1. <i>Simulação do processo com modelo linear.....</i>	<i>74</i>
6.5.2. <i>Simulação rigorosa do processo.....</i>	<i>81</i>

CAPÍTULO 7. ADAPTAÇÃO DO MÉTODO DO GRADIENTE REDUZIDO PARA OTIMIZAÇÃO EM TEMPO REAL	87
7.1. <i>Introdução</i>	87
7.2. <i>O método do gradiente reduzido.....</i>	88
7.3. <i>Aplicação do novo controlador ao FCC.....</i>	91
7.4. <i>Simulação da mudança de campanha durante a otimização</i>	97
7.5. <i>Comentários.....</i>	106
 CAPÍTULO 8. ANÁLISE DA CONVERGÊNCIA DA OTIMIZAÇÃO ECONÔMICA COM O ALGORITMO PROPOSTO.....	107
8.1. <i>Introdução</i>	107
8.2. <i>Condições necessárias e suficientes para o extremo local</i>	115
8.2.1. <i>Programação não linear com restrições.....</i>	117
 CAPÍTULO 9. CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA A CONTINUIDADE DOS ESTUDOS...	125
9.1. <i>Sugestões para a continuidade dos estudos</i>	127
 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS:	128
 APÊNDICE A - MODELO DINÂMICO DO CONVERSOR FCC	133

CAPÍTULO 1. INTRODUÇÃO

1.1. Necessidade do Otimizador/Controlador

Para um engenheiro de processos, o propósito de um sistema de controle não é primeiramente manter as variáveis em seus “setpoint” da melhor maneira possível ou detectar mudanças nos “setpoint”, mas operar a planta de modo a maximizar o retorno do lucro líquido na presença de um distúrbio (Engell, 2006). Por outro lado a operação da planta além de trazer o retorno esperado deve ser estável, assim as ações de controle devem ser suaves e rápidas, permitindo que as variáveis controladas atinjam rapidamente os valores desejados.

Backx et al. (2000) insistem na necessidade de operações dinâmicas nos processos industriais em uma economia crescente voltada para o mercado, onde as operações na planta estão baseadas numa cadeia de suprimentos flexível focando em uma produção “just-in-time” de maneira a manter a competitividade. Minimizar custos de operação enquanto mantendo a qualidade desejável do produto neste ambiente é consideravelmente mais difícil do que numa produção continua com mudanças esporádicas e, isto não pode ser atingido somente com operadores experientes e gerentes utilizando todo o seu conhecimento sobre o desempenho da planta. Operações ágeis e rentáveis demandam por uma nova abordagem de integração do controle de processos com a operação dos processos.

Visando esta contribuição, utilizamos a opção da otimização direta ou “on-line”, em uma camada (Zanin, 2001) ou otimização completa de controle (Rolandi e Romagnoli, 2005).

O esquema que será apresentado aqui contém a otimização econômica integrada dentro do controlador MPC linear.

Progressos recentes na computação numérica e nos algoritmos de otimização permitiram a alteração da estrutura de duas camadas tradicionalmente usada na otimização “on-line”, para uma estrutura mais simples onde a otimização e o

controle são integrados em um único bloco. Nesta abordagem, os graus de liberdade disponíveis do processo são usados diretamente para otimizar uma função econômica de custo no final de um horizonte de predição usando um modelo não-linear rigoroso do processo. A sintonia dos parâmetros de qualidade, que são usualmente formulados como uma trajetória ou problema de rejeição do distúrbio, podem ser integrados na otimização por meio de restrições adicionais que devem ser satisfeitas dentro do horizonte de predição (Engell, 2006).

1.2. Otimização em controle de processos

Uma maneira de integrar a otimização com o controle de processos é usar multicamadas, também conhecida como estrutura hierárquica (Kwong, 1992), que pode ser representada de maneira simplificada como mostrada na figura 1-1.

Figura 1-1 - Esquema simplificado da estratégia de otimização em duas camadas

A camada de otimização busca (baseada no modelo econômico) as melhores condições de operação para o processo. A camada de regulação realiza as ações de controle. A camada do processo contém as operações unitárias e a instrumentação da planta.

Mas qual é a melhor forma de interação entre a camada de otimização e a de controle regulatório?

Existem várias formas de interação, a saber:

- (a) A otimização ocorre separadamente e “setpoint” de operação são implementados na planta por operadores. Foi observado por Latour (1979) que esta forma de iteração não utiliza todo o potencial benéfico da otimização em tempo real do estado estacionário.
- (b) A otimização do estado estacionário é realizada em tempo real em um intervalo de tempo maior do que o das ações de controle (Kwong, 1992). Isto é, quando os “setpoint” são alterados, espera-se um tempo até que a planta atinja um novo estado estacionário e assim possam ser calculados novos “setpoint”, assim para plantas que sofrem muitos distúrbios, os “setpoint” de otimização terão baixa acuracidade. Os “setpoint” de otimização são calculados na camada de otimização e então enviados para a estratégia de controle avançado (geralmente um controlador preditivo – MPC – Model Predictive Control) localizado no nível do controle.
- (c) Quando a otimização e o controle são realizados em uma mesma camada, o problema da otimização econômica está incluso no controlador preditivo (Gouvêa & Odloak, 1998)

Na primeira estrutura apresentada acima, as atividades de otimização e regulação são completamente independentes. Na segunda estrutura (figura 1-1) existe uma forte interação entre as camadas, mas suas ações são realizadas em procedimentos distintos. Na última estrutura apresentada, a otimização e o controle formam uma única camada que calcula as ações de controle que levam em consideração as melhores condições operacionais do processo. O esquema simplificado dessa estrutura pode ser observado na figura 1-2.

As duas últimas estruturas são as estratégias de otimização em tempo real mais comentadas na literatura. O controle preditivo define o futuro (ou a predição) do estado estacionário do processo e a otimização inclui todas as restrições do processo. Instabilidade na operação devido esta forma de iteração pode ocorrer se ocorrer um distúrbio no processo ao mesmo tempo em que os “setpoint” estão sendo alterados (Gouvêa & Odloak, 1998).

Figura 1-2 - Esquema simplificado da estratégia de otimização em uma camada

Na estrutura proposta por Schiavon & Corrêa (1998) a camada de controle regulatório é baseada em um QDMC (controle preditivo quadrático) com restrições e a camada de otimização resolve um problema de programação não linear, minimizando o quadrado da diferença entre os “setpoint” e as variáveis controladas ao longo do horizonte de predição. Apenas a primeira ação de controle é implementada. A predição é realizada utilizando o modelo de convolução. O modelo de convolução calcula o valor predito das saídas (variáveis controladas) através da entrada (variável manipulada) no instante atual (k) e dos instantes passados dentro do horizonte do modelo.

1.3. Motivação

A idéia inicial para o desenvolvimento deste trabalho surgiu da necessidade de uma estratégia de otimização integrada ao controlador que tenha as vantagens daquelas já presentes na literatura. Contudo esta nova estratégia deve atentar para o problema de tempo computacional elevado e da convergência do problema de otimização em tempo real quando integrado ao controlador MPC.

Esta estratégia possibilita que as restrições operacionais possam ser facilmente incluídas, haja vista que o problema resultante do otimizador/controlador corresponde a um problema de PNL. Outro benefício desta abordagem é a

possibilidade de incluir dinamicamente restrições nas ações de controle que é importante para se evitar danos operacionais nas válvulas de controle, causados por variações abruptas na sua abertura.

Nos estudos apresentados na literatura a estrutura de uma camada mesmo apresentando um problema de excessivo tempo de computação e possibilidade de não convergência ou até mesmo uma convergência para uma solução local inaceitável é uma estratégia que apresentou superioridade na manutenção de operações suaves dos processos (Zanin, 2001). Esta estratégia propicia melhor sincronismo entre as ações de controle em função de o algoritmo considerar o problema dinâmico e econômico simultaneamente e devido à ausência de uma camada intermediária entre o algoritmo de otimização e o controle regulatório que acaba modificando os valores ótimos das variáveis manipuladas em função do controle dinâmico.

1.4. Apresentação da dissertação

Finalizado o capítulo da introdução, a dissertação ainda apresenta outros 8 capítulos que serão descritos a seguir:

No capítulo 2 é realizada uma revisão bibliográfica dos trabalhos que estudam e visam contribuições para a otimização “online” ou em tempo real de processos químicos. Para efeito de comparações, em capítulos futuros ainda será realizada uma revisão de outras estratégias de integração da otimização com o controle de processos, sendo elas a de duas e a de três camadas.

O capítulo 3 contém a formulação utilizada para a obtenção dos modelos em variáveis de estado que serão utilizados para o controle preditivo, bem como os algoritmos que descrevem o MPC (Model Predictive Control) convencional e uma adaptação do mesmo em duas camadas. No Apêndice A estão descritas todas as funções de transferência do sistema FCC.

No capítulo 4 são apresentadas as possíveis formas de integração do controle preditivo à otimização. São elas, a saber: duas camadas, três camadas e em uma camada, também denominadas na literatura como otimização em tempo real – Real time optimization (RTO) ou otimização “online”.

O Capítulo 5 descreve o algoritmo proposto neste trabalho com a otimização “online” simplificada, onde será incluída na função objetivo do controlador o gradiente da função objetivo econômica.

No Capítulo 6 é apresentada a descrição do processo do FCC (Fluid Catalytic Cracking) e o problema de otimização nesta unidade. São descritas as importâncias e os motivos da escolha das variáveis manipuladas e controladas e os objetivos da otimização. O capítulo é finalizado com a aplicação do algoritmo proposto no capítulo anterior para a unidade de craqueamento catalítico e a descrição dos modelos utilizados para tal.

O Capítulo 7 utilizamos o conceito de gradiente reduzido para produzir um algoritmo modificado para esta estratégia de otimização. Serão apresentadas as equações e metodologia de implementação. Finalizando este capítulo temos uma pequena discussão e apresentação das simulações de ambas as estratégias de otimização “online” com e sem a aplicação do algoritmo modificado do gradiente reduzido.

As condições e as análises necessárias para que se obtenha a convergência da otimização para o extremo desejado são avaliadas no capítulo 8.

Para finalizar o trabalho, o capítulo 9 apresenta as conclusões e as melhorias necessárias sugeridas para a próxima etapa do trabalho e para estudos futuros.

1.5. Objetivos do trabalho

Obter como resultado deste trabalho, um pacote computacional adequado e simplificado em sua operação e rápido para apresentação de resultados para otimização e controle preditivo de processos. O principal objetivo é a simplificação da metodologia rigorosa do trabalho desenvolvido anteriormente no LSCP através

das teses de doutoramento de Gouvêa (1997) e Zanin (2001), no sentido de melhorar o desempenho do controlador quando se tratar de problemas de grande porte, ou seja, tornar a solução proposta mais robusta sob o aspecto da implantação prática.

A realização desta meta está relacionada com os seguintes objetivos específicos:

- (a) Desenvolvimento de uma metodologia de integração da função objetivo econômica, função de otimização da operação de processos contínuos com o controlador MPC em uma camada de forma a preservar a confiabilidade do conjunto: controle e otimização;
- (b) Aplicar a estratégia proposta em sistemas simulados que tenham complexidade equivalente aos processos industriais.

CAPÍTULO 2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1. Estratégias de otimização em tempo real com controle preditivo

A estratégia clássica é a de 3 camadas,(Zanin & Rotava,2005). A camada superior corresponde à camada do otimizador não linear que manda à segunda camada de otimização valores ótimos de operação para as entradas e saídas que serão utilizados no algoritmo de programação linear (PL), ou de programação quadrática (PQ) baseada em modelo linear para a obtenção de novos pontos ótimos de operação que serão utilizados pelo controlador que trabalha com um modelo dinâmico linear e um algoritmo de controle multivariável para a manutenção dos valores de operação, das variáveis controladas. A camada da otimização não linear é executada numa frequência relativamente baixa que, depende da complexidade do processo, enquanto que a otimização linear e o controlador são resolvidos seqüencialmente e na mesma frequência.

No caso da estratégia de duas camadas, a função objetivo econômica que visa buscar o melhor ponto de operação, é inclusa através de uma nova camada adicionada ao controlador. Nesta estratégia de otimização, a camada inferior é responsável pelo controle, enquanto que a camada superior, em função das variáveis controladas, das restrições do processo dos graus de liberdade e função objetivo econômica, determina, através de um algoritmo de programação não linear, os “setpoint” ótimos das variáveis para o estado estacionário. Estas informações de operação visando a operação ótima são enviadas para a camada inferior que as utiliza como “setpoint” das variáveis manipuladas e controladas. Dentro de um intervalo de tempo estes valores de referência são recalculados e enviados ao controlador.

Figura 2-1 - Otimização em três camadas (estrutura clássica)

A sintonia do controlador pode ser realizada lançando-se mão das técnicas de controle robusto (Gouvêa, 1997) o que pode garantir um desempenho dentro das expectativas para a malha fechada. Esta é a estratégia mais utilizada para controle multivariável nas indústrias de processo, que emprega como modelo econômico uma função linear para a otimização.

Ainda para as estratégias de duas ou três camadas, pode ser incluída uma função adicional, denominada estimador representado na figura 2-2 para o caso da estratégia de 2 camadas. Esta função adicional calcula valores de propriedades ou distúrbios que são utilizados pelo controlador ou otimizador. Para o cálculo destes valores são utilizadas as medições disponíveis.

Figura 2-2 - Otimização em duas camadas (Gouvêa,1997)

Como se deseja obter o ponto ótimo de operação da planta, o modelo do processo normalmente utilizado é o estático rigoroso, ou seja, o estado estacionário para o qual a planta deve tender. Deve-se ressaltar que nesta otimização hierárquica (duas ou três camadas) os novos valores ótimos só são enviados para o controlador quando a planta se encontra estabilizada. Caso a planta não se encontre estabilizada, erros significativos podem ser introduzidos gerando valores de referência não ótimos e que eventualmente possam desestabilizar a planta. A planta também pode estar sob o efeito de distúrbios, então ações de controle são geradas e, se ao mesmo tempo novos valores de referência forem enviados pode-se gerar instabilidade e, a sintonia deve ser adequada para comportar tamanhas perturbações. A sintonia do controlador deve ser feita de maneira bastante criteriosa para garantir a robustez do controlador para uma faixa de operação bastante grande. Conseqüentemente a operação será bastante conservadora.

Para contornar esta situação uma estratégia onde otimização e controle são realizados ao mesmo tempo foi proposta.

As estratégias de duas e três camadas foram comparadas por Ying & Joseph (1999). Segundo os autores, se a otimização não linear for executada na mesma frequência que o controlador multivariável, não há necessidade da estratégia em três camadas. Mas se o modelo do processo tiver alta complexidade, neste caso a estratégia em três camadas é relativamente superior e apresenta as seguintes vantagens:

- (a) No estado estacionário apresenta melhor desempenho econômico, pois os pontos ótimos de operação para variáveis manipuladas e controladas determinados pelo otimizador não linear são deslocados na presença de perturbações. O processo pode operar em uma condição subótima na otimização em duas camadas já que a otimização é executada em uma frequência relativamente menor. Na estratégia de três camadas ocorre a retroalimentação do processo atualizando o efeito das perturbações nas variáveis controladas, haja vista que as duas camadas inferiores são executadas na mesma frequência. Assim o otimizador linear (que trabalha com parâmetros calculados por um modelo rigoroso) permite a movimentação das condições de processo para uma condição relativamente econômica.
- (b) Eliminação de “off-sets” nas variáveis manipuladas. Com as perturbações do sistema pode haver saturação de variáveis, perda de graus de liberdade, impossibilitando a implementação da solução apresentada pelo otimizador não-linear da estratégia de duas camadas. Desta maneira, as variáveis manipuladas e controladas acabam por apresentar “off-set”. Já na estrutura de três camadas, a camada de otimização intermediária (linear) acaba por detectar as perturbações e determina uma nova solução ótima que elimine os “off-sets” nas variáveis controladas.
- (c) Melhor desempenho dinâmico. A estratégia de duas camadas devido a característica de sua função objetivo, que será apresentada mais adiante no capítulo 4 – item 4.1, suprime grandes variações nas variáveis

manipuladas, tornando assim o controlador muito lento, podendo causar desvios nas variáveis controladas em relação aos valores ótimos. O que não acontece na estratégia de três camadas, pois na camada intermediária as perturbações são detectadas e ajustes são realizados para os novos valores ótimos das variáveis manipuladas e controladas que, finalmente são encaminhados para a camada controladora.

Segundo Zanin (2001) outra forma de implementar a otimização não linear consiste em utilizar o modelo rigoroso do processo apenas para obter as derivadas parciais da função objetivo econômica em relação às variáveis manipuladas. É utilizado um controlador de duas camadas onde a camada superior é uma PL (Programação linear) que minimiza a seguinte função objetivo definida por:

$$\min_{u^*} - \frac{\partial f}{\partial u} u^*$$

onde $\frac{\partial f}{\partial u}$ corresponde ao vetor das derivadas parciais da função objetivo econômica em relação às variáveis manipuladas, obtidas através do referido modelo rigoroso por um programa executado de forma independente do algoritmo de otimização e u^* são os valores ótimos a serem enviados para o controlador. Assim, na estrutura proposta, a otimização é efetuada através de um algoritmo de programação linear, cujos coeficientes $(\frac{\partial f}{\partial u})$ da função objetivo são atualizados, através do modelo rigoroso do processo, nos diferentes pontos de operação do processo.

Se o problema de otimização estática não linear for resolvido simultaneamente com o problema de controle preditivo multivariável, tem-se a estratégia de uma camada (Gouvêa, 1997), que se encontra ilustrada na figura 2-3. Tanto a formulação do controle dinâmico linear, como as equações de lucratividade e

modelo do sistema no estado estacionário estão incluídas na função objetivo neste caso da camada otimizador/controlador que será resolvido através de um algoritmo de programação não linear juntamente com as restrições estáticas e dinâmicas. A frequência de execução do algoritmo deve ser alta para que seja possível rejeitar as perturbações dinâmicas do processo.

Figura 2-3 - Otimização em uma camada (Gouvêa, 1997)

Na simulação de Gouvêa & Odloak (1998) da aplicação do otimizador não linear integrado ao controle para a otimização de gás liquefeito de petróleo numa unidade de craqueamento catalítico, o problema dinâmico é formulado de maneira a impor trajetórias dinâmicas para as variáveis controladas. Neste trabalho os autores comparam a estratégia de otimização em uma camada com a otimização não linear em duas camadas. Finalmente concluem que a otimização em uma camada assimila mais rapidamente as mudanças nos objetivos econômicos da unidade e apresenta uma resposta mais suave, estabilizando o processo. Um ponto negativo é a lentidão da resposta, que acaba por reduzir o desempenho do algoritmo na rejeição de fortes perturbações no processo. Deve-se mencionar ainda que, analogamente os casos de otimização em várias camadas, o ponto

ótimo de operação do otimizador em uma camada pode ser afetado por erros no modelo do processo.

Toumi & Engell, 2004(a) propuseram um esquema de otimização do controle de horizonte finito que emprega o mesmo modelo rigoroso não-linear que é usado na otimização do processo e aplicam o algoritmo para as três zonas reativas do SMB (Simulated Moving Beds) para isomerização de glicose. A característica principal desta abordagem é que o custo de produção é minimizado “on-line” sob um horizonte finito enquanto que a pureza dos produtos é considerada como restrição. A otimização usando todos os graus de liberdade operacionais é realizada “on-line”, em vez de uma busca por trajetórias ou “setpoint” pré-calculados. Em Toumi et al., 2005, este conceito de controle foi estendido para processos comerciais mais complexos VARICOL (Multicolumn continuous separation process) (Toumi et al., 2003) e Power Feed (Kearney e Rieb 1992) onde as portas são trocadas desincronizadamente e as vazões são variadas em subintervalos do período de troca. Estas variantes do processo oferecem um número ainda maior de graus de liberdade que podem ser utilizados para a otimização econômica do processo enquanto que ao mesmo tempo satisfazem a condição de pureza requerida do produto (Engell, 2006).

Uma abordagem de otimização diferente da do SMB foi proposta por Erdem et al. (2004a,b) e Abel, et al., (2005). Nestes trabalhos, sobre um horizonte móvel de otimização “on-line” é utilizado um modelo linear de ordem reduzida que é obtido da linearização de um modelo rigoroso no estado estacionário. As variáveis de estado do modelo são estimadas pelo filtro de Kalman que processa as medições de concentração de produto.

CAPÍTULO 3. CONTROLE PREDITIVO

Neste trabalho o modelo dinâmico do processo considerado para a predição da trajetória das saídas controladas é um modelo linear em variáveis de estado. Para a aplicação em controle de processos, os modelos de variáveis de estado apresentam uma vantagem em relação aos modelos de resposta ao degrau ou impulso, eles possibilitam uma representação compacta dos modelos dinâmicos que se encontram inicialmente na forma de ODEs.

Os modelos lineares de resposta ao degrau foram preteridos pelo modelo em variáveis de estado, uma vez que este último leva a utilização de matrizes de menores dimensões para obtenção da predição das variáveis controladas, quando da operação ótima do sistema. Com isto, temos a redução do tempo de processamento do algoritmo de controle. Assim todas as formulações apresentadas a seguir serão desenvolvidas através do modelo linear em variáveis de estado.

Os modelos de variáveis de estado também são obtidos realizando testes na planta, injetando sinais conhecidos, como variação em degrau unitário ou impulso, por exemplo, e armazenado as respostas das variáveis de saída a este distúrbio conhecido. Modelos lineares podem então ser obtidos através da utilização de técnicas de identificação que variam de um simples ajuste de curva até métodos sofisticados. O controle preditivo tem exigências especiais quanto à identificação de sistemas devido às interações entre as variáveis de entrada e saída, na maioria dos casos um simples ajuste de curva não atende a estas necessidades.

3.1. Formulação do modelo em variáveis de estado

Atualmente não há, na verdade, boas razões para se trabalhar com modelos de resposta ao degrau. Se disponível, o modelo linear de resposta ao degrau pode ser facilmente convertido em um modelo de variáveis de estado que reproduz exatamente o modelo de resposta ao degrau. Um procedimento usual é introduzir distúrbios randômicos (degraus) no processo e através do pacote de identificação do Matlab obter funções de transferência para o sistema. Analiticamente as funções de transferência nada mais são do que as transformadas de Laplace ou z das equações diferenciais ordinárias que descrevem os fenômenos do processo em intervalos de tempo. Em seguida podemos aplicar um procedimento padronizado para obter o modelo em variáveis de estado.

As funções de transferência são normalmente colocadas na seguinte forma:

$$\frac{y(z)}{u(z)} = \frac{b_0 z^n + b_1 z^{n-1} + \mathbf{L} + b_n}{z^n + a_1 z^{n-1} + \mathbf{L} + a_n} \quad (3.1)$$

Onde $y(z)$ corresponde à transformada da saída do sistema e $u(z)$ à transformada da entrada. Os coeficientes $b_0, b_1, \dots, b_n$ e $a_1, \dots, a_n$ são os parâmetros do modelo.

No domínio do tempo, a equação (3.1) pode ser representada pela equação de diferenças de ordem n :

$$\begin{aligned} y(k+n) + a_1 y(k+n-1) + \dots + a_{n-1} y(k+1) + a_n y(k) = \\ = b_0 u(k+n) + b_1 u(k+n-1) + \dots + b_{n-1} u(k+1) + b_n u(k) \end{aligned} \quad (3.2)$$

onde k denota o k -ésimo instante de amostragem, $y(k)$ são as saídas do sistema no k -ésimo instante de amostragem e, $u(k)$ são as entradas no k -ésimo instante de amostragem.

Podemos definir as variáveis de estado como, Ogata (1970):

$$x_1(k) = y(k) - h_0 u(k)$$

$$x_2(k) = x_1(k+1) - h_1 u(k)$$

$$x_3(k) = x_2(k+1) - h_2 u(k)$$

L

$$x_n(k) = x_{n-1}(k+1) - h_{n-1} u(k)$$

onde $h_0, h_1, h_2, \dots, h_n$ são determinados a partir de:

$$h_0 = b_0$$

$$h_1 = b_1 - a_1 h_0$$

$$h_2 = b_2 - a_1 h_1 - a_2 h_0$$

L

$$h_n = b_n - a_1 h_{n-1} - \mathbf{L} - a_{n-1} h_1 - a_n h_0$$

Com essa escolha das variáveis de estado, obtemos o seguinte modelo, a saber:

$$\begin{bmatrix} x_1(k+1) \\ x_2(k+1) \\ \mathbf{M} \\ x_{n-1}(k+1) \\ x_n(k+1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & \mathbf{L} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{L} & 0 & 0 \\ \mathbf{M} & \mathbf{M} & \mathbf{M} & \mathbf{M} & \mathbf{M} \\ 0 & 0 & \mathbf{L} & 0 & 1 \\ -a_n - a_{n-1} \mathbf{L} - a_2 - a_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1(k) \\ x_2(k) \\ \mathbf{M} \\ x_{n-1}(k) \\ x_n(k) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \\ \mathbf{M} \\ h_{n-1} \\ h_n \end{bmatrix} u(k) \quad (3.3)$$

$$y(k) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \mathbf{L} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1(k) \\ x_2(k) \\ \mathbf{M} \\ x_n(k) \end{bmatrix} + h_0 u(k) \quad (3.4)$$

ou

$$x(k+1) = Ax(k) + Bu(k) \quad (3.5)$$

$$y(k) = Cx(k) + Lu(k) \quad (3.6)$$

onde

$$C = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \mathbf{L} & 0 \end{bmatrix}$$

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & \mathbf{L} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{L} & 0 & 0 \\ \mathbf{M} & \mathbf{M} & & \mathbf{M} & \mathbf{M} \\ 0 & 0 & \mathbf{L} & 0 & 1 \\ -a_n & -a_{n-1} & & -a_2 & -a_1 \end{bmatrix}$$

$$B = \begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \\ \mathbf{M} \\ h_{n-1} \\ h_n \end{bmatrix}$$

$$L = h_0 = b_0$$

Para um sistema com ny saídas e nu entradas a equação (3.2) vai ficar da seguinte forma:

$$\begin{aligned} y(k+n) + A_1 y(k+n-1) + \dots + A_{n-1} y(k+1) + A_n y(k) = \\ = B_0 u(k+n) + B_1 u(k+n-1) + \dots + B_{n-1} u(k+1) + B_n u(k) \end{aligned} \quad (3.7)$$

onde $A_i \in R^{ny \times ny} \quad i=1, \dots, n \quad B_i \in R^{ny \times nu} \quad i=1, \dots, n$

Daí, o modelo do sistema pode ser colocado na seguinte forma geral:

$$x(k+1) = Ax(k) + Bu(k) \quad (3.8)$$

$$y(k) = Cx(k) \quad (3.9)$$

onde:

$$C = \begin{bmatrix} I_{ny} & 0 & \mathbf{L} & 0 \end{bmatrix}$$

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & \mathbf{L} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{L} & 0 & 0 \\ \mathbf{M} & \mathbf{M} & & \mathbf{M} & \mathbf{M} \\ 0 & 0 & \mathbf{L} & 0 & 1 \\ -A_n & -A_{n-1} & & -A_2 & -A_1 \end{bmatrix}$$

$$B = \begin{bmatrix} H_1 \\ H_2 \\ \mathbf{M} \\ H_{n-1} \\ H_n \end{bmatrix}$$

$$x(k) \in R^{n \times m_y}$$

onde

$$H_0 = B_0$$

$$H_1 = B_1 - A_1 H_0$$

$$h_2 = B_2 - A_1 H_1 - A_2 H_0$$

$$\mathbf{L}$$

$$H_n = B_n - A_1 H_{n-1} - \mathbf{L} - A_{n-1} H_1 - A_n H_0$$

Contudo, no caso geral, devido a presença de distúrbios não medidos, o estado estacionário do sistema é desconhecido e a formulação descrita em (3.8) e (3.9) leva a “off-set” nas variáveis controladas. Para contornarmos este problema podemos utilizar o modelo em variáveis de estado na forma incremental, que tem a forma representada abaixo:

$$x(k+1) = Ax(k) + Bu(k) \quad (3.10)$$

$$y(k) = Cx(k) \quad (3.11)$$

O Modelo representado nas equações (3.10) e (3.11) pode ser obtido do modelo representado por (3.8) e (3.9) se o estado do modelo incremental for escrito da seguinte forma:

$$x(k) = \begin{bmatrix} x(k) \\ u(k-1) \end{bmatrix}$$

Dáí as equações (3.10) e (3.11) podem ser escritas na forma:

$$\begin{bmatrix} x(k+1) \\ u(k) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & B \\ 0 & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x(k) \\ u(k-1) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} B \\ I \end{bmatrix} \Delta u(k) \quad (3.12)$$

$$y(k) = \begin{bmatrix} C & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x(k) \\ u(k-1) \end{bmatrix} \quad (3.13)$$

assim:

$$\mathcal{A} = \begin{bmatrix} A & B \\ 0 & I \end{bmatrix}, \mathcal{B} = \begin{bmatrix} B \\ I \end{bmatrix} \text{ e } \mathcal{C} = \begin{bmatrix} C & 0 \end{bmatrix}$$

3.2. Filtro de Kalman para estimativa de estado de sistemas em variáveis de estado.

A estrutura do MPC apresentada no algoritmo desenvolvido neste trabalho faz uso de um modelo linear em variáveis de estado, surge então a necessidade de estimarmos o estado do sistema a partir das medidas das variáveis controladas. O estimador de estado que será utilizado neste trabalho é o filtro de Kalman. Consideramos então o sistema linear representado pelas equações (3.10) e (3.11). Somados aos elementos do lado direito de cada uma das equações temos $w(k)$ e $v(k)$, ruídos randômicos associados com os erros no modelo e na medida respectivamente.

Reproduzindo estas equações temos:

$$\begin{aligned} \mathcal{X}(k+1) &= \mathcal{A}\mathcal{X}(k) + \mathcal{B}\Delta u(k) + w(k) \\ y(k) &= \tilde{C}\tilde{x}(k) + v(k) \end{aligned} \quad (3.14)$$

O valor esperado desses ruídos é zero e por hipótese não existe correlação entre eles e tampouco com nenhuma outra variável do sistema. Como o vetor das

variáveis controladas $y(k)$ medidas apresenta dimensão menor que o estado $x(k)$, não podemos calcular diretamente o estado a partir desta medida. O filtro de Kalman apresenta uma solução para a estimativa de x a partir do conhecimento de y .

Assim a estimativa do filtro de Kalman pode ser colocada na forma:

$$\hat{x}(k+1/k) = \tilde{A}\hat{x}(k/k-1) + \tilde{B}\Delta u(k) + K(k)[y(k) - \tilde{C}\hat{x}(k/k-1)] \quad (3.15)$$

onde $\hat{x}(k+1/k)$ é a estimativa de $x(k+1)$ baseada nas informações da planta até o instante k e K é o ganho do filtro.

Definimos o erro desta estimativa como:

$$e(k+1) = x(k+1) - \hat{x}(k+1/k) \quad (3.16)$$

Subtraindo (3.14) de (3.15) temos:

$$x(k+1) - \hat{x}(k+1/k) = A[x(k) - \hat{x}(k/k-1)] + w(k) - K(k)[y(k) - C\hat{x}(k/k-1)]$$

$$e(k+1) = Ae(k) + w(k) - K(k)[Cx(k) + v(k) - C\hat{x}(k/k-1)] \quad (3.17)$$

$$e(k+1) = (A - K(k)C)e(k) + w(k) - K(k)v(k)$$

Para o cálculo de K , é feita a minimização da covariância do erro da estimativa do estado, $P(k)$ que é definida por:

$$P(k) = E\left[\left(e(k) - E[e(k)]\right)\left(e(k) - E[e(k)]\right)^T\right] \quad (3.18)$$

onde $E[\]$ é o valor esperado da variável que está contida no colchetes. O valor esperado de e pode ser obtido a partir da equação (3.17)

$$E[e(k+1)] = \left[\begin{matrix} \mathbb{A} - K(k)\mathbb{C} \end{matrix} \right] E[e(k)] \quad (3.19)$$

Assim, se $E[e(0)] = 0$, então $E[e(k)] = 0$

Considerando esta hipótese e usando a equação (3.17) temos:

$$\begin{aligned} P(k+1) &= E[e(k+1)e(k+1)^T] \\ P(k+1) &= E\left[\left(\left(\begin{matrix} \mathbb{A} - K(k)\mathbb{C} \end{matrix}\right)e(k) + w(k) - K(k)v(k)\right)\left[\left(\begin{matrix} \mathbb{A} - K(k)\mathbb{C} \end{matrix}\right)e(k) + w(k) - K(k)v(k)\right]^T\right] \\ P(k+1) &= \left(\begin{matrix} \mathbb{A} - K(k)\mathbb{C} \end{matrix}\right)E[e(k)e(k)^T]\left(\begin{matrix} \mathbb{A} - K(k)\mathbb{C} \end{matrix}\right)^T + \left(\begin{matrix} \mathbb{A} - K(k)\mathbb{C} \end{matrix}\right)E[e(k)w(k)^T] + \\ &+ \left(\begin{matrix} \mathbb{A} - K(k)\mathbb{C} \end{matrix}\right)E[e(k)v(k)^T]K(k)^T + E[w(k)e(k)^T]\left(\begin{matrix} \mathbb{A} - K(k)\mathbb{C} \end{matrix}\right)^T + E[w(k)w(k)^T] + \\ &+ E[w(k)v(k)^T]K(k)^T + K(k)E[v(k)e(k)]\left(\begin{matrix} \mathbb{A} - K(k)\mathbb{C} \end{matrix}\right)^T + K(k)E[v(k)w(k)^T] \\ &+ K(k)E[v(k)v(k)^T]K(k)^T \end{aligned} \quad (3.20)$$

Como a premissa diz que $v(k)$ e $w(k)$ não deverão ser correlacionados com nenhuma outra variável, temos que:

$$E[e(k)w(k)^T] = E[e(k)v(k)^T] = E[w(k)v(k)^T] = 0$$

Portanto a equação (3.20) fica:

$$P(k+1) = \left(\begin{matrix} \mathbb{A} - K(k)\mathbb{C} \end{matrix}\right)E[e(k)e(k)^T]\left(\begin{matrix} \mathbb{A} - K(k)\mathbb{C} \end{matrix}\right)^T + E[w(k)w(k)^T] + K(k)E[v(k)v(k)^T]K(k)^T \quad (3.21)$$

ou

$$P(k+1) = \left(\begin{matrix} \mathbb{A} - K(k)\mathbb{C} \end{matrix}\right)P(k)\left(\begin{matrix} \mathbb{A} - K(k)\mathbb{C} \end{matrix}\right)^T + W + K(k)VK(k)^T$$

Onde

$$W = E[w(k)w(k)^T] \text{ e } V = E[v(k)v(k)^T]$$

Sendo agora o objetivo minimizar $a^T P(k+1)a$ onde a é um vetor arbitrário, equivale a minimizar o maior valor singular de $P(k+1)$. Então da equação (3.21) tem-se:

$$a^T P(k+1)a = a^T \left\{ \tilde{A}P(k)\tilde{A}^T + W - K(k)\tilde{C}P(k)\tilde{A}^T - \tilde{A}P(k)\tilde{C}^T K(k)^T + K(k)[V + \tilde{C}P(k)\tilde{C}^T]K(k)^T \right\} a \quad (3.22)$$

Definindo

$$H = \tilde{A}P(k)\tilde{C}^T \text{ e } R = V + \tilde{C}P(k)\tilde{C}^T$$

e observando que

$$\begin{aligned} -KH^T - HK^T + KRK^T &= -KH^T - HK^T + KRK^T + HR^{-1}H^T - HR^{-1}H^T = \\ &= (K - HR^{-1})R(K - HR^{-1})^T - HR^{-1}H^T \end{aligned}$$

Então a equação (3.22) pode ser escrita da seguinte forma

$$\begin{aligned} a^T P(k+1)a &= a^T \left\{ \tilde{A}P(k)\tilde{A}^T + W - \tilde{A}P(k)\tilde{C}^T [V + \tilde{C}P(k)\tilde{C}^T]^{-1} \tilde{C}P(k)\tilde{A}^T \right\} a + \\ &+ a^T \left\{ K(k) - \tilde{A}P(k)\tilde{C}^T (V + \tilde{C}P(k)\tilde{C}^T)^{-1} \right\} [V + \tilde{C}P(k)\tilde{C}^T] \left\{ K(k) - \tilde{A}P(k)\tilde{C}^T (V + \tilde{C}P(k)\tilde{C}^T)^{-1} \right\} a \end{aligned} \quad (3.23)$$

Como a matriz $V + \tilde{C}P(k)\tilde{C}^T$ é positiva definida e o primeiro termo da direita de (3.23) não depende de $K(k)$, o mínimo de (3.23) é obtido para o $K(k)$ que anula o segundo termo da direita. Ou seja,

$$K(k) = \tilde{A}P(k)\tilde{C}^T (V + \tilde{C}P(k)\tilde{C}^T)^{-1} \quad (3.24)$$

Substituindo a equação (3.24) na (3.21) temos:

$$\begin{aligned}
P(k+1) = & \tilde{A}P(k)\tilde{A}^T - AP(k)\tilde{C}^T(V + \tilde{C}P(k)\tilde{C}^T)^{-1}\tilde{C}P(k)\tilde{A}^T - \tilde{A}P(k)\tilde{C}^T(V + \tilde{C}P(k)\tilde{C}^T)^{-1}\tilde{C}P(k)\tilde{A}^T + \\
& + \tilde{A}P(k)\tilde{C}^T(V + \tilde{C}P(k)\tilde{C}^T)^{-1}\tilde{C}P(k)\tilde{C}^T(V + \tilde{C}P(k)\tilde{C}^T)^{-1}\tilde{C}P(k)\tilde{A}^T + W + \\
& + \tilde{A}P(k)\tilde{C}^T(V + \tilde{C}P(k)\tilde{C}^T)^{-1}V(V + \tilde{C}P(k)\tilde{C}^T)^{-1}\tilde{C}P(k)\tilde{A}^T
\end{aligned}$$

Sabe-se que:

$$\begin{aligned}
& - \tilde{A}P(k)\tilde{C}^T(V + \tilde{C}P(k)\tilde{C}^T)^{-1}\tilde{C}P(k)\tilde{A}^T + \\
& + \tilde{A}P(k)\tilde{C}^T(V + \tilde{C}P(k)\tilde{C}^T)^{-1}\tilde{C}P(k)\tilde{C}^T(V + \tilde{C}P(k)\tilde{C}^T)^{-1}\tilde{C}P(k)\tilde{A}^T + \\
& + \tilde{A}P(k)\tilde{C}^T(V + \tilde{C}P(k)\tilde{C}^T)^{-1}V(V + \tilde{C}P(k)\tilde{C}^T)^{-1}\tilde{C}P(k)\tilde{A}^T = 0
\end{aligned}$$

Portanto:

$$P(k+1) = \tilde{A}P(k)\tilde{A}^T - AP(k)\tilde{C}^T(V + \tilde{C}P(k)\tilde{C}^T)^{-1}\tilde{C}P(k)\tilde{A}^T + W \quad (3.25)$$

Para valores de k suficientemente grande, K(k) e P(k) convergem para valores estacionários dados por:

$$K = \tilde{A}P\tilde{C}^T(V + \tilde{C}P\tilde{C}^T)^{-1} \quad (3.26)$$

$$P = \tilde{A}P\tilde{A}^T - \tilde{A}P\tilde{C}^T[V + \tilde{C}P\tilde{C}^T]^{-1}\tilde{C}P\tilde{A}^T + W \quad (3.27)$$

A solução da equação (3.27) é obtida por um método iterativo.

3.3. MPC (Model Predictive Control) convencional

A função objetivo usual de um controlador MPC convencional tem a seguinte forma:

$$J_k = \sum_{j=0}^p e^T(k+j)Qe(k+j) + \sum_{j=0}^{m-1} \Delta u^T(k+j)R\Delta u(k+j) \quad (3.28)$$

onde

$$e(k+j) = y(k+j) - y^{sp} \quad (3.29)$$

$$\Delta u(k+j) = u(k+j) - u(k+j-1) \quad (3.30)$$

Q e R são matrizes pesos positivas definidas, y^{sp} é o “setpoint” da controlada, $y(k+j)$ é a predição da saída no instante de amostragem $k+j$, p é o horizonte de predição e m o horizonte de controle,

Substituindo a equação 3.29, em 3.28 obtemos:

$$J_k = \{ \bar{A}x(k) - y^{sp} + \bar{B}\Delta u \}^T Q_p \{ \bar{A}[x(k) - y^{sp}] + \bar{B}\Delta u \} + \Delta u^T R_m \Delta u \text{ ou}$$

$$J_k = \Delta u^T H \Delta u + Ct \Delta u + c \quad (3.31)$$

onde

$$H = \bar{B}^T Q_p \bar{B} + R$$

$$Ct = 2(\bar{A}x(k) - \bar{y}^{sp})^T Q_p \bar{B}$$

$$c = [x(k) - x(k)^{sp}]^T \bar{A}^T Q_p \bar{A} [x(k) - x(k)^{sp}]$$

$$\bar{y}^{sp} = \begin{bmatrix} y^{sp} \\ y^{sp} \\ \mathbf{M} \\ y^{sp} \end{bmatrix} \quad y^{sp} \in R^{ny.p}$$

$$\bar{A} = \begin{bmatrix} \tilde{C} \\ \tilde{C}\tilde{A} \\ \mathbf{M} \\ \tilde{C}\tilde{A}^{np} \end{bmatrix}, \quad \bar{B} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \mathbf{L} & 0 \\ \tilde{C}\tilde{B} & 0 & \mathbf{L} & 0 \\ \tilde{C}\tilde{A}\tilde{B} & \tilde{C}\tilde{B} & \mathbf{L} & 0 \\ \tilde{C}\tilde{A}^{p-1}\tilde{B} & \tilde{C}\tilde{A}^{p-2}\tilde{B} & \mathbf{L} & \tilde{C}\tilde{A}^{p-m}\tilde{B} \end{bmatrix} \quad (3.32)$$

$$\Delta u = [\Delta u(k)^T \mathbf{L} \Delta u(k+m-1)^T]^T$$

$$Q_p = \text{diag}(Q_{123} Q_p)$$

$$R = \text{diag}(R_{123} R_m)$$

O MPC convencional minimiza J_k , sujeita a um conjunto de restrições:

$$\begin{aligned} u_{\min} \leq u(k+j) \leq u_{\max} \quad j = 0, 1, \dots, m-1 \\ -\Delta u_{\max} \leq \Delta u(k+j) \leq \Delta u_{\max} \quad j = 0, 1, \dots, m-1 \end{aligned} \quad (3.33)$$

onde:

$\Delta u_{\max}$ = máxima ação de controle

$u_{\min}$ = valor mínimo para a variável manipulada

$u_{\max}$ = valor máximo para a variável manipulada

O primeiro termo da (3.28) é a soma ponderada dos erros preditos das variáveis controladas e o segundo se refere a penalização dos movimentos das variáveis manipuladas.

Nas equações (3.33) estão representadas as restrições nas variáveis manipuladas e nos incrementos das variáveis manipuladas, respectivamente.

Na formulação convencional admite-se que as necessidades operacionais do processo são traduzidas em um conjunto de “setpoint” para as variáveis controladas. Isso nem sempre acontece na prática, pois nem sempre as condições operacionais ótimas podem ser definidas por “setpoint” apenas nas saídas.

3.4. MPC convencional em duas camadas

Visando resolver o problema da limitação da estratégia que define as condições ótimas através de “setpoint” para as controladas, foi proposta uma solução onde o controlador é decomposto em duas camadas (Moro & Odloak, 1995). Na camada superior, busca-se uma condição ótima através de um modelo estacionário linear que é usado na otimização de uma função objetivo econômica que também é linear em relação às entradas e saídas do sistema. Nesse problema de otimização são incluídas as restrições de entrada e saída do processo. Como resultados da solução da camada superior temos “setpoint” ou “targets” para as variáveis manipuladas e controladas. Para acomodar esses “targets” para as variáveis manipuladas, a camada inferior do controlador tem uma função objetivo similar à função objetivo apresentada no capítulo anterior, porém estendida com um termo que pondera a distância entre o valor previsto para as variáveis manipuladas no estado estacionário e o “target” desejado.

Neste esquema $u(k-1)$ é a última ação de controle implementada, $y(k)$ é a última leitura da saída, $y(k+N)$ é a predição da saída no estado estacionário, y^{SP} e u^{SP} são os “targets” para as saídas e entradas no sistema respectivamente.

Camada de Otimização no estado estacionário

Usando a formulação da seção anterior, a predição da saída no estado estacionário pode ser descrita da seguinte forma:

$$y(k+N) = \tilde{C}\tilde{A}^N \tilde{x}(k) + \begin{bmatrix} \tilde{C}\tilde{A}^{N-1}\tilde{B} & \tilde{C}\tilde{A}^{N-2}\tilde{B} & \mathbf{L} & \tilde{C}\tilde{A}^{N-m}\tilde{B} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta u(k) \\ \Delta u(k+1) \\ \mathbf{M} \\ \Delta u(k+m-1) \end{bmatrix} \quad (3.34)$$

Onde N é suficientemente grande para aproximar o estado estacionário.

Portanto, quando $N \rightarrow \infty$ a equação (3.21) pode ser escrita da seguinte forma:

$$y(k + \infty) = \tilde{C} \tilde{A}^\infty x(k) + \tilde{C} \tilde{A}^\infty \tilde{B} \sum_{i=0}^{m-1} \Delta u(k+i)$$

$$y(k + \infty) = \tilde{C} \tilde{A}^\infty \tilde{x}(k) + \tilde{C} \tilde{A}^\infty \tilde{B} (u(k+m-1) - u(k-1)) \quad (3.35)$$

Porém, $u(k+m-1) = u(k+\infty)$ que corresponde ao estado estacionário da saída e a equação (3.35) fica:

$$y(k + \infty) = \tilde{C} \tilde{A}^\infty \tilde{x}(k) + \tilde{C} \tilde{A}^\infty \tilde{B} (u(k+\infty) - u(k-1)) \quad (3.36)$$

Suponhamos agora que exista uma função objetivo econômica do tipo:

$$f = C_y^T y(k + \infty) + C_u^T u(k + \infty)$$

onde C_y e C_u são vetores de preços (+) ou custos (-) das saídas e das entradas. Assim, a camada superior do controlador resolve o seguinte problema:

$$\max_{u(k+\infty), y(k+\infty)} f = C_y^T y(k + \infty) + C_u^T u(k + \infty)$$

sujeita à (3.36) e

$$y_{\min} \leq y(k + \infty) \leq y_{\max}$$

$$u_{\min} \leq u(k + \infty) \leq u_{\max}$$

Como solução desse problema obtém-se os “setpoint” para a camada inferior do controlador: $y^{SP} = y(k + \infty)$ e $u^{SP} = u(k + \infty)$

Camada inferior – MPC modificado

A camada inferior desse controlador tem a seguinte função objetivo:

$$J_k^m = \sum_{j=1}^p \left[y(k+j) - y^{SP} \right]^T Q \left[y(k+j) - y^{SP} \right] + \left(u(k+m-1) - u^{SP} \right)^T R_u \left(u(k+m-1) - u^{SP} \right) + \sum_{j=0}^{m-1} \Delta u(k+j)^T R \Delta u(k+j) \quad (3.37)$$

Portanto na camada inferior do controlador resolve-se o seguinte problema

$$\min_{\Delta u(k), \dots, \Delta u(k+m-1)} J_k^m$$

Sujeito à (3.37) e

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

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

Observe que em (3.37) pondera-se o erro entre a entrada e seu respectivo “target” apenas para o último instante do horizonte de controle. Isso é conveniente para desacoplar o controle das saídas da otimização das entradas. Dessa forma, o controlador dará prioridade para controlar as saídas nos valores desejados e moverá as entradas para seus “targets” apenas quando houver graus de liberdade suficientes.

No MPC de duas camadas descrito neste capítulo, a otimização executada na camada superior tem um caráter heurístico, pois a função objetivo e o modelo utilizado são demasiadamente simples para descrever realisticamente os objetivos operacionais. Entretanto, em alguns casos, atinge-se um significativo benefício econômico quando, por exemplo, o principal objetivo operacional é bastante simples como maximizar a carga da unidade ou minimizar o consumo de vapor. Nos casos em que o problema de otimização econômica é mais complexo, essa estrutura de controlador pode ser usada ainda, porém acrescentando-se uma terceira camada que seria responsável pela otimização rigorosa do processo.

CAPÍTULO 4. INTEGRAÇÃO DO CONTROLE PREDITIVO À OTIMIZAÇÃO

4.1. Algoritmo MPC com otimização em duas camadas

Na estratégia de otimização em duas camadas apresentada na figura 2-2, o otimizador determina os valores ótimos do estado estacionário das variáveis manipuladas e controladas, estes valores são disponibilizados para o controlador preditivo multivariável, que é responsável pela implementação destes valores ótimos de operação no processo, sempre respeitando as restrições do problema dinâmico.

- (a) A camada superior, tendo em vista, as previsões futuras das variáveis controladas, as restrições do processo, os graus de liberdade do sistema e o objetivo econômico, determina através de um algoritmo de programação não linear, os “setpoint” ótimos das variáveis para o estado estacionário, que são enviados para a camada inferior e utilizados como “setpoint” das variáveis manipuladas e controladas.
- (b) O controlador multivariável é o mesmo MPC da camada inferior do capítulo anterior com uma alteração no uso dos “setpoint” das saídas.

A seguir serão descritos os algoritmos que compõem a estratégia de otimização em duas camadas.

Otimizador

O otimizador tem como funções, minimizar a função objetivo, manter as variáveis do processo, no estado estacionário, dentro dos seus limites operacionais e manter a predição das saídas controladas dentro de suas faixas de operação.

Definimos o problema de otimização como:

$$\min_{x,y,u} f_{eco}(x,y,u) \quad (4.1)$$

sujeito às restrições:

$$g(x,u,y) = 0 \quad - \text{Modelo estático}$$

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

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

onde u e y são os valores das entradas e saídas no estado estacionário.

Controlador multivariável

As funções do controlador são manter as variáveis do processo dentro dos seus limites operacionais e conduzir as variáveis manipuladas e controladas para os seus valores ótimos determinados pelo otimizador. No controlador é usado um modelo dinâmico linear normalmente obtido nas condições operacionais de projeto mais prováveis.

Portanto para o problema de controle temos:

$$\begin{aligned}
J_k^m = & \sum_{j=1}^p \left[y(k+j) - y^{SP} \right]^T Q \left[y(k+j) - y^{SP} \right] + \left(u(k+m-1) - u^{SP} \right)^T R_u \left(u(k+m-1) - u^{SP} \right) + \\
& + \sum_{j=0}^{m-1} \Delta u(k+j)^T R \Delta u(k+j)
\end{aligned}
\tag{4.2}$$

sujeito às restrições:

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

$$u_{\min} \leq u_{k-1} + \sum_{i=1}^j \Delta u(k+i) \leq u_{\max} \quad j = 0, 1, \dots, m-1$$

No caso descrito, os valores modificados dos “setpoint” das variáveis controladas (y_m^{SP}) são determinados da seguinte forma:

- (a) Para a predição da variável controlada maior que o seu limite superior ($y_{\max}$), o “setpoint” modificado (y_m^{SP}) é igualado ao respectivo limite superior e o peso não é alterado.
- (b) Para a predição da variável dentro dos limites operacionais ($y_{\min}$ e $y_{\max}$), o “setpoint” modificado (y_m^{SP}) acompanha a referida predição e os correspondentes pesos nos erros de predição são anulados.
- (c) Para a predição da variável controlada menor que seu limite inferior ($y_{\min}$), o “setpoint” modificado (y_m^{SP}) é igualado ao respectivo limite inferior ($y_{\min}$) e o peso não é alterado.

Assim, com o controle dinâmico efetuado por faixas, a equação (4.2) é transformada na (4.3) abaixo:

$$\begin{aligned}
J_k^m = & \sum_{j=1}^p \left[y(k+j) - y_m^{SP} \right]^T Q \left[y(k+j) - y_m^{SP} \right] + \left(u(k+m-1) - u^{SP} \right)^T R_u \left(u(k+m-1) - u^{SP} \right) + \\
& + \sum_{j=0}^{m-1} \Delta u(k+j)^T R \Delta u(k+j)
\end{aligned}
\tag{4.3}$$

4.2. Algoritmo MPC com otimização em três camadas

A estratégia de três camadas tem duas funções principais

- (a) Otimização do estado estacionário. A camada superior corresponde ao otimizador não linear com modelo estático rigoroso do processo e é realizada em uma frequência relativamente baixa, cujo valor depende da complexidade do modelo do processo (Zanin, 2001).
- (b) Implementação da solução ótima obtida acima pelo MPC (de duas camadas: intermediária e inferior), que é responsável pelo direcionamento do estado dinâmico do processo ao ponto ótimo de operação obtido pelo RTO. A camada intermediária corresponde ao otimizador com modelo estático linear enquanto que a camada inferior ao controle multivariável. A otimização linear e o controle dinâmico são resolvidos seqüencialmente e na mesma frequência.

A execução do MPC é dividida em duas partes:

- Controle dinâmico, que é responsável pela manutenção do processo dentro de suas restrições e de conduzi-lo até seu ponto ótimo de operação.
- Otimização linear, que é executada na mesma frequência que o controle dinâmico, cuja função é compatibilizar a solução obtida no RTO com o MPC, realizando pequenos ajustes devido aos distúrbios

que entraram no processo no momento do intervalo da execução do RTO.

A integração do RTO e MPC é alcançada através da função objetivo da camada de otimização linear do MPC. Na primeira camada do otimizador, o ponto ótimo de operação é obtido através da otimização não linear da função objetivo econômica. Desta maneira, quando o RTO está ativo o problema da camada de otimização corresponde ao problema definido em (4.1)

4.3. MPC com otimização em uma camada

Para dar início ao desenvolvimento da metodologia utilizada para a otimização em tempo real que será apresentada neste trabalho, vamos apresentar uma estratégia desenvolvida por Gouvêa (1997) e Zanin (2001). Sendo que esse último trabalho enfoca a implementação da estratégia em um sistema real da indústria de refino. Gouvêa (1997) apresentou a idéia da otimização acoplada ao controle multivariável em uma única camada com a inclusão de um modelo não linear, e a função objetivo econômica também não linear e altamente não convexa. Nesse trabalho também foi discutida a comparação da otimização em uma camada com a de duas camadas além do desenvolvimento de um algoritmo robusto de resolução de problemas de programação não linear.

Ao final de seu trabalho Gouvêa (1997) conclui que ambas as estratégias de otimização (uma e duas camadas) se mostraram práticas, onde modelos simplificados poderão ser utilizados desde que sejam capazes de representar o efeito das variáveis de maior relevância para o controle do processo e para a otimização. A validação da estrutura de otimização é um trabalho complexo, principalmente na otimização em uma camada, uma vez que a sintonia da malha fechada não é simples. Gouvêa (1997) ainda ressalta alguns pontos que devem ser observados na implementação da estratégia de otimização, a saber:

- Identificar o maior número possível de variáveis que afetam o problema de otimização.

- Os modelos econômicos além de refletir o real ganho do processo devem relacionar-se com as variáveis operacionais, já os modelos do processo podem ser simplificados, mas sabe-se que erros na modelagem podem acarretar em soluções sub-ótimas ou gerar pontos de operação ótimos fora da região viável de operação. Assim a estratégia deve ser validada por uma simulação.
- Os parâmetros de sintonia para a estratégia devem ser escolhidos de modo que um desempenho adequado seja estabelecido.

No trabalho desenvolvido por Zanin (2001) o objetivo principal era a implementação industrial da estratégia de otimização de uma camada no conversor de uma unidade FCC da PETROBRAS. Dentre as principais conclusões obtidas nesse trabalho podemos citar:

- A importância de se ter um bom modelo. Zanin (2001) realizou uma comparação entre a otimização com o modelo linear e o rigoroso do processo, ambos captam a tendência correta da estratégia de otimização, contudo o benefício econômico obtido através da utilização de cada um dos modelos é diferente, sendo que a abordagem que utiliza o modelo não linear para determinar o estado estacionário apresenta um desempenho econômico significativamente melhor. Esse resultado era de se esperar haja vista que o processo de craqueamento catalítico é acentuadamente não linear e possui ampla faixa de operação, assim é de fácil entendimento que a otimização linear (controlador de duas camadas) é bastante limitada, pois as variáveis não são modeladas adequadamente em toda a região operacional da unidade.
- Quanto a aplicação da otimização integrada ao controle e de duas camadas, Zanin (2001) conclui que apesar de suas estruturas de controle serem bastante distintas, estas apresentaram algumas semelhanças como, por exemplo, o fato de que as variáveis controladas serem mantidas dentro de suas faixas, gerando graus de liberdade para o otimizador incrementar a função objetivo econômica e seus procedimentos de sintonia são baseados

no balanceamento entre a velocidade do algoritmo de atingir o objetivo econômico ótimo e as amplitudes das restrições violadas.

De modo que o algoritmo proposto se torne mais robusto, e que seja possível implementá-lo, Zanin(2001) efetuou algumas alterações no controlador de Gouvêa(1997), como a exclusão da última ação de controle das parcelas do erro dinâmico na função objetivo e inclusão nesta, de uma nova parcela para que fosse possível a eliminação do “off-set” na variável manipulada em relação ao seu valor ótimo.

Embora as duas estratégias (uma e duas camadas) se mostrem eficientes para os casos simulados, a integração da otimização ao controlador preditivo em uma camada se mostrou superior por manter uma operação mais suave do processo. Assim, pode-se concluir que a vantagem desta integração dentro de um mesmo algoritmo consiste no maior sincronismo entre as ações de controle em função de que o problema dinâmico e o econômico estão sendo considerados em um mesmo algoritmo.

Na estratégia de otimização ilustrada na figura 1-2, o problema de otimização não linear no estado estacionário é resolvido simultaneamente com o controle preditivo multivariável.

A função objetivo do controlador MPC que integra as funções de regulação dinâmica e otimização econômica foi definida por Gouvêa (1997) da seguinte forma:

$$J_k^m = \sum_{j=1}^p [y(k+j) - y^{SP}]^T Q [y(k+j) - y^{SP}] + \sum_{j=0}^{m-1} \Delta u(k+j)^T R \Delta u(k+j) + P_{\text{optim}} f_{\text{econ}} \quad (4.4)$$

sujeito às restrições:

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

$$u_{\min} \leq u_{at} + \sum_{i=1}^j \Delta u(i) \leq u_{\max} \quad j = 0, 1, \dots, m-1$$

onde:

P_{otim} Peso da otimização

f_{otim} Função objetivo econômico

Se considerarmos que para esta estratégia, o controle dinâmico das variáveis também é efetuado por faixas, a equação (4.7) é substituída por:

$$J_k^m = \sum_{j=1}^p \left[y(k+j) - y_m^{SP} \right]^T Q \left[y(k+j) - y_m^{SP} \right] + \sum_{j=0}^{m-1} \Delta u(k+j)^T R \Delta u(k+j) + P_{otim} f_{econ} \quad (4.5)$$

CAPÍTULO 5. ALGORITMO PROPOSTO COM OTIMIZAÇÃO SIMPLIFICADA

Como vimos no capítulo anterior (Gouvêa,1997 e Zanin,2001), a estratégia de uma camada apresentou superioridade, com uma resposta dinâmica do processo mais suave quando comparada com a estratégia de duas camadas. No emprego desta estratégia as restrições operacionais podem ser facilmente incluídas, bem como restrições nas ações de controle.

A estratégia desenvolvida por Gouvêa (1997) e aplicada por Zanin(2001) se mostrou vantajosa, mas apresenta algumas desvantagens. O problema de otimização do controlador é uma SQP de grande porte que:

- Pode demorar mais que o período de amostragem para convergir.
- Pode não convergir ou o solver pode apresentar uma solução não viável.

Neste último caso a unidade fica sem controle.

Assim, justifica-se este trabalho que enfoca o desenvolvimento de um algoritmo de integração otimização/controle em uma camada sem as desvantagens do algoritmo de Gouvêa(1997) e Zanin(2001). Para tal consideremos um sistema multivariável com n_y variáveis controladas e n_u manipuladas. A qualquer instante k podemos representar as variáveis manipuladas e controladas como os vetores.

$$y(k) = [y_1(k), y_2(k) \dots y_{n_y}(k)]^T$$

$$u(k) = [u_1(k), u_2(k), \dots, u_{n_u}(k)]^T$$

Se a predição do estado estacionário da variável controlada correspondente a u é representada por $\hat{y}$ então a função objetivo econômica associada ao estado estacionário pode ser apresentada por uma função genérica do tipo:

$$F = f(\hat{y}, u) \quad (5.1)$$

Se, alterarmos o vetor de controle para $u + \Delta \bar{u}$, a aproximação de primeira ordem do gradiente da função objetivo F neste ponto é:

$$V_{u+\Delta u} = \left. \frac{dF}{du} \right|_{u+\Delta \bar{u}} = \left. \frac{dF}{du} \right|_u + \frac{d^2 F}{du^2} \Delta \bar{u} \quad (5.2)$$

Na otimização da operação se não houver restrições procura-se por um ponto extremo onde $V_{u+\Delta u} = 0$

Porém da equação (5.1) tem-se:

$$\frac{dF}{du} = \frac{\mathcal{F}_F}{\mathcal{F}_{\hat{y}}} \frac{\mathcal{F}_{\hat{y}}}{\mathcal{F}_u} + \frac{\mathcal{F}_F}{\mathcal{F}_u} \quad (5.3)$$

e

$$\frac{d^2 F}{du^2} = \left[\left(\frac{\mathcal{F}_{\hat{y}}}{\mathcal{F}_u} \right)^T \frac{\mathcal{F}^2 F}{(\mathcal{F}_{\hat{y}})^2} + \frac{\mathcal{F}^2 F}{\mathcal{F}_{\hat{y}} \mathcal{F}_u} \right] \frac{\mathcal{F}_{\hat{y}}}{\mathcal{F}_u} + \frac{\mathcal{F}_F}{\mathcal{F}_{\hat{y}}} \frac{\mathcal{F}^2 \hat{y}}{\mathcal{F}_u^2} + \left[\frac{\mathcal{F}_{\hat{y}}}{\mathcal{F}_u} \right]^T \frac{\mathcal{F}^2 F}{\mathcal{F}_u \mathcal{F}_{\hat{y}}} + \frac{\mathcal{F}^2 F}{\mathcal{F}_u^2} \quad (5.4)$$

Se o modelo rigoroso no estado estacionário for conhecido, as derivadas $\frac{\mathcal{F}_{\hat{y}}}{\mathcal{F}_u}$ e

$\frac{\mathcal{F}^2 \hat{y}}{\mathcal{F}_u^2}$ podem ser calculadas.

Usualmente $\frac{\mathcal{F}_{\hat{y}}}{\mathcal{F}_u}$ é definido como o ganho do processo que vamos neste trabalho denominar de K_p .

Substituindo as equações (5.3) e (5.4) na (5.2), temos:

$$V_{u+\Delta u} = \left[\frac{\partial F}{\partial \hat{y}} K_p + \frac{\partial F}{\partial u} \right] + \left[K_p^T \frac{\partial^2 F}{(\partial \hat{y})^2} K_p + \frac{\partial^2 F}{\partial \hat{y} \partial u} K_p + \frac{\partial F}{\partial \hat{y}} \left(\frac{\partial^2 \hat{y}}{\partial u^2} \right) + K_p \frac{\partial^2 F}{\partial u \partial \hat{y}} + \frac{\partial F}{\partial u^2} \right] \Delta \bar{u}$$

Que pode ser colocada na forma:

$$V_{u+\Delta u} = d + G \Delta \bar{u} \quad (5.5)$$

onde:

$\Delta \bar{u}$ pode ser interpretado como o movimento global no vetor de variáveis manipuladas.

$$\Delta \bar{u} = u(k+m-1) - u(k-1)$$

O vetor gradiente apresentado em (5.5) pode ser interpretado como um vetor de erros em relação a um “setpoint” que no ponto ótimo corresponde a zero. Assim, zerar esse vetor pode ser incluído como um dos objetivos do controlador.

Daí, o conjunto de equações de erros representado na equação (5.5), pode ser incluído na função custo do algoritmo MPC.

Assim sendo, a função objetivo do controlador aqui proposto que integra as funções de controle e otimização é escrita como:

$$\bar{J} = \sum_{j=1}^p \left[y(k+1) - y^{SP} \right]^T Q \left[y(k+1) - y^{SP} \right] + \sum_{j=0}^{m-1} \Delta u(k+j)^T R \Delta u(k+j) + V_{u+\Delta u}^T P_{otim} V_{u+\Delta u} \quad (5.6)$$

onde Q, R e P_{otim} são matrizes peso diagonais. P_{otim} define a importância da otimização econômica em relação aos erros das controladas.

Usando as equações (3.10) e (3.11) que definem o modelo em variáveis de estado adotado pelo controlador, temos as seguintes equações para predição da saída do processo ao longo do horizonte de predição.

$$y(k+1) = CAx(k) + CB\Delta u(k)$$

$$\begin{aligned}
y(k+2) &= CAx(k+1) + CB\Delta u(k+1) \\
&= CA \left[Ax(k) + B\Delta u(k) \right] + CB\Delta u(k+1) \\
&= CA^2 x(k) + CAB\Delta u(k) + CB\Delta u(k+1) \\
\mathbf{M} \quad \mathbf{M} \quad \mathbf{M} \quad \mathbf{M} \\
y(k+p) &= CA^p x(k) + CA^{p-1} B\Delta u(k) + CA^{p-2} B\Delta u(k+1) + \mathbf{L} + CA^{p-1} \Delta u(k+m-1)
\end{aligned}$$

Portanto na forma vetorial temos:

$$\begin{bmatrix} y(k+1) \\ y(k+2) \\ \mathbf{M} \\ y(k+p) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} CA \\ CA^2 \\ \mathbf{M} \\ CA^p \end{bmatrix} x(k) + \begin{bmatrix} CB & 0 & \mathbf{L} & 0 \\ CAB & CB & \mathbf{L} & 0 \\ \mathbf{M} & \mathbf{M} & \mathbf{O} & 0 \\ CA^{p-1}B & CA^{p-2}B & \mathbf{L} & CA^{p-m}B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta u(k) \\ \Delta u(k+1) \\ \mathbf{M} \\ \Delta u(k+m-1) \end{bmatrix}$$

Que pode ser escrita como

$$\bar{y} = \bar{A}x(k) + \bar{B}\Delta u$$

Podemos definir x^{SP} tal que $y^{SP} = Cx^{SP}$

Além disto, é claro que (5.5) pode ser escrita na forma:

$$z_{u+\Delta u}^T = d + [G \ G \ \mathbf{L} \ G] \begin{bmatrix} \Delta u(k) \\ \mathbf{M} \\ \Delta u(k+m-1) \end{bmatrix}$$

Conseqüentemente, a função objetivo definida em (5.6) pode ser descrita na forma:

$$\bar{J} = \left\{ \bar{A} \left[x(k) - x^{SP} \right] + \bar{B}\Delta u \right\}^T Q_p \left\{ \bar{A} \left[x(k) - x^{SP} \right] + \bar{B}\Delta u \right\} + \Delta u^T R_m \Delta u + [d + G\Delta u]^T P_{otim} [d + G\Delta u] \quad (5.7)$$

$$\bar{J} = \Delta u^T \bar{H} \Delta u + \bar{C}_t \Delta u + \bar{c}$$

onde:

$$\bar{H} = \bar{B}^T Q_p \bar{B} + R_m + G^T P_{otim} G$$

$$\bar{C}_i = 2(\bar{A}x(k) - x^{sp})^T Q_p \bar{B} + 2d^T P_{otim} G \Delta u$$

$$\bar{c} = \left[x(k) - x(k)^{sp} \right]^T \bar{A}^T Q_p \bar{A} \left[x(k) - x(k)^{sp} \right] + d^T P_{otim} d$$

Observa-se que neste caso o controlador preserva a simplicidade da QP embora integre em seu objetivo a busca pelo ponto ótimo de operação.

Assim o algoritmo proposto neste trabalho é baseado na solução do seguinte problema de otimização.

$$\min_{\Delta u} \bar{J} = \Delta u^T \bar{H} \Delta u + \bar{C}_i \Delta u + \bar{c} \quad (5.8)$$

sujeito a:

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

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

CAPÍTULO 6. APLICAÇÃO DO ALGORITMO PROPOSTO NA OTIMIZAÇÃO DO FCC

6.1. A unidade FCC – descrição do processo

Para testar o algoritmo proposto, é interessante considerar um processo de complexidade equivalente aos processos industriais típicos onde a integração da otimização em tempo real e o controle avançado tenham um papel relevante. Além disto, como os testes serão realizados por simulação, temos que escolher um processo para o qual tenhamos o modelo estático e dinâmico bem conhecidos e testados. Tal processo é o sistema reator-regenerador da unidade FCC encontrada em todas as refinarias de petróleo.

A unidade FCC é um exemplo desafiador típico de um problema de controle de processos da engenharia química (McFarlane et al, 1993). É um sistema intrinsecamente multivariável com restrições nas variáveis controladas e manipuladas. A unidade de FCC é constantemente afetada por distúrbios externos que tendem a distanciar o sistema de seus “set-points”. Uma média das últimas horas, para as variáveis manipuladas e controladas, pode levar a conclusões errôneas quando o sistema está sob condições transientes.

A solução para o problema da otimização dinâmica para sistemas não lineares já foi proposta na literatura, mas aparentemente nunca foi implementada industrialmente. Para o caso do FCC, o modelo dinâmico não linear já foi desenvolvido para vários casos (Kurihara, 1967, McFarlane et al. 1993, Moro & Odloak, 1995), mas além do problema numérico associado à otimização, a influência das variáveis de estado não mensuráveis do sistema parece ser uma etapa crítica para o problema. A unidade converte hidrocarbonetos de pesos moleculares elevados em basicamente gasolina e gás liquefeito, os quais são os derivados do petróleo de maiores valores agregados.

Figura 6-1 – Representação esquemática do modelo Kellogg para a unidade FCC

Será considerado o modelo Kellogg que está representado esquematicamente na figura 6-1 onde são apresentadas as malhas de controle regulatório. Na figura 6-1, as variáveis $u_{i=1,\dots,4}$ serão manipuladas pelo controlador avançado aqui estudado, ao qual será integrada a função objetivo. A unidade é alimentada com gasóleo proveniente de tanque. O gasóleo é primeiramente pré-aquecido com o óleo de reciclo da fracionadora e enviado para o forno onde a temperatura é elevada para uma faixa entre 230 – 300°C. A alimentação é então injetada no “riser” (reator tubular), onde é misturada com catalisador aquecido regenerado que fornece a energia necessária para a manutenção do processo endotérmico de craqueamento. No “riser”, devido ao contato com o catalisador quente, a carga é rapidamente vaporizada e iniciam-se as reações de craqueamento, as quais continuam ao longo do “riser”, onde o tempo de residência é de poucos segundos após a mistura da carga e catalisador. A separação dos produtos resultantes do processo de craqueamento acontece no vaso do reator, onde os hidrocarbonetos

são retirados do catalisador utilizado através do uso de vapor. O nível do leito fluidizado dentro do vaso do reator é controlado no DCS por um controlador que manipula a válvula “plug” no fundo do “stand-pipe” que conduz o catalisador gasto do reator para o primeiro estágio do regenerador. Durante as reações de craqueamento ocorre a deposição de coque na superfície do catalisador, reduzindo drasticamente a sua atividade. A geração de energia para as reações endotérmicas de craqueamento e a reativação do catalisador é efetuada, pela combustão do coque depositado no mesmo, no equipamento denominado regenerador, o qual é dividido em duas partes principais denominadas 1º e 2º estágio de regeneração. Cada um dos estágios é formado por um leito fluidizado de catalisador e, sobre a mesma, uma fase diluída composta pelos gases de combustão e catalisador arrastado da fase densa. Sobre as fases diluídas do 1º e 2º estágios é formada a fase diluída geral. A maioria do coque depositado no catalisador é queimado no primeiro estágio do regenerador e, como consequência a vazão de ar de combustão introduzido no primeiro estágio é mais que 90% de todo o ar do processo. Apenas uma fonte de ar está disponível para todo o processo, mas há controladores individuais no DCS para cada vazão de ar, para cada um dos estágios do regenerador. A diferença de pressão entre o regenerador e o reator é controlada pela manipulação da válvula “slide” na linha de gás do regenerador. Como a combustão é parcial, os gases da combustão desta região são direcionados para a caldeira de CO, onde pela conversão total do CO em CO₂, ocorre a geração de vapor de alta pressão. O vapor que deixa o reator passa por um conjunto de ciclones, onde ocorre a retenção das partículas de catalisador arrastadas, é enviado para a fracionadora principal que separa o óleo leve de circulação, gasolina e outras frações líquidas. O vapor do topo da fracionadora é alimentado para o compressor de “gás úmido” e então encaminhado para a seção de recuperação de gás na unidade de FCC. A pressão na fracionadora e conseqüentemente a pressão do reator são controladas pela manipulação da velocidade de rotação do compressor de “gás úmido”. O catalisador gasto, antes de ser conduzido ao regenerador, é mantido fluidizado no fundo do reator através da injeção de vapor de retificação, o qual remove os

hidrocarbonetos adsorvidos no catalisador. Através de um controlador de nível, o catalisador gasto é enviado à fase densa do 1º estágio do regenerador, onde se inicia o processo de combustão. Daí, o mesmo transborda sobre um vertedouro para o 2º estágio, no qual é concluído o processo de regeneração.

6.2. O problema de controle na unidade FCC

Na unidade FCC temos variáveis dependentes a serem controladas, ou mantidas dentro de uma faixa, de maneira a estabilizar a operação do processo ou a preservar a integridade mecânica do sistema. Nesta aplicação a temperatura do “riser” é controlada para viabilizar as reações de craqueamento. Em algumas aplicações do controle preditivo multivariável no FCC apresentadas na literatura (Grosdidier et al., 1993), o “setpoint” da temperatura do “riser” é considerada uma variável manipulada do controlador. Este “setpoint” é enviado para o DCS onde um controlador PID manipula a válvula do catalisador regenerado no fundo do “riser”. A severidade calculada da reação de craqueamento, como proposto por Wollaston (1975), representa a conversão da unidade e é uma importante variável controlada uma vez que afeta diretamente na obtenção dos produtos finais. A temperatura do regenerador também deve ser controlada para prevenir danos metalúrgicos ao sistema e garantir uma proporção adequada de óleo/catalisador. No regenerador do modelo F da Kellog temos dois estágios de regeneração e várias medições de temperatura em ambas as fases diluída e densa dos dois estágios. Controla-se a temperatura da fase densa do segundo estágio, uma vez que a temperatura da fase densa afeta diretamente a circulação de catalisador e a temperatura da fase diluída está ligada com as temperaturas dos ciclones que devem ficar abaixo do limite máximo. Outras variáveis do sistema como o ΔP na válvula do catalisador regenerado e a velocidade de rotação do compressor de “gás úmido” também devem ser controladas de modo a proteger o sistema. Um

ΔP mínimo na válvula do catalisador deve ser mantido de maneira a prevenir o fluxo reverso de gasóleo ao regenerador onde há presença de oxigênio podendo causar explosões. A velocidade do compressor geralmente apresenta um limite máximo associado à máxima capacidade da turbina do compressor.

Para testar o controlador proposto neste trabalho, vamos considerar uma configuração simplificada, onde o controlador pode manipular a vazão total de ar para o regenerador (u_1), a abertura da válvula do catalisador regenerado (u_2), vazão de carga (u_3) e a temperatura de carga (u_4). A vazão de ar tem uma restrição máxima relacionada com a capacidade do soprador de ar. A abertura da válvula de catalisador tem que operar obviamente em uma faixa de 0-100%. A temperatura de carga também tem uma restrição relacionada com a capacidade máxima do forno.

As variáveis controladas dinamicamente são tratadas como restrições, pois são mantidas dentro de limites superiores e inferiores. São elas, a saber:

- Temperaturas no leito do regenerador, y_1 para a temperatura da fase densa do 1º estágio do regenerador (T_{rg1}) e y_2 temperatura da fase densa do 2º estágio do regenerador (T_{rg2})

- y_3 severidade das reações de craqueamento (SEV) é uma estimativa da conversão. A Severidade aumenta com os acréscimos da temperatura de saída do riser e da relação catalisador/óleo para uma dada vazão de carga. Se mantida fixa a temperatura da reação, a severidade aumenta com o decréscimo da temperatura do regenerador e/ou carga.

- y_4 temperatura da saída do riser ou da reação (T_{rx}).

Associados com as variáveis manipuladas e controladas temos os objetivos econômicos que, podem ser traduzidos em simples objetivos operacionais como maximização da produção de gasolina, de óleo leve de circulação, de compostos C3/C4 entre outros. As variáveis incluídas nestes objetivos econômicos apresentam relações não-lineares com as variáveis de operação.

Nas simulações que serão aqui apresentadas, são consideradas restrições nas variáveis controladas e manipuladas. Estas restrições estão descritas na tabela 6-1.

variável	unidade	limite inferior	limite superior	Δ max
R_{tf}	(m ³ /dia)	5000	9840	4840
T_{fp}	(°C)	230	240	10
R_{ai}	(ton/h)	200	228	28
c_{TCV}	-	0.5	0.98	0.48
T_{rg1}	(°C)	665	675	-
T_{rg2}	(°C)	685	725	-
T_{rx}	(°C)	540	547	-
SEV	-	60	95	-

Tabela 6-1 Restrições de processo

Assim, as restrições operacionais são dadas por:

$$l_{R_{tf}} \leq R_{tf} \leq u_{R_{tf}} \quad (6.1)$$

$$-\Delta u_{R_{tf}}^{max} \leq \Delta u_{R_{tf}} \leq \Delta u_{R_{tf}}^{max} \quad (6.2)$$

$$l_{T_{fp}} \leq T_{fp} \leq u_{T_{fp}} \quad (6.3)$$

$$-\Delta u_{T_{fp}}^{max} \leq \Delta u_{T_{fp}} \leq \Delta u_{T_{fp}}^{max} \quad (6.4)$$

$$l_{R_{ai}} \leq R_{ai} \leq u_{R_{ai}} \quad (6.5)$$

$$-\Delta u_{R_{ai}}^{max} \leq \Delta u_{R_{ai}} \leq \Delta u_{R_{ai}}^{max} \quad (6.6)$$

$$l_{c_{TCV}} \leq c_{TCV} \leq u_{c_{TCV}} \quad (6.7)$$

$$-\Delta u_{c_{TCV}}^{max} \leq \Delta u_{c_{TCV}} \leq \Delta u_{c_{TCV}}^{max} \quad (6.8)$$

$$l_{T_{rg1}} \leq T_{rg1} \leq u_{T_{rg1}} \quad (6.9)$$

$$l_{T_{rg2}} \leq T_{rg2} \leq u_{T_{rg2}} \quad (6.10)$$

$$l_{T_{rx}} \leq T_{rx} \leq u_{T_{rx}} \quad (6.11)$$

onde Δu_i^{max} a máxima amplitude de variação na variável manipulada i

6.3. Modelos

Para a otimização em tempo real em uma camada serão necessários dois tipos diferentes de modelos, o dinâmico para a predição da trajetória das variáveis controladas e o modelo no estado estacionário para a predição do ponto ótimo de operação, que será utilizado para o cálculo da otimização.

O modelo dinâmico relaciona as ações de controle com a predição das variáveis de saída e devem ser relacionadas também com os valores ótimos previstos pelo otimizador. O algoritmo de controle avançado necessita de tal modelo.

Além disso, para a simulação da aplicação do novo algoritmo de controle/otimização precisamos de um modelo dinâmico rigoroso para o processo.

Modelo Dinâmico

Modelo identificado em funções de transferência

Normalmente o modelo dinâmico que é usado no cálculo das predições das variáveis controladas é um modelo linear obtido nas condições nominais (de projeto) de operação. Como resultado do procedimento de identificação do modelo obtém-se um conjunto de funções de transferência que são ajustadas aos dados experimentais. Neste trabalho, dentro do controlador, as funções de transferência são convertidas em um modelo de variáveis de estado.

Representação da planta para simulação

Para fins de análise de resultados, uma simulação do processo é realizada. Para que a representação apresente resultados mais próximos dos que serão obtidos em testes em planta, um modelo rigoroso do processo é utilizado. Por outro lado, também será conduzida uma simulação utilizando um modelo linear do processo.

Desta maneira as interferências referentes às imperfeições do modelo rigoroso, não vão interferir na avaliação do algoritmo que foi desenvolvido neste trabalho.

O modelo dinâmico utilizado neste trabalho identificado em função de transferência, encontra-se representado no apêndice A, já o modelo rigoroso utilizado foi o apresentado em Moro & Odloak, 1995.

Modelo no estado estacionário

Para a otimização será empregado um modelo empírico relacionado com os objetivos da otimizador utilizado pela PETROBRAS e que será descrito no item a seguir.

6.4. Objetivos da otimização e controle

O gás liquefeito do petróleo (GLP) e a gasolina são alguns dos produtos de maior valor agregado nas refinarias e estes são obtidos na unidade de FCC. Desta maneira o FCC contribui com uma parcela significativa para a obtenção de lucros na refinaria. Um dos objetivos da operação pode ser a maximização da produção de GLP. Desta maneira neste item serão apresentadas expressões que avaliem o rendimento obtido em GLP, gasolina, LCO e OD.

6.4.1. O modelo para cálculo dos objetivos econômicos

Para o cálculo do rendimento em GLP, foi utilizada uma correlação usada pela PETROBRAS que define a relação entre rendimento em GLP com a severidade da reação (conversão) e variáveis operacionais.

$$GLPV = \frac{0.556}{D20} F1(1 - F2) \quad (6.12)$$

sendo que $D20$ é a densidade relativa da alimentação de gasóleo que é uma propriedade medida e $F1$ e $F2$ são variáveis auxiliares calculadas como:

$$F1 = a_{10} + a_{11} \ln FSF + a_{12} CONV V + a_{13} CONV V^4 + a_{14} FSF^4 + a_{15} CONV V \times FSF \quad (6.13)$$

$$F2 = a_{20} + a_{21} FSF + \frac{a_{22}}{FSF} + a_{22} FSF^2 + a_{23} \left(\frac{CONV V \times T_{rx}}{FSF} \right)^2 + a_{24} \frac{CONV V \times T_{rx}}{FSF} \quad (6.14)$$

onde, FSF é um fator de caracterização da carga e $CONV V$ é a conversão obtida em % volumétrica. As constantes do modelo a_{10} a a_{15} e a_{20} a a_{24} são dadas na tabela 6-2.

ij	a_{ij}	ij	a_{ij}	ij	a_{ij}	ij	a_{ij}
10	-27.198427	13	-2.56093×10^{-7}	20	-0.5972	23	-0.000116
11	7.1285430	14	-9.963736×10^{-8}	21	0.015746	24	$-3.3024438 \times 10^{-6}$
12	0.55590500	15	0.008509	22	14.107127	25	0.00279

Tabela 6-2 Constantes do modelo de caracterização do rendimento em GLP

A propriedade FSF pode ser obtida em função de propriedades medidas da alimentação como:

$$FSF = \frac{75 - 0.065 PEMVF - 0.9S + 0.6PA - 0.26 \frac{PA}{D60}}{1 + 0.0000808 TNB} \quad (6.15)$$

onde, $PEMVF$ é o ponto de ebulição da carga, PA o ponto de anilina, S o teor de enxofre, $D60$ a densidade 60/60 e TNB o teor de nitrogênio básico.

A variável $CONV V$ é calculada pela relação:

$$CONV V = c_0 FSF (1 + c_1 SEV) + \frac{c_2}{FSF} (1 + c_3 SEV) + c_4 SEV + c_5 SEV^2 + c_6 SEV^3 \quad (6.16)$$

As constantes c_0 a c_6 são apresentadas na tabela 6-3.

i	c_i	i	c_i	i	c_i
0	-0.019164	3	0.1248132	6	3.32486×10^{-6}
1	0.021289919	4	1.145835		
2	-64.866937	5	-0.000997		

Tabela 6-3 Constantes do modelo de conversão volumétrica

A severidade da reação é dada por:

$$SEV = 100 \frac{A_{est}}{1 + A_{est}} \quad (6.17)$$

onde, A_{est} é calculada como:

$$A_{est} = 2.5 \times 10^5 \frac{RAZCO^{0.65}}{R_{ff}^{0.35}} \exp\left(\frac{-15000}{R(T_{rx} + 273.15)}\right) \quad (6.18)$$

onde,

R_{ff} = vazão de carga

T_{rx} = Temperatura do reator (riser)

RAZCO é a razão catalisador/óleo e é calculada como:

$$RAZCO = 2.761 \frac{T_{rx} - T_{fp}}{T_{rg2} - T_{rx}} + 1.805 \quad (6.19)$$

onde,

T_{rg2} = Temperatura no segundo estágio do regenerador

T_{fp} = Temperatura da carga

Percebemos que nas equações acima aparecem diversas variáveis operacionais as quais se relacionam entre si. A dependência entre elas advém dos fenômenos físico-químicos envolvidos no processo e que podem ser modelados (Moro & Odloak, 1995).

Para o cálculo da produção de gasolina usamos a relação:

$$GLNV = F_1 F_2 \quad (6.20)$$

onde GLNV é o rendimento volumétrico da gasolina em relação à carga da unidade.

Analogamente, os rendimentos em “Light Cycle Oil” e Óleo decantado são calculados através das expressões:

$$ODV = \frac{1}{3} \frac{D60_{tf}(100 - SEV)}{(D60_{OD} - D60_{LCO})} - D60_{LCO}(100 - SEV) \quad (6.21)$$

$$LCOV = 100 - CONVV - ODV \quad (6.22)$$

onde LCOV e ODV são os rendimentos volumétricos, respectivamente do óleo leve de reciclo e óleo decantado em relação à carga da unidade. As densidades ($D60_{LCO}$ e $D60_{OD}$) são obtidas pelas expressões:

$$D60_{LCO} = 141.5[134.3288 + API_{tf} - 3.424132 \times 10^{-6} FSF^3 + 3.5(0.001679 CONVV^2 - 2.0 \times 10^{-5} CONVV^3 - 6.820585 \times 10^{-8} (FSF \times CONVV)^2)]^{-1} \quad (6.23)$$

onde API_{tf} é a densidade em °API da carga, calculada como se segue:

$$API_{tf} = \frac{141.5}{D60_{tf}} - 131.5 \quad (6.24)$$

$$D60_{OD} = 141.5[66.9512 + 0.693431 API_{tf} + 1.8(1.962553 CONVV - 0.034062 CONVV^2 + 0.00017 CONVV^3)]^{-1} \quad (6.25)$$

Agora que dispomos das correlações para os rendimentos dos produtos mais importantes da unidade de craqueamento (GLPV, GLNV, LCOV e ODV) definidos pelas equações (6.20) a (6.25), podemos calcular a função lucro da unidade FCC.

$$f_{eco_ML} = R_{tf}(GLPV \times P_{GLP} + GLNV \times P_{GLN} + LCOV \times P_{LCO} + ODV \times P_{OD} - 100 C_{Rtf}) \quad (6.26)$$

onde P_{GLP} , P_{GLN} , P_{LCO} e P_{OD} são os preços do GLP, gasolina, LCO e óleo decantado respectivamente. C_{Rtf} é o custo da carga.

6.5. Aplicação do algoritmo ao FCC

6.5.1. Simulação do processo com modelo linear

Para testar o algoritmo desenvolvido no capítulo 5 desta dissertação, consideremos o caso em que a unidade de FCC é representada pelo modelo linear apresentado no Apêndice A. O FCC parte do estado estacionário e no instante igual a $t=50$ minutos o otimizador é ligado e tem como objetivo levar o sistema ao ponto ótimo de operação para maximização de GLP. Para melhor observar o algoritmo desenvolvido no capítulo 5 desta dissertação, realizamos a simulação da unidade com o modelo dinâmico linear. Nesta situação de simulação, todas as interferências e imperfeições do modelo rigoroso são eliminadas, possibilitando assim melhor observação dos resultados da integração da otimização no controlador.

A sintonia utilizada no controlador resultado da solução do problema definido em (5.8) é a seguinte:

$$m = 3; p = 40; N = 100; n_y = 4; n_u = 4;$$

$$R = \text{diag} (50 \ 50 \ 50 \ 50);$$

$$Q = \text{diag} (1 \ 1 \ 1 \ 1);$$

$$y_{\max} = [675 \ 725 \ 95 \ 547];$$

$$y_{\min} = [665 \ 685 \ 60 \ 540];$$

$$u_{\max} = [228 \ 98 \ 404 \ 240]^T;$$

$$u_{\min} = [200 \ 50 \ 404 \ 230]^T;$$

$$\Delta u_{\max} = \text{diag}([.02 \ .02 \ .02 \ .02]) * [u_{\max} - u_{\min}];$$

(a)

(b)

(c)

Figura 6-2 - Variáveis manipuladas para operação do FCC com maximização da produção de GLP com diferentes pesos da importância da otimização.¹

Na figura 6-2 mostramos os perfis das variáveis manipuladas durante a simulação. As diferentes curvas (cheia e tracejada) correspondem aos dois pesos do termo referente ao gradiente da função objetivo econômico (P_{otim} na equação 5.7) aplicados nesta simulação, ou seja, a importância da otimização dentro da integração com o controlador. A vazão de alimentação de carga foi mantida constante durante a simulação. Notamos que as variáveis tendem a estabilizar ao final do período de estudo. A variável que representa a temperatura de carga (figura 6-2c) decresce e atinge o seu limite mínimo (linha pontilhada), ou seja, satura. A abertura da válvula TCV (válvula de catalisador regenerado, figura 6-2b) estabiliza sem ocorrer a saturação e sem violar as restrições de processo. A abertura da válvula do catalisador regenerado apresenta grande influência na obtenção de maiores vazões de GLP e deve estar acima do valor para o estado

¹ Mantida constante a variável manipulada que representa a vazão de carga

estacionário sem otimização (estado estacionário no início da simulação). Isto é esperado, uma vez que se favorecida a reação catalítica, minimiza-se a obtenção de subprodutos indesejáveis, provenientes da reação térmica e maximizam-se os produtos finais desejados.

(a)

(b)

(c)

(d)

Figura 6-3 - Variáveis controladas para operação do FCC com maximização da produção de GLP com diferentes pesos da importância da otimização.

Na figura 6-3 encontram-se as variáveis controladas que tendem ao estado estacionário ao final do período de simulação. A variável que representa a temperatura no primeiro estágio do regenerador (figura 6-3a) atinge o seu valor mínimo (linha pontilhada) com pequena violação da restrição de mínimo e permanece abaixo do mínimo no restante da simulação. Já a temperatura do segundo estágio do reator (figura 6-3b) não viola a restrição de mínimo em nenhum momento da simulação e seu valor no estado estacionário ainda está dentro da faixa de restrições. O contrário ocorreu com a controlada que representa a temperatura no reator (figura 6-3d), que apesar de apresentar estabilização após o período de simulação do processo, violou a restrição de máximo em ambas as simulações, ou seja, para ambos os pesos de otimização. Mesmo no estado inicial, a temperatura do reator já está muito próxima de seu limite máximo.

Para operações otimizadas, as temperaturas no primeiro e segundo estágios do regenerador permaneceram abaixo da temperatura inicial, ainda sem otimização. Já a severidade e a temperatura do reator que tem grande influência na obtenção de maiores vazões de GLP aparecem acima do valor para o estado estacionário sem otimização.

Figura 6-4 - Função objetivo para operação do FCC com maximização da produção de GLP com diferentes pesos da importância da otimização.

O perfil da função objetivo econômico que traduz a produção volumétrica de GLP durante a simulação da otimização em tempo real com o emprego do modelo dinâmico linear é mostrada na figura 6-4. O algoritmo de otimização possibilitou que o valor da função objetivo fosse aumentado, saindo de um patamar de aproximadamente 20% e estabilizando em valores próximos a 20.5% para peso de otimização igual a 0.3 e atingindo 21.4 quando se dá maior importância para a otimização (peso 5).

6.5.2. Simulação rigorosa do processo

Nas análises apresentadas na seção anterior, toda a simulação do processo foi realizada através do modelo linear descrito no Apêndice A. Em seguida vamos verificar se as observações acima são mantidas quando utilizamos um modelo rigoroso do processo para a mesma simulação. No estudo descrito abaixo, foi utilizado o peso correspondente ao objetivo econômico de 0.3.

(a)

(b)

(c)

Figura 6-5 – Comparação entre os perfis das variáveis manipuladas na simulação com o modelo linear frente a simulação com o modelo rigoroso do processo.

As variáveis manipuladas apresentam perfis muito semelhantes durante toda a simulação. A temperatura da carga (figura 6-5c) estabiliza saturando a variável manipulada em ambas as simulações. A figura 6-5b mostra que a simulação linear vai estabilizar a variável em um valor aproximadamente 2% menor do que na simulação rigorosa do processo.

(a)

(b)

(c)

(d)

Figura 6-6 - Comparação entre os perfis das variáveis controladas na simulação com o modelo linear frente a simulação com o modelo rigoroso do processo.

Para as variáveis controladas não há diferenças significativas nos perfis das variáveis durante a simulação, todas apresentam trajetórias semelhantes e com a mesma tendência durante toda a simulação. A figura 6-6a que mostra o perfil da temperatura no primeiro estágio do regenerador sinaliza a violação da restrição de mínimo na simulação linear enquanto que na simulação rigorosa do processo, apesar da variável atingir o seu mínimo, não viola a restrição inferior.

Figura 6-7 – Comparação entre os perfis da produção de GLP na simulação com o modelo linear frente a simulação com o modelo rigoroso do processo.

Ambos os modelos mostraram a mesma tendência e trajetória para simular o ganho total para o processo na integração da otimização com o controle, não houve diferenças significativas na simulação dos resultados finais com o emprego dos diferentes modelos do processo.

CAPÍTULO 7. ADAPTAÇÃO DO MÉTODO DO GRADIENTE REDUZIDO PARA OTIMIZAÇÃO EM TEMPO REAL

7.1. Introdução

Como vimos no capítulo 6, a simples inclusão na função objetivo do controlador de um termo que penaliza o gradiente da função objetivo econômico pode forçar uma ou mais variáveis controladas do processo para fora de suas faixas de operação. Para evitar que variáveis controladas que tenham atingido seus máximos ou mínimos na última iteração sejam consideradas livres no cálculo da trajetória ótima a ser seguida pelo processo, vamos modificar o procedimento anterior empregando o gradiente reduzido na função objetivo. No método do gradiente, calcula-se uma direção de busca para a otimização da função objetivo, ou seja, direção na qual a função tende a caminhar para seu máximo (ou mínimo). Quando se faz uso de uma variável que já tenha violado a sua restrição, ou seja, que já tenha atingido o seu máximo ou mínimo, para o cálculo da direção do gradiente, o resultado é que a direção de busca resultante tende a forçar a variável ainda mais para fora da sua faixa de operação. Se as variáveis com restrições violadas forem desconsideradas, então o vetor da direção ótima terá componentes apenas na direção das variáveis que ainda apresentam mobilidade o suficiente para contribuir na otimização.

No algoritmo apresentado neste trabalho, uma avaliação das variáveis controladas acontece a cada iteração, comparando a trajetória calculada (predição das controladas, $\hat{y}$) com sua faixa de restrições. Caso ocorra a violação da restrição a variável é desconsiderada para a próxima iteração. Neste último caso inclui-se uma restrição que força a controlada a não se mover mais para fora.

7.2. O método do gradiente reduzido

O método do gradiente reduzido generalizado (GRG – generalized reduced gradient) foi desenvolvido primeiramente por Jean Abadie (Abadie & Carpentier, 1969) e tem sido estudado e melhorado por outros pesquisadores desde então. O método do gradiente reduzido é implementado no GRG2, que é um otimizador não linear muito divulgado [Lasdon et al.,1978; Lasdon & Waren,1978; Smith & Lasdon,1992].

Vamos exemplificar o algoritmo do gradiente reduzido para o problema mais simples que é caracterizado por um problema não linear com apenas uma restrição de igualdade (Edgar & Himmelblau, 2001)

Minimizar: $x^2 + y^2$

sujeito a: $x + y = 4$

Figura 7-1 – Contorno circular da função objetivo e a restrição linear para o exemplo de GRG, Edgar (2001)

A geometria deste problema é mostrada da figura 7-1. A restrição de igualdade é representada pela reta e os contornos circulares com centro na origem representam a função objetivo. Do ponto de vista geométrico, o problema está em encontrar um ponto na reta (da restrição) que é mais próximo da origem em $x=0$, $y=0$ onde a função objetivo possui o seu menor valor possível (sem restrição). A solução para o problema é em $x = 2$ e $y = 2$, onde o valor para a função objetivo é 8.

O método do gradiente reduzido assume uma abordagem natural e direta para a solução deste problema bem simplificado. O método utiliza a restrição de igualdade para solucionar a restrição para uma das variáveis em função da outra. Por exemplo, se solucionarmos o problema para x , a restrição se torna:

$$x = 4 - y \quad (7.1)$$

Toda vez que y assumir um valor, que satisfaça a restrição de igualdade, x pode ser facilmente calculado. Denominamos y de variável independente ou não básica e x de dependente ou básica. Uma vez que x é determinada por y , este problema pode ser reduzido a um problema de uma variável, temos então para a função objetivo:

$$F(y) = (4 - y)^2 + y^2$$

A função $F(y)$ é denominada função objetivo reduzida e o problema reduzido é minimizar $F(y)$ sem nenhuma restrição. Uma vez que um valor ótimo é encontrado para y , o valor ótimo de x é calculado a partir de (7.1)

Uma vez que o problema reduzido não apresenta restrições e é simples, ele pode ser solucionado analiticamente ou de forma iterativa através do algoritmo da direção descendente. Vamos resolvê-lo analiticamente. Fazendo o gradiente de $F(y)$ igual a zero denominado, *gradiente reduzido*, tem-se:

$$\nabla F(y) = \frac{dF(y)}{dy} = -2(4 - y) + 2y = -8 + 4y = 0$$

Resolvendo a simples equação acima temos que $y = 2$. Substituindo em (7.1) temos que $x = 2$ e $(x, y) = (2, 2)$ é certamente, igual a solução obtida geometricamente.

Com base na metodologia usada pelo método GRG, o algoritmo de controle/otimização apresentado no capítulo anterior é modificado da seguinte forma:

A cada instante de amostragem, resolvemos o algoritmo da seção anterior e, verificamos se os valores previstos para as variáveis controladas no estado estacionário ($\hat{y} = y(k + \infty)$) estão dentro de suas respectivas faixas de operação.

Daí temos duas possibilidades.

- a) As previsões das saídas estão dentro das faixas. Neste caso aplicamos no processo a solução controlador/otimizador definido no capítulo anterior.
- b) Para a saída i temos $\hat{y}_i \geq y_{\max,i}$ ou $\hat{y}_i \leq y_{\min,i}$, então nesse caso, ao problema do controlador/otimizador incluímos a seguinte restrição:

$$\Delta y_i = \sum_{j=1}^{nu} K_{pi,j} \Delta \bar{u}_j = 0$$

onde

nu é o número de variáveis manipuladas, $K_{pi,j}$ é o ganho da controlada i para uma movimentação Δu_j da variável manipulada j .

Assim, para que as variáveis que atingiram a restrição em um dado instante de amostragem durante a execução do algoritmo de otimização em tempo real com gradiente reduzido sejam excluídas do cálculo da trajetória ótima no próximo instante, é incluída uma restrição que mantém a previsão da variável controlada no valor atual.

Desta maneira, a cada instante em que o valor da previsão de uma saída controlada violar a faixa da variável controlada, a restrição não permite que o gradiente tenha um componente na direção dessa variável.

7.3. Aplicação do novo controlador ao FCC

Para testar o efeito do algoritmo apresentado neste capítulo consideramos novamente o caso em que a unidade de FCC opera no estado estacionário, quando é ligado o otimizador, com o objetivo de maximizar a produção de GLP. A sintonia utilizada no controlador é a mesma do caso anterior. Vamos analisar em uma simulação rigorosa do processo, os resultados da operação com o gradiente completo frente o emprego do algoritmo apresentado acima, com o método do gradiente reduzido. A sintonia adotada no controlador é a seguinte:

$$\begin{aligned}
 m &= 3; p = 40; N = 100; n_y = 4; n_u = 4; \\
 R &= \text{diag} (50 \ 50 \ 50 \ 50); \\
 Q &= \text{diag} (1 \ 1 \ 1 \ 1); \\
 y_{\text{máx}} &= [675 \ 725 \ 95 \ 547]; \\
 y_{\text{min}} &= [665 \ 685 \ 60 \ 540]; \\
 u_{\text{máx}} &= [228 \ 98 \ 404 \ 240]^T; \\
 u_{\text{min}} &= [200 \ 50 \ 404 \ 230]^T; \\
 \Delta u_{\text{máx}} &= \text{diag} ([.02 \ .02 \ .02 \ .02]) * [u_{\text{máx}} - u_{\text{min}}]; \\
 P_{\text{otim}} &= 0.3
 \end{aligned}$$

(a)

(b)

(c)

Figura 7-2 - Variáveis manipuladas para operação do FCC com maximização da produção de GLP em simulação rigorosa do uso do gradiente completo comparado com o uso do gradiente reduzido.

A figura 7-2 mostra os perfis das variáveis manipuladas durante a simulação com modelo rigoroso do controlador MPC integrado à otimização através da inclusão do gradiente na função objetivo. Também neste caso, a vazão de alimentação de carga foi mantida constante durante a simulação. Notamos que as variáveis estabilizam ao final do período do estudo. A estabilização da variável que representa a temperatura de carga acontece quando ela atinge o seu limite mínimo, ou seja, satura (figura 7-2c). A abertura da válvula TCV estabiliza sem violar as restrições de processo (figura 7-2b).

(a)

(b)

(c)

(d)

Figura 7-3 - Variáveis manipuladas para operação do FCC com maximização da produção de GLP em simulação rigorosa do uso do gradiente completo comparado com o uso do gradiente reduzido.

Na figura 7-3 encontram-se as variáveis controladas que também estabilizam após o período de simulação desta otimização. A variável que representa a temperatura no primeiro estágio do regenerador (figura 7-3a) atingiu seu valor mínimo com violação das restrições do processo nos primeiros instantes de otimização quando o gradiente é utilizado por completo, já no uso do gradiente reduzido, a variável apesar de atingir o seu mínimo não viola a restrição. Para esta estratégia a controlada que representa a temperatura no reator (figura 7-3d), sofreu a violação de sua restrição de máximo para ambas as simulações, contudo quando o gradiente reduzido é usado o controlador tende a trazer a variável para o seu limite máximo. Vemos que ao final do período de simulação, a violação com a consideração do gradiente reduzido foi de apenas 0.15°C enquanto que no caso anterior a violação no máximo da temperatura era de 1.3°C . Portanto, a consideração do gradiente reduzido é bastante efetiva sob o aspecto prático.

Figura 7-4 - Função objetivo econômica para operação do FCC com maximização da produção de GLP em simulação rigorosa do uso do gradiente completo comparado com o uso do gradiente reduzido.

A produção de GLP durante a simulação com o uso do gradiente reduzido é mostrada na figura 7-4. O algoritmo de otimização possibilitou novamente que a função objetiva fosse levada a um valor superior ao inicial, atingindo aproximadamente 20.4%, porém, abaixo do que o apresentado com o gradiente completo. Este valor menor se deve ao fato de que com o uso do gradiente reduzido não ocorreu excessiva violação da restrição da temperatura máxima no reator (variável controlada de número 4) que tem contribuição significativa na produção de GLP.

7.4. Simulação da mudança de campanha durante a otimização

Visando validar o algoritmo proposto neste trabalho em situações reais do dia a dia de uma unidade de FCC vamos realizar durante a simulação uma alteração nos objetivos de otimização.

A unidade inicia a operação e, após atingir o estado estacionário, é ligado o otimizador visando a maximização da produção de GLP, segundo a seguinte função objetivo:

$$f_{eco} = R_{tf} GLPV$$

Contudo frente a uma maior demanda por diesel, a estratégia da produção muda e no instante $t = 1000$ minutos, a otimização passa a buscar a maximização da produção de hidrocarbonetos pesados e simultaneamente a otimização do lucro. Para obter estes resultados, forçamos uma diminuição da conversão da unidade, diminuindo a restrição de máximo de 95 para 78 e, mudamos a função objetivo a ser maximizada. Neste último caso a função lucro foi modificada, forçando uma maior contribuição do LCO no lucro, aumentando o seu preço, como mostrado na função objetivo econômica representada abaixo:

$$f_{eco_ML} = R_{tf} (GLPVxP_{GLP} + GLNVxP_{GLN} + LCOVxP_{LCO} + ODVP_{OD} - 100C_{Rt_f})$$

Esta modificação favorece maior produção do LCO e entra em vigor após 1000 minutos da simulação. Para a simulação linear foi utilizada a seguinte sintonia:

$$m = 3; p = 40; N = 100; ny = 4; nu = 4;$$

$$R = \text{diag} (10 \ 10 \ 50 \ 50);$$

$$Q = \text{diag} (1 \ 1 \ 1 \ 1);$$

$$y_{\text{máx}}=[675 \ 725 \ \mathbf{95} \ 547];$$

$$y_{\text{min}}=[665 \ 685 \ 60 \ 540];$$

$$u_{\text{máx}}=[228 \ 98 \ 410 \ 240]^T;$$

$$u_{\text{min}}=[200 \ 50 \ 400 \ 230]^T;$$

$$\Delta u_{\text{máx}}=\text{diag}([.02 \ .02 \ .02 \ .02])*[u_{\text{máx}} - u_{\text{min}}];$$

$$P_{\text{otim}} = 5$$

$$P_{\text{GLP}} = 2.25$$

$$P_{\text{GLN}} = 4.8$$

$$P_{\text{LCO}} = 0.9$$

$$P_{\text{OD}} = 0.5$$

$$C_{\text{Rtf}} = 1$$

Do instante 1001 até o final da simulação apenas a restrição de máximo da severidade é alterada

$$y_{\text{máx}}=[675 \ 725 \ \mathbf{78} \ 547];$$

então, obtivemos os seguintes resultados:

(a)

(b)

(c)

(d)

Figura 7-5 – Perfil das variáveis manipuladas frente a alteração da estratégia de otimização.

Na figura 7-5 estão representados os perfis das variáveis manipuladas durante a simulação da otimização da unidade com mudança de objetivo de otimização durante o processo. O controlador é ligado aos 20 minutos após a estabilização do processo e seu objetivo é a maximização a produção do GLP, contudo após 1000 minutos, a estratégia da otimização é alterada e agora visa a maximização do lucro com conversão reduzida que, acaba por favorecer a obtenção de hidrocarbonetos pesados.

Mais uma vez, as variáveis ao final do período de estudo estabilizaram, apenas a temperatura de carga (figura 7-5d) atinge o seu valor mínimo (230°C) na primeira parte da otimização. Após a alteração do objetivo de otimização, a temperatura da carga é elevada até que atinge seu limite máximo (240°). A vazão da carga (figura 7-5c) para esta simulação não permaneceu constante, foi aberta a possibilidade para a mesma variar de 400 a 410. Assim a vazão para a primeira simulação (visando a maximização da produção de GLP) fica em seu valor mínimo, saturando a variável. Este mesmo perfil de saturação é observado quando é alterado o objetivo da otimização só que neste caso a vazão caminha para o seu valor máximo.

As variáveis representadas nas figuras 7-5a e b que mostram os perfis da vazão de ar total no regenerador e abertura da TCV transitam dentro da faixa sem atingir o seus limites.

(a)

(b)

(c)

(d)

Figura 7-6 – Perfil das variáveis controladas frente a alteração da estratégia de otimização.

Na figura 7-6 estão os perfis das variáveis controladas durante o processo de troca de objetivos de otimização descrito acima. Na figura 7-6a vemos a temperatura no primeiro estágio do regenerador violar brevemente o seu limite mínimo (665°C) no início da simulação, e manter-se no limite mínimo até a troca da campanha, quando é elevada até o seu limite máximo, sem violação da restrição. A variável referente a temperatura (figura 7-6d) do reator viola levemente a restrição de máximo na primeira otimização contudo, o controlador tende a trazê-la para o seu limite máximo na medida que a simulação se desenvolve e, na mudança do objetivo de otimização, ocorre uma queda e a variável permanece dentro de sua faixa. Na figura 7-3d que representa a conversão da unidade, podemos observar claramente que a alteração do limite máximo durante a simulação, buscando a maior obtenção de hidrocarbonetos pesados. O controlador busca uma redução na conversão para atender a nova restrição de máximo (78%)

Figura 7-7 – Perfil da Função objetivo GLP durante a mudança de estratégia da otimização.

Na figura 7-7 está descrita a trajetória da função objetivo produção de GLP, durante a simulação que teve dois objetivos diferentes de otimização: produção de GLP e o lucro, que tem sua função objetivo durante o mesmo período de simulação apresentada na figura 7-8.

Figura 7-8 - Perfil da Função objetivo lucro durante a mudança de estratégia da otimização.

Ambas as funções convergiram para o extremo desejado, possibilitando a maximização da produção do GLP no início da simulação da otimização e posteriormente a maximização do lucro.

A unidade atingiu o estado estacionário, com valores de produção de GLP e lucro superiores aos iniciais, caracterizando a otimização desejada.

7.5. Comentários

Para ambas as aplicações da estratégia, com ou sem o gradiente reduzido, a otimização utilizando a programação quadrática trouxe maximização da função objetivo econômico, como o desejado.

O “offset” ou, a não obediência à restrição de máximo, na temperatura do reator para a otimização com emprego do maior peso para a otimização com o gradiente não reduzido, possibilitou que se atingisse um maior valor para a função objetivo, contudo violando a restrição (figura 7-3d), o que não acontece na estratégia de otimização com o gradiente reduzido.

Um dos pontos importantes a serem avaliados neste trabalho é a convergência da função objetivo econômico para o extremo desejado. Neste caso apresentado acima, nenhum problema relacionado com a convergência foi observado, o que não acontece quando trabalhamos com a otimização da gasolina. Neste caso a função objetivo econômica converge para um extremo não desejado, o mínimo. Isto acontece, pois a posição inicial do sistema se encontra em uma região onde há um mínimo local. Caso a planta continue a operar nestas condições, a unidade vai trabalhar em prejuízo. Assim precisamos realizar uma análise capaz de nos sinalizar a necessidade de desligar o otimizador em caso de conversão para o extremo indesejado. Neste caso a operação será conduzida apenas com o controle preditivo. Isto será discutido no capítulo a seguir.

CAPÍTULO 8. ANÁLISE DA CONVERGÊNCIA DA OTIMIZAÇÃO ECONÔMICA COM O ALGORITMO PROPOSTO

8.1. Introdução

A forma geral de um problema de otimização não linear é:

$$\begin{aligned} \min f(x) \\ \text{sujeito a } a_i \leq g_i \leq b_i \quad i = 1, \mathbf{L}, m \\ \text{e} \quad l_j \leq x_j \leq u_j \quad j = 1, \mathbf{L}, n \end{aligned} \tag{8.1}$$

Nesta formulação $\mathbf{x}$ é um vetor com n variáveis de decisão $(x_1, \mathbf{L}, x_n)$, f é a função objetivo e g_i são funções de restrições, enquanto a_i e b_i são os mínimos e máximos das funções restrições respectivamente com $a_i \leq b_i$ e l_j e u_j são os limites superiores e inferiores das variáveis com $l_j \leq u_j$.

O problema de otimização apresentado em (8.1) é não linear se a função f ou uma ou mais funções g_i for não linear. Se não existir nenhuma g_i e nenhum limite para $x_1, \mathbf{L}, x_n$ o problema é sem restrições. Um problema com restrições lineares e uma função objetiva quadrática é chamada programação quadrática, que é o caso do problema de otimização deste trabalho.

Um vetor $\mathbf{x}$ é viável se ele satisfaz todas as restrições do problema. O conjunto de todos os pontos viáveis é denominado região viável F . Um ponto (vetor) $\mathbf{x}^*$ é denominado mínimo local se

$$f(x^*) \leq f(x) \tag{8.2}$$

para todo $\mathbf{x}$ em uma vizinhança (região) N ao redor de $\mathbf{x}^*$ com $\mathbf{x}$ diferente de $\mathbf{x}^*$. Independentemente do fato de que $\mathbf{x}^*$ é um mínimo local, outros mínimos podem existir fora desta denominada vizinhança N , o que significa que um problema de programação não linear (PNL), pode apresentar mais de um mínimo local se toda a região de $\mathbf{x}$ for avaliada. Outro importante conceito está relacionado com o mínimo global, que é uma única solução para um problema de PNL. O mínimo global ocorre se (8.2) englobar todos os $x \in F$. Analogamente para máximo local e máximo global. A maioria, não todos, os algoritmos para resolver problemas de PNL convergem a um extremo local a partir de um dado ponto inicial. Isto acontece no algoritmo desenvolvido neste trabalho, quando objetiva-se a maximização do lucro.

Aplicando o algoritmo desenvolvido no capítulo 7 desta dissertação consideremos o caso em que a unidade de FCC opera a partir de um estado estacionário, quando é ligado o otimizador, com o objetivo de maximizar a gasolina segundo a equação (6.20) do capítulo 6. Nesta simulação (linear) também está sendo considerada a aplicação do algoritmo modificado do método do gradiente reduzido.

As sintonias utilizadas no controlador são as seguintes:

$$m = 3; p = 40; N = 100; n_y = 4; n_u = 4;$$

$$R = \text{diag} (50 \ 50 \ 50 \ 50);$$

$$Q = \text{diag} (1 \ 1 \ 1 \ 1);$$

$$y_{\text{máx}} = [675 \ 725 \ 95 \ 547];$$

$$y_{\text{min}} = [665 \ 685 \ 60 \ 540];$$

$$u_{\text{máx}} = [228 \ 98 \ 404 \ 240]^T;$$

$$u_{\text{min}} = [200 \ 50 \ 404 \ 230]^T;$$

$$\Delta u_{\text{máx}} = \text{diag}([.02 \ .02 \ .02 \ .02]) * [u_{\text{máx}} - u_{\text{min}}];$$

$$P_{\text{otim}} = 5$$

O resultado desta otimização apresentou convergência para um mínimo local, contrariando todas as expectativas da otimização, que visava aumentar a produção de gasolina.

(a)

(b)

(c)

Figura 8-1 - Variáveis manipuladas para operação do FCC com otimização da produção de gasolina.

A figura 8-1 mostra as variáveis manipuladas durante a simulação da integração da otimização que visa a maximização da produção de GLN com o controle preditivo do processo estudado (FCC).

A figura 8-1a mostra a variação da vazão de ar total para ambos os estágios do regenerador, que decresce sem violar e tampouco atingir o mínimo, mas tende a estabilização. Também para este caso de estudo a temperatura da carga satura, atingindo sua restrição mínima. (figura 8-1c)

(a)

(b)

(c)

(d)

Figura 8-2 - Variáveis controladas para operação do FCC com otimização da produção de gasolina.

Os perfis das variáveis controladas para a otimização da produção de gasolina estão representadas na figura 8-2.

Figura 8-3 - Gráfico da função objetivo econômica – maximização da produção de gasolina

A convergência indesejada para o mínimo local da função objetivo econômica, pode ser observada na figura 8-3. Para evitar a obtenção de resultados indesejáveis como este, deve-se, portanto analisar o problema de otimização antes da aplicação do algoritmo de integração da otimização ao controle apresentado neste trabalho. Essa análise pode ser feita “off-line”.

8.2. Condições necessárias e suficientes para o extremo local

Para entender o problema de convergência da função objetivo econômico para um extremo indesejado vamos analisar o problema da convexidade e suas aplicações na otimização de sistemas não lineares. Vamos definir primeiramente conjunto convexo e função convexa.

Conjunto convexo: Um conjunto de pontos (ou região) é definida como *convexa*, se, todos os pares de pontos x_1 e x_2 contidos no conjunto, podem ser conectados por uma reta, também contida neste conjunto. Para cada par de pontos x_1 e x_2 em um conjunto convexo todo ponto $\mathbf{x}$ que pode ser escrito como uma combinação linear de x_1 e x_2 pertence ao conjunto.

Função convexa: A função $f(\mathbf{x})$ definida em um conjunto convexo é dita convexa se a seguinte relação for verdadeira:

$$f[gx_1 + (1-g)x_2] \leq gf(x_1) + (1-g)f(x_2)$$

Onde g é um escalar onde seu valor está no intervalo $0 \leq g \leq 1$. Se houver apenas sinal de desigualdade, a função não somente é convexa, como estritamente convexa.

O problema de programação convexa

Seja o seguinte problema

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) \\ \text{sujeito a} & g_i(x) \leq 0 \quad i = 1, \mathbf{L}, m \end{array}$$

No qual $f(\mathbf{x})$ é uma função convexa e cada restrição de desigualdade é uma função convexa, de uma maneira que as restrições formem um conjunto convexo. Então a seguinte propriedade pode ser tomada como verdadeira: o mínimo local de $f(\mathbf{x})$ é também o mínimo global.

Como consequência o problema:

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) \\ \text{sujeito a} & g_i(x) \leq 0 \quad i = 1, \mathbf{L}, m \\ & h_k(x) = 0 \quad k = 1, \mathbf{L}, r < n \end{array}$$

pode não ser um problema de programação convexa nas variáveis $x_1, \mathbf{L}, x_n$ se quaisquer das funções $h_k(x)$ for não linear.

Determinação de convexidade e concavidade

A definição de convexidade e de função convexa não é útil para se estabelecer onde uma região ou uma função é convexa, pois as relações devem ser aplicadas a um conjunto de pontos sem limitações. Contudo a propriedade a seguir é uma ferramenta útil vinda do conceito da convexidade de um conjunto de pontos. Um conjunto de pontos que satisfaça a relação:

$$\mathbf{x}^T H(\mathbf{x}) \mathbf{x} \leq 1$$

É convexo se a matriz Hessiana $H(\mathbf{x})$ é simétrica real e positiva-semidefinida. Onde:

$$H(\mathbf{x}) \equiv H \equiv \nabla^2 f(\mathbf{x})$$

Portanto, a Hessiana pode ser usada para identificar o caráter de extremo de uma função. A forma quadrática $Q(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T H \mathbf{x}$ é dita positiva definida se $Q(\mathbf{x}) > 0$ para todos os $\mathbf{x} \neq 0$ e, dita positiva semi-definida se $Q(\mathbf{x}) \geq 0$ para todos os $\mathbf{x} \neq 0$. Analogamente para negativa semi e definida.

Que pode ser resumido da seguinte maneira:

1. H é positiva - definida se somente se $\mathbf{x}^T H \mathbf{x} > 0$ para todos os $\mathbf{x} \neq 0$.
2. H é negativa – definida se somente se $\mathbf{x}^T H \mathbf{x} < 0$ para todos os $\mathbf{x} \neq 0$.

3. $\mathbf{H}$ é positiva - semidefinida se somente se $\mathbf{x}^T \mathbf{H} \mathbf{x} \geq 0$ para todos os $\mathbf{x} \neq 0$.
4. $\mathbf{H}$ é negativa - semidefinida se somente se $\mathbf{x}^T \mathbf{H} \mathbf{x} \leq 0$ para todos os $\mathbf{x} \neq 0$.
5. $\mathbf{H}$ é indefinida se $\mathbf{x}^T \mathbf{H} \mathbf{x} < 0$ para alguns $\mathbf{x}$ e $\mathbf{x}^T \mathbf{H} \mathbf{x} > 0$ para outros $\mathbf{x}$.

8.2.1. Programação não linear com restrições

O problema estudado nesta dissertação tem restrições de igualdade apenas quando se faz uso do algoritmo modificado do gradiente reduzido como apresentado no capítulo 7. Contudo vamos descrever todo o procedimento da análise da convexidade, para que este trabalho também possa contribuir e servir de referências a outros problemas se não apenas o apresentado aqui.

Problemas com Restrições de igualdade

Supondo o problema de programação não linear:

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) \\ \text{sujeito a} & h(x) = 0 \end{array} \quad (\mathbf{P} \ 1)$$

Sendo a solução ótima para este problema igual a $\mathbf{x}^*$, o gradiente da função objetivo $\nabla f(\mathbf{x}^*)$ é ortogonal ao plano tangente da restrição em $\mathbf{x}^*$. Normalmente $\nabla h(\mathbf{x}^*)$ é ortogonal ao plano tangente plano tangente a $h(\mathbf{x}^*)$. Desta maneira pode-se afirmar que $\nabla f(\mathbf{x}^*)$ e $\nabla h(\mathbf{x}^*)$ são colineares, apesar da possibilidade de apresentarem diferentes direções. Isto significa que estes vetores devem ser múltiplos um do outro.

$$\nabla f(\mathbf{x}^*) = I \nabla h(\mathbf{x}^*) \quad (8.3)$$

Onde I é denominado *multiplicador de Lagrange* para a restrição $h=0$.

A relação da equação (8.3) deve ser respeitada em cada ótimo local para qualquer restrição de igualdade em uma programação não linear, envolvendo funções

“suaves”, caso contrário, quaisquer movimentos ao longo das restrições melhoram o valor da função objetivo, reduzindo seu valor em caso de minimização e incrementando o valor no caso de maximização.

Assim a relação (8.3) pode ser escrita na seguinte forma:

$$\nabla f(x^*) + I \nabla h(x^*) = 0 \quad (8.4)$$

Sendo $L(x, I)$ a função Lagrangeana:

$$L(x, I) = f(x) + I h(x) \quad (8.5)$$

Da definição apresentada em (8.5) temos que:

$$\nabla_x L(x, I)_{(x^*, I^*)} = 0 \quad (8.6)$$

Assim o gradiente da função Lagrangeana em relação a $\mathbf{x}$ avaliada em (x^*, I^*) deve ser zero. A equação (8.6) e a condição de viabilidade $h(x^*) = 0$ constituem as condições de primeira ordem necessárias para a existência de um extremo.

Estas condições necessárias de primeira ordem, para problemas com restrições de igualdade são conhecidas como condição de Kuhn-Tucker.

A condição de Kuhn-Tucker (KT) é baseada no fato de que em qualquer extremo local de um problema de otimização com restrições, nenhuma alteração nas variáveis do problema (mesmo que pequena), possibilita um melhor resultado para a função objetivo.

Problemas com Restrições de desigualdade

Para o problema de otimização (P2).

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) \\ \text{sujeito a} & g_j(x) \leq c_j \quad j = 1, \mathbf{L}, r \end{array} \quad (\mathbf{P\ 2})$$

Em $\mathbf{x}^*$, ∇f está contido no cone formado pelos gradientes negativos das restrições ativas.

Para que a condição de KT possa ser atendida, deve existir um multiplicador de Lagrange tal que:

$$\begin{aligned} \nabla f(x^*) &= \sum_{j \in I} m_j^* [-\nabla g_j(x^*)] \\ m_j^* &\geq 0, \quad j \in I \end{aligned}$$

e I é o conjunto dos índices das restrições de desigualdades ativas.

Podemos redefinir a condição de KT e incluir todas as restrições definindo os multiplicadores $m_j^* = 0$ se $g_j(x^*) < c_j$. Então podemos dizer que $m_j^* \geq 0$ se $g_j(x^*) = c_j$. Esta propriedade onde restrições de desigualdade inativas apresentam multiplicadores de KT com valor igual a zero é denominada folga complementar. Assim a condição KT final fica:

$$\nabla f(x^*) + \sum_{j=1}^r m_j^* \nabla g_j(x^*) = 0 \quad (a)$$

$$m_j^* \geq 0, \quad m_j^* [g_j(x^*) - c_j] = 0 \quad (b) \quad (8.7)$$

$$g_j(x^*) \leq c_j, \quad j = 1, \mathbf{L}, r \quad (c)$$

Os multiplicadores de Lagrange para o caso de restrições de desigualdade são portanto similares aos das restrições de igualdade. Podemos então definir a função Lagrangeana.

$$L(x, m) = f(x) + \sum_{j=1}^r m_j [g_j(x) - c_j]$$

onde m_j são os multiplicadores para as restrições de desigualdade $g_j(x) < c_j$, então a condição em (8.7) diz que $L(x, m)$ deve estar “estacionário” em $\mathbf{x}$ em (x^*, m^*) com os multiplicadores satisfazendo a condição (8.7).

Problemas com restrições de igualdade e desigualdade

Neste caso o problema de otimização é definido por:

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) \\ \text{sujeito a} & g_j(x) \leq c_j \quad j = 1, \mathbf{L}, r \\ & h_i(x) = b_i \quad i = 1, \mathbf{L}, m \end{array} \quad (\mathbf{P\ 3})$$

Definidos os multiplicadores de Lagrange como I_i associados com as restrições de igualdade e m_j para as desigualdades e, a função Lagrangeana como:

$$L(x, I, m) = f(x) + \sum_{i=1}^m I_i [h_i(x) - b_i] + \sum_{j=1}^r m_j [g_j(x) - c_j] \quad (8.8)$$

Então, se x^* é um mínimo local do problema P3, existe um vetor dos multiplicadores de Lagrange I^* e m^* , de modo que $\mathbf{x}^*$ é um ponto estacionário da função $L(x^*, I^*, m^*)$ tal que:

$$\nabla_x L(x^*, I^*, m^*) = \nabla f(x^*) + \sum_{i=1}^m I_i^* \nabla h_i(x^*) + \sum_{j=1}^r m_j^* \nabla g_j(x^*) = 0 \quad (8.9)$$

e a folga complementar para as desigualdades:

$$m_j^* \geq 0, \quad m_j^* [g_j(x^*) - c_j] = 0, \quad j = 1, \mathbf{L}, r$$

Assim, se aplicarmos os critérios acima apresentados para este trabalho veremos que:

Todas as restrições de igualdades e desigualdade são lineares, por se tratarem de limites mínimos e máximos das variáveis do processo ou a condição de anulamento do gradiente em algumas direções. Então:

$$\nabla_x L(x^*, I^*, m^*) = \nabla f(x^*) + \sum_{i=1}^m I_i^* \nabla \underbrace{h_i}_{\substack{\text{constante} \\ \text{123}}} (x^*) + \sum_{j=1}^r m_j^* \nabla \underbrace{g_j}_{\substack{\text{constante} \\ \text{123}}} (x^*) = 0 \quad (8.10)$$

O que implica em:

$$\nabla_x^2 L = \nabla^2 f(x^*) \quad (8.11)$$

Assim, a análise da convergência do problema em questão, a otimização do FCC nas condições presentes neste trabalho, deverá ser conduzida através da análise do Hessiano da função objetivo em relação às variáveis de entrada como apresentado em (8.11).

Uma vez que objetivamos a maximização, o Hessiano da função objetivo deverá ser negativo ou na pior das hipóteses negativo semidefinido, para que possamos garantir a convergência para o extremo desejado.

Caso o Hessiano não apresente seus autovalores negativos ou iguais a zero, a otimização deverá ser desligada, ficando então o sistema disponível apenas ao controle e não mais a otimização.

Assim podemos resumir as condições para extremos locais e globais como:

Condição Necessária e Suficiente de Primeira Ordem

A condição de KT incorpora ambas as condições suficientes e necessárias para a otimização de problemas convexos suaves. No problema de otimização P3, se a função objetivo $f(\mathbf{x})$ e as restrições de desigualdades $g_j(x)$ são convexas, e as restrições $h_i(x)$ forem lineares, então a região viável do problema é convexa e, qualquer mínimo local é um mínimo global. Trata-se, portanto do caso apresentado por este trabalho, onde todas as restrições de igualdade e desigualdade são lineares, quando aplicado o algoritmo modificado do gradiente reduzido. Ainda, se $\mathbf{x}^*$ é uma solução viável, se todas as funções do problema tenham derivadas de ordem um em $\mathbf{x}^*$ contínuas e, os gradientes das restrições ativas em $\mathbf{x}^*$ são independentes, então $\mathbf{x}^*$ é um ponto ótimo, se somente se as condições de KT são satisfeitas em $\mathbf{x}^*$.

Condição Necessária e Suficiente de Segunda Ordem

As condições de KT são satisfeitas em quaisquer pontos mínimos locais ou máximos e em pontos sela. Se (x^*, I^*, m^*) é um ponto KT para o problema P3 e, as condições suficientes e necessárias de segunda ordem são satisfeitas, otimização está garantida.

As condições de otimização de segunda ordem envolvem matrizes de derivadas parciais em relação a $\mathbf{x}$ (A matriz Hessiana da função Lagrangeana) e pode ser escrita da seguinte forma:

$$y^T \nabla_x^2 L(x^*, I^*, m^*) y > 0 \quad (8.12)$$

Para todos os vetores y diferentes de zero de modo que

$$J(x^*) y = 0 \quad (8.13)$$

onde $J(\mathbf{x}^*)$ é a matriz cujas linhas são os gradientes das restrições que são ativas em $\mathbf{x}^*$. A equação (8.13) define o conjunto de vetores y que são ortogonais aos

gradientes das restrições ativas. Estes vetores constituem o plano tangente às restrições ativas.

Assim a equação (8.12) demanda que a Hessiana da matriz Lagrangeana seja positiva-definida para todos os vetores y neste plano tangente. Se o sinal “>” em (8.12) der lugar ao “ $\geq$ ”, então as condições apresentadas nas equações (8.12) e (8.13) somadas às condições de KT são as condições suficientes e necessárias de segunda ordem para um mínimo local.

Vamos então analisar os autovalores para o caso da otimização da produção de GLN, cujos gráficos estão representados nas figuras 8.1, 8.2 e 8.3.

autovalores	<i>400 minutos</i>	<i>600 minutos</i>	<i>800 minutos</i>
e_1	13.6	14.2	14.2
e_2	0	0	0
e_3	0	0	0
e_4	0	0	0

Tabela 8-1 Autovalores para o Hessiano da função objetivo econômica da maximização da produção de gasolina

Podemos verificar que os valores em negrito não atendem a condição necessária e suficiente para a obtenção de uma solução ótima de máximo da função objetivo econômica. Todos os Hessianos em relação ao autovalor e_1 não atendem ao critério para a convergência ao extremo desejado. Assim abriu-se a possibilidade para que durante a execução do algoritmo de otimização, a direção de busca utilizada fosse a direção de um mínimo local dentro da região viável, não atendendo as expectativas da otimização. Desta maneira com o resultado da análise destes autovalores a otimização deverá ser desligada.

Agora vamos fazer a mesma análise para um a função objetivo que convergiu para um extremo desejado, no caso da maximização da produção de GLP, cujos gráficos estão apresentados nas figuras 7.2, 7.3 e 7.4 do capítulo 7.

<i>autovalores</i>	<i>400 minutos</i>	<i>600 minutos</i>	<i>800 minutos</i>
e_1	-10.4	-10.6	-10.6
e_2	0	0	0
e_3	0	0	0
e_4	0	0	0

Tabela 8-2 Autovalores para o Hessiano da função objetivo econômica da maximização da produção do GLP

Neste caso os autovalores do Hessiano da função objetivo são negativos embora alguns estejam bem próximo a zero ou até ligeiramente positivos devido ao método aproximado de obtenção do Hessiano. A consequência é que a otimização desta função objetivo vai resultar em um ponto ótimo máximo na região viável em questão como já observado.

CAPÍTULO 9. CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA A CONTINUIDADE DOS ESTUDOS

A contribuição deste trabalho pode ser dividida em duas partes. A primeira é com relação à integração da otimização ao controlador utilizando a estratégia de uma camada, ou seja, a otimização é realizada juntamente com o controle preditivo. A função objetivo do problema é composta pelas parcelas do controle dinâmico e da otimização econômica. Para tal foi proposta uma estratégia onde o gradiente da função objetivo econômica foi incluída na função objetivo do controlador. A idéia é que o gradiente seja minimizado juntamente com a minimização dos erros preditos e a suavização das ações de controle. A segunda contribuição deste trabalho é com relação a uma modificação do algoritmo acima que considera o gradiente reduzido para a solução do problema de controle em tempo real quando uma ou mais saídas atingem suas restrições. Este algoritmo baseado no gradiente reduzido modificado possibilita a manutenção de variáveis controladas dentro de suas faixas de operação calculando adequadamente as entradas de tal forma que as variáveis que violaram suas restrições, sejam impedidas de realizar movimentos na direção das restrições que foram violadas.

O algoritmo de otimização desenvolvido neste trabalho apresentou um baixo tempo computacional quando comparado com o algoritmo de Gouvêa (1997). Isto por que o problema resolvido é uma QP em vez de uma SQP como no método de Gouvêa (1997). Outro fator que contribui para a minimização do tempo computacional é o emprego do modelo linear em variáveis de estado, que resulta em matrizes de dimensões menores para a predição das trajetórias das variáveis controladas.

No caso estudado, o algoritmo convergiu para o máximo conforme desejado quando o objetivo econômico era aumentar a produção de GLP ou o lucro da unidade. Entretanto, devemos ressaltar que a minimização do gradiente apenas

garante a convergência para um ponto extremo de mínimo ou máximo, quando o Hessiano é positivo definido ou negativo definido. Portanto, a aplicação do método deve ser precedida de uma análise da convexidade do problema de otimização.

A análise necessária para a aplicação do método é portanto relativamente de fácil execução, e impede que a otimização resulte na convergência a um extremo não desejado. Uma vez que a análise seja feita e é caracterizada a convergência para o extremo indesejado, o otimizador deve ser desligado e o controlador irá executar apenas a função de controle da unidade, evitando assim que a unidade opere em prejuízo ou na direção contrária ao objetivo econômico.

No caso em que existe um extremo adequado na região de operação de interesse, a estratégia proposta facilmente substitui a estratégia de otimização em uma camada apresentada na literatura, que inclui explicitamente na camada do controlador a função objetivo econômica. A estratégia apresentada neste trabalho possibilitou a simplificação da função objetivo econômica, bem como a utilização da programação quadrática ao invés da programação seqüencial quadrática, reduzindo o tempo computacional. O uso da aproximação de primeira ordem do gradiente da função objetivo permitiu o sincronismo entre as ações de controle e de otimização.

Já com relação a aplicação do gradiente reduzido, percebemos que esta estratégia permite a manutenção das variáveis controladas dentro de suas faixas, não gerando desvios significativos em relação às restrições de operação, além da convergência para o extremo desejado. A inclusão do gradiente reduzido não acarretou em aumento do tempo computacional e o algoritmo continua simples e de fácil utilização.

Com relação ao emprego de diferentes modelos para a simulação do processo, podemos concluir que o modelo dinâmico linear reflete adequadamente o efeito das variáveis e quando a simulação utilizando o modelo linear é comparada com a simulação rigorosa, as duas apresentam tendências muito próximas e a simulação rigorosa pode ser facilmente substituída pela simulação linear. Este ponto é um fator que agrega no sentido da minimização do tempo computacional em estudos de outras estratégias de controle/otimização.

9.1. Sugestões para a continuidade dos estudos

Com relação a continuidade deste trabalho, seria interessante estudar a estabilidade e robustez da estratégia aqui proposta. Uma primeira etapa deste estudo seria a integração da otimização como aqui proposto, ao controlador de horizonte infinito desenvolvido anteriormente no LSCP. O termo referente ao gradiente da função econômica pode ser interpretado como uma incerteza que tende a estabilizar o MPC. Provavelmente os estudos Rodrigues e Odloak (2003) e Odloak (2004) possam ser estendidos a este caso.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS:

- ABADIE,J. E CARPENTIER,J. **Generalization of the Wolfe Gradiante Method to the use of Nonlinear Constraints.** In **Optimization**, R.Fletcher, ed Academic Press, New York,1969.
- ABEL, X. et al.**Optimizing control of simulated moving beds-experimental implementation.** J Chromatography A, 1092 (1) 2-16,2005.
- BACKX,T. ;BOSGRA,O E MARQUARDT,W. **Integration of Model Predictive Control and Optimization of Processes.** ProclFAC Symposium *ADCHEM, Pisa, 249-260, 2000.*
- EDGAR,T.F.; HIMMELBLAU,D.M.**Optimization of chemical processes.** McGraw-Hill,Texas,2001
- ENGELL,S. **Feedback control for optimal process operation.** Proc IFAC *Symposium ADCHEM*, Gramado, 13-16, 2006.
- ERDEM, G. et al. **Automatic control of simulating moving beds.** Part I: Linear isotherms . Ind. Eng. Chem. Res., 43 405-421, 2004 (a).
- ERDEM, G. et al. **Automatic control of simulating moving beds.** Part II: Nonlinear isotherms . Ind. Eng. Chem. Res., 43 3895-3907, 2004 (b).
- GARCIA, C.E. E MORARI, M., **Internal model control, A unifying review and some results**,Ind.Eng.Chem.Proc.Des.Dev.,21,308-323,1982.
- GOUVÊA, M.T., **Uso de um algoritmo SQP na otimização de processos químicos contínuos em tempo real.** São Paulo, 1997. Tese de Doutorado – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo.
- GOUVÊA, M. T. E ODLOAK, D. **One-layer real time optimization of LPG production in the FCC unit: procedure, advantages and disadvantages.** Computers Chem. Engng., 22, Suppl., p. 191 (1998).
- GROSDIDIER,P.; MASON,A.; AITOLATHI,A. E HEINOMEN,P. E VANHAMAKI V., **FCC unit reactor regenerator control, Computer an Chem Engngn.**,17,2,165-179,1993.
- KEARNEY,M. E RIEB, K. **Time variable simulated moving bed process.** US patent 5.102.553,1992

- KURIHARA,H. **Optimal Control of fluid catalytic cracking processes**, Sc. D. Thesis, MIT,1967.
- KWONG, W. H. **Otimização de Plantas Industriais Complexas**, Tese de Doutorado, Universidade de São Paulo/EPUSP, São Paulo (1992).
- LATOUR, P.R., **Online computer optimization 2: benefits and implementation**. Hydrocarbon Processing, Julho, p 219, 1979
- LASDON,L. et al. **Design and Testing of a Generalized Relaxed Gradient Code for Nonlinear Programming**. ACM Trans Math Soft, 1978
- LASDON,L.S. E WAREN,A.D. **Generalized Reduced Gradient Software for Linearly and Nonlinearly Constraints Problems**. Design and Implementattion of Optimization Software, H.J. Greenberg, ed Sijthoff and Noordhoff, Holland, 1978
- LJUNG, L. **System Identification: theory for the use**. Prantice Hall, 1987
- MACIEJOWSKI, J.M. **Predictive control with constrains**, *Prentice Hall*, Essex,2002.
- MARLIN, E.T.; FORBES, J.F.**Selecting the proper location for economic optimization: multivariate control or RTO**. In: NPRA Computer Conference, National Petroleum Refiners Association, paper CC-95-125, Nasville, November 6-8, 1995.
- MCFARLANE,R.C. E REINEMAN,R.C.; BARTEE,J.F.E GEORGAKIS,C. **Dynamic simulator for a model IV fluid catalytic cracking unit**, Comp. and Chem. Eng.,17,3,275-300,1993.
- MORO, L. F. L. **Desenvolvimento de um controlador preditivo multivariável para um conversor industrial de craqueamento catalítico**. São Paulo. 1992. Dissertação de Mestrado. Escola Politécnica, Universidade de São Paulo.
- MORO,L.F.L. E ODLOAK,D. **Constrained multivariable control of fluid catalytic cracking converters**. Journal of Process Control, 5,1-11, 1995.
- MORO,L.F.L.; SPANDRI, R.; E ODLOAK,D. **Constrained multivariable control of fluid catalytic cracking converters: a practical application**. In: A.I.Ch.E Spring Meeting, paper 241c,Houston,March 19-23.1995.

- MORO, L.F.L. **SICON - Uma solução sliente servidor para controle avançado.** IV Congresso PETROBRAS de Informática e Telecomunicações – INFTEL, São Paulo, 1997.
- NATARAJAN, S. E LEE, J.H. **Repetitive model predictive control applied to a simulated moving bed chromatography system.** *Comp. Chem. Eng.*, 24, 1127-1133, 2000
- ODLOAK, D. E GOUVÊA, M. T. **Control and optimization of a fluid catalytic cracking converter.** *Proc. CBA*, p. 1411, 1996.
- ODLOAK, D. **Extended Robust Model Predictive Control.** *AIChE Journal*, 50, 1824-1836, 2004.
- OGATA,K. **Modern control engineering.** Prentice Hall, 1970.
- PONTON,J.W. **Degrees of Freedom analysis in process control.** *Chem. Eng. Sci.*, v48, no13, 2089-2095, 1994.
- QIN,S.J. E BADGEWELL,T. **A survey of industrial model predictive control technology.** *Contr.Eng.Pract.*,11,733-764, 2003.
- RODRIGUES,M.A. E ODLOAK,D. **MPC for stable linear systems with model uncertainty.** *Automatica*, 39, 569-583, 2003.
- ROLANDI,P.A. E ROMAGNOLI,J.A. **Framework for On-line full optimizing control of chemical processes.** *Proc. ESCAPE 15*, Elsevier, 1315-1320, 2005.
- SEBORG,D.E.;EDGAR,T.F. E MELLICHAMP,D.A. **Process dynamics and control.** Segunda edição,WILEY, Santa Barbara,2004.
- SCHIAVON,A.L. E CORRÊA,R.G. **Application of an alternative formulation for one layer real time optimization.** *Braz. J. Chem. Eng.* Vol.17 n.4-7, Print ISSN 0104-6632, São Paulo 2000.
- SMITH,S E LASDON,L.**Solving Large Sparse Nonlinear Programs Using GRG.** *Orsa J Comput*,1992
- TOUMI, A.; ENGELL, S.; LUDEMANN-HOMBOURGER, O.; NICOUD, R.M. E BAILLY, M. **Optimization of simulated moving bed and Varicol process.** *J. Chromatography A.*, 1006, 2003.

- TOUMI,A. E ENGELL,S., **Optimal operation and control of a reactive simulated moving bed process for glucose isomerization**. Preprints IFAC Symposium ADCHEM., Hong Kong,243-248 ,2004.(a)
- TOUMI,A. E ENGELL,S., **Optimization-based control of a reactive simulated moving bed process for glucose isomerization**. Chem.Eng.Sci., 59,3777-3792 ,2004.(b)
- TOUMI,A., DIEHL, M. E ENGELL,S., **Finite horizon optimizing of control advanced SMB chromatographic processes**. 16th IFAC World Congress, 59,3777-3792 ,2004 ©.
- TOUMI, A. E ENGELL, S. **Advanced control of simulated moving bed processes**. Chapter 9 in: Preparative Chromatography, Schmidt-Traub, H.Wiley-WCH, Weinheim,401-416, 2005
- YING,C.M.;JOSEPH,B. **Performance and stability analysis of LP-MPC and QP-MPC cascade control systems**. AIChE Journal, v.45,n.7, p1521 -1534,1999
- WOLLASTON, E.G.; HAFLIN, W.J., FORD, W. D. E D'SOUZA, G. J. Hydrocarb. Proc.September 1975.
- ZANIN,A.C. **Implementação de um controlador preditivo multivariável**. São Paulo, 1992. Dissertação de Mestrado – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo
- ZANIN, A.C.; GOUVÊA, M.T.; ODLOAK, D. **Control and Optimization of a FCC unit**. In: 2nd European Congress on Chemical Engineering, Montpellier, France, October 5-7, 1999, CD-Proceedings, 1999a.
- ZANIN, A.C.; GOUVÊA, M.T.; ODLOAK, D. **Implementation of a real-time optimization strategy for the FCC catalytic converter**. In: Mercosul Process Engineering Congress/ENPROMER'99, Florianópolis, 1999, CD-Proceedings, 1999b
- ZANIN, A.C.; GOUVÊA, M.T.; ODLOAK, D. **Comparing different real-time optimization strategies for the FCC catalytic converters**. In: ADCHEM 2000 International Symposium on Advanced Control of Chemical Processes, Pisa, June, 14-16, 2000, Proceedings, 2000a.

ZANIN, A.C.; GOUVÊA, M.T.; ODLOAK, D. **Industrial implementation of a real time optimization strategy for maximizing production of LPG in a FCC unit.** Computers and Chemical engineering, v.24, p.525-531, 2000b.

ZANIN,A.C. **Implementação industrial de um otimizador em tempo real.** São Paulo, 2001. Tese de Doutorado – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo.

ZANIN,A.C, ROTAVA **Multivariate Control and real time optimization.** Hydrocarbon Processing, Agosto, p 63, 2005.

APÊNDICE A - MODELO DINÂMICO DO CONVERSOR FCC

Modelo identificado em funções de transferência

	u_1	u_2	u_3	u_4
y_1	$\frac{0,008429}{z^2 - 1,887z + 0,8937}$	$\frac{-0,001368}{z^2 - 1,969z + 0,9709}$	$\frac{-0,003436}{z^2 - 1,883z + 0,8889}$	$\frac{0,005203}{z^2 - 1,885z + 0,8939}$
y_2	$\frac{0,008204}{z^2 - 1,9100z + 0,9163}$	$\frac{-0,001651}{z^2 - 1,967z + 0,9689}$	$\frac{-0,002552}{z^2 - 1,916z + 0,9203}$	$\frac{0,003958}{z^2 - 1,917z + 0,9235}$
y_3	$\frac{0,003413}{z^2 - 1,200z + 0,2277}$	$\frac{0,005874}{z^2 - 1,228z + 0,2554}$	$\frac{-0,02729}{z^2 - 0,6782z - 0,07966}$	$\frac{0,002626}{z^2 - 1,046z + 0,07175}$
y_4	$\frac{0,02109}{z^2 - 1,331z + 0,3611}$	$\frac{0,01015}{z^2 - 1,536z + 0,5515}$	$\frac{-0,06117}{z^2 - 0,7404z - 0,1309}$	$\frac{0,03684}{z^2 - 0,7301z - 0,2055}$

Tabela B 1 Modelo identificado em funções de transferência