



CONTROLE DE PROCESSOS
BASEADO EM ESQUEMAS DE RECONFIGURAÇÃO

Julio Cesar Sampaio Dutra

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia Química.

Orientadores: Enrique Luis Lima

José Carlos Costa da Silva Pinto

Rio de Janeiro
Agosto de 2012

CONTROLE DE PROCESSOS
BASEADO EM ESQUEMAS DE RECONFIGURAÇÃO

Julio Cesar Sampaio Dutra

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA QUÍMICA.

Examinada por:

Prof. Enrique Luis Lima, D.Sc.

Prof. José Carlos Costa da Silva Pinto, D.Sc.

Prof. Argimiro Resende Secchi, D.Sc.

Prof. Maurício Bezerra de Souza Jr., D.Sc.

Prof. Márcia Peixoto Vega Domiciano, D.Sc.

Dr. Euclides Almeida Neto, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

AGOSTO DE 2012

Dutra, Julio Cesar Sampaio

Controle de Processos Baseado em Esquemas de Reconfiguração/ Julio Cesar Sampaio Dutra. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2012.

XVI, 177 p.: il.; 29,7 cm.

Orientadores: Enrique Luis Lima

José Carlos Costa da Silva Pinto

Tese (doutorado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Química, 2012.

Referencias Bibliográficas: p. 145-161.

1. Controle de processos. 2. Reconfiguração de controle. 3. Manutenção de operabilidade. I. Lima, Enrique Luis *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Química. III. Título.

Aos meus pais, Gina e José,
à minha irmã, Juliana,
ao meu cunhado Vanderson,
e ao meu sobrinho Arthur,
pelo apoio incondicional, carinho e amor!

AGRADECIMENTOS

“Je t'ai attendu 100 ans dans les rues en noir et blanc...”

Éblouie par la nuit, Zaz.

Finalmente, a longa jornada de trabalho desta tese está finalizada. Nesta trilha, encontrei muitas pedras que me fizeram sentir estagnado, sem forças e ideias para prosseguir. Como na passagem acima, por diversas vezes, as dificuldades tornaram meus sonhos em preto e branco. Felizmente, a misericórdia de Deus me mostrou que esses momentos eram passageiros e colocou pessoas importantes em minha vida para afastar a solidão e encontrar muitas oportunidades a partir das adversidades. Como isso foi fundamental para chegar até aqui, gostaria de registrar minha gratidão àqueles que foram furacões, ou mesmo brisas, e agitaram às minhas ideias e me deram ânimo nesses anos de estudo.

O maior de todos os agradecimentos cabe unicamente a Deus, pois Ele confiou a mim fôlego de vida desde o princípio e restaurou minhas forças e a cor dos meus sonhos.

À minha família, por entender minha ausência em tantos momentos importantes, fazer valer a pena cada instante e acreditar em mim até quando eu mesmo duvidava.

Aos meus queridos orientadores, sem os quais este trabalho não seria possível. Agradeço por terem me acolhido, entendido minhas limitações e incentivado a perseverar durante todo o grande desafio que representou o doutoramento direto.

Enrique é um amigo e conselheiro paciente, me resgatou de momentos bastante difíceis e me fez compreender que os frutos do trabalho são também aqueles colhidos a partir de nosso crescimento pessoal.

Zé Carlos representa o modelo de um grande pesquisador a ser seguido, em toda sua paixão e entusiasmo pelo trabalho, e foi o catalisador incondicional de discussões muito importantes para o andamento desta tese.

Ao professor Sigurd Skogestad, pela colaboração de alto nível em Trondheim, por mostrar que a Noruega também pode ser calorosa mesmo em pleno inverno de -30 °C e pelo incentivo contínuo, mesmo estando tão distante.

Aos meus professores da UFRuralRJ, em especial a Maurício Mancini e Márcia Vega, que despertaram a paixão pela Engenharia Química e pela área de controle de processos.

Aos brilhantes professores da UFRJ, Argimiro Secchi, Evaristo Biscaia Jr, Geraldo Lippel, José Herskovits, Lidia Dieguez, Márcia Dezotti, Maurício Bezerra, Paulo Lage, Príamo Melo Jr e Vítor Teixeira, pelos conselhos e aulas brilhantes.

Aos meus amigos da UFRuralRJ, Allan, Frederico, Kelly, Rodrigo e Thiago do Quinto, pelos inúmeros momentos de diversão; ao Thiago Feital, pelas discussões filosóficas e aventuras gastronômicas; e, sobretudo, ao Diogo e Willian, companheiros de moradia, pelas conversas importantes e por ajudarem a me tornar uma pessoa melhor.

Aos companheiros trogloditas do LMSCP e da UFRJ, em especial ao André, Carol, Cauê, Bruno Oechsler, Bruno Nogueira, Dirceu, Eduardo Lemos, Fabrício, Ícaro, Isaías, João Batista, Kese, Marina, Schwaab e Rodrigo Brackmann, pelas discussões interessantes, pelas paradas para os cafés e porque, até aqui, deu pra convergir.

Aos meus grandes amigos de Angra dos Reis, Almira França, João Ciriaco e Rodrigo de Lima, e aos que me foram dados de presente pelo Rio de Janeiro, Jorge Marques, Edimir Andrade, Julio Suíta, Daniela Neves, Mariúza de Castilho e Pedro Lopes.

Àqueles que me acolheram em Trondheim, Matteo Ciccioiti, Xiaoguang Ma, Lisbeth Roel, Per Albert Vold, Esmail Jahanshahi, Deeptanshu Dwivedi, Magnus Jacobsen, Chriss Grimholt, Mehdi Panahi, Ramprasad Yelchuru e Naresh Jayavelu.

Ao Arthur, Luciana, Paula e Vera, pela atenção constante na secretária do PEQ.

À banca, pela paciência e disposição para ler e avaliar este trabalho.

Ao CNPq, pelo importante apoio financeiro.

“Até aqui nos ajudou o Senhor.” I Samuel 7:12.

Julio Cesar Sampaio Dutra

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D. Sc.)

CONTROLE DE PROCESSOS
BASEADO EM ESQUEMAS DE RECONFIGURAÇÃO

Julio Cesar Sampaio Dutra

Agosto/2012

Orientadores: Enrique Luis Lima

José Carlos Costa da Silva Pinto

Programa: Engenharia Química

A determinação de estratégias de controle eficientes é de fundamental importância para o atendimento da qualidade de produtos e manutenção da operabilidade em processos químicos. Assim, é necessário que sejam projetadas estruturas de controle capazes de lidar com as complexidades de plantas modernas. Entretanto, as metodologias presentes na literatura normalmente selecionam apenas uma configuração de controle, o que pode comprometer o desempenho global do processo. Diante disto, o presente trabalho considera o problema de reconfiguração da estrutura de controle para alcançar desempenho aceitável na presença de perturbações nas variáveis do processo. São propostas diretrizes, distribuídas ao longo de quatro etapas, baseadas na extensão das tarefas do projeto de estrutura de controle com a inclusão de esquemas de reconfiguração. O procedimento é aplicado a dois exemplos típicos da Engenharia Química para a determinação de políticas operacionais adequadas e validação dos esquemas de controle por meio de simulação dinâmica. Os resultados obtidos justificam a modificação em linha da configuração de controle, na medida em que é possível manter o ponto ótimo econômico do processo, atender as especificações de qualidade e recuperar operabilidade em face de uma diversidade de condições operacionais.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D. Sc.)

PROCESS CONTROL STRATEGY
BASED ON RECONFIGURATION SCHEMES

Julio Cesar Sampaio Dutra

August/2012

Advisors: Enrique Luis Lima

José Carlos Costa da Silva Pinto

Department: Chemical Engineering

Determining efficient control strategies is important to meet product quality and maintaining the operability of chemical processes. Thus, engineers must design control structures capable of dealing with the complexities of modern plants. However, traditional methodologies usually select only one control configuration, such way that the process overall performance may be compromised. In this regard, the present work considers the problem of control structure reconfiguration, so as to achieve acceptable performance despite disturbances in process variables. Throughout four steps, some guidelines are proposed to embody reconfiguration schemes into the design tasks of control structures. The procedure is applied to two simulated examples, a binary distillation column and a polymerization reactor, to find suitable operational policies and validate the control schemes through dynamic simulation. The obtained results justify the online control reconfiguration, since it is possible to maintain the process optimum point, meet the quality specifications and recover operability in the face of a variety of operating conditions.

SUMÁRIO

| | |
|--|-----------|
| 1. INTRODUÇÃO | 1 |
| 1.1. Apresentação | 1 |
| 1.2. Motivação | 2 |
| 1.3. Desafios na operabilidade..... | 4 |
| 1.4. Objetivos..... | 6 |
| 1.5. Organização | 8 |
| 2. PROJETO DE ESTRUTURAS DE CONTROLE | 9 |
| 2.1. Introdução..... | 9 |
| 2.2. Projeto de estruturas de controle | 11 |
| 2.2.1. <i>Questões estruturais</i> | 14 |
| 2.2.2. <i>Projeto de controle baseado em heurísticas</i> | 18 |
| 2.2.3. <i>Projeto de controle baseado em teoria</i> | 19 |
| 2.3. Comentários finais..... | 25 |
| 3. ESQUEMAS DE RECONFIGURAÇÃO DE CONTROLE..... | 27 |
| 3.1. Introdução..... | 27 |
| 3.2. Reconfiguração de controle | 31 |
| 3.3. Esquemas da literatura..... | 33 |
| 3.3.1. <i>Decomposição em regimes operacionais</i> | 34 |
| 3.3.2. <i>Controle preditivo - MPC</i> | 42 |
| 3.3.3. <i>Controle tolerante a falhas</i> | 49 |
| 3.3.4. <i>Produção celular</i> | 56 |
| 3.4. Comentários finais..... | 57 |
| 4. DIRETRIZES PROPOSTAS | 59 |
| 4.1. Introdução..... | 59 |
| 4.2. Diretrizes propostas | 60 |
| 4.3. Adaptações para casos específicos | 62 |
| 4.4. Topologia do sistema de controle..... | 63 |
| 4.5. Requerimentos | 64 |
| 4.6. Comentários finais..... | 65 |

| | |
|---|------------|
| 5. CONTROLE DE UMA COLUNA DE DESTILAÇÃO..... | 67 |
| 5.1. Introdução..... | 67 |
| 5.2. Metodologia de projeto de controle..... | 69 |
| 5.3. Coluna de destilação..... | 70 |
| 5.4. Aplicação da Metodologia..... | 72 |
| 5.4.1. <i>Análise e definição das regiões operacionais</i> | 72 |
| 5.4.2. <i>Estratégia de controle proposta – MPC/TC</i> | 78 |
| 5.5. Estratégia de controle alternativa - PID..... | 85 |
| 5.6. Simulação dinâmica..... | 86 |
| 5.7. Resultados e discussão..... | 87 |
| 5.8. Comentários finais..... | 95 |
| 6. CONTROLE DE UM REATOR DE POLIMERIZAÇÃO | 97 |
| 6.1. Introdução..... | 97 |
| 6.2. O processo de polimerização..... | 100 |
| 6.3. Modelagem matemática..... | 103 |
| 6.3.1. <i>Taxas de reação por componente</i> | 103 |
| 6.3.2. <i>Técnica dos Momentos</i> | 105 |
| 6.3.3. <i>Balanços de massa</i> | 107 |
| 6.3.4. <i>Balanços de energia</i> | 109 |
| 6.3.5. <i>Propriedades finais</i> | 111 |
| 6.4. Configuração de controle..... | 114 |
| 6.5. Testes preliminares..... | 117 |
| 6.6. Esquema de controle proposto..... | 122 |
| 6.6.1. <i>Estratégia A</i> | 123 |
| 6.6.2. <i>Estratégia B</i> | 123 |
| 6.7. Testes de troca de catalisadores..... | 126 |
| 6.7.1. <i>Cat₁ – Cat₃</i> | 127 |
| 6.7.2. <i>Cat₃ – Cat₂</i> | 131 |
| 6.7.3. <i>Cat₃ – Cat₂ – Cat₁</i> | 132 |
| 6.7.4. <i>Aumento da taxa de produção em + 25%</i> | 135 |
| 6.8. Comentários finais..... | 138 |
| 7. CONCLUSÕES E SUGESTÕES | 141 |

| | |
|---|------------|
| 7.1. Conclusões e contribuições | 141 |
| 7.2. Pesquisas futuras | 143 |
| 8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS | 145 |
| 9. APÊNDICES | 163 |
| 9.1. Apêndice A - Modelo da coluna de destilação | 163 |
| 9.2. Apêndice B - Formulação de MPC baseado em espaço de estados | 167 |
| 9.3. Apêndice C - Algoritmo de recálculo de <i>set-points</i> e priorização de restrições | 174 |

ÍNDICE DE FIGURAS

| | |
|--|----|
| Figura 1.1 – Organização dos principais capítulos da tese..... | 8 |
| Figura 2.1 – Representação da decomposição hierárquica da estrutura de controle de uma planta química baseada em escala do tempo (adaptado de SKOGESTAD, 2000). 12 | |
| Figura 2.2 – Vertentes de metodologias de projeto de estruturas de controle..... | 16 |
| Figura 3.1 - Decomposição do espaço operacional em regiões locais (adaptado de RODRIGUEZ <i>et al.</i> , 2003)..... | 35 |
| Figura 3.2 – Sistema de controle baseado em chaveamento. | 39 |
| Figura 3.3 – Exemplo de controle em arranjo <i>split range</i> | 40 |
| Figura 3.4 – Hierarquia envolvida no esquema de controle tolerante a falhas, adaptado de STEFEEN (2005)..... | 53 |
| Figura 3.5 – Representação da solução de reconfiguração para falha em um atuador... 56 | |
| Figura 4.1 – Representação esquemática do conjunto de tarefas envolvidas nas diretrizes propostas para o projeto de controle com etapa de reconfiguração..... | 60 |
| Figura 5.1 – Coluna de destilação típica com configuração de controle LV..... | 70 |
| Figura 5.2 – Resultados da otimização estacionária, quando F é um grau de liberdade. 74 | |
| Figura 5.3 - Comparação das respostas dinâmicas para perturbação em F | 81 |
| Figura 5.4 - Comparação das respostas dinâmicas para perturbação em L_T | 81 |
| Figura 5.5 - Comparação das respostas dinâmicas para perturbação em V_B | 81 |
| Figura 5.6 - Resposta das composições x_B e x_D para perturbação de +20% na taxa de alimentação. | 87 |
| Figura 5.7 - Variáveis manipuladas para perturbação de +20% na taxa de alimentação. | 88 |
| Figura 5.8 - Resposta das dinâmicas para perturbação de +30% na taxa de alimentação. | 89 |
| Figura 5.9 – Vazões de produto de fundo e topo para perturbação de +30% na taxa de alimentação..... | 90 |

| | |
|---|-----|
| Figura 5.10 - Resposta das composições para a perturbação não medida $z_F = 0,50$ | 91 |
| Figura 5.11 - Resposta das composições e manipulações para a perturbação medida $z_F = 0,50$ | 92 |
| Figura 5.12 - Resposta das composições e manipulações para a perturbação medida $z_F = 0,75$ | 93 |
| Figura 5.13 - Perturbação de +30 % na taxa de alimentação implementada na forma de uma função sigmoide..... | 93 |
| Figura 5.14 - Comparação do desempenho entre as alternativas de controle para as variáveis controladas. | 94 |
| Figura 5.15 - Comparação do desempenho entre as alternativas de controle para as variáveis manipuladas..... | 95 |
| Figura 6.1 - Diagrama simplificado do reator de polimerização..... | 101 |
| Figura 6.2 - Representação da estrutura da controle para a operação os catalisadores Ziegler-Natta..... | 115 |
| Figura 6.3 - Representação da estrutura da controle para a operação com o catalisador metallocênico..... | 116 |
| Figura 6.4 – Manutenção da produtividade operacional e a ação de controle sobre a alimentação dos os catalisadores. | 118 |
| Figura 6.5 – Comportamento dinâmico do índice de fluidez frente às especificações. | 118 |
| Figura 6.6 – Manipulação da alimentação de hidrogênio durante a operação com catalisadores ZN e da temperatura do reator quando Cat_3 é usado. | 119 |
| Figura 6.7 – Comportamento dinâmico de XS frente às especificações, com a observação de desvio estacionários com Cat_1 e Cat_2 | 120 |
| Figura 6.8 – Manipulação da razão $\dot{m}_{TEA} / \dot{m}_{PEEB}$ para o controle de XS. | 120 |
| Figura 6.9 – Exemplo de uma produção fora de especificação durante a troca de catalisador, devido a quantidade de hidrogênio no reator. | 124 |
| Figura 6.10 - Representação simplificada do esquema de troca de catalisador. | 125 |
| Figura 6.11 - Diagrama do esquema de troca de catalisador em linha..... | 127 |

| | |
|--|-----|
| Figura 6.12 – Resposta dinâmica da troca de catalisadores no teste Cat ₁ -Cat ₃ : manipulação da alimentação dos catalisadores e manutenção da produtividade. | 128 |
| Figura 6.13 - Desempenho da estratégia de controle para mudança de grade de XS com a manipulação de $\dot{m}_{TEA}/\dot{m}_{PEEB}$, durante a troca Cat ₁ -Cat ₃ | 129 |
| Figura 6.14 –Resposta dinâmica do índice de fluidez, durante a troca Cat ₁ -Cat ₃ | 129 |
| Figura 6.15 – Manipulação da alimentação de hidrogênio e da temperatura do reator. | 130 |
| Figura 6.16 – Desempenho de controle quando é desejado reduzir MI e a manipulação da temperatura do reator, durante a troca Cat ₁ -Cat ₃ | 130 |
| Figura 6.17 – Manutenção da produtividade durante a troca Cat ₃ -Cat ₂ e a respectiva manipulação da alimentação de catalisadores. | 131 |
| Figura 6.18 – Resposta dinâmica do índice de fluidez para mudança de <i>grade</i> e a manipulação da alimentação de hidrogênio no teste Cat ₃ -Cat ₂ | 132 |
| Figura 6.19 – Desempenho do esquema de controle na manutenção de XS constante, durante a troca Cat ₃ -Cat ₂ e a manipulação dos cocatalisadores. | 132 |
| Figura 6.20 – Série de troca de catalisadores para a manutenção da produtividade constante quando o teste Cat ₃ –Cat ₂ - Cat ₁ é realizado..... | 134 |
| Figura 6.21 – Controle de MI e XS durante o teste Cat ₃ –Cat ₂ - Cat ₁ | 134 |
| Figura 6.22 – Manipulação das taxas de alimentação de hidrogênio e cocatalisadores durante a troca Cat ₃ –Cat ₂ - Cat ₁ | 135 |
| Figura 6.23 – Restauração do controle do índice de fluidez devido a restrição operacional na taxa de alimentação de hidrogênio por meio da troca Cat ₁ -Cat ₂ | 136 |
| Figura 6.24 - Manipulações sobre a alimentação de hidrogênio e catalisadores quando a taxa de produção é aumentada..... | 137 |
| Figura 6.25 – Controle de XS quando a taxa de produção é aumentada e o catalisador Cat ₁ é trocado por Cat ₂ | 137 |

ÍNDICE DE TABELAS

| | |
|---|-----|
| Tabela 2.1: Questões estruturais relacionadas projeto de estruturas de controle. | 14 |
| Tabela 3.1 - Estratégias de controle para manutenção da operabilidade. | 29 |
| Tabela 3.2 - Metodologia de reconfiguração de células de produção de SAAD (2003).57 | |
| Tabela 5.1 - Metodologia de controle com etapa de reconfiguração..... | 69 |
| Tabela 5.2 - Condições operacionais nominais e parâmetros..... | 71 |
| Tabela 5.3 - Ponto operacional no ótimo econômico para cada perturbação. | 73 |
| Tabela 5.4 - Divisão das regiões operacionais em função da taxa de alimentação. | 75 |
| Tabela 5.5 - Perdas econômicas ($\$/\text{min}^{-1}$) para as alternativas de variáveis controladas em seus valores nominais ótimos. | 77 |
| Tabela 5.6 - Restrições nominais do processo..... | 84 |
| Tabela 5.7 - Pesos empregados no MPC. | 85 |
| Tabela 5.8 - Parâmetros de sintonia dos controladores PID em configuração LV ajustados a partir de SKOGESTAD <i>et. al.</i> (1989)..... | 86 |
| Tabela 6.1 - Catalisadores empregados na polimerização..... | 102 |
| Tabela 6.2 - Resumo do modelo cinético proposto para a polimerização do propeno. 102 | |
| Tabela 6.3 - Constantes cinéticas das reações de polimerização do propeno..... | 112 |
| Tabela 6.4 - Parâmetros do processo usados na simulação. | 113 |
| Tabela 6.5 - Parâmetros adicionais para o cálculo de XS. | 113 |
| Tabela 6.6 - Restrições operacionais para simulação..... | 113 |
| Tabela 6.7 - Parâmetros dos controladores PI. | 116 |
| Tabela 6.8 - Especificações nominais do polímero para cada catalisador..... | 117 |
| Tabela 6.9 – Resumo das propriedades dos catalisadores. | 121 |
| Tabela 6.10 – Exemplo de uma lista de produção..... | 126 |

LISTA DE SIGLAS

| | |
|----------------|---|
| FTC | Controle tolerante a falhas (<i>Fault Tolerant Control</i>) |
| GL | Grau de liberdade |
| IDCOM-M | Pacote comercial de MPC (<i>Identification and Command - Multivariable</i>) |
| MATLAB | <i>Software</i> interativo para cálculo numérico (<i>Matrix Laboratory</i>) |
| MC | Catalisador metolocênico |
| MI | Índice de fluidez (<i>Melting Index</i>) |
| MINLP | Programação não linear inteira mista (<i>Mixed-integer Nonlinear Programming</i>) |
| MPC | Controle preditivo (<i>Model Predictive Control</i>) |
| PI | Controlador proporcional e integral |
| PID | Controlador proporcional, integral e derivativo |
| RTO | Otimização em tempo real (<i>Real Time Optimization</i>) |
| SDCD | Sistema digital de controle distribuído |
| TC | Recálculo de <i>set-points</i> (<i>Target Calculation</i>) |
| XS | Fração de extraíveis em xileno (<i>Xylene Extractables</i>) |
| ZN | Catalisador Ziegler-Natta |

1. Introdução

Neste capítulo, uma breve introdução sobre o trabalho proposto é apresentada, incluindo a motivação e os objetivos principais, de modo a perfazer um panorama desta tese. Por fim, segue uma descrição da estrutura de organização do texto.

1.1. Apresentação

Frequentemente, os engenheiros de processos são chamados a realizar as tarefas de projetar e colocar em prática estruturas de controle que sejam capazes de lidar com as complexidades de plantas modernas e que representem alternativas tecnológicas eficientes para manutenção do desempenho. Com estas estruturas, é possível garantir o atendimento da qualidade dos produtos e da segurança da produção, bem como assegurar a redução de perdas materiais e impactos ambientais. Conseqüentemente, os produtos passam a ter maior valor agregado, o que pode garantir posição estratégica no mercado e aumento da lucratividade. Neste sentido, o foco deste trabalho de tese é o estudo de esquemas de controle que permitam tratar alguns desafios inerentes da operação de um processo químico, com vistas ao melhoramento do desempenho global.

A área de Controle de Processos é bastante vasta em aplicações e remonta à Antiguidade, pois, por exemplo, os gregos já demonstravam preocupação de determinar precisamente o tempo em relógios d'água. No entanto, foi com o advento da Revolução Industrial, na Europa durante o século XVIII, que o Controle passou a receber maior atenção devido à necessidade de regular adequadamente o funcionamento de máquinas industriais, como moinhos, refervedores e máquinas a vapor. Ao longo do tempo, isso foi impulsionado com o desenvolvimento da Matemática, que fez com que o Controle deixasse de ser uma arte para se tornar uma ciência. O estágio atual do Controle de

Processos deve-se bastante à evolução dos computadores, a partir da segunda metade do século XX, já que os mesmos permitem o tratamento de uma grande quantidade de dados e a solução de diversos algoritmos em linha. Em todas estas fases, sempre se buscou a determinação de políticas operacionais adequadas para manter os resultados de um processo em um nível satisfatório.

Atualmente, a manutenção da operabilidade dos processos químicos (isto é, o funcionamento dentro de requisitos operacionais pré-estabelecidos), em face dos diversos cenários de qualidade de produto, da possibilidade de falhas e de manutenção do ótimo, é um dos fatores que têm motivado pesquisas nesta área. Diversas alternativas de projeto de estruturas de controle são desenvolvidas para lidar com este problema e a configuração de controle selecionada geralmente é dependente da condição nominal considerada. Isto pode comprometer o desempenho global do processo, quando a configuração não é adequada para operação com múltiplos cenários. A natureza desafiadora deste problema tem chamado atenção e investimento por parte do meio acadêmico.

Neste capítulo, são apresentadas a motivação da pesquisa e a definição do objetivo desta tese, destacando como o trabalho contribui para a ciência. Posteriormente, comenta-se a organização deste material escrito.

1.2. Motivação

A competitividade do mercado, a necessidade de redução de custos operacionais e restrições ambientais mais fortes são fatores que aumentam a demanda por políticas operacionais eficientes. Neste sentido, é preciso buscar uma melhor utilização das matérias-primas e da energia disponível no processo. Nos processos modernos, isto geralmente é alcançado por meio de recursos de integração, que podem implicar em comportamento dinâmico mais complexo. Dessa forma, há a necessidade de que o projeto de controle do processo seja feito de modo holístico, tendo em vista melhorar o desempenho global da operação.

Na literatura, existem diferentes metodologias de projeto de estruturas de controle, que, de forma geral, consideram uma decomposição do problema em diversas camadas. Normalmente, projeta-se o controle das malhas mais rápidas (como o controle de inventário) ligadas à estabilização do processo e, posteriormente, o das malhas mais

lentas (como o controle de qualidade), que se vinculam a aspectos econômicos. A partir da representação hierárquica, desenvolvem-se estratégias de controle que interconectem as diferentes camadas. Em uma camada específica, interessa o projeto do controlador e sua sintonia, ao passo em que o projeto de estruturas envolve decisões estruturais entre as camadas. O projeto do sistema de controle apresenta três tarefas principais: (1) projeto da estrutura de controle; (2) projeto do controlador; (3) e implementação na planta.

Durante o projeto da estrutura de controle, tem-se o objetivo de encontrar a combinação sistemática de variáveis medidas, controladas e manipuladas. Para tanto, as diversas metodologias de projeto de controle global, cuja origem remonta aos anos 60, combinam heurísticas de processos com técnicas teóricas de modelagem e otimização. Essas metodologias permitem a exploração de uma série de diversas estruturas de controle. No entanto, apenas uma é selecionada para implementação, em função de um determinado objetivo ou critério. Normalmente, isto é justificado pela redução da complexidade do esquema de controle. Contudo, um problema importante pode surgir para operação dinâmica do processo em face dos diversos cenários operacionais, já que a estrutura selecionada, tomada como fixa, pode ser dependente da condição de projeto.

Dessa forma, com uma estrutura permanente (isto é, a configuração do sistema de controle), o desempenho de controle pode se deteriorar ao longo das condições operacionais, quando se avalia a operação do ponto de vista holístico. Isto significa que, caso seja necessário levar a operação a outras condições diferentes da nominal, uma configuração fixa do sistema de controle pode limitar a realização do processo e levar a um comportamento dinâmico inadequado. Essa consideração pode comprometer seriamente a manutenção da operabilidade do processo, de tal modo que a operação possa ficar fora das especificações ou, em um caso extremo, ser levada a uma condição de inviabilidade.

É possível que um sistema de controle multivariável, como o controle preditivo não linear, seja capaz de lidar com o problema da operabilidade. Mas, também se sabe que, no domínio de controle global, existem restrições importantes ao uso dessa tecnologia, devido à dimensão dos processos e ao custo de manter um modelo acurado e da solução computacional em linha. Além disso, boa parte dos processos químicos já instalados faz uso de controladores do tipo PI, de modo que é interessante buscar soluções para este tipo de sistema de controle.

Contudo, mesmo em face do forte impacto que se pode ter sobre a operabilidade, pouca informação está disponível quando se pretende considerar o emprego de um sistema com esquemas de reconfiguração da estrutura de controle. Na verdade, as referências encontradas na literatura da Engenharia Química ainda não tratam deste problema de modo mais específico. Uma ideia geral é a determinação de um banco de configurações de controle a serem empregadas de acordo com os requerimentos da operação. Por exemplo, pode-se ter uma estrutura para um nível de conversão baixa e outra para um nível de conversão alta de reatores. No geral, as metodologias de projeto correntes permitem obter tais estruturas em cada condição operacional, mas os trabalhos, que incluem esta tarefa, normalmente optam pela alternativa mais simples e robusta.

1.3. Desafios na operabilidade

As indústrias químicas modernas são muito complexas e grandes em escala, de tal modo que estão sujeitas a variações significantes no ambiente em que se encontram inseridas. Segundo SRINIVASAN e QIAN (2006), devido à alta competitividade do mercado, estas plantas são obrigadas a operar em uma diversidade de estados estacionários (modos de operação) e frequentemente transitam entre os mesmos. Neste contexto, destaca-se a operabilidade do processo, que consiste na manutenção de seu funcionamento dentro dos limites operacionais pré-estabelecidos, a despeito de mudanças em seu ambiente.

Para TRAN *et al.* (2007), essas mudanças surgem de fatores, que em geral podem ser resumidos em variações nos parâmetros e nos objetivos da produção, para acomodar diversos eventos como:

- a. mudanças nas especificações de produtos para aumentar sua disponibilidade, flexibilidade e confiabilidade;
- b. variações na matéria-prima;
- c. produção de diferentes produtos (*grades*);
- d. mudanças na taxa de produção;
- e. falhas de sensores ou atuadores;

- f. mudanças de parâmetros característicos do processo, como a atividade de um catalisador.

As transições nos processos químicos também são observadas durante o início (*startup*) e a parada (*shutdown*) de suas atividades. Um fato interessante é que uma ou mais variáveis, denominadas como variáveis chave por SRINIVASAN *et al.* (2005), mudam consideravelmente seus valores durante as transições e podem ser usadas para caracterizar a condição do processo. Embora as transições sejam essenciais, implicam em elevados custos de produção, já que possivelmente são obtidas grandes quantidades de produtos fora de especificação.

Para reduzir este efeito, uma das ideias básicas é a minimização do tempo de duração das transições. Normalmente, os erros humanos são mais frequentes nessas ocasiões, uma vez que o envolvimento do operador no controle da produção é maior. Os operadores devem, então, executar procedimentos operacionais predefinidos para iniciar ou parar atividades do processo. Se não seguirem as operações padrão, os erros incorridos podem levar o processo a situações anormais e/ou provocar acidentes (SUNDARRAMAN e SRINAVASAN, 2003).

Quanto à produção de diferentes *grades*, a produção industrial de polímeros se apresenta como um exemplo interessante de multiplicidade de estados estacionários. Neste caso, é um ambiente no qual a produção de diversos produtos com qualidades diferentes é muito frequente (EMBIRUÇU *et al.*, 1996). Este tipo de indústria obtém desde produtos cujas especificações são muito restritas - uma vez que são muito valorizados no mercado - até uma lista de produtos diversos, que representam *commodities* (isto é, possuem cotação e negociabilidade globais com impacto significativo na economia). Desta forma, uma planta de produção de polímeros precisa apresentar uma operação estável e bastante flexível entre os diferentes estados, buscando diminuir a produção fora de especificação e o tempo gasto para a transição.

Outro problema operacional se apresenta quando se deseja aumentar a taxa de produção de um processo e ocorre a saturação do elemento final que garante seu controle. O aumento da produção da planta corresponde à procura por uma operação ótima que, em muitos casos, exige vazões máximas (restrições ativas) através dos gargalos do processo (ASKE *et al.*, 2007). Dependendo da localização da variável manipulada para a taxa de produção (PRICE e GEORGAKIS, 1993), o sistema perde

um grau de liberdade e uma estrutura de controle fixa se torna inadequada para que se alcance a produção desejada. Em relação a isto, ARAÚJO (2007) destacou que as restrições ativas formam um conjunto de variáveis controladas, de modo que uma mudança no conjunto de restrições ativas requer uma mudança do conjunto de variáveis controladas. Deste modo, se destaca uma avaliação mais rigorosa das condições operacionais quando do projeto de controle do processo.

Somam-se a esses fatores as falhas em instrumentos e equipamentos causadas por mau funcionamento, por razões físicas/químicas e por fatores externos ao processo. Visto que um sistema controlado é totalmente interconectado, uma falha em uma de suas partes afeta todas as outras partes por meio das malhas de controle. De um modo geral, o desempenho da produção normalmente diminui quando ocorrem no processo os problemas citados, uma vez que as condições operacionais se tornam muito diferentes daquela consideradas nas etapas de projeto do processo e de seu controle (BENOSMAN, 2010).

1.4. Objetivos

Em face do cenário dinâmico em que os processos químicos estão inseridos, os mesmos devem ser controlados e monitorados globalmente para responderem mais rapidamente e se tornarem mais competitivos. Para evitar que o desempenho da produção seja diminuído, as estratégias de controle precisam considerar alternativas que garantam a operabilidade também quando ocorrerem mudanças nas condições de operação. Neste caso, os sistemas de controle que podem ter a configuração modificada para permitir a operação do processo em uma gama maior de condições, de modo a atender a diferentes especificações ou responder a eventos anormais, tornam-se cada vez mais necessários. No entanto, há uma carência de estudos em relação à determinação de estratégias necessárias para a realização da reconfiguração da estrutura de controle, bem como do tratamento de problemas práticos que podem estar envolvidos.

Assumindo o problema de manutenção da operabilidade de processos químicos como relevante, o objetivo específico desta tese em particular é o estudo de esquemas de reconfiguração para o sistema de controle, utilizando-se das metodologias da literatura para o projeto de controle e propondo estratégias para a mudança da configuração de controle. Para tanto, são usados dois exemplo típicos da Engenharia

Química, implementados em MATLAB versão 7.10.0 (MATHWORKS, 2010) e com motivações distintas para a reconfiguração de controle. Dessa forma, esta tese pretende contribuir especificamente com aspectos práticos de controle de processos, nos quais o desempenho de uma configuração de controle possa ser comprometido ao se considerar mudanças operacionais importantes.

Além desses pontos, os objetivos secundários desta tese são apresentar uma breve revisão das áreas de controle global de processos e de reconfiguração de controle e oferecer ideias e referências para pesquisas futuras, que são necessárias para compreensão do estágio atual deste trabalho.

Este trabalho foi realizado principalmente no Laboratório de Modelagem, Simulação e Controle de Processos (LMSCP) do Programa de Engenharia Química da COPPE/UFRJ e está inserido nas linhas atuais de pesquisa do mesmo, juntamente com outros trabalhos que tratam do monitoramento, gerenciamento de falhas e otimização de processos químicos (GOMES, 2007; FREITAS, 2009; PAGANO, 2009; PRATA, 2009; QUINTO, 2010; FEITAL, 2011). Adicionalmente, por meio do doutorado sanduíche, foi possível um estágio, entre os anos de 2010 e 2011, com o professor Sigurd Skogestad no grupo de Controle de Processos do Departamento de Engenharia Química da Universidade Norueguesa de Ciência e Tecnologia (NTNU) na cidade de Trondheim. Maiores informações podem ser obtidas nas páginas da internet peq.coppe.ufrj.br e ntnu.no/kjempros/prosess-systems.

As diversas contribuições de conhecimento teórico e aplicações práticas desses grupos foram importantes no suporte desta pesquisa, principalmente aquelas relacionadas à determinação de políticas operacionais (ARAÚJO, 2007; ANDRADE, 2008; HOVD, 2007; JACOBSEN, 2011; MAGALHÃES, 2010; PANAH, 2011; RANGEL, 2010; SOUZA, 2010; YELCHURU, 2012). Além disso, os professores oferecem vasta experiência na modelagem e simulação de sistemas reais da Engenharia Química, a avaliação de processos químicos em uma multiplicidade de condições, a otimização em tempo real para fins de controle, o uso de estimadores de estados e a estimação de parâmetros.

1.5. Organização

Para alcançar os objetivos, um cenário de investigações teórico-computacionais foi explorado, cuja estrutura principal pode ser apreendida da Figura 1.1. O Capítulo I apresenta a introdução da tese. Os Capítulos II e III apresentam revisões bibliográficas importantes para seu desenvolvimento, incluindo respectivamente as principais vertentes de metodologias de projeto de controle global, seguidas de uma sinopse dos esquemas de reconfiguração de controle. O Capítulo IV traz as diretrizes propostas nesta tese, que incluem os esquemas de reconfiguração como uma extensão das tarefas de controle. Os Capítulos V e VI são dedicados ao projeto de controle de dois exemplos de aplicação da Engenharia Química, o primeiro trata de uma coluna de destilação binária como exemplo de aplicação do procedimento proposto e o outro de um reator contínuo de polimerização do propeno, desde sua modelagem matemática até o problema de controle. O Capítulo VII resume os resultados alcançados, discute vantagens e limitações da proposta, conclui o trabalho de tese e aponta tendências para pesquisas futuras. Finalmente, o Capítulo VIII traz as referências bibliográficas.

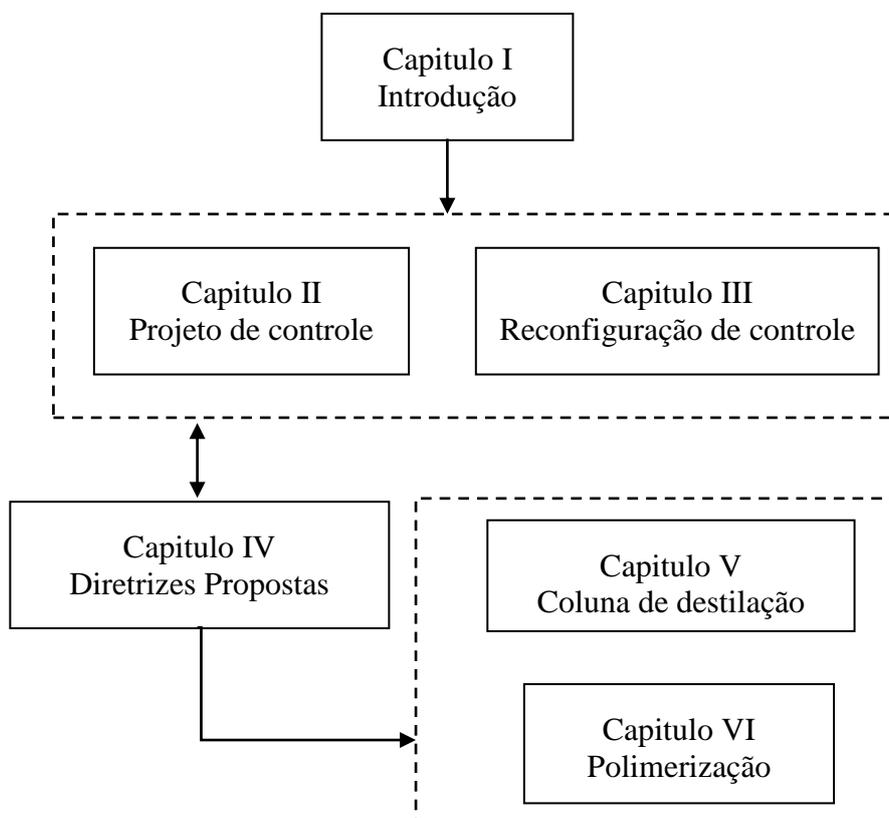


Figura 1.1 – Organização dos principais capítulos da tese.

2. Projeto de Estruturas de Controle

Este capítulo apresenta uma área importante da Engenharia de Processos conhecida como *controle global*, por meio de uma breve revisão das principais vertentes da literatura para o projeto de estruturas de controle, seguida de alguns comentários finais.

2.1. Introdução

Nos processos químicos modernos, é bastante comum o emprego de fatores de integração, como correntes de reciclo de material e integração energética, para obter principalmente redução de custos. No entanto, esses fatores podem afetar a controlabilidade e a operabilidade do processo. Isto modifica seu comportamento global, de tal modo que é difícil predizê-lo, a partir do comportamento das unidades individuais. Diante deste fato, tornou-se necessária uma mudança do modo tradicional de projeto e análise de um processo para uma abordagem mais holística (DUNN e EL-HALWAGI, 2003). É preciso considerar a planta como um organismo complexo, formado a partir da interação de diferentes operações unitárias e equipamentos, que não explicam individualmente o comportamento global.

Em virtude dos problemas que podem ocorrer nesses processos, o desenvolvimento de técnicas para a análise de controlabilidade e para o projeto de controle adequado representa uma tarefa importante. A área de pesquisa da Engenharia de Processos que considera uma avaliação de toda a planta é denominada controle global ou controle de plantas completas (*plantwide control*, em inglês), envolvendo análises e estratégias sistemáticas necessárias para o controle. Essas estratégias incluem diversas metodologias, cujo principal objetivo é o melhoramento do desempenho global da planta.

Neste contexto, o termo *controle global* não se refere apenas à sintonia e à análise do comportamento das malhas em um processo químico, mas diz respeito à filosofia de controle de todo o processo (LARSSON e SKOGESTAD, 2000). Esta filosofia enfatiza as decisões estruturais, que incluem a seleção das variáveis manipuladas e medidas, o pareamento entre elas e a sintonia das malhas obtidas, assim como a decomposição de todo o problema em subproblemas menores. Deste modo, o objetivo do controle global é fornecer uma estrutura para o controle coordenado de variáveis importantes de um processo, incluindo toda a produção e o controle da qualidade do produto.

Outra definição para esta filosofia, vista em LUYBEN *et al.* (1998), coloca que o controle global é uma atividade que envolve a determinação da lógica, da instrumentação e das estratégias necessárias para a operação segura, de modo a alcançar os objetivos de projeto de uma planta integrada e complexa.

STEPHANOPOULOS e NG (2000) indicaram que o controle global apresenta características próprias, que não são encontradas no projeto de processos formados por unidades simples. Nos casos de processos integrados:

- a. as variáveis a serem controladas por um sistema de controle global não são tão claras ou facilmente definidas, como é feito para unidades simples;
- b. uma decisão local de controle, feita dentro do contexto de unidades simples, pode ter efeitos diversos em toda a planta devido à presença de interconexões;
- c. o tamanho do problema de controle global é significativamente maior que aquele de unidades simples, tornando sua solução mais complexa.

Além disso, conforme observado por LARSSON e SKOGESTAD (2000): *“Por que controlar inúmeras temperaturas, pressões ou composições de uma planta, quando não há especificações para a maioria dessas variáveis? Há alguma razão especial para isso ou é simplesmente porque essas variáveis podem ser medidas?”*.

O interesse no projeto de estruturas de controle global de plantas remonta ao trabalho pioneiro de BUCKLEY (1964), que introduziu o conceito de controle dinâmico de processos. Nessa ocasião, esse autor demonstrou objetivamente que a atividade de controle de processos consiste na arte de combinar variáveis e como fazê-las trabalhar em conjunto de modo a atingir objetivos específicos. Contudo, historicamente, o projeto de controle sempre foi executado utilizando algumas regras heurísticas baseadas na

experiência com o processo, adquirida ao longo dos anos. Isto ocorreu devido ao fato de não terem sido desenvolvidas ferramentas teóricas para este fim e à dificuldade que representa a modelagem da planta, que cada vez mais é projetada com recursos de integração energética e mássica (ANDRADE, 2008).

Esta carência já havia sido percebida por FOSS (1973), que afirmou, entre outras coisas, que o principal problema a ser resolvido era o desenvolvimento de teorias para determinação de estruturas de sistemas de controle. Apesar de algumas áreas da teoria de controle de processos terem apresentado avanços importantes até a década de 70 (como é o caso da otimização em tempo real, do controle preditivo e de ferramentas de análise de controlabilidade), somente a partir de 1980 começaram a ser publicados trabalhos com desenvolvimentos teóricos sobre controle global, que culminaram em um maior interesse, tanto da parte do meio acadêmico como do industrial, no assunto nos anos 90. Dessa época em diante, diversas linhas de pesquisa passaram a considerar o projeto de estruturas de controle, devido às características desafiadoras do problema (LARSSON e SKOGESTAD, 2000).

2.2. Projeto de estruturas de controle

Uma estrutura de controle consiste na combinação sistemática de variáveis medidas (y) com variáveis manipuladas (u), de forma a manter em linha as variáveis controladas (c) em suas especificações (c_s). O projeto de uma determinada estrutura de controle depende fortemente do grau de avanço da teoria de controle de processos, de certo grau de criatividade e arte, bem como do grau de conhecimento do comportamento do processo. A implementação prática do esquema de controle depende da disponibilidade de sensores e atuadores confiáveis e operadores treinados (STEPHANOPOULOS e NG, 2000).

De acordo com MORARI *et al.* (1980), a manutenção de algumas variáveis em torno de valores desejados visa ao atendimento dos objetivos da produção, que podem ser divididos em duas categorias:

1. *Objetivos operacionais*: são os objetivos que estão associados à viabilidade operacional e envolvem as variáveis de processo, tendo em vista a qualidade de produto, a segurança, a satisfação de exigências operacionais e a preservação do meio ambiente.

2. *Objetivos econômicos*: são os objetivos que estão associados aos aspectos econômicos do processo (por exemplo, lucratividade ou custo de operação, J) e são apenas satisfeitos quando já foram atendidos os objetivos anteriores e ainda existirem graus de liberdade disponíveis.

No desenvolvimento de um sistema de controle, como já colocado, costuma-se decompor o problema em diversas camadas com base nas diferentes escalas de tempo de atuação dos controladores das malhas (SKOGESTAD, 2000). No entanto, a escala de tempo dos níveis da hierarquia de controle é apenas ilustrativa e tem uma alta dependência das dimensões do processo e do grau de reciclo utilizado, uma vez que este pode implicar em sistemas muito lentos. Em todo caso, esta representação (Figura 2.1) inclui camadas cujo tempo para implementação da ação de controle varia de segundos a semanas. As mais importantes, em termos operacionais, são aquelas relacionadas mais diretamente à dinâmica da planta, já que o tempo para a tomada de decisão é menor.

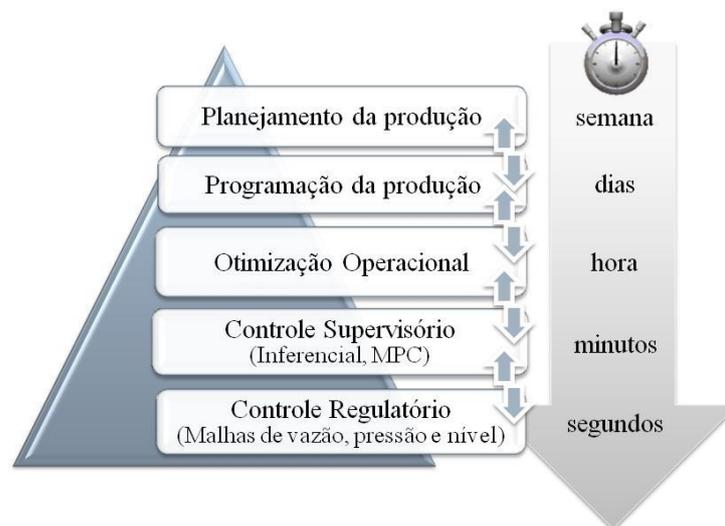


Figura 2.1 – Representação da decomposição hierárquica da estrutura de controle de uma planta química baseada em escala do tempo (adaptado de SKOGESTAD, 2000).

A camada de controle regulatório se relaciona ao controle do inventário do processo, como os balanços de massa, de energia e de quantidade de movimento, envolvendo vazões das correntes, pressão de gases, níveis de líquidos e temperaturas das unidades. Dessa forma, lida com o controle do processo frente a perturbações de alta frequência para manter a planta estável. Por outro lado, a camada de controle supervisório se refere ao controle da taxa de produção e da qualidade de produto. Na camada de otimização operacional, determinam-se os valores desejados para a camada

de controle supervísório, representando um ajuste fino ao processo. Acima dessas camadas, encontra-se a otimização do processo, na qual se consideram os objetivos globais de controle, aspectos operacionais do processo e informações do mercado.

Os objetivos econômicos são alcançados ao serem repassados do planejamento da produção para as camadas de controle. Todas as camadas são interconectadas por meio de decisões estruturais (estrutura de controle), sendo que as camadas superiores indicam normalmente os *set-points* e restrições a serem seguidos pelas variáveis controladas das camadas inferiores, ou usam diretamente alguns elementos finais de controle (como válvulas de controle, bombas e *dampers*, por exemplo) se houver graus de liberdade excedentes. A interação entre a camada de otimização e a camada de controle é feita por meio da atualização dos alvos ou pontos operacionais desejáveis, geralmente, uma vez a cada hora, enquanto que a camada de controle opera continuamente. No entanto, quando se considera apenas uma determinada camada, interessa o projeto do controlador e o problema de sua sintonia. Dessa forma, enquanto o projeto de estruturas de controle envolve decisões estruturais, o projeto do controlador lida com decisões paramétricas (SKOGESTAD, 2004).

Boa parte das propostas de metodologias de projeto de controle são aplicadas a problemas de referência (*benchmarks*) na área para comprovar seu desempenho. O mais popular destes problemas é a bem conhecida planta Tennessee Eastman, sugerido por DOWS e VOGEL (1993), cujas soluções propostas variam desde estruturas de PID descentralizado (MCAVOY e YE, 1994; MCAVOY, 1999; RICKER, 1996) até controle preditivo (MPC, do inglês *Model Predictive Control*) (RICKER e LEE, 1995). Por exemplo, destes trabalhos, viu-se que, quando o desempenho de uma estrutura descentralizada de PID é comparável a do MPC, dá-se preferência a estruturas de PID. As razões desta escolha são a simplicidade da estrutura de controle e o fato de que a mesma é de fácil compreensão pelos operadores (ROBINSON *et al.*, 2001).

Além deste exemplo, podem-se destacar outros, como as plantas HDA (MCKETTA, 1977), Shell (PRETT e MORARI, 1986), AMOCO (MCFARLANE *et al.*, 1993) e Johnson Wax (CHYLLA e HAASE, 1993).

2.2.1. Questões estruturais

O desenvolvimento que ocorreu na área de controle global, nas décadas de 80 e 90, deveu-se em grande parte às críticas feitas por FOSS (1973), quanto ao distanciamento da academia das reais necessidades da indústria, bem como à elucidação de questões importantes para o projeto de controle. Estas questões estão diretamente ligadas às decisões estruturais que precisam ser definidas pelo engenheiro de processo na etapa de projeto de controle: *Quais variáveis devem ser controladas, quais variáveis devem ser medidas, quais entradas devem ser manipuladas e quais conexões devem ser feitas entre as mesmas?*

De certa forma, as metodologias propostas na literatura foram norteadas por estas questões (Tabela 2.1), além de considerar aspectos particulares de cada processo, como a política geral de gerenciamento da produção e as condições econômicas presentes e futuras (STEPHANOPOULOS e NG, 2000).

Tabela 2.1: Questões estruturais relacionadas projeto de estruturas de controle.

| Questões de FOSS (1973) | Observações |
|---|--|
| 1. Quais variáveis devem ser controladas? | Seleção das variáveis que apresentam valores desejados, isto é $\mathbf{c} = \mathbf{c}_s$. |
| 2. Quais variáveis devem ser medidas? | Seleção das variáveis medidas \mathbf{y} para propostas de controle e estabilização do processo. |
| 3. Quais entradas devem ser manipuladas? | Seleção dos graus de liberdade \mathbf{u} necessários para permitir um controle adequado. |
| 4. Quais pareamentos devem ser feitos entre as variáveis do processo? | Seleção da configuração de controle, isto é, a estrutura do controlador que interconecta suas entradas (variáveis medidas e controladas) com as variáveis manipuladas. Seleção do tipo, ordem e estrutura de controlador necessário para se alcançar o desempenho desejado. |

As respostas obtidas em cada uma das questões estruturais representam as etapas do projeto da estrutura de controle e permitem determinar as possíveis alternativas de controle para uma determinada planta. Inicialmente, as decisões se relacionam com objetivos de controle do processo. Posteriormente, deve-se selecionar a configuração de controle, que define a forma de conexão e a hierarquia entre as variáveis controladas e manipuladas, atendendo a determinadas características

dinâmicas, como rejeição a perturbações, baixa interação e robustez. Por fim, dependendo de aspectos como os objetivos de controle e restrições de implementação, é feita a escolha da lei de controle (VAN DER WAL e JAGER, 2001).

VAN DER WAL e JAGER (2001) apresentaram uma revisão de diversos métodos de seleção de pares de entrada/saída, usando propriedades desejáveis do sistema de controle, controlabilidade e desempenho alcançável como critério. No entanto, os critérios apresentados não consideram objetivos mais globais, como o resultado econômico ou custo operacional envolvido.

De modo geral, a primeira classe de objetivos de controle (objetivos operacionais) determina as variáveis que precisam ser medidas. A forma de se alcançar a segunda classe de objetivos pode ser obtida ao se considerar, por exemplo, uma estratégia de controle *feedback*. Em relação ao conjunto de variáveis manipuladas, esta seleção influencia a capacidade do sistema em rejeitar perturbações externas e em manter os objetivos de controle no nível desejado. Um número grande de variáveis manipuladas (graus de liberdade) é melhor para fins de controle. Contudo, a determinação destas variáveis deve ser orientada por aspectos estruturais, considerando os limites de saturação e a relação de ganho com as variáveis controladas (SKOGESTAD, 2000).

Geralmente, um bom entendimento do processo permite determinar o que deve ser controlado. Contudo, como já havia sido destacado por MORARI *et al.*, (1980), os vários conjuntos de variáveis controladas, medidas e manipuladas, e suas estruturas de interconexão, não podem ser escolhidos de forma independente, mas de forma simultânea. Deste modo, a consideração de aspectos econômicos, de segurança, das restrições operacionais e da confiabilidade de sensores também deve ser levada em conta nesta seleção da estrutura e controle.

Na literatura, as diferentes sistemáticas para obter a decisões estruturais definem as propostas de projeto de estruturas, que, a princípio, mostram-se comportar, pelo menos em algum aspecto, melhor que as outras. Tradicionalmente, as estruturas de controle são obtidas para determinadas condições operacionais e tecnológicas (instrumentos e equipamentos) e arranjo das unidades (isto é, o projeto de controle é a última etapa) (DOWNS e SKOGESTAD, 2011). Realiza-se uma busca intensa por apenas uma configuração de controle e a alternativa selecionada deve permitir o

atendimento dos requerimentos de controlabilidade e de desempenho dinâmico. Apesar de diferenças fundamentais, as metodologias buscam satisfazer os objetivos do processo e podem ser normalmente divididas em dois grandes grupos, em função dos procedimentos aplicados (ANTELO *et al.*, 2007):

- a. *Técnicas baseadas no bom senso e no conhecimento do processo.* O uso destas técnicas visa à decomposição hierárquica do problema de controle global em problemas de dimensão menor por meio de heurísticas.
- b. *Técnicas baseadas na modelagem e na teoria de controle.* Especificamente, as bases destas técnicas se encontram no desenvolvimento teórico de modelagem matemática, de técnicas de controle robusto e de otimização. Tratam da solução de um problema de programação matemática não linear de grande escala, que deve ser capaz de determinar simultaneamente a dimensão das subunidades, suas interconexões e a estrutura de controle ótima.

As alternativas, que utilizam ferramentas desenvolvidas por esses dois grupos, são, portanto, classificadas aqui como *técnicas híbridas* (Figura 2.2).

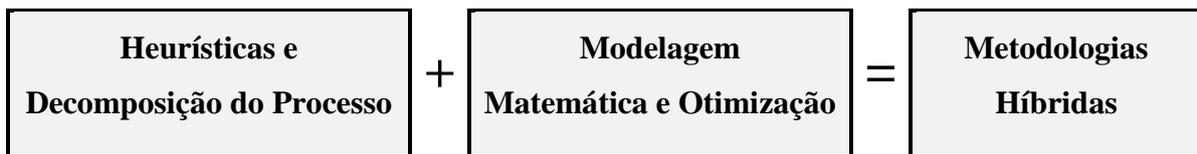


Figura 2.2 – Vertentes de metodologias de projeto de estruturas de controle.

Tanto LARSSON e SKOGESTAD (2000) como STEPHANOPOULOS e NG (2000) apresentaram boas revisões da literatura sobre projeto de estruturas de controle global. Estes trabalhos revisaram os desafios encontrados e as características peculiares do problema de controle global, registraram os avanços nas pesquisas publicadas por outros grupos e apontaram desenvolvimentos futuros necessários para a área.

Recentemente, DOWNS e SKOGESTAD (2011) apresentam um artigo de revisão contemplando simultaneamente as visões acadêmica e industrial sobre o controle global. Estes autores destacaram a necessidade de uma abordagem formalizada que possa considerar os diversos desafios que surgem no projeto de controle de plantas modernas. A preocupação central é a operação no ótimo econômico do processo. No entanto, isso é dificultado pela segregação das tarefas de projeto do processo e do

controle. Isso ainda é bastante comum devido principalmente à dificuldade de mudança de uma abordagem histórica, em que o sistema de controle é projetado após o processo.

Embora existam diversas metodologias de projeto de estruturas de controle na literatura, normalmente se consideram duas abordagens gerais para o problema de controle global, chamadas de descendente e ascendente, que podem ser combinadas iterativamente (ÅSTRÖM e WITTENMARK, 1997):

- a. *Abordagem descendente (top-down)*: este tipo de análise se inicia com a definição do problema de controle global, envolvendo a seleção dos objetivos de controle e das variáveis controladas, variáveis medidas e variáveis manipuladas. O problema é dividido sistematicamente em subproblemas de dimensão menor, considerando um refinamento sucessivo. Em torno destes subproblemas, são agrupadas variáveis controladas e manipuladas, sendo desejável que apresentem acoplamento fraco e reposta dinâmica comportada. O procedimento termina quando os subsistemas correspondam a problemas bem conhecidos.
- a. *Abordagem ascendente (bottom-up)*: este procedimento se inicia dos subproblemas para uma análise mais geral, envolvendo as questões estruturais primeiramente. Para as especificações desejadas, são encontrados diferentes controladores (baseados em arranjos *feedback*, predição/estimação, otimização ou adaptação), de modo que se obtenham os subsistemas em malha fechada. Posteriormente, os subsistemas são combinados sucessivamente, até que se alcancem os objetivos do problema de controle global.

De modo geral, é necessário avaliar com cuidado a metodologia que se pretende utilizar para o projeto da estrutura de controle. As inúmeras propostas que se encontram na literatura, algumas das quais são brevemente comentadas aqui, resultam em estruturas razoáveis para uma determinada condição de operação. No entanto, na medida em que se busca um domínio maior de aplicação, cresce o grau de dificuldade conceitual, a necessidade por ferramentas teóricas mais complexas e, conseqüentemente, diminuem as possibilidades de uma implementação prática facilitada.

Vale a pena ressaltar que o projeto de um sistema de controle é apenas uma parte de um sistema geral e mais complexo, que supervisiona a operação. Neste caso,

por exemplo, questões adicionais relacionadas à segurança da produção, ao monitoramento do processo e à detecção de falhas podem ser consideradas durante o projeto de estruturas de controle.

2.2.2. Projeto de controle baseado em heurísticas

As propostas baseadas no conhecimento do processo visam à decomposição do problema de controle em problemas de dimensão menor por meio de heurísticas. Por exemplo, uma regra simples é a recomendação de se localizar a variável manipulada para o controle da taxa de produção em uma posição próxima ao centro da trajetória principal do processo e a partir deste ponto se projetam os demais controladores (PRICE e GEORGAKIS, 1993).

Diversas ideias foram exploradas para o desenvolvimento de procedimentos hierárquicos para aplicação sistemática ao projeto de estruturas de controle. Entre elas, podem-se destacar:

- a. Decomposição do processo em unidades de operação individuais, para as quais se projetam diferentes controles que, posteriormente, devem ser coordenados (UMEDA *et al.*, 1978);
- b. Separação dos objetivos de controle, como o controle de inventário de material, do balanço de energia, da taxa de produção e da qualidade do produto (BUCKLEY, 1964; PRICE *et al.*, 1994);
- c. Projeto de controle baseando-se na dinâmica das malhas (isto é, nas suas escalas de tempo de atuação), iniciando pelas mais rápidas (vazões) e indo às mais lentas (qualidade de produto) (MCAVOY e YE, 1994).
- d. A divisão do problema em camadas de controles regulador e supervisor (SKOGESTAD e POSTLETHWAITE, 2005);
- e. O agrupamento de partes do processo em função do horizonte de tempo (NG e STEPHNOPOULOS, 1998);
- f. O estabelecimento de áreas de controle, como gerenciamento de energia, taxa de produção, sistemas de reciclo e balanços de materiais (LUYBEN *et al.*, 1998).

A decomposição baseada nas unidades de operação individuais tem sido historicamente usada nas indústrias. Entre as estruturas resultantes, normalmente ocorrem conflitos, que são resolvidos por ajustes mútuos. Contudo, com o aumento de linhas de reciclo, integração energética e a necessidade de redução de inventários, esta abordagem pode resultar em muitos conflitos e se tornar impraticável.

2.2.3. Projeto de controle baseado em teoria

As propostas mais teóricas na literatura consideram a solução de problemas de controle robusto ou de programação matemática complexa, como a programação não linear inteira mista (MINLP), que devem ser capazes de determinar todas as interconexões da estrutura (NARRAWAY e PERKINS, 1993, 1994; ZHENG *et al.*, 1999; KOOKOS e PERKINS, 2002). No entanto, como estes problemas são de natureza combinatorial, consomem muito tempo computacional e, geralmente, o ótimo global não pode ser garantido. A solução ideal, conforme recomendação de ASTEASUAIN *et al.* (2006), é que sejam feitos simultaneamente os projetos do processo e da estrutura de controle. No entanto, a maior parte dos trabalhos trata do projeto de controle de processos já em funcionamento, por exemplo, para atender a mudanças de rotas de produção ou implementar melhorias econômicas (NARRAWAY e PERKINS, 1994).

Especificamente, em contraste à minimização do erro de rastreamento na teoria de controle clássico, o projeto de controle ótimo considera a solução de um problema de otimização mais abrangente. Assim, busca-se o melhor conjunto de variáveis a partir da minimização de uma função custo, frequentemente dada em termos econômicos, ou da seleção do conjunto de variáveis que atendam a certos critérios de controlabilidade, como a maximização do menor valor singular (SKOGESTAD e POSTLETHWAITE, 2005). No caso de considerar a economia do processo, além da estrutura de controle ótima, a camada de otimização operacional define os valores desejados ótimos para o controle supervisor.

A seleção das variáveis controladas é importante no projeto de controle para operar o processo no ótimo. A camada de otimização operacional é uma tarefa local que pode ser feita por otimização em tempo real (RTO) (FORBES e MARLIN, 1996; DARBY *et al.*, 2011), por um controlador otimizador (KASSIDAS *et al.*, 2000; ENGELL, 2007), ou então pelo rastreamento de condições necessárias de otimalidade

(SRINIVASAN *et al.*, 2003; KADAM *et al.*, 2007). Quando uma perturbação (d) afeta o processo, a camada de controle busca manter as variáveis em seus *set-points*. A perturbação deve ser estimada pela otimização local a partir das medidas do processo e então devem se definidos os novos valores ótimos para controle, tomando como base o modelo do processo. O rastreamento dos *set-points* normalmente é feito por malhas *feedback*.

Podem ser encontrados dois focos principais para abordar a definição dos *set-points* ótimos, o primeiro lida com o problema de *como resolver* um algoritmo de otimização e o outro de *como implementar* a solução ótima (NARASIMHAN e SKOGESTAD, 2007). Normalmente, os trabalhos de controle se interessam pelo segundo foco e a solução ideal é a otimização em linha, em que as medidas são usadas para atualizar o modelo e a condição do processo. Com a chegada de novas medidas, o problema é resolvido para as entradas, a cada instante de amostragem. A consideração de RTO para calcular entradas ótimas do processo é a solução mais completa. Mas, no contexto de controle global, isso pode ser inviável devido ao custo elevado de manutenção de um modelo acurado de toda a planta e ao esforço computacional demasiado para solução do problema (FORBES e MARLIN, 1996).

Na verdade, entre os práticos da área de controle, parece haver uma preferência por sistemas de controle que sejam de compreensão pouco complexa, de sintonia facilitada, de baixa suscetibilidade a falhas e insensíveis a erros de modelagem. De modo geral, as propostas de controle devem ser mantidas em um nível mais simples possível e fazer uso de diferentes camadas hierárquicas. No lugar de depender de um único controlador multivariável, isto faz com que haja a decomposição dos objetivos de controle, facilitando a etapa de projeto. Com este intuito, podem ser encontradas na literatura duas abordagens: (1) o projeto de controle auto-otimizante (SKOGESTAD, 2000) e (2) o desenvolvimento de estratégias baseadas na química do processo (WARD *et al.*, 2004). Ambas as abordagens baseiam-se na implementação de sistemas de controle simples, robustos e confiáveis, que buscam prover a manutenção da operação ótima, fazendo uso apenas da natureza das variáveis do processo. Neste caso, o uso de um otimizador faz apenas pequenos ajustes no processo, que já está próximo ao ótimo (DOWNS e SKOGESTAD, 2011).

Especificamente, SKOGESTAD (2000) retomou as ideias de MORARI *et al.* (1980). A sugestão era encontrar funções de variáveis do processo, que, ao serem

mantidas constantes, levassem automaticamente as variáveis manipuladas às condições ótimas de operação. A partir deste conceito, foi proposta uma metodologia para o projeto de estruturas de controle, cujo sucesso se deve à simplicidade e a sistemática de projeto. A abordagem de controle auto-otimizante, consiste em fixar algumas variáveis em *set-points* constantes, de modo que se possa operar indiretamente em condições próximas ao ponto ótimo: “*Controle auto-otimizante é quando se pode alcançar uma perda aceitável, considerando uma política de set-points constantes para as variáveis controladas sem a necessidade de otimizá-los novamente quando ocorrem perturbações...*”.

No procedimento concluído em SKOGESTAD (2004), inicialmente é preciso controlar as chamadas variáveis primárias de controle, que estão diretamente relacionadas com a garantia de uma operação economicamente ótima. Deste modo, as restrições ativas e as variáveis auto-otimizantes, que, com *set-points* constantes, mantêm o processo perto de seu estado ótimo, mesmo sob perturbações e/ou erros de implementação, devem ser controladas. Em segundo lugar é preciso controlar as variáveis que proporcionam um controle regulatório satisfatório, que são as chamadas variáveis de controle secundárias. Isso significa:

1. Controlar níveis de líquidos instáveis.
2. Estabilizar outros modos instáveis.
3. Controlar variáveis que são sensíveis a grandes perturbações.

Para a determinação de variáveis auto-otimizantes, deve-se resolver o problema de busca do ponto operacional ótimo econômico formulado como uma otimização não linear em estado estacionário, conforme a Equação 2.1.

$$\begin{aligned}
 & \min_{\mathbf{u}_s} J(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{d}) \\
 & \text{sujeito a} \\
 & \quad g_1(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{d}) = 0 \\
 & \quad g_2(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{d}) \leq 0
 \end{aligned}
 \tag{2.1}$$

Nesta representação, J é uma função custo escalar a ser maximizada (por exemplo, lucro ou rendimento) ou minimizada (no caso de representar custos de produção), $\mathbf{x} \in \mathfrak{R}^{n_x}$, $\mathbf{u}_s \in \mathfrak{R}^{n_{u_s}}$ e $\mathbf{d} \in \mathfrak{R}^{n_d}$ são respectivamente as variáveis de estados, os

graus de liberdade (GL) em estado estacionário e as perturbações. Os GL em estado estacionário são diferentes dos GL disponíveis no processo, já que alguns destes estão associados a variáveis que não têm efeito sobre a operação estacionária, como o nível nos tanques. A restrição de igualdade g_1 representa o modelo estacionário do processo, que expressa a relação de \mathbf{x} com as variáveis independentes (\mathbf{u}, \mathbf{d}) . A restrição de desigualdade g_2 indica os limites que devem ser satisfeitos durante a operação, tais como limites de qualidade de produto, de segurança e de saturação de atuadores, bem como a capacidade de equipamentos.

Quando o modelo estacionário é resolvido para expressar $\mathbf{x} = f(\mathbf{u}, \mathbf{d})$ e as restrições ativas da Equação 2.1 são consideradas, isto resulta em um problema de otimização de espaço reduzido, segundo a Equação 2.2.

$$\min_{\mathbf{u}} J(\mathbf{u}, \mathbf{d}) \tag{2.2}$$

Neste caso, \mathbf{u} são os GL não restritos. Para manter a operação no ótimo, o novo problema de otimização deve ser resolvido, de modo a obter $\mathbf{u} = \mathbf{u}_{opt}(\mathbf{d})$ para qualquer perturbação, cujo custo ótimo é $J_{opt} = J(\mathbf{u}_{opt}(\mathbf{d}), \mathbf{d})$. No entanto, em vez de se atualizar a entrada \mathbf{u} em tempo real, estas variáveis devem ser usadas para o controle das variáveis auto-otimizantes. Neste caso, a seleção destas variáveis deve buscar um conjunto individual ou uma combinação das medidas ($\mathbf{c} = \mathbf{H}\mathbf{y}$) que levem a uma perda econômica aceitável. Esta perda, dada pela Equação 2.3, é a diferença entre o valor da função objetivo com as variáveis auto-otimizantes e o valor quando o processo é reotimizado para a mesma perturbação. A matriz \mathbf{H} representa a seleção individual ou a combinação de variáveis medidas.

$$L = J(\mathbf{u}, \mathbf{d}) - J(\mathbf{u}_{opt}(\mathbf{d}), \mathbf{d}) \tag{2.3}$$

A seleção deste conjunto pode ser feita por uma busca exaustiva ao se determinar diferentes alternativas de controle, calcular o valor das perdas diretamente para diversas perturbações (tratadas como aleatórias) e selecionar a alternativa que fornece o menor valor de perda para o pior caso ou a menor perda média. Como essa abordagem pode ser muito custosa computacionalmente, outros métodos foram propostos na literatura, como (1) o controle do gradiente analítico do problema de otimização em torno de zero (CAO, 2003), e (2) os métodos locais, que são baseados na

análise local com modelo estacionário linearizado em um ponto operacional (HALVORSEN *et al.*, 2003).

Os métodos locais podem ser usados para selecionar as variáveis controladas como um subconjunto ou combinações lineares das medidas disponíveis, sendo que este último leva a perdas menores (ALSTAD *et al.*, 2009; HU *et al.*, 2012). Neste caso, podem-se empregar alguns critérios, como a regra do valor singular mínimo (SKOGESTAD e POSTLETHWAITE, 2005), a minimização da perda no pior caso (HALVORSEN *et al.*, 2003), da perda média (KARIWALA *et al.*, 2008) e o método do espaço nulo (ALSTAD e SKOGESTAD, 2007).

O trabalho de HALVORSEN *et al.* (2003) apresentou o método exato local, que fornece a perda para o pior caso, para cada conjunto de variáveis controladas. Este nome é devido ao fato de se usar normas para o cálculo das perdas econômicas. O conjunto que apresentar a perda mínima deve ser selecionado para a estrutura de controle, compondo juntamente com as restrições ativas o conjunto das variáveis controladas encontradas anteriormente. Segundo este método, a perda para o pior caso é dada pelas Equações 2.4.

$$L_{\text{worst}} = \frac{1}{2} \bar{\sigma}^2 (\mathbf{M})$$

$$\mathbf{M} = \mathbf{J}_{uu}^{1/2} (\mathbf{H} \mathbf{G}^y)^{-1} (\mathbf{H} [\mathbf{F} \mathbf{W}_d \quad \mathbf{W}_n]) \quad 2.4$$

$$\mathbf{F} = \mathbf{G}^y \mathbf{J}_{uu}^{-1} \mathbf{J}_{ud} - \mathbf{G}_d^y$$

Nesta representação, $\bar{\sigma}$ é o valor singular máximo da matriz \mathbf{M} induzido pela norma-2; \mathbf{H} é a matriz de seleção das variáveis controladas a partir das variáveis medidas, tal que $\mathbf{c} = \mathbf{H} \mathbf{y}$; \mathbf{W}_d e \mathbf{W}_n são matrizes diagonais contendo respectivamente a magnitude esperada de perturbação e a magnitude do ruído de cada medida; \mathbf{G}^y é matriz de ganho das medidas selecionadas com as entradas, \mathbf{J}_{ud} é a hessiana da função objetivo com respeito aos graus de liberdade não restritos e às perturbações. \mathbf{F} é a matriz de sensibilidade ótima das medidas em relação às perturbações e é dependente das matrizes do modelo (\mathbf{G}^y e \mathbf{G}_d^y , que é a matriz de ganho das perturbações para as variáveis medidas) e das hessianas da função objetivo (\mathbf{J}_{uu} e \mathbf{J}_{ud}).

Segundo PANAHI (2011), para evitar problemas numéricos na obtenção da matriz de sensibilidade ótima, é recomendado encontrar a mesma por meio da reotimização do processo na presença de diferentes perturbações, conforme a Equação 2.5. Além disso, é importante selecionar, segundo o senso da engenharia do processo, magnitudes suficientemente pequenas para as perturbações, de modo que $\Delta \mathbf{y}_{opt} / \Delta \mathbf{d}$ seja independente de $\Delta \mathbf{d}$. Dessa forma, um dado elemento de \mathbf{F} representa a inclinação da sensibilidade ótima de uma medida em relação a uma determinada perturbação.

$$\mathbf{F} = \left(\frac{\Delta \mathbf{y}_{opt}}{\Delta \mathbf{d}} \right) \quad 2.5$$

Alternativamente, como o pior caso tem probabilidade baixa de ocorrência, KARIWALA *et al.* (2008) propuseram empregar a perda média, L_{avg} . Isto é feito ao se substituir o valor singular $\bar{\sigma}(\mathbf{M})$ pela métrica de Frobenius (Equações 2.6). Para evitar o número excessivo de cálculos, CAO e KARIWALA (2008) e KARIWALA e CAO (2009, 2010) apresentaram algoritmos de otimização *Branch and Bound* bidirecional para encontrar as diversas soluções ótimas de \mathbf{H} , cujas rotinas em MATLAB estão disponíveis gratuitamente na internet (ntu.edu.sg/home/vinay).

$$L_{avg} = \frac{1}{2} \|\mathbf{M}\|_F^2 \quad 2.6$$

$$\|\mathbf{M}\|_F = \sqrt{\sum_{i,j} M_{i,j}^2}$$

Além da seleção numérica sistemática, SKOGESTAD (2000) também apresentou alguns requerimentos qualitativos para variáveis controladas otimizantes, que podem ser vistos sob o senso de métodos locais. Esses requerimentos precisam ser atendidos para garantir uma boa seleção de variável controlada otimizante, além de reduzirem o espaço de busca da otimização.

Requerimento 1- O valor ótimo da variável controlada (não a própria variável) deve ser insensível a perturbações (Δc_{opt} pequeno), o que implica em elementos pequenos em \mathbf{F} .

Requerimento 2 - A variável controlada tem que ser de medida fácil e controle acurado, o que significa que o erro de implementação \mathbf{W}_n é pequeno.

Requerimento 3 - A variável controlada tem que ser sensível a variações nas variáveis manipuladas. O valor do ganho da entrada para a variável controlada é grande, de modo que leva a um valor pequeno na inversão de \mathbf{G}^y .

Requerimento 4 - Para os casos com duas ou mais variáveis controladas, as variáveis selecionadas não podem ser correlacionadas, para que a matriz \mathbf{G}^y não esteja próxima da singularidade.

Vale ressaltar que o controle auto-otimizante não deve ser visto com uma alternativa para a RTO ou outras metodologias de controle ótimo, mas como um complemento. Ao se selecionar variáveis controladas mais apropriadas, pode-se reduzir ou eliminar a necessidade de reotimização ou de atualização dos *set-points*. Além disso, como o valor ótimo das variáveis auto-otimizantes é pouco sensível a perturbações, também se reduz a necessidade de estimação em linha dessas perturbações (ARAÚJO *et al.*, 2007).

2.3. Comentários finais

Até recentemente, a preocupação dos engenheiros era a manutenção de toda a planta em torno de um ponto operacional. No entanto, o aumento da demanda por produtos de propriedades cada vez mais específicas, a necessidade de redução de custos operacionais e o atendimento às legislações ambientais tornaram a operação cada vez mais integrada. Foram propostas diversas contribuições nesta área, com diferentes níveis de conteúdo teórico e heurístico, mostrando que o projeto da estrutura de controle global de uma planta representa um problema tecnológico atual e de grande relevância para o seu bom desempenho.

Apesar de terem surgido inúmeras alternativas de projeto de controle, não se pode afirmar que tenham alcançado grande repercussão no meio industrial, em termos de implementação real. Na prática, o projeto de controle tem sido realizado de forma quase independente para cada unidade, sendo que pouca atenção foi dada ao controle global (DOWNS e SKOGESTAD, 2011; ZHENG *et al.*, 1999). É possível que este resultado seja consequência não só da grande dificuldade que a dimensão e a complexidade das plantas químicas reais introduzem ao problema, mas também da falta de uma metodologia sistemática que seja, ao mesmo tempo, eficiente e de fácil entendimento e de implementação viável.

Além disso, este trabalho destaca a falta de tratamento do problema da manutenção da operação em uma diversidade de condições operacionais. De uma maneira geral, na ocorrência de mudanças nas condições do processo, os requerimentos de controle e de desempenho podem ser diferentes, de modo que uma configuração fixa para a estrutura de controle pode limitar sua operação. Naturalmente, para atender ao requerimento básico de políticas operacionais eficientes, deve haver análise mais profunda do problema, por exemplo, de modo a obter uma coleção de possíveis cenários, que, por sua vez, permitiriam o projeto de estruturas de controle mais adequadas (KORDON *et al.*, 1999).

Uma solução seria incorporar o desenvolvimento de esquemas de reconfiguração de controle às tarefas de projeto de controle, para aplicar em linha cada uma das estratégias selecionadas. As características de reconfiguração podem conferir uma alternativa para acomodar as mudanças durante a operação. Desse modo, o escopo do projeto de controle no contexto de controle global passaria a considerar também o estudo da manutenção e/ou da mudança da configuração de uma estrutura de controle para atender determinados requerimentos, por meio da ótica da reconfiguração de controle.

3. Esquemas de Reconfiguração de Controle

Este capítulo tem por objetivo apresentar alguns dos esquemas de controle encontrados na literatura de controle de processos, que consideram algum conceito de reconfiguração em sua metodologia, como o uso de múltiplos controladores, o recálculo de *set-points* para o controle preditivo e o controle tolerante a falhas.

3.1. Introdução

Normalmente, as plantas industriais de grande porte operam continuamente por longos períodos de tempo em torno de uma condição operacional. Neste sentido, os estudos dos diferentes ramos de processos assistidos por computador tendem a considerar a manutenção da operação em regiões próximas a um determinado estado estacionário como motivação principal (LONG *et al.*, 2000).

Dessa forma, o controle do processo, o gerenciamento de alarmes, o diagnóstico de falhas e outros sistemas de automação são usualmente configurados admitindo-se apenas a ocorrência de um estado de operação. Quando há a mudança de estado, estas aplicações podem gerar instabilidade nas ações de controle ou sinalizar alarmes indesejados, mesmo quando ocorre uma mudança desejada. Neste ponto, o desenvolvimento de trabalhos para o monitoramento de transições bem como a operabilidade em diversos cenários operacionais se destacam significativamente (SUNDARRAMAN e SRINAVASAN, 2003).

Os processos químicos são inerentemente não lineares em sua natureza e a teoria de controle linear convencional nem sempre permite controle satisfatório quando grandes mudanças de *set-points* ou perturbações ocorrem. Nestas situações, o sistema

tende a apresentar desempenho pobre, quando se tem o intuito de manter uma margem de estabilidade adequada (OGUNNAIKE, 1996; SEBORG *et al.*, 2011).

Historicamente, os sistemas de controle distribuído não incluem o projeto de uma habilidade interna para o controle de uma planta durante a ocorrência de transições e as aplicações de níveis avançados não apresentam desempenho efetivo durante as transições. Segundo SRINIVASAN *et al.* (2005), todos os estados de uma planta, incluindo as transições, devem ser avaliados com o mesmo grau de rigor e cuidado, com o intuito de tornar possível a operabilidade do processo em todos os modos. Separando estados em modos e transição, tem-se que os primeiros representam uma operação quase contínua da unidade em uma configuração fixa em estado quase estacionário; e o segundo se refere a uma operação com a ocorrência de descontinuidades (por exemplo, mudanças de *set-points*, de configuração de equipamentos ou abertura de válvulas).

A adequação da operação do processo a frequentes alterações de seu entorno, para manter sua operabilidade, despertou inúmeras pesquisas no campo de controle de processos. As diversas alternativas desenvolvidas incluem ferramentas para monitoramento do processo, projeto de estruturas de controle descentralizado, controle adaptativo, controle preditivo, controle robusto, detecção de falhas, reconfiguração do sistema, modelagem do problema como autômatos híbridos, implementações de algoritmos de otimização global e análise de estabilidade de sistemas (LUYBEN *et al.*, 1998; KONSTANTOPOULOS e ANTSAKLIS, 1999; ZHENG *et al.*, 1999; LAKSHMINARAYANAN *et al.*, 2001; TAN *et al.*, 2004; TRAN *et al.*, 2007; BENOSMAN, 2010).

A Tabela 3.1 apresenta brevemente algumas destas estratégias encontradas na literatura, sendo que o que se refere ao controle preditivo, supervisório (decomposição da operação) e tolerante a falhas é comentado em uma seção específica neste capítulo. De modo geral, embora se diferenciem em suas ideias motivadoras, essas diversas abordagens seguem uma premissa fundamental que é dotar o sistema de controle com alguma estrutura de inteligência, permitindo que o controlador opere de modo autônomo (KOUMBOULIS *et al.*, 2007).

Entre essas abordagens, a técnica de ganhos ajustáveis (*gain scheduling*), no controle adaptativo, é a metodologia mais simples e intuitiva deste tipo de controle. Este método emprega uma família de controladores lineares, cada um dos quais provê um

controle satisfatório para um diferente ponto de operação do sistema. Uma ou mais variáveis, chamadas de variáveis de planejamento (*scheduling variables*), são usadas para determinar a região operacional que está ativa e permitir o uso do controlador mais apropriado. Desse modo, o sistema de controle torna-se mais robusto, ao compensar variações não lineares nos parâmetros do controlador como função das condições operacionais (LAGERBERG e BREITHOLTZ, 1997; OLIVEIRA *et al.*, 1997; GARDUNO-RAMIREZ e LEE, 2007).

Tabela 3.1 - Estratégias de controle para manutenção da operabilidade.

| Estratégia | Descrição |
|-----------------------------|--|
| Controle adaptativo | A estrutura de controle é tomada como fixa. Contudo, os parâmetros dos controladores são adaptados continuamente a cada ciclo de controle do processo (ÅSTRÖM e WITTENMARK, 1997). |
| Controle preditivo | A estrutura de controle é multivariável e sua configuração pode ser atualizada por meio do modelo do processo e das restrições operacionais (RAWLINGS e MAYNE, 2009). |
| Controle robusto | A estrutura de controle e os parâmetros são fixos e empregados para diferentes situações, com as quais o desempenho global está associado (MORARI e ZAFIRIOU, 1989). |
| Controle supervisorio | Envolve a manutenção do processo por meio da abordagem de modos de operação (decomposição), para os quais são projetadas soluções de controle (RODRIGUEZ <i>et al.</i> , 2003). |
| Controle tolerante a falhas | É feito explicitamente diagnóstico de falhas com o uso de sensores virtuais como filtro de Kalman e observadores dedicados (ZHANG e JIANG, 2008). |

Em outro extremo, tem-se o controle preditivo, que é capaz de lidar explicitamente com as diversas alterações que afetam o processo, uma vez que incorpora seu modelo matemático, suas interconexões e restrições físicas e econômicas. Obviamente, no caso da operação em diferentes pontos, o modelo do processo deve ser capaz de lidar com as diferentes regiões de operação. As aplicações industriais em tempo real se apresentam em número crescente e exibem resultados muito satisfatórios. Apesar de o esforço computacional para a busca da solução ser uma questão dominada, a implementação desse tipo de controle demanda uma modelagem extensiva do

processo, o que reduz seu potencial para aplicações em larga escala (FORBES e MARLIN, 1996).

Dentre as possíveis abordagens à manutenção da operabilidade, mesmo quando ocorrem os desafios apresentados anteriormente, destacam-se também as estratégias que representam uma alternativa para a adaptação de um sistema para uma configuração mais adequada em dadas circunstâncias. Essa adaptação envolve aspectos de cooperação, de coordenação e, de modo geral, mudanças estruturais internas do sistema, como a comunicação de seus sinais, seu comportamento dinâmico e sua resposta esperada (BENÍTEZ-PÉREZ *et al.*, 2007). Dessa forma, diversas linhas de pesquisa da engenharia de controle têm se dedicado à pesquisa de técnicas com esquemas de reconfiguração, que compreendem normalmente as tarefas de:

- a. detecção de mudanças internas ou externas ao sistema;
- b. tomada de decisões em relação ao evento ocorrido; e
- c. adaptação às novas condições.

De modo geral, a questão chave, e talvez o que representa o maior desafio para este tipo de abordagem, é decidir qual deve ser a nova configuração de controle. De qualquer modo, a reconfiguração de controle pode envolver mudanças estruturais e/ou paramétricas do sistema, como a comunicação de seus sinais e a sintonia dos controladores, para permitir a transição entre as regiões do espaço operacional.

Na literatura de controle global, há uma grande quantidade de trabalhos sobre projetos de controle. No entanto, consideram que a estrutura de controle é tomada como imutável e independente das condições operacionais do processo. Isto faz com que esta atividade reduza-se simplesmente ao projeto do controlador. Esta consideração não permite a solução dos problemas inerentes da operação de processo em uma variedade de cenários, o que pode reduzir o desempenho do sistema de controle. Assumindo que este problema possa ser contornado em parte pela reconfiguração das estruturas de controle, este capítulo apresenta algumas vertentes da literatura que são a base necessária para o entendimento do problema de reconfiguração.

3.2. Reconfiguração de controle

Esta tarefa de controle tem bases fortes na robótica e na aeronáutica. Para o controle de voo de aviões, realiza-se o projeto de controladores adequados para cada momento: a preparação para a decolagem, a decolagem em si, a estabilização do voo, a aterrissagem e a finalização para o desembarque (SIGURD, 2003). No entanto, esta abordagem pode ser considerada também em processos da Engenharia Química, já que, por exemplo, a operação dinâmica em múltiplas regiões pode apresentar desafios importantes. Na verdade, além do gerenciamento da condição do processo (FEITAL, 2011), as motivações para reconfiguração na operação de processos químicos podem incluir a compensação da mudança da dinâmica do processo, a manutenção da viabilidade operacional e a manutenção do processo nas proximidades do ótimo econômico (ASKE *et al.*, 2009).

O desenvolvimento desta área remonta os anos 80, devido à necessidade de conferir aspectos de autorreparação a sistemas de controle de voo para restaurar sua funcionalidade quando da ocorrência de falhas (ETERNO *et al.*, 1985). Desde então, este tipo de abordagem representa uma alternativa para a manutenção da operabilidade em outras áreas da engenharia, uma vez que o controle pode ser adaptado para uma configuração mais adequada (ZHANG e JIANG, 2008). Normalmente, a execução da reconfiguração de controle emprega algoritmos lógicos, que podem ser divididos em (BENÍTEZ-PÉREZ *et al.*, 2007):

- a. Reconfiguração baseada no modelo do processo, onde se utiliza um índice de desempenho, como uma função dos erros de predição, para se definir o modelo mais adequado e os novos parâmetros do controlador.
- b. Reconfiguração baseada na busca de um conjunto de controladores, que são testados individualmente para determinadas condições operacionais do processo e, em função de um índice de desempenho ou da região do espaço operacional, os mesmos podem ser alternados para aplicação em linha.

Ambas as classes consideram que não há a possibilidade de adaptações no projeto do processo e tampouco substituições de suas partes. Na verdade, apenas adaptações estruturais e/ou paramétricas relativas ao controle podem estar envolvidas. Segundo STEFFEN (2005), o sistema de controle reconfigurado pode fazer uso de um atuador diferente, que foi desconsiderado pela estrutura nominal, ou depender da leitura

de outros sensores ainda não empregados. CORRADINI e ORLANDO (2002) consideraram que este tipo de controle é emergente e que o maior fator limitante do emprego de reconfiguração/chaveamento eram os longos períodos de transição, que podem implicar em perdas importantes ou em instabilidade das malhas.

Para melhor compreensão do termo *reconfiguração de controle*, SIGURD (2003) mostrou uma inspiração interessante na química orgânica. Neste caso, na química molecular, o termo configuração é utilizado para distinguir substâncias que apresentam fórmulas moleculares idênticas – isomeria. Por exemplo, essas substâncias podem se diferenciar somente na posição relativa de alguns átomos (isomeria espacial). No contexto de controle, também se podem apontar as configurações de um sistema de controle em relação ao arranjo das malhas (estrutura de controle) ou aos parâmetros. Do mesmo modo que a diversidade de disposições geométricas confere, em nível macroscópico, diferentes propriedades à substância, a reconfiguração do sistema de controle pode fornecer características desejadas para a operação do processo.

Uma definição mais geral para a reconfiguração de controle considera o problema de encontrar uma nova configuração e novos parâmetros do sistema de controle para mudanças programadas na operação do processo ou devidas à ocorrência de eventos anormais. Neste caso, entende-se como configuração uma estrutura qualquer que seja adequada para um dado objetivo e que possa ser implementada no sistema; o termo reconfiguração é visto como a adaptação ou a troca entre quaisquer destas estruturas. Dessa forma, a reconfiguração de controle implica no desenvolvimento de um esquema dotado de diferentes estratégias para manutenção do sistema de controle, que pode ter sua configuração alterada, quando os requerimentos da operação do processo não forem atendidos ou a operação estiver comprometida (SRINIVASAN *et al.*, 2005; TRAN *et al.*, 2007).

Tal como a operação do processo, os objetivos de reconfiguração de controle são diversos e são determinados pelos requerimentos operacionais e econômicos de controle. Dessa maneira, é difícil definir apenas um objetivo para descrever suficientemente todos os problemas de reconfiguração. No entanto, sabendo que a configuração nominal do sistema satisfaz a requisitos de estabilidade e controlabilidade, o sistema reconfigurado também deve atender de certo modo a esses aspectos, como a restauração da estabilidade das malhas de controle (STEFFEN, 2005). Esses objetivos podem ser alcançados ao longo de três tarefas holísticas interdependentes, como (1) o

controle dinâmico do sistema, (2) a supervisão do desempenho do sistema e (3) a realização da reconfiguração da estrutura de controle (BENÍTEZ-PÉREZ *et al.*, 2007).

Para conferir confiabilidade, estas tarefas exigem que o programa (*software*), que controla e supervisiona o processo, considere algoritmos simples para uma reconfiguração fácil e de custo adequado. Adicionalmente, as soluções de instrumentação (*hardware*) a serem empregadas devem ser consideradas quando do projeto do sistema de controle com a funcionalidade de reconfiguração (LONG *et al.*, 2000). Quanto a isso, em um processo químico existem diversos sistemas mecatrônicos na forma de controladores e computadores industriais. Deste modo, o processo pode ser analisado a partir de dois pontos de vista: de um lado, têm-se o processo e os elementos físicos; e de outro, os componentes e as aplicações de controle (BRENNAN *et al.*, 2008). Com isto, ambas as análises têm que prover condições tecnológicas suficientes para que a reconfiguração seja de realização prática possível. Este trabalho considera em seu escopo apenas a análise do processo químico e o desenvolvimento de aplicações de controle.

3.3. Esquemas da literatura

Quando da consideração da tarefa de reconfiguração de controle, o primeiro passo no desenvolvimento de qualquer esquema é a determinação das limitações de uma estrutura de controle. Deste modo, a tarefa é então iniciada a partir do projeto de um controlador de configuração adequada para garantir estabilidade e desempenho satisfatório, pelo menos na condição em que o processo tem maior probabilidade de ser operado (EICK, 2003). Posteriormente, dadas as limitações do controle proposto, as estratégias para reconfiguração são desenvolvidas, sendo soluções *ad hoc* em sua maior parte, isto é, específicas para cada caso.

As propostas encontradas na literatura consideram que, durante a reconfiguração de controle, os controladores podem ser reestruturados, envolver a busca por novos parâmetros em resposta a uma deficiência de controle, bem como modificados por meio do projeto de uma nova lei de controle. Por exemplo, no caso de falhas em instrumentos, o sistema de controle reconfigurado deve propiciar uma condição em que o comportamento dinâmico do processo seja equivalente à operação

nominal (STEFFEN, 2005). Além disso, o sistema reconfigurado em malha fechada deve ser estável.

As próximas seções têm o objetivo de apresentar um breve panorama da diversidade de soluções de controle, que, em algum aspecto de seu desenvolvimento, empregam esquemas de reconfiguração. O principal foco das aplicações tem envolvido tópicos importantes como (1) o gerenciamento de transições, que demanda uma abordagem de reconfiguração dinâmica para permitir mudanças em linha, sem a necessidade de paradas do processo; (2) a obtenção de esquemas de controle autoadaptativos, que implicam em uma abordagem de reconfiguração inteligente e automática, usando a filosofia de controle adaptativo ou preditivo; (3) a recuperação da operabilidade do processo após a ocorrência de eventos anormais, em que são desejadas soluções de controle tolerantes a falhas para propiciar controle satisfatório; e (4) a manutenção constante da operação próxima ao ótimo econômico em todo espaço operacional.

3.3.1. Decomposição em regimes operacionais

Este tipo de abordagem assume que qualquer modelo ou controlador pode exibir desempenho satisfatório apenas em uma região reduzida do espaço operacional. Por exemplo, algumas soluções de controle podem deixar de garantir a estabilidade do processo devido à inviabilidade de medição de algumas perturbações e/ou à mudanças de *set-points* que fazem com que o ponto operacional seja diferente. Na verdade, nos processos químicos, os fatores que determinam essa limitação são diversos e, entre eles, estão o limite de validade da linearização do modelo e as hipóteses de modelagem (RODRIGUEZ *et al.*, 2003). Outro problema pode surgir ao se desejar implementar as soluções ótimas encontradas fora de linha, já que o conjunto de variáveis do processo disponível para otimização pode não ser constante (JACOBSEN e SKOGESTAD, 2011). Deste modo, no intuito de obter um modelo/controlador global, pode ser interessante particionar a operação do processo em regiões (ou regimes) operacionais, dentro das quais um único controlador local seja aplicado (SUNDARRAMAN e SRINAVASAN, 2003).

Conforme o exemplo da Figura 3.1, o espaço operacional, formado pelas variáveis x_1 e x_2 de um processo, é particionado em quatro regiões distintas, que

poderiam representar, por exemplo, a operação em termos do instante de *start-up*, dos níveis baixo, médio ou alto de conversão e da parada da produção (RODRIGUEZ *et al.*, 2003). Do mesmo modo, as regiões podem ser representativas da saturação de algumas variáveis manipuladas (LERSBAMRUNGSUK *et al.*, 2008) ou da mudança do conjunto de variáveis controladas devida à ativação de diferentes restrições operacionais (JAGTAP *et al.*, 2011). Neste caso, as variáveis x_1 e x_2 seriam dadas por parâmetros ou perturbações importantes.

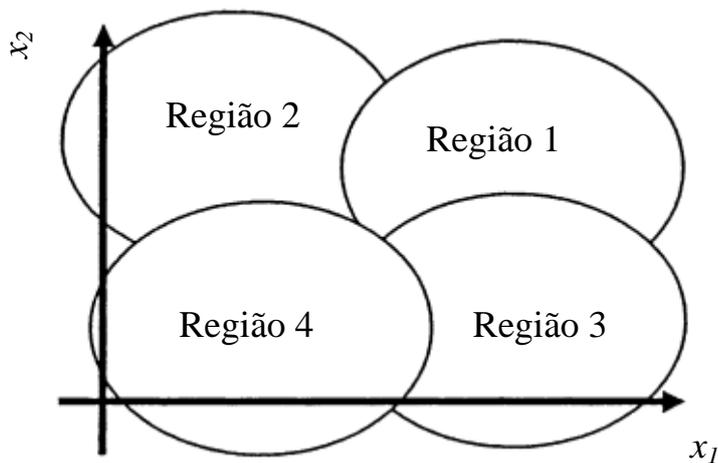


Figura 3.1 - Decomposição do espaço operacional em regiões locais
(adaptado de RODRIGUEZ *et al.*, 2003).

De modo geral, nos processos químicos, é possível identificar um conjunto de fenômenos relevantes, que podem ser usados para caracterizar as regiões operacionais, de modo a simplificar o problema à análise de efeitos locais. A ideia central é que o desenvolvimento de modelos locais, além de ser mais simples, pode ser suficiente, mesmo quando o processo apresenta não linearidades importantes globalmente. O resultado direto é a determinação de como o processo pode ser particionado em múltiplas regiões e a sistematização da análise e projeto do sistema de controle para cada região (FOSS *et al.*, 1995; SRINIVASAN *et al.* 2005).

Embora o problema tenha sido tratado puramente fora de linha (*offline*), LAKSHMINARAYANAN *et al.* (2001) estudaram a reconfiguração de uma malha de controle de pressão de gás combustível por motivos econômicos. A pressão era inicialmente controlada por meio da corrente de butano. Contudo, para reduzir os custos de produção, já que o butano era adquirido de uma fonte externa, foi necessário

modificar o controle para a corrente de etano. Para tanto, apresentaram uma abordagem sistemática para a identificação de modelos, a partir de dados experimentais das malhas fechadas, e obtiveram um modelo empírico com o qual se projetou o controlador.

SRINIVASAN *et al.* (2005) apresentaram uma metodologia, que permite a utilização do sistema de controle e monitoramento em diferentes modos de operação do processo. Nesta proposta, cada um dos estados de operação (modo ou transição) é identificado e caracterizado, a partir dos dados históricos do processo. Essa caracterização se baseia nos intervalos de variação das variáveis e as transições, em função de variáveis significantes e suas tendências. Este conhecimento é usado por uma hierarquia supervisória para identificar o estado do processo em tempo real. A informação gerada na etapa anterior é utilizada para reconfigurar o controle automaticamente, quando a planta é submetida a uma mudança de estado.

BENÍTEZ-PÉREZ *et al.* (2007) apresentaram um estratégia de reconfiguração de controle baseada no conhecimento do atraso de sensores de um sistema de esteiras industriais. Para tanto, considerando um sistema de controle distribuído, onde os efeitos das falhas são locais, a metodologia consolida técnicas de controle, que garantem a estabilidade global, e técnicas de planejamento de estratégias, que são empregadas em função de uma determinada falha e da duração dos atrasos relacionados. Esses autores também mostraram que a reconfiguração de controle é viável, desde que se faça uso de uma técnica de chaveamento que predetermine quando uma estratégia de controle é mais adequada que outra em uma dada circunstância.

GARDUNO-RAMIREZ e LEE (2007) desenvolveram uma estratégia de controle de uma planta de geração de energia ao longo de suas regiões operacionais. A partição das regiões foi realizada a partir da análise dos valores característicos da matriz de ganhos estáticos da planta, em cada ponto operacional de interesse. Neste caso, a variável cujo valor característico apresenta maior variação em relação ao nominal é usada para determinar a partição e indicar o chaveamento para controle mais apropriado. Cada controlador local está associado a uma partição da região operacional por meio de uma regra de inferência de sistemas *Fuzzy* (TAKAGI e SUGENO, 1985), fazendo com que o conjunto de controladores da planta se reduza a um controlador de ganho planejado multimodal. Contudo, uma desvantagem é a necessidade de um modelo da planta válido para todas as regiões operacionais para o cálculo de compensadores, o que nem sempre é viável para as plantas industriais.

KOUMBOULIS *et al.* (2007) apresentaram uma técnica para controle de sistemas SISO, considerando chaveamento lógico entre controladores. Considera-se que esses sistemas são descritos por modelos lineares identificados a partir de um conjunto de dados, de modo que a validade é restrita a regiões próximas aos pontos operacionais. Dada uma mudança, o chaveamento é realizado apenas no momento em que o sistema alcança um ponto operacional, que deve pertencer a uma região de tolerância adjacente à anterior. Esta técnica foi aplicada a um CSTR isotérmico simples com uma reação de 1ª ordem. Os resultados obtidos foram satisfatórios e melhores que aqueles provindos da abordagem de ganhos ajustáveis e do chaveamento em malha aberta. Contudo, os requerimentos impostos na seleção dos controladores e na estratégia de chaveamento são muito restritivos.

PANAHI (2011) estudou o problema de controle de uma planta de recuperação de 90% do CO₂, usando o processo MEA. Quando se aumentou a carga de processamento em +25%, a manutenção da temperatura (variável otimizada) da seção de *stripper* não foi possível, devido à saturação da carga do refulvador (variável manipulada). Para evitar instabilidade, o controle da quantidade recuperada de CO₂ foi descontinuado para possibilitar o uso da vazão de reciclo de amina no controle da temperatura. Embora a composição de CO₂ não tenha sido controlada diretamente, a reconfiguração fora de linha permitiu o atendimento do requerimento de recuperação mínima de 80% e o aumento da carga processada em cerca de +40 %.

Quanto à partição do espaço operacional, um método de busca de regiões operacionais de restrições ativas, em função das perturbações, foi recentemente publicado por JACOBSEN e SKOGESTAD (2011). Neste caso, têm-se os conceitos de *curva de restrição* e *região* para uma determinada restrição, que se referem respectivamente à linha que separa a região, onde é ótimo manter a restrição em estudo como ativa, das outras regiões; e a uma parte específica do espaço de perturbações, limitada pelas curvas de restrições e descrita pelas restrições que estão ativas. Quando há N restrições, as quais podem estar ou ativas ou inativas, o número de conjuntos de restrições ativas, isto é, de regiões, é da ordem de 2^N . No entanto, em aplicações práticas, este número é menor já que algumas combinações de restrições são fisicamente inviáveis.

Dessa forma, antes de se iniciar a determinação das regiões, algum conhecimento do processo pode ser considerado, juntamente com o procedimento de

otimização. Isto é feito com o intuito de evitar a avaliação de um grande número de pontos dentro do espaço de perturbações. Neste caso, pode-se:

- a. verificar se algumas das restrições são continuamente ativas (ou inativas) para todos os valores das perturbações, já que isso reduz o número de regiões possíveis por um fator de 2 para cada restrição nesta condição.
- b. prever se algumas das fronteiras das regiões (parte das curvas de restrição) independem de perturbações. No caso de um espaço de perturbações bidimensional, estas fronteiras são linhas verticais ou horizontais.
- c. localizar as fronteiras das regiões que são apenas verticais ou horizontais, considerando o valor da perturbação no qual a restrição muda entre ativa e inativa.

O problema deve ser refinado até o ponto em que a descrição das regiões seja suficientemente representativa, não havendo necessidade de considerar mais pontos. Contudo, para uma descrição mais acurada das regiões, o procedimento de JACOBSEN e SKOGESTAD (2011) busca mais pontos por meio de um algoritmo de interpolação. A ideia é encontrar o valor da perturbação (d_{ativo}) para o qual a restrição muda de natureza. Para qualquer restrição c_i , faz-se uso do fato de que o próprio valor da restrição e/ou do respectivo multiplicador de Lagrange λ_i é nulo e que a soma dos dois termos é monótona, pelo menos em uma região próxima de d_{ativo} . Neste ponto, tem-se que $c_i + \lambda_i = 0$. Desse modo, pode-se resolver iterativamente a Equação 3.1 para encontrar d_{ativo} para cada restrição. Para este fim, define-se um intervalo de busca inicial, no qual o sinal de $c_i + \lambda_i$ deve ser diferente.

$$res_i(d) = c_i(d) + \lambda_i(d) \tag{3.1}$$

De acordo com esses trabalhos citados, a decomposição do espaço operacional permite chegar então a um conjunto de controladores denominados locais, que apresentam desempenho satisfatório apenas em cada região específica. Quando estes controladores são coordenados, segundo um esquema de reconfiguração (chamado de chaveamento, ou de *switching*, em alguns trabalhos), permitem obter um controlador global teoricamente capaz de manter o desempenho em todas as regiões (Figura 3.2). Para realizar esta tarefa é preciso determinar um esquema para a combinação das soluções locais, de modo a formar um sistema global (RODRIGUEZ *et al.*, 2003). Neste

caso, uma camada de coordenação deve ser capaz de encontrar dinamicamente, a cada instante de amostragem, um controlador K_i , onde $i = 1 \dots n$, que seja mais adequado na manutenção da variável de saída y em torno do valor de referência r , reduzindo a magnitude do erro de controle e .

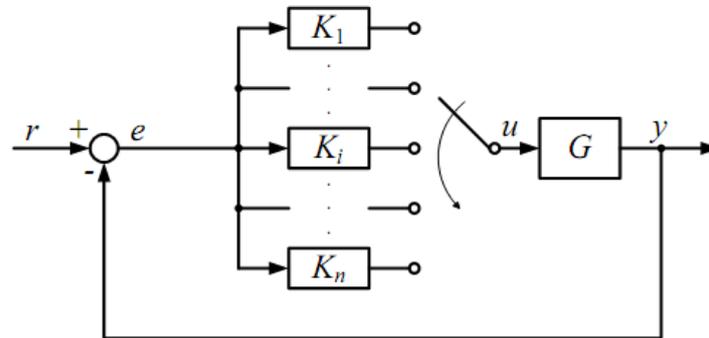


Figura 3.2 – Sistema de controle baseado em chaveamento.

Para este fim existem diversas abordagens, que, por exemplo, podem ser baseadas em hipóteses determinísticas ou estocásticas ou apresentar partições rígidas ou flexíveis. Nos casos mais simples para lidar com mudanças nas restrições ativas na entrada, empregam-se controladores PI em arranjo de *split range*. Este arranjo permite que a atuação sobre o processo seja conduzida por meio de duas ou mais variáveis manipuladas, coordenadas por um único controlador (normalmente, chamado de seletor), para o controle de apenas uma variável medida. A variável manipulada usada para manutenção do processo em suas condições operacionais nominais é denominada primária, enquanto que as demais são as secundárias. Contudo, a escolha final do arranjo pode ser baseada em outras considerações, o que revela certa flexibilidade a ser explorada no projeto da estrutura de controle (SEBORG *et al.*, 2011).

Por exemplo, ao aumentar a vazão de alimentação (F) de uma coluna de destilação, com vistas ao aumento da taxa de produção, em algum instante, a vazão de vapor do refeedor (V_B) pode atingir seu limite de saturação (quando $F \geq F^*$). Se o controle da composição de fundo (x_B) é feito usando V_B como variável primária, então a estabilidade desta malha é comprometida. A solução de controle *split range* permite utilizar uma segunda variável manipulada, como a vazão de refluxo (L_T) para a situação em que V_B não está mais disponível (Figura 3.3). Neste caso, é esperado que o desempenho do controle de x_B seja reestabelecido por meio da capacidade de reconfiguração conferida à malha de controle.

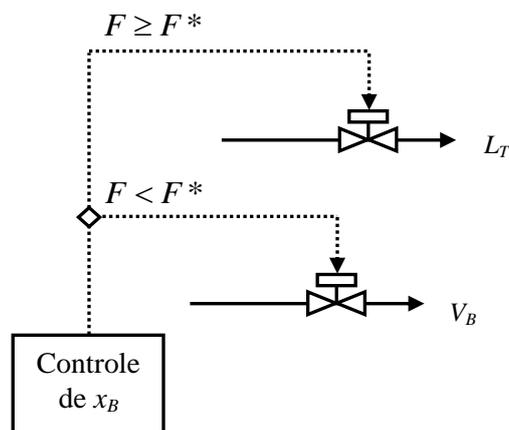


Figura 3.3 – Exemplo de controle em arranjo *split range*.

No contexto de controle ótimo, a proposta fundamental do emprego do chaveamento entre as configurações de controle é possibilitar a implementação de uma política de operação ótima, observando as mudanças no conjunto de restrições ativas. É possível operar nas diferentes regiões quando se monitoram as mudanças nas restrições ativas. Quando uma nova região é determinada, a política ótima correspondente à nova região que deve ser implementada (NARASIMHAN e SKOGESTAD, 2007).

Neste cenário, LERSBAMRUNGSUK *et al.* (2008) estudaram o controle de redes de trocadores de calor quanto à implementação do ponto ótimo econômico encontrado fora de linha. O problema foi formulado como uma programação linear inteira mista (MILP, do inglês *mixed-integer linear programming*), que resultou em um conjunto de soluções ótimas normalmente encontradas em uma restrição (vértice). No caso das entradas, isto implica na ocorrência de saturação. Dessa forma, depois de os graus de liberdade não restritos serem usados para controle das restrições de igualdade, é ótimo manter algumas variáveis manipuladas em suas restrições. Para uma dada janela de operação, o vértice ótimo pode mudar segundo as condições operacionais. A solução ideal seria empregar RTO, no entanto, para atender a requisitos de simplicidade, foi proposto alternativamente o emprego de chaveamento de controle para lidar com as restrições ativas. Como resultado, o problema MILP possibilitou obter uma estrutura ótima para os controladores em arranjo *split range* ao longo de cinco regiões operacionais.

Por outro lado, as soluções mais avançadas consideram que a tarefa de reconfiguração de controle local é realizada por meio de um supervisor para manter as saídas do processo em valores de referência. Esta metodologia difere da solução de

controle *split range*, por exemplo, pelo fato de a seleção do controlador apropriado ser feita em linha. Para tanto, em adição à tarefa de decomposição do espaço operacional do processo em regiões operacionais, o desenvolvimento de um sistema de controle híbrido dentro desta ótica pode apresentar as seguintes etapas: (1) seleção do modelo/controlador local em cada região e (2) parametrização de cada região por meio de variáveis do processo (RODRIGUEZ *et al.*, 2003).

No caso de se basear no modelo do processo, a reconfiguração é realizada por meio de um mecanismo de observação dos erros de estimação da saída atual do processo, gerados por um conjunto de modelos candidatos a representar a região operacional atual. Alternativamente, observa-se o valor de funções de desempenho de controle, que podem ser dadas em termos econômicos ou de controlabilidade. Dentro desta ótica, considera-se que o modelo que atenda aos critérios de seleção seja representativo do comportamento atual do processo e permita a implementação em linha do controlador associado (KULKARNI e RAMADGE, 1996). Dessa maneira, pode-se considerar que a reconfiguração do par modelo/controlador representa intrinsecamente uma extensão dos sistemas de controle adaptativo em vários sentidos, como o fato de oferecer uma alternativa para a sintonia dos parâmetros.

Contudo, a reconfiguração também pode trazer efeitos indesejáveis para o sistema de controle, como a ocorrência de descontinuidade de sinal e/ou a presença de transientes, frequentemente chamados de *bumps* (LIBERZON e MORSE, 1999). Isto ocorre sempre que a saída de um controlador em linha difere da saída do novo controlador a ser implementado no instante de chaveamento (CHEONG e SAFONOV, 2008). Por exemplo, no caso de chaveamento do controlador K_i para K_j no tempo t_s , a saída do controlador global é definida como mostrado na Equação 3.2. Quando a ação do controlador y_{K_i} é substituída por y_{K_j} , a saída do controlador u pode produzir efeitos indesejados.

$$u = \begin{cases} y_{K_i} & \text{para } t < t_s \\ y_{K_j} & \text{para } t \geq t_s \end{cases} \quad 3.2$$

Para atenuar este efeito, foram propostos métodos de transferência baseados no conhecimento explícito do estado verdadeiro do processo ou na dinâmica interna de cada controlador (ZACCARIAN e TEEL, 2004). Neste último caso, por exemplo, pode-se requerer que as saídas do par de controladores envolvidos no chaveamento sejam

equivalentes no instante do chaveamento. Segundo RODRIGUEZ *et al.* (2003), é feito um mapeamento da saída atual sobre os controladores latentes, de modo que os mesmos estejam conectados em paralelo e possam ser guiados também pelo sinal de controle final (o que permite a informação contínua da última ação de controle).

A literatura de controle que considera o uso de múltiplos modelos ou controladores é bastante vasta. De certo modo, a origem das propostas tem base no conceito de controle adaptativo (ÅSTRÖM e WITTENMARK, 1997), uma vez que apenas o modelo do processo é empregado para a busca do controlador de acordo com os fenômenos observados (e a estrutura de controle permanece inalterada). No caso da operação ótima, uma questão que ainda está em aberto é como modificar a estrutura de controle para levar em conta não apenas variações no conjunto de restrições ativas, mas também quando as soluções de variáveis auto-otimizantes podem ser diferentes em cada região operacional.

3.3.2. Controle preditivo - MPC

O controle preditivo é uma das alternativas de controle avançado mais estudadas e com maior aplicação na indústria, visto que é capaz de considerar todas as restrições do processo. A principal proposta é encontrar uma sequência de ações de controle baseadas em um modelo explícito a partir de um problema de otimização, levando em conta o rastreamento dos *set-points*, os esforços de controle e as restrições operacionais. Para tanto, são empregados normalmente modelos lineares multivariáveis e parâmetros de sintonia (matrizes de penalização do esforço e do erro de controle e os horizontes de controle e predição), cujas definições podem tomar um tempo considerável. Na literatura, há artigos de revisão bastante extensos sobre a história do MPC, seus desenvolvimentos, que foram inspirados principalmente em questões práticas da indústria, como RAWLINGS (2000), MACIEJOWSKI (2002), QIN e BADGWELL (2003) e RAWLINGS e MAYNE (2009).

O problema linear se refere à minimização de uma função objetivo quadrática, sujeita ao modelo e às restrições (Equações 3.3).

$$\min_{\Delta u} J(k) = \sum_{i=1}^P \left\| \mathbf{y}_{k+i} - \mathbf{y}_{k+i}^{set} \right\|_Q^2 + \sum_{i=0}^{M-1} \left\| \Delta \mathbf{u}_{k+i} \right\|_R^2 + \sum_{i=0}^{M-1} \left\| \mathbf{u}_{k+i} - \mathbf{u}_{k+i}^{set} \right\|_S^2 \quad 3.3a$$

sujeito a

$$\begin{aligned}\mathbf{x}(k+1) &= \mathbf{\Phi} \cdot \mathbf{x}(k) + \mathbf{\Gamma} \cdot \mathbf{u}(k) \\ \mathbf{y}(k) &= \mathbf{C} \cdot \mathbf{x}(k) \\ \mathbf{y}_{min} &\leq \mathbf{y}(k) \leq \mathbf{y}_{max} \\ \mathbf{u}_{min} &\leq \mathbf{u}(k) \leq \mathbf{u}_{max}\end{aligned}\tag{3.2b}$$

Nesta representação, a Equação 3.3a corresponde à função objetivo do problema a ser minimizada a cada iteração e a Equações 3.2b são o modelo do processo e o conjunto de restrições. \mathbf{x} é o vetor de estados; \mathbf{u} é o vetor de variáveis de entrada; \mathbf{y} é o vetor de variáveis de saída, $\mathbf{\Phi}$, $\mathbf{\Gamma}$ e \mathbf{C} são matrizes de dimensão adequada do modelo linear; \mathbf{y}^{set} e \mathbf{u}^{set} são respectivamente os *set-points* para as variáveis de saída e de entrada; k é o instante de amostragem; P é o horizonte de predição; M é horizonte de controle no qual se buscam as ações de controle $\Delta\mathbf{u}$; \mathbf{Q} é matriz de ponderação de rastreamento das variáveis controladas; \mathbf{R} e \mathbf{S} são respectivamente as matrizes de penalização da variação e de rastreamento do alvo das variáveis manipuladas.

Este tipo de controle é empregado normalmente à manutenção de variáveis relacionadas à definição do ponto ótimo de operação (como a taxa de produção e da qualidade de produto na camada de controle supervisorio). Contudo, ao se desejar operar com custo mínimo, quando for desejável variar a quantidade de produto ou para atenuar perturbações, podem surgir problemas importantes. Por exemplo, (1) a garantia do desempenho do controle dinâmico pode ser prejudicada devido a mudanças no conjunto de restrições ativas (SKOGESTAD, 2004); (2) as restrições operacionais consideradas tornam-se inviáveis, de modo que não exista solução de controle possível (ROSSITER, 2004); ou (3) a estabilidade das malhas pode ser afetada quando a dinâmica das perturbações é comparável à dinâmica do processo (TATJEWSKI *et al.*, 2006).

Nos casos em que as restrições ativas ao longo da campanha podem ser diferentes, possivelmente deve haver mudanças também no conjunto das variáveis controladas, o que pode demandar reconfiguração de malhas da camada de controle regulatório. Este tipo de alteração é indesejável, uma vez que a estabilidade do processo pode ser comprometida. Na verdade, a camada regulatória deve ser independente dos

objetivos econômicos (ASKE *et al.*, 2009). De qualquer modo, o controle supervisorio deve incluir estratégias para realizar a reconfiguração de controle. Para tanto, a otimização realizada em linha, juntamente com o MPC, pode incorporar fatores bastante importantes para permitir a consideração de (1) mudança de objetivos de controle, (2) mudança de dinâmica do processo, (3) entrada de perturbações ou (4) ocorrência de condição de falha. É por isso que o MPC talvez seja reconhecido como a única técnica de controle que considera intrinsecamente as mudanças ocorridas na operação e seja capaz de reconfigurar o controle do processo, a cada instante de amostragem (RAWLINGS e MAYNE, 2009).

Na prática, isso é possível devido à natureza multivariável do MPC, à atualização do modelo do processo e à definição dos *set-points* ótimos para as variáveis controladas e dos valores de referência para as variáveis manipuladas. Geralmente, estes novos valores de controle são definidos por RTO, que é realizada com um modelo não linear estacionário e uma função objetivo baseada em dados econômicos (DARBY *et al.*, 2011). No entanto, a reconfiguração *automática* do MPC, de modo a refletir a verdadeira condição do processo, pode torná-lo mal condicionado e trazer problemas à controlabilidade (ASKE *et al.*, 2009). De qualquer forma, o esquema de controle com MPC é preferível quando as restrições ativas mudam, de modo a evitar lógicas de reconfiguração complicadas (SKOGESTAD, 2004).

No entanto, o custo computacional implicado pela RTO pode inibir sua aplicação em alguns processos, principalmente quando vistos no contexto de controle global. Para evitar a necessidade da solução a cada ciclo, foi proposto na literatura o MPC explícito, em que as entradas são calculadas usando um controlador *feedback* explícito, a partir dos valores medidos ou estimados do estado atual (PISTIKOPOULOS *et al.*, 2000; GRANCHAROVA *et al.*, 2004). A ideia é dividir o espaço de estado em regiões, de modo a formular uma lei de controle baseada nos estados para cada região. Cada partição do espaço operacional corresponde a um conjunto de restrições ativas. Do mesmo modo, MANUM *et al.* (2008) propuseram o uso de soluções ótimas pré-computadas baseadas em otimização fora de linha, em que as medidas são usadas para indiretamente atualizar as entradas por meio de esquema de controle *feedback*.

Contudo, estes esquemas podem se tornar de realização prática complicada devido ao aumento do número de regiões com as dimensões do processo. Além disso, algumas das restrições do processo podem ser apenas futuras restrições ativas, portanto,

não existindo relação direta com a restrição ativa atual, mas apenas com as medidas (ou estimativas) dos estados atuais do processo e do controlador (NARASIMHAN e SKOGESTAD, 2008).

Nos problemas em que a estabilidade das malhas é prejudicada pela dinâmica das perturbações, apenas a aplicação da RTO pode não ser eficiente. A principal razão para isso é que as perturbações podem mudar a posição do ótimo estacionário mais frequentemente que a RTO é realizada. Como o ponto ótimo é diferente, o uso do MPC com *set-points* desatualizados pode levar a perdas econômicas significantes ou tornar a operação inviável (TATJEWSKI *et al.*, 2006). Um esquema comum de reconfiguração, que surgiu a partir de aplicações industriais, é a introdução de uma camada de otimização chamada de recálculo de *set-points* (*target calculation* – TC), localizada entre a RTO e o MPC para implementação contínua do ótimo viável (DARBY e NIKOLAOU, 2012).

A principal ideia do TC é realizar uma atualização dos valores ótimos a cada instante de amostragem, antes de o algoritmo do MPC ser ativado. Neste sentido, o TC é a tradução dos objetivos operacionais supridos pelas camadas de otimização superiores em objetivos de controle que sejam viáveis em face das perturbações. Em outras palavras, representa o tratamento de *set-points* desatualizados ou enganosos que poderiam ser fornecidos ao MPC. Esses novos pontos operacionais devem ser viáveis e estarem localizados próximos o possível dos valores ótimos informados pela RTO (HOVD, 2007). Como algumas aplicações comerciais já usam com sucesso este conceito em seus produtos, o TC representa uma boa maneira de evitar condições que levam a operação do processo à inviabilidade.

As metodologias atuais de TC podem ser divididas em três grupos principais, cujas diferenças mais significativas estão relacionadas com a natureza do modelo do processo e a consideração da presença de incertezas: TC linear (YING e JOSEPH, 1999); TC robusto (KASSMANN *et al.*, 2000); e TC não linear (TATJEWSKI *et al.*, 2006). Entre estes grupos, a abordagem linear é a mais considerada, visto que pode ser implementada facilmente a partir do modelo linear aplicado no MPC. De qualquer modo, a formulação desses métodos é baseada na otimização de uma função objetivo que pode ser expressa em termos econômicos ou considerando desvio quadrático em torno do ótimo informado pela RTO. Além disso, a otimização está sempre sujeita às

restrições do processo e ao modelo estacionário, que pode ser obtido a partir da linearização de um modelo não linear a cada ciclo de controle.

No caso linear, o modelo estacionário pode ser visto apenas como uma matriz de ganhos estacionários, $\mathbf{G} = -\mathbf{C}(\mathbf{I} - \Phi)^{-1}\Gamma$, obtida a partir do modelo linear usado no MPC. Uma possível representação do problema de TC pode ser dada por meio da programação linear (LP, do inglês *linear programming*) descrita pelas Equações 3.4, onde \mathbf{c}_y e \mathbf{c}_u são vetores de penalidade e \mathbf{y}^* e \mathbf{u}^* são os *set-points* retificados pelo TC, a partir dos valores dados RTO.

$$\min_{\mathbf{y}^*, \mathbf{u}^*} J_k = \mathbf{c}_y^T (\mathbf{y}^* - \mathbf{y}^{set}) + \mathbf{c}_u^T (\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^{set}) \quad 3.4a$$

sujeito a

$$\begin{aligned} \mathbf{y}^* &= \mathbf{G} \cdot \mathbf{u}^* \\ \mathbf{y}_{min} &\leq \mathbf{y}^* \leq \mathbf{y}_{max} \\ \mathbf{u}_{min} &\leq \mathbf{u}^* \leq \mathbf{u}_{max} \end{aligned} \quad 3.4b$$

Uma formulação similar para uma programação quadrática (QP, do inglês *quadratic programming*), sujeita ao mesmo conjunto de restrições do problema LP, pode ser expressa pela Equação 3.5, onde \mathbf{C}_y e \mathbf{C}_u são matrizes de ponderação para penalizar o desvio em relação ao ótimo da RTO.

$$\min_{\mathbf{y}^*, \mathbf{u}^*} J_k = (\mathbf{y}^* - \mathbf{y}^{set})^T \mathbf{C}_y (\mathbf{y}^* - \mathbf{y}^{set}) + (\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^{set})^T \mathbf{C}_u (\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^{set}) \quad 3.5$$

Em se determinando os *set-points* retificados, se alguma variável deve ser ajustada estritamente em sua especificação, então a mesma é implementada como uma restrição ativa e, nos demais casos, a implementação dos valores de referência pode ser realizada de duas formas no MPC: (1) os valores são passados diretamente como *set-points* constantes sobre todo o horizonte de controle; ou (2) são considerados apenas como os valores finais, de modo a formar uma trajetória desejada a partir da implementação atual conforme filtros típicos como os descritos pelas Equações 3.6 e 3.7 (ROSSITER, 2004).

$$\mathbf{r}_{k+ik} = \mathbf{r}_k + (1 - \mu^{i-1}) \left(\mathbf{r}_k - \begin{bmatrix} \mathbf{y}_k^* & \mathbf{u}_k^* \end{bmatrix}^T \right) \quad 3.6$$

$$\mathbf{r}_{k+i|k} = \mathbf{r}_k + \beta \left(\mathbf{r}_k - \begin{bmatrix} \mathbf{y}_k^* & \mathbf{u}_k^* \end{bmatrix}^T \right) \quad 3.7$$

Nestas representações, \mathbf{r} é a trajetória a ser considerada no ciclo do MPC a partir dos valores retificados no instante de amostragem k e os parâmetros de sintonia (μ e β) dos filtros são selecionados entre 0 e 1, sendo que se tomam valores de μ mais próximos a unidade e valores pequenos de β para implementação mais suave.

Em alguns casos, a busca por uma solução ótima pode se tornar inviável, quando o número de graus de liberdade for insuficiente para garantir todas as especificações (QIN e BADGWELL, 2003). Uma possível razão para isso é que o conjunto de restrições normalmente é tomado como rígido (ou seja, não pode ser violado). Isto é feito para se considerar limites físicos, termodinâmicos ou de especificações de controle. Esta consideração leva o sistema de controle a um problema de inviabilidade, visto que as restrições não podem ser atendidas (STRAND e SAGLI, 2003). Apesar de o MPC poder operar em um ambiente com restrições excessivamente rigorosas, torna-se necessário relaxar algumas especificações de controle, com o intuito de manter a viabilidade na busca do ótimo.

Como o modelo do processo e as restrições das variáveis de entrada representam limitações fenomenológicas e físicas do problema, não podem ser relaxadas. Por outro lado, normalmente as restrições das variáveis de saída são escritas para satisfazer requerimentos operacionais em vez de limitações físicas, de modo que a violação de algumas pode ser possível. Uma abordagem comum para relaxar algumas destas restrições é incluir um vetor de variáveis de folga ao conjunto das variáveis de decisão do problema de otimização (RAWLINGS, 2000). Nesse caso, cada variável de folga se refere à magnitude da violação da restrição da respectiva variável de saída.

Por exemplo, o problema QP com variáveis de folga pode ser expresso pelas Equações 3.8. O vetor \mathbf{c}_δ de penalidades positivas sobre a violação e os elementos da matriz positiva definida \mathbf{C}_δ devem ser grandes o suficiente para garantir convergência do método (GONZÁLEZ e ODLOAK, 2009). Uma vantagem dessa formulação é que, em vez de apenas penalizar a violação da restrição, a soma total das violações também é considerada devido à combinação dos termos lineares e quadráticos para as restrições que podem ser relaxadas. Outro ponto importante é que as violações são distribuídas entre todas essas restrições.

$$\min_{\mathbf{y}^*, \mathbf{u}^*, \delta} J_k = \mathbf{c}_y^T (\mathbf{y}^* - \mathbf{y}^{set}) + \mathbf{c}_u^T (\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^{set}) + \mathbf{c}_\delta^T \delta + \delta^T \mathbf{C}_\delta \delta \quad 3.8a$$

sujeito a

$$\mathbf{y}^* = \mathbf{G} \cdot \mathbf{u}^*$$

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

$$\begin{pmatrix} \mathbf{y}_{min} - \mathbf{y}^* \\ \mathbf{y}^* - \mathbf{y}_{max} \end{pmatrix} \leq \delta \quad 3.8b$$

$$\delta \geq 0$$

No entanto, o uso desse tipo de restrição para todas as variáveis controladas pode levar a um problema de sintonia complicado ou impossível de realizar. Para contornar esse problema, STRAND e SAGLI (2003) usaram um mecanismo explícito de priorização, de modo que a violação das restrições ocorre apenas onde é estritamente necessária. Por exemplo, consideraram que as restrições sobre a taxa de variação e magnitude das variáveis manipuladas podem ser sempre respeitadas; contudo, se existirem conflitos, as mesmas devem ser relaxadas, segundo uma ordem de priorização.

Na verdade, a tecnologia IDCOM-M foi a primeira implementação a considerar que as restrições podem ser ordenadas (ou classificadas), de modo a seguir uma lista de prioridade (QIN e BADGWELL, 2003). É possível impor uma prioridade entre as restrições que podem ser relaxadas, tal que uma dada restrição é violada somente se a solução do problema de otimização não for viável, mesmo quando há violações arbitrariamente grandes nas restrições menos importantes. Como as variáveis estão ordenadas, o controle de uma determinada variável não se sacrifica para melhorar o desempenho de controle de outra variável de menor prioridade. Desta maneira, a priorização das restrições é um modo intuitivo e estrutural de impor o conhecimento do processo e os objetivos de controle (VADA, 2000). Aplicações práticas da lista de prioridade podem ser encontradas na literatura e em produtos comerciais (GONZÁLEZ e ODLOAK, 2009).

Com a atualização do modelo empregado no MPC, com a RTO e/ou o TC para atualizar os *set-points* das variáveis controladas e as referências para as variáveis manipuladas, com a violação de algumas restrições operacionais, seguindo uma lista de prioridade, pode-se aumentar a capacidade de reconfiguração de controle para o MPC.

Dessa forma, de acordo com a mudança ocorrida (mudança de especificação, entrada de perturbações e eventos de falhas), este algoritmo de controle possui esquemas de reconfiguração que permitem alteração intrínseca do arranjo de controle.

3.3.3. Controle tolerante a falhas

Diante de um mercado altamente competitivo, os processos industriais são frequentemente forçados a operar em condições bastante desafiadoras para atender aos requerimentos de taxa de produção e qualidade de produto. Como apresentam uma complexidade de equipamentos, instrumentos e malhas de controle, o desempenho de controle do processo pode ser severamente prejudicado se houver o funcionamento defeituoso de uma dessas partes (WANG *et al.*, 2008). Nestas condições, pode haver a perda funcional de alguns instrumentos, como atuadores e sensores, ou então modificações intrínsecas que afetam as propriedades internas do processo, como desativação catalítica e aumento de incrustação em trocadores de calor (FEITAL, 2011). Desse modo, há uma área de pesquisa interessante para o desenvolvimento de métodos de supervisão e monitoramento contínuo da condição do processo para garantia da segurança e da confiabilidade em toda sua vida útil (BOUSSAID *et al.*, 2011).

Neste sentido, diversas pesquisas têm sido motivadas pela busca por alternativas de controle tolerante a falhas, cujos objetivos principais são a manutenção da estabilidade do processo e acomodação das falhas automaticamente (ZHANG e JIANG, 2008). Originalmente, foi a partir dos problemas normalmente encontrados em sistemas de aeronaves que a reconfiguração de controle passou a receber maior atenção. Neste caso, o objetivo é fornecer capacidade de autorreparação para permitir que o piloto possa pousar com segurança em caso de uma falha grave (EICK, 2003; GONÇALVES, 2009).

Em todo caso, existe uma quantidade considerável de trabalhos com aplicações em plantas químicas (FEITAL, 2011). Durante esta tese, encontrou-se que o trabalho de JENSEN (1997) foi um dos pioneiros a discutir a necessidade de reconfiguração de controle em função dos modos de operação de forma mais sistemática, no contexto de gerenciamento de alarmes. Embora, KOBİ *et al.* (1994), no estudo de diagnóstico de falhas, já tivessem estudado o problema de reconfiguração de um sistema, empregando

uma estrutura de controle fixa, cujos parâmetros podiam ser modificados. No entanto, este trabalho pode ser visto apenas como a adaptação dos parâmetros dos controladores.

TRAN *et al.* (2007) propuseram um método para o projeto de estratégias de configuração, que emprega uma técnica de controle supervisorio para encontrar, eficientemente, controladores para todas as possíveis falhas em atuadores e mudanças definidas, *a priori*, na especificação de produto. Após a detecção de tais eventos, um novo controlador é ativado por meio do chaveamento entre controladores projetados em uma etapa anterior. Neste método, um autômato híbrido com dinâmica contínua, linear e com incertezas é usado para modelar a planta sob o efeito de controlador discreto. Para esta classe de sistemas, o cálculo dos conjuntos de estados alcançáveis, que é uma etapa chave no cômputo de ações de controle viáveis, se mostrou eficiente e de aplicação possível para processos industriais relevantes. No entanto, a formulação do método é bastante complexa.

De modo geral, este tipo de controle se baseia em uma etapa de detecção e diagnóstico de falhas (isto é, determinação das falhas presentes, indicando a natureza e a intensidade), seguida do projeto do controlador. Quanto à realização destas tarefas, podem ser encontradas duas abordagens (BLANKE *et al.*, 2006):

- a. a primeira é chamada de passiva e considera apenas o emprego de um controlador robusto de configuração fixa para um conjunto de falhas esperadas;
- b. e a segunda, classificada como ativa, utiliza as informações da condição do processo para reconfigurar em linha a estrutura de controle.

Essas abordagens são aplicadas quando falhas severas, como perda de atuadores ou sensores, podem comprometer as malhas de controle. Além disso, os parâmetros dos controladores podem ser ajustados para acomodar a dinâmica modificada do processo. No entanto, o controlador é tomado como robusto para um conjunto fixo de falhas na abordagem passiva. Por exemplo, pode haver o emprego de técnicas de estimação (ou reconciliação) do estados verdadeiros do processo, de modo que um controlador nominal seja suficiente. Neste caso, diz-se que o processo foi reconfigurado, no lugar do sistema de controle (STEFFEN, 2005). Na abordagem ativa, a reconfiguração de controle é inserida como um bloco no sistema global com o objetivo de aumentar a fidelidade do processo com controle *feedback*, por meio da reestruturação das malhas para evitar a pane de todo sistema (PATTON, 1997).

A abordagem passiva é mais limitada, já que considera apenas as falhas conhecidas e não modifica o controlador empregado. As falhas esperadas podem ser modeladas como incertezas em torno do modelo nominal do processo. Desse modo, as falhas, que atendem ao raio de estabilidade dado pelo controlador robusto, não apresentam efeito significativo sobre a estabilidade do processo. Por outro lado, a abordagem ativa busca compensar os efeitos das falhas por meio da seleção de leis de controle pré-computadas ou da síntese de um novo controlador realizada por um bloco de reconfiguração de controle em linha (EICK, 2003). Neste caso, o principal requerimento é que o novo controlador mantenha a estabilidade e o desempenho em um nível satisfatório.

Para o leitor interessado em exemplos práticos dessas abordagens, a revisão apresentada por ZHANG e JIANG (2008) traz diversas referências que podem ser consultadas. Além disso, em relação à determinação da condição de um processo, diversos métodos têm sido desenvolvidos para sistemas dinâmicos. Um material de revisão bibliográfica bastante indicado para leitura sobre detecção e diagnóstico das falhas é a série de trabalhos publicados por VENKATASUBRAMANIAN *et al.* (2003a, b, c). Esses métodos são responsáveis pelo monitoramento de todo o processo, indicando o início, a localização e a gravidade das falhas que ocorrem, informando a condição atual para uma camada de supervisão de todo o sistema.

Esta camada é a fase ativa do controle tolerante a falhas e é essencialmente responsável pelo tratamento das informações obtidas, a partir do diagnóstico de falhas. Para tanto, verifica se o efeito da falha sobre o controle é prejudicial o suficiente para justificar as mudanças do controlador, com o intuito de reestabelecer a estabilidade e o desempenho. Caso seja preciso, a supervisão realiza as tarefas de reconfiguração (sintonia ou adaptação dos controladores em linha), de modo a acomodar os efeitos das falhas diagnosticadas (EICK, 2003). Neste sentido, a reconfiguração de controle representa um conjunto de ações a serem tomadas para a manutenção do processo, não apenas quando todos os componentes estão disponíveis, mas também quando sensores ou atuadores apresentam funcionamento defeituoso.

Para demonstração simples deste problema, considere um processo descrito por meio de um modelo linear, dado em espaço de estados (Equação 3.9) para a operação em condição nominal, e que se dispõe de um controlador proporcional ao erro de rastreamento do *set-point* (Equação 3.10).

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x}(t) + \mathbf{B} \cdot \mathbf{u}(t) + \mathbf{B}_d \cdot \mathbf{d}(t)$$

$$\mathbf{z} = \mathbf{C}_z \cdot \mathbf{x}(t) \quad 3.9$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{C} \cdot \mathbf{x}(t)$$

$$\mathbf{u}(t) = \mathbf{K} \cdot [\mathbf{y}^{set} - \mathbf{y}(t)] \quad 3.10$$

Em aplicações em tempo real, a implementação do projeto de controle tolerante a falhas exige que o modelo do sistema, após a ocorrência da falha, seja determinado em linha, de modo que as variáveis de estado estejam disponíveis para controle (ZHANG *et al.*, 2005). Dessa forma, na ocorrência de falhas, supõe-se que existam mecanismos disponíveis para realizar a identificação da mesma e que se disponha de um modelo do processo nesta condição, como pode ser visto na Equação 3.11. As matrizes \mathbf{A}_f , \mathbf{B}_f e \mathbf{C}_f podem ser diferentes das correspondentes do modelo nominal devido à ocorrência da falha. Por exemplo, determinados parâmetros internos do processo podem ser alterados ou pode haver a perda de instrumentos. Neste último caso, ocorrendo a perda de atuadores, as respectivas colunas da matriz \mathbf{B}_f devem ser nulas, ou, se for a perda de sensores, então as respectivas linhas da matriz \mathbf{C}_f devem ser nulas.

$$\frac{d\mathbf{x}_f}{dt} = \mathbf{A}_f \cdot \mathbf{x}_f(t) + \mathbf{B}_f \cdot \mathbf{u}_f(t) + \mathbf{B}_d \cdot \mathbf{d}(t)$$

$$\mathbf{z}_f = \mathbf{C}_z \cdot \mathbf{x}_f(t) \quad 3.11$$

$$\mathbf{y}_f = \mathbf{C} \cdot \mathbf{x}_f(t)$$

Nas Equações 3.9 e 3.11, $\mathbf{x} \in \mathfrak{R}^n$ é o vetor de estados da planta; $\mathbf{u} \in \mathfrak{R}^m$, o vetor de variáveis de entrada; $\mathbf{d} \in \mathfrak{R}^p$, o vetor de perturbações; $\mathbf{z} \in \mathfrak{R}^r$, o vetor de variáveis não empregadas para fins de controle; $\mathbf{y} \in \mathfrak{R}^r$, é o vetor de variáveis medidas; \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{C}_z e \mathbf{C} são matrizes de dimensão apropriada; e o subscritos d e f se referem respectivamente às perturbações e ao modelo em condição de falha. Na Equação 3.10, \mathbf{K} representa o ganho do controlador e $\mathbf{y}^{set} \in \mathfrak{R}^r$ é o vetor de valores desejados para as variáveis de saída.

Assumindo que a processo em condição de falha pode ser estabilizado com as variáveis de entrada \mathbf{u}_f e seja observável por meio das variáveis de saída \mathbf{y}_f , alguns autores utilizam a ideia do bloco de reconfiguração conforme a Figura 3.4 (STEFFEN, 2005; LUNZE, 2007; RICHTER *et al.*, 2007). Este bloco é capaz de tornar disponíveis as informações necessárias para controle a partir do processo e, assim, restaurar a malha de controle e ajustar os parâmetros do controlador. Para tanto, contém todas as funções e conexões que podem ser adicionadas ao sistema de controle, bem como o algoritmo para implementação das mudanças durante a reconfiguração. Neste caso, somente é possível modificar alguns aspectos do controlador, já que pode ser inviável fazer adaptações no projeto do processo.

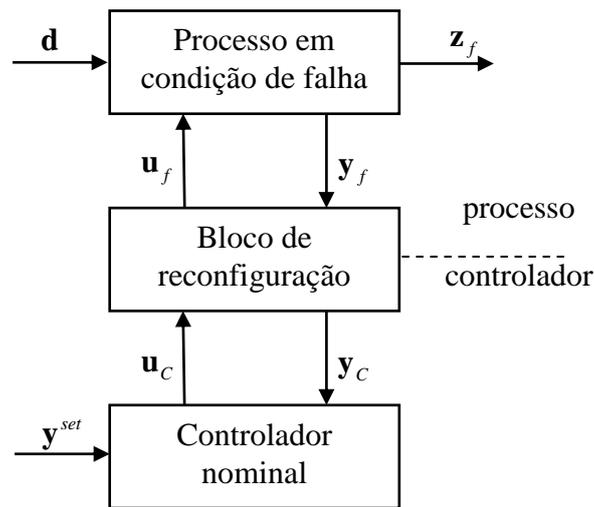


Figura 3.4 – Hierarquia envolvida no esquema de controle tolerante a falhas, adaptado de STEFFEN (2005).

O bloco de reconfiguração é inserido entre o processo e o controlador nominal, de modo que o sistema pode ser visto de duas formas: o processo reconfigurado ou o controlador reconfigurado. O primeiro ponto de vista vem da consideração conjunta do processo em falha com o bloco de reconfiguração, cujo comportamento deve ser mantido apenas pelo controlador nominal com as informações modificadas \mathbf{u}_c e \mathbf{y}_c . No segundo ponto, o bloco é visto como uma extensão do controlador nominal, que deve prover diretamente o controle do processo em falha. Embora seja preferível a abordagem de processo reconfigurado, o bloco de reconfiguração deve permitir o uso de qualquer tipo de controlador em ambas as interpretações. No entanto, de modo a se ter mudanças mínimas, o controlador nominal deve ser empregado sempre que possível.

Como foi exposto, o problema de reconfiguração é dividido em duas partes conectadas pelo bloco de reconfiguração. A partir desta divisão, o problema pode então ser definido em termos de objetivos específicos (STEFFEN, 2005), que indicam as diretrizes para a recuperação da funcionalidade do processo em falha e para a modificação do controle, de modo que o comportamento global se aproxime ao do processo nominal.

Do ponto de vista do processo, os objetivos se referem às tarefas de:

- a. estabilização da malha reconfigurada, $\lim_{t \rightarrow \infty} |\mathbf{x}_f(t)| = \max_{i,t \geq 0} \mathbf{x}_{fi}(t)$;
- b. restauração do comportamento estacionário, $\lim_{t \rightarrow \infty} \mathbf{z}(t) - \mathbf{z}_f(t) = 0$;
- c. restauração do comportamento dinâmico, $\mathbf{z}(t) = \mathbf{z}_f(t) \quad \forall t \in \mathfrak{R}_+$;
- d. e restauração da trajetória dos estados do processo, $\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}_f(t) \quad \forall t \in \mathfrak{R}_+$.

Por outro lado, a partir do controlador, o objetivo é o mascaramento da falha, de modo que a entrada do controlador, informada pelo bloco de reconfiguração, seja equivalente à saída nominal do processo, $\mathbf{y}(t) = \mathbf{y}_c(t) \quad \forall t \in \mathfrak{R}_+$. Se este objetivo é alcançado, então a solução de reconfiguração é independente do controlador, uma vez que o processo reconfigurado terá o mesmo comportamento entrada/saída que o processo nominal. Este objetivo é justificado para fins práticos de controle, já que restaurar o valor da saída do processo nominal (isto é, a variável controlada) é um aspecto importante.

Para realizar as tarefas de reconfiguração, dependendo da localização das falhas existem alguns algoritmos na literatura, que, de modo geral, obedecem à premissa básica de que devem permitir aplicação em linha para operações em tempo real, sem intervenção manual, após a falha ter sido identificada. As soluções típicas incluem abordagens estáticas, como o ajuste de ganhos, e blocos de reconfiguração dinâmica, como controle com múltiplos modelos, controle adaptativo, controle preditivo, controle com estrutura variável e por modos deslizantes, entre outros (ZHANG e JIANG, 2008).

Neste grupo de reconfiguração dinâmica também são encontrados os sensores ou atuadores virtuais, que podem ser usados para traduzir as informações do processo em condição de falha para valores adequados para o controlador (STEFFEN, 2005). De modo geral, o controlador reconfigurado é uma alteração do controlador nominal do

processo por meio de mudanças estruturais e/ou paramétricas. Por exemplo, pode-se usar um atuador diferente, que foi desconsiderado pela estrutura nominal, ou passar a depender da leitura de outros sensores ainda não empregados. Por isso, é importante não limitar o problema apenas às partes em falha para aumentar a redundância do sistema e prover caminhos alternativos de controle.

Para concluir, uma solução simples para o exemplo apresentado no início desta seção é encontrada em STEFFEN (2005). Considerando o caso de falha ou perda de um atuador, pode-se empregar um bloco de reconfiguração baseado em acoplamento estático. Este bloco é dado pela matriz \mathbf{S} , que é solução do problema $\mathbf{B}_f \cdot \mathbf{S} = \mathbf{B}$, sob a condição de haver redundância, $\text{rank } \mathbf{B}_f = \text{rank } \begin{bmatrix} \mathbf{B}_f & \mathbf{B} \end{bmatrix}$. Caso $\mathbf{B}_f = \mathbf{B}$, a matriz de acoplamento é igual a uma matriz identidade. Dada uma realização do processo, a camada de supervisão atualiza o modelo do processo e conseqüentemente a matriz \mathbf{S} . Por fim, as novas variáveis de entrada do processo em falha são geradas a partir desta matriz, de modo que $\mathbf{u}_f = \mathbf{S} \cdot \mathbf{u}_c$.

A Figura 3.5 representa esta alternativa de reconfiguração, onde a solução dada pela matriz de acoplamento implica que os esforços de controle são compartilhados entre as variáveis redundantes j remanescentes, com exceção do atuador i que está em condição de falha. A região compreendida pela área destacada corresponde ao processo reconfigurado (isto é, processo em falha mais o bloco de reconfiguração), que é mantido apenas pelo controlador nominal.

Por outro lado, se se tratar de falha em um sensor, \mathbf{S} é obtida a partir de $\mathbf{S} \cdot \mathbf{C}_f = \mathbf{C}$, com a condição de que $\text{rank } \mathbf{C}_f = \text{rank } \begin{bmatrix} \mathbf{C}_f^T & \mathbf{C}^T \end{bmatrix}^T$, e é empregada para calcular as variáveis de entrada do controlador $\mathbf{y}_c = \mathbf{S} \cdot \mathbf{y}_f$. As duas abordagens podem ser úteis em alguns casos especiais, porém exigem que o processo tenha mais atuadores ou sensores que o necessário para restaurar o comportamento nominal. Isto é muito custoso e quase improvável de se encontrar na prática, a não ser que a redundância tenha sido um dos objetivos do projeto do processo.

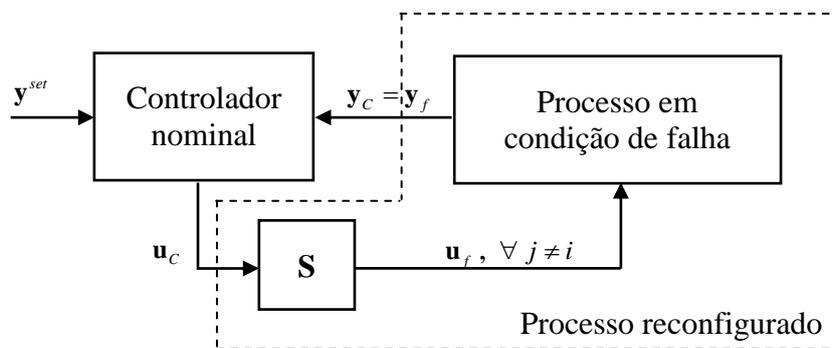


Figura 3.5 – Representação da solução de reconfiguração para falha em um atuador.

No caso de perda de um atuador, como podem existir diversas soluções para \mathbf{S} , uma ideia é selecionar aquela que conduz ao valor mínimo de um índice como $I(\mathbf{u}_f) = \mathbf{u}_f^T \cdot \mathbf{Q} \cdot \mathbf{u}_f$, onde \mathbf{Q} é uma matriz de ponderação. Este índice é muito útil, já que cada uma das entradas redundantes tem limites diferentes. Além disso, a matriz \mathbf{Q} pode ser escolhida *a priori*, uma vez que os limites são independentes das falhas.

3.3.4. Produção celular

Embora a reconfiguração do projeto do processo não seja objetivo deste trabalho de tese, pode-se encontrar na Engenharia de Produção o termo *produção celular*. Esta metodologia utiliza a filosofia de tecnologia de grupos, para representar a produção como uma divisão física dos equipamentos e operações de um processo em células. Cada uma dessas células é projetada para produzir uma família de produtos, que são obtidos a partir de uma matéria-prima e que requerem equipamentos similares, operados manual ou automaticamente (KAMRANI *et al.*, 1993).

Considerando esse conceito, SAAD (2003) apresentou uma metodologia de reconfiguração das células (Tabela 3.2) para o rearranjo dos equipamentos, representando uma alteração no projeto do processo. O objetivo dessa reconfiguração é melhorar o desempenho do processo, para satisfazer a demanda e a programação da produção, por meio de um melhor emprego dos recursos. Segundo esse autor, a natureza das decisões de reconfiguração é muito complexa e, de uma maneira geral, encerra duas questões básicas: “*Quando se deve reconfigurar?*” e “*Como se deve reconfigurar?*”. No entanto, este tipo de consideração é mais adequado para organizações que têm um grau de padronização dos produtos, uma taxa de produção baixa e que apresentam uma perda

de desempenho, quando da mudança das condições operacionais em relação às nominais.

As técnicas para o projeto de produções celulares podem ser baseadas em programação matemática ou métodos heurísticos (SUNDARAM, 1990). Estas técnicas têm como principais funções:

- a. Buscar vantagens econômicas e operacionais, explorando a semelhança de um grupo similar de produtos.
- b. Procurar reduzir a complexidade do fluxo produtivo para diminuir as perdas de produção, aumentar a velocidade de processamento e a acurácia dos resultados planejados e facilitar o controle da produção.
- c. Redução do tempo de preparação dos equipamentos para iniciar as campanhas.
- d. Otimizar o fluxo e o consumo dos materiais dentro do processo de produção.

Tabela 3.2 - Metodologia de reconfiguração de células de produção de SAAD (2003).

| Etapas da metodologia | Observações |
|------------------------------|---|
| Monitoramento | Se os indicadores de desempenho da atual configuração do sistema são satisfatórios para o próximo cenário operacional, então a mesma deve ser mantida. Por outro lado, se esses indicadores são insatisfatórios, então a reconfiguração (criação de novas células) deve ser considerada. |
| Reconfiguração | A ação de reconfiguração é realizada por uma otimização multiobjetivo sempre que houver a necessidade de buscar alternativas de arranjo adequadas para o sistema, de modo a atender as especificações de produção. A configuração que atender ao nível de desempenho desejado deve ser selecionada e implementada no sistema. |

3.4. Comentários finais

Como exposto neste capítulo, é possível encontrar na literatura exemplos com a aplicação de algum conceito intrínseco de reconfiguração de controle. Contudo, ainda há um caminho a percorrer entre os resultados obtidos em laboratórios e a necessidade das plantas reais. Há uma grande resistência do meio industrial na aplicação dessas

novas tecnologias. Conforme posto por BRENNAN *et al.* (2008), estes usuários finais querem empregar tecnologias já experimentadas; entretanto, não querem ser os primeiros a fazê-lo.

Especificamente, uma questão ainda permanece em aberto no que se refere a que variáveis devem ser controladas, em cada região operacional, quando da reconfiguração. No contexto de controle auto-otimizante, além do conjunto de restrições ativas ser diferente em cada região, as variáveis que devem ser controladas em *set-points* constantes, que indiretamente permitem operação próxima do ótimo, também podem não ser as mesmas. Ao se manter fixa a configuração de uma estrutura de controle auto-otimizante, o comportamento dinâmico do processo pode torna-se instável. Isto acontece porque, em geral, as variáveis controladas auto-otimizantes são válidas enquanto uma nova restrição ativa não tenha surgido. Neste caso, a ideia central da reconfiguração seria a modificação das malhas de controle auto-otimizante quando o processo é levado a uma nova região de restrição ativa. No entanto, os trabalhos da literatura consultada tentam sempre obter a estrutura de controle mais simples com a qual uma perda econômica razoável é aceita.

Com a saturação de uma variável manipulada, a solução ideal é repetir o procedimento de controle auto-otimizante e encontrar a nova melhor variável controlada (se houver graus de liberdade excedente). No entanto, os trabalhos dessa área consideram o controle contínuo da mesma variável auto-otimizante em todos os cenários, tendo em vista evitar a abordagem de reconfiguração. Na verdade, pode-se limitar o problema apenas às variáveis que têm mais efeito sobre a economia do processo, de modo a reduzir sua dimensão. Em todo caso, a camada de supervisão do processo precisa levar em conta o controle rígido apenas das variáveis que levem à condição de ótimo. Conseqüentemente, pode-se evitar a estimação em linha de algumas perturbações ou reduzir a dependência de RTO ou TC para as variáveis auto-otimizantes, já que se controlam apenas as variáveis, cujos valores ótimos são pouco sensíveis a estas perturbações.

4. Diretrizes Propostas

Este capítulo apresenta a contribuição central deste trabalho, cuja proposta baseia-se na extensão das tarefas do projeto de estrutura de controle com a inclusão de esquemas de reconfiguração, com vistas à manutenção da operabilidade, em face de uma diversidade de condições operacionais.

4.1. Introdução

Em face dos desafios encontrados nos processos químicos, diversas metodologias de projeto de controle foram desenvolvidas. As estruturas de controle são obtidas para determinadas condições de projeto do processo e requerimentos operacionais, sendo que se realiza a busca por uma configuração de controle por meio de regras heurísticas e/ou ferramentas teóricas. A alternativa selecionada busca satisfazer os critérios de controlabilidade e permitir que o processo apresente desempenho dinâmico satisfatório (DOWNS e SKOGESTAD, 2011).

No entanto, na ocorrência de mudanças nas condições nominais, uma configuração fixa de controle pode limitar a operação e/ou levar a um comportamento dinâmico inadequado. Deste modo, pode ser interessante buscar os possíveis cenários de operação (abordagem de decomposição), aos quais a planta poderia ser levada. Esta tarefa, por sua vez, pode permitir o projeto de estruturas de controle mais adequadas. Assim, forma-se uma coleção de configurações de controle para aplicação individual em momentos adequados na campanha do processo (KORDON *et al.*, 1999).

As ideias embrionárias desta tese foram inspiradas em ARAÚJO (2007), que estudou o projeto de controle de processos de grande escala e suas implicações dinâmicas do ponto de vista de engenharia. Nesse trabalho, tornou-se clara a importância do tratamento eficaz de regiões operacionais definidas por restrições ativas,

que requer mudança do conjunto de variáveis controladas para manter operação ótima. Por exemplo, se as restrições ativas não são controladas, perdas econômicas podem ser contabilizadas (ASKE *et al.*, 2009). Do mesmo modo, da experiência de trabalho do LMSCP, sabe-se que outros eventos mais gerais dos processos químicos podem também destacar a necessidade de reconfiguração de controle, como o atendimento de diferentes especificações na produção de polímeros ou o gerenciamento de falhas, no intuito de se manter a operabilidade.

Sendo assim, a contribuição central deste trabalho de tese envolve a realização da reconfiguração do sistema de controle, considerando as estruturas de controle projetadas para possibilitar a obtenção de uma operação satisfatória ao longo dos cenários. Sob esta ótica, espera-se garantir a manutenção da operabilidade da operação, em uma variedade de cenários, dentro das restrições de qualidade de produto, das restrições ambientais e de segurança da produção. Especificamente, a contribuição refere-se à busca sistemática de diferentes configurações de controle e à apresentação de técnicas ou heurísticas para aplicações práticas.

4.2. Diretrizes propostas

Existem diversas metodologias para o projeto de controle de um processo. Contudo, esta tese não objetivou apenas a análise e projeto de uma estrutura específica, mas a compreensão da viabilidade da reconfiguração das malhas de controle. Isto é feito no intuito de se buscar estratégias para a manutenção do desempenho de controle ao longo de cenários operacionais esperados. Para tanto, é proposto o uso de projeto de estruturas de controle em cada cenário operacional e o desenvolvimento de esquemas de reconfiguração para modificação das estruturas de controle, de modo a se obter um sistema de controle baseado em reconfiguração (Figura 4.1).

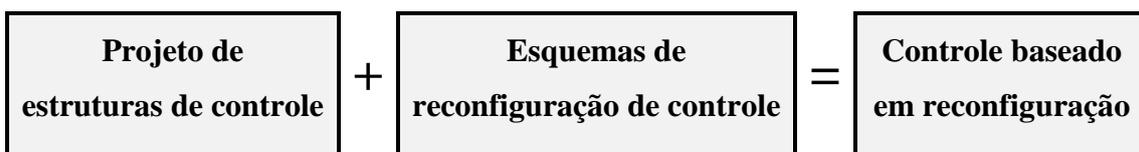


Figura 4.1 – Representação esquemática do conjunto de tarefas envolvidas nas diretrizes propostas para o projeto de controle com etapa de reconfiguração.

Especificamente, as diretrizes propostas consistem de quatro passos dedicados às etapas de:

1. *Definição dos objetivos de operação e de controle.* Nesta fase inicial, é importante determinar um modelo do processo, enumerar as restrições operacionais e identificar uma função de desempenho da operação. No caso de operar o processo em condição ótima econômica, esta função é escrita em função dos custos e do lucro devido à produção. Em outros casos, podem-se buscar definições de seletividade ou rendimento.
2. *Identificação das regiões operacionais.* A partir do conhecimento dos objetivos do processo e do elenco das possíveis mudanças futuras (como especificações de produtos, variações em parâmetros e/ou condição de falha), é possível particionar o processo em regiões operacionais, que podem demandar alguma atualização em linha da configuração de controle empregada (isto é, reconfiguração estrutural das malhas de controle nominais ou paramétrica dos controladores). A observação da limitação de controle pode ser vista sempre que for necessário levar o processo a condições de operação diferentes das nominais. A identificação das regiões pode ser feita em função das regiões de restrições ativas no caso ótimo, da parada/perda de instrumentos, de mudanças de comportamento dinâmico do processo, no sentido de que o mesmo não responde da mesma forma às variáveis manipuladas, entre outros.
3. *Projeto de estruturas de controle.* Neste ponto, é considerado o projeto da estrutura de controle para todas as regiões, iniciando-se pela condição de operação nominal. A partir deste caso, deve-se levar em conta o elenco das possíveis mudanças futuras e observar as possíveis limitações de controle da estrutura nominal. Deste modo, esta análise permite o projeto de controle para as outras condições de operação. Para o desenvolvimento das diferentes estratégias de controle é incentivado o uso de metodologias de controle global, cuja lei de controle pode ser baseada em controladores PI ou MPC.
4. *Monitoramento para reconfiguração.* Esta etapa representa uma extensão das metodologias tradicionais de projeto de estrutura de controle ao inserir a preocupação de manutenção contínua da operabilidade, por meio da modificação da proposta de controle. Para tanto, encontradas as configurações

na etapa de projeto de estruturas de controle, devem ser formulados esquemas de reconfiguração para o sistema de controle simples para conferir confiabilidade e aplicação em linha. Especificamente, pode-se observar/estimar o comportamento do processo para determinar sua condição e verificar se a configuração de controle atende aos requerimentos locais. Caso seja necessário, o sistema de controle deve fazer uso dos esquemas de reconfiguração para atualizar a estrutura de controle aplicada no processo. Dentro da proposta apresentada, esta é a única etapa que é realizada em linha, as demais são feitas durante o projeto do sistema de controle fora de linha.

4.3. Adaptações para casos específicos

A apresentação das ideias acima é feita de modo mais genérico propositalmente, já que as razões para justificar e as estratégias para realizar a reconfiguração podem ser diferentes. Entre estas razões, figuram as mudanças de qualidade de produto, o aumento da taxa de produção, mudanças intrínsecas da dinâmica, a ocorrência de falhas e manutenção do ótimo. Dessa forma, para a consideração das diretrizes em casos específicos, devem-se enumerar os objetivos de controle, os desafios encontrados em um determinado processo, bem como as tecnologias disponíveis para o tratamento do problema.

Por exemplo, quando se tratar do caso de gerenciamento de falhas, o projeto do sistema de controle passa obrigatoriamente também pelo monitoramento da condição do processo - técnicas de diagnósticos de falhas (FEITAL, 2011) - e pelas estratégias de controle tolerantes a falhas (ZHANG e JIANG, 2008). No caso de controle ótimo, o projeto de controle é iniciado pela busca do ponto de operação nominal ótimo, por meio da minimização de uma função custo do processo. Ao se considerar as mudanças esperadas para as perturbações ou para os parâmetros, por exemplo, podem-se definir regiões operacionais em termos dos conjuntos de restrições ativas (JACOBSEN e SKOGESTAD, 2011) ou dos diferentes conjuntos de variáveis auto-otimizantes. Posteriormente, uma política de gerenciamento do controle dos diferentes conjuntos de variáveis controladas deve ser estabelecida para implementação com vista à reconfiguração.

Assim, o atendimento das diversas motivações para a reconfiguração de controle pode ser feito caso a caso, supondo que a necessidade de técnicas para o tratamento de um problema específico não impõe questões adicionais. Na verdade, independente do problema estudado, a tarefa central de controle, baseado em esquemas de reconfiguração, é a implementação em linha de uma nova configuração de controle.

4.4. Topologia do sistema de controle

De modo geral, considera-se que o sistema de controle é dotado de duas camadas de controle com objetivos bem distintos: (1) a estabilização do processo, evitando o desvio de algumas variáveis como níveis de tanques (variáveis integradoras), cujos *set-points* podem ser definidos independentemente da economia; (2) e a manutenção do ótimo econômico, que é baseada no controle de variáveis que afetam diretamente os resultados econômicos (como o controle de variáveis auto-otimizantes). Assim, em termos de controle, a camada econômica (representada comumente pela camada supervisória implementada como MPC) manipula os *set-points* das variáveis da camada regulatória.

Esta proposta de arranjo em duas camadas facilita a compreensão do problema do atendimento dos objetivos de controle. Contudo, poder-se-ia pensar em outros arranjos para o sistema de controle como:

- a. o uso de apenas uma camada de controle integrando os dois objetivos, que simplifica a questão de implementação e de coordenação e que, no entanto, tem o desempenho comprometido quando o valor ótimo das variáveis que afetam a economia muda frequentemente com as perturbações;
- b. ou o tratamento misto dos objetivos de controle, que permite incluir algumas variáveis de saída em restrição ativa, para todas as perturbações, na camada regulatória. Entretanto, se uma variável manipulada é uma restrição ativa continuamente, então não deve ser usada nesta camada para fins de estabilização.

Independentemente da topologia de controle empregada, as ações de reconfiguração devem ser tomadas sobre a camada supervisória. As tarefas de monitoramento para reconfiguração são realizadas na mesma escala de tempo, indicando se a configuração corrente de controle corresponde à mais adequada para o

momento da campanha do processo. De qualquer forma, no caso de manutenção de resultado ótimo, é altamente recomendável que as modificações da estrutura de controle sejam efetuadas apenas na camada supervisória (isto é, reconfiguração de controle parcial), senão se teriam efeitos indesejáveis sobre a estabilidade do processo. Esta limitação pode ser inevitável no caso de falhas em instrumentos. Porém, nesta classe de problemas, normalmente se dispõe de redundância dos instrumentos que têm o papel de assegurar a estabilidade do processo.

4.5. Requerimentos

A reconfiguração em processos químicos pode impor desafios importantes por causa de restrições severas no uso dos recursos do processo, do tempo de cômputo dos algoritmos e dos sinais de comunicação. Neste sentido, alguns requerimentos para as soluções de reconfiguração precisam ser estabelecidos.

Inicialmente, vale ressaltar que as tecnologias que permitem que as aplicações de *software* de controle sejam modificadas em tempo real e em linha são fundamentais para o desenvolvimento e implantação da reconfiguração de controle. Na verdade, isto está em contraste com o estado atual da arte dos sistemas de controle comumente empregados, já que não permitem que o *software* incorporado seja modificado (o que reflete a falta de flexibilidade destes sistemas). No entanto, é assumido aqui que é possível empregar o controle baseado em reconfiguração por meio da modificação dos algoritmos de controle programados nos computadores dedicados do sistema digital de controle distribuído (SDCD), usando linguagens interpretadas como Java ou interface de comando. Por outro lado, a comunicação dos sinais do processo pode ser realizada com as redes de dados convencionais.

Considerando a questão de reconfiguração parcial, é interessante modificar o controle apenas das variáveis que realmente afetam os índices de desempenho do processo, como a economia ou a estabilidade. Na identificação de uma estrutura de controle, um problema que pode surgir é o gerenciamento da transição, em que um grau de liberdade não restrito é perdido ao se tornar restrição ativa. De modo geral, algum esquema de reconfiguração das malhas pode ser suficiente para manter os índices em níveis aceitáveis. No entanto, usando conhecimento prévio sobre qual restrição se torna ativa, pode-se projetar uma estrutura de controle que não requeira reconfiguração para

as variáveis com pouco efeito sobre o desempenho. Neste caso, admite-se que é possível operar próximo ao ótimo em todo o espaço operacional viável com perda aceitável.

Conseqüentemente, este requerimento implica em uma ideia mais geral que é a de modificação mínima da estrutura de controle durante a reconfiguração. Isto é, as mudanças estruturais ou paramétricas são feitas apenas nos locais em que sejam necessárias, de tal modo que a complexidade da solução reconfiguração é mantida em um nível mais baixo o possível. Por exemplo, a definição das estratégias de reconfiguração pode ser limitada à camada de controle supervisória, que está ligada apenas à manutenção da qualidade. Mudanças na camada regulatória, que assegura a estabilidade do processo, podem levar a resultados indesejáveis. Este requerimento também faz com que a reconfiguração seja de compreensão e implementação facilitada e a realização em linha esteja menos suscetível a erros. Associada a este fato, também está a determinação de esquemas com algoritmos rápidos e autônomos, no intuito de lidar com as restrições de tempo de tomada de ação e de reduzir a interação com os operadores respectivamente.

Deste modo, com vista à implementação prática em linha, é necessário ser possível que os algoritmos de controle possam ser reprogramados nos computadores dedicados e que as soluções de reconfiguração de controle sejam simples, de resposta rápida aos eventos monitorados pela supervisão e com características de inteligência para conferir confiabilidade e autonomia para a estratégia de controle.

4.6. Comentários finais

Foi apresentado um conjunto de diretrizes simples, mas sistemático para o projeto de controle baseado na busca dos limites de viabilidade de operação com apenas uma configuração de controle. Ao se atingir esta circunstância, podem ser propostas soluções alternativas de controle que devem ser conectadas à configuração de controle nominal por meio de esquemas de reconfiguração. Estes esquemas devem prever mudanças mínimas na estrutura de controle e se limitar apenas às variáveis necessárias.

Nos próximos capítulos, são apresentados dois exemplos simulados da Engenharia Química, o primeiro trata de uma coluna de destilação binária e o outro de um reator contínuo de polimerização do propeno. Espera-se que sejam elucidados mais detalhes das diretrizes propostas diante destas aplicações práticas.

5. Controle de uma Coluna de Destilação

Este capítulo apresenta um exemplo de aplicação do conjunto de diretrizes proposto com o intuito de ilustrar as ideias de cada um dos quatro passos. Este exemplo constitui-se de uma coluna de destilação binária, cujo desempenho é medido por meio de uma função dos custos de operação. Ao longo do capítulo é projetado o controle para este processo, considerando os objetivos e as restrições operacionais. Quando a operação torna-se inviável, devido ao aumento da taxa de produção, se faz necessário o uso de algum esquema de reconfiguração para restaurar a operabilidade. Neste exemplo, foi suficiente o uso de controle preditivo com a estratégia de recálculo dos *set-points* para garantir a manutenção da estabilidade do processo e a operação em torno do ótimo econômico.

5.1. Introdução

O controle de colunas de destilação é dos assuntos mais explorados na Engenharia Química. Frequentemente, os engenheiros são chamados a buscar alternativas de controle que permitam reduzir custos operacionais de uma planta e manter continuamente o ótimo econômico. Em sua maior parte, esses custos são representados pelo consumo de energia total, da qual, em geral, cerca de 30 a 50 % são devidos às unidades de destilação. Ao se projetar um sistema de controle adequado, esse consumo pode ser reduzido até 15 %, melhorando a economia do processo (RIGGS, 2000).

Diante desse fato, percebe-se que o estudo de alternativas de controle, que permitam manter continuamente o ótimo econômico é muito importante. Uma estratégia usual é empregar controladores do tipo PI. Entretanto, este tipo de controle pode

conduzir a resultados insatisfatórios, já que há a presença de forte interação entre as variáveis e normalmente se opera em regiões próximas às restrições (por exemplo, colunas de pureza elevada). Nesse sentido, as propostas que consideram técnicas de controle avançado, como o controle preditivo, recebem destaque na literatura. O MPC, em especial, é um dos mais estudados e com maior aplicação na indústria, visto que é possível considerar sistematicamente todas as restrições. (DARBY e NIKOLAOU, 2012).

Para implementação prática, deve-se realizar antes o projeto da estrutura de controle do processo, isto é, encontrar a combinação sistemática de variáveis medidas, controladas e manipuladas. Conforme visto nos capítulos anteriores, diversas estruturas de controle são exploradas e apenas uma é selecionada, segundo algum critério de desempenho. Isto é feito para se reduzir a complexidade do sistema de controle. No entanto, ao se considerar a operação do ponto de vista holístico, o desempenho de controle pode se deteriorar ao longo das condições operacionais. Desse modo, a manutenção da operabilidade do processo, em face dos diversos cenários de operação, passa a ter maior destaque nas pesquisas da área de controle.

Este presente exemplo insere-se neste contexto e visa ao estudo de uma alternativa para reconfiguração da estrutura de controle. O objetivo é manter a operação do processo próxima do ótimo econômico, a despeito da entrada de perturbações. Especificamente, as atividades desenvolvidas se relacionam com as etapas de identificação das regiões operacionais, por meio de otimização econômica, e com o projeto da estrutura de controle com a técnica otimizante. Posteriormente, as etapas de monitoramento, controle e reconfiguração, com o recálculo de *set-points* (TC), são realizadas em linha no processo.

Vale destacar que se desejou aplicar inicialmente as diretrizes de controle baseado em reconfiguração a um exemplo em que houvesse mudança explícita do conjunto de variáveis controladas, segundo o senso de controle auto-otimizante. Na literatura, podem ser vistos casos em que há este tipo de mudança estrutural, como em JACOBSEN (2011). Este autor encontrou diversas regiões operacionais em função das variáveis controladas para um processo de duas colunas de destilação em série. Contudo, até o momento em que esta tese foi apresentada, não foi possível contemplar este caso com mudanças estruturais de forma autônoma. De qualquer forma, para o exemplo com uma coluna deste capítulo, os resultados mostram que o sistema proposto

é capaz de lidar com o aumento da taxa de produção, atendendo ao requerimento sobre a composição de topo e retificando o referente à composição de fundo. Em suma, pode-se dizer que o problema foi limitado à definição das regiões operacionais e à proposta de um mecanismo de reconfiguração paramétrica do sistema de controle.

5.2. Metodologia de projeto de controle

A proposta no capítulo anterior consiste na extensão das tarefas do projeto de controle, de modo a incluir alternativas de reconfiguração. Desse modo, uma metodologia pode ser vislumbrada a partir do resumo das etapas na Tabela 5.1.

Tabela 5.1 - Metodologia de controle com etapa de reconfiguração.

| Etapas | Observações |
|--------------------------------|---|
| <i>1. Análise do processo</i> | Definição das condições de operação, dos objetivos de controle e do modelo não linear com vistas à otimização. |
| <i>2. Regiões operacionais</i> | Definição das regiões operacionais para possíveis mudanças futuras em função dos limites de controle ou viabilidade. |
| <i>3. Projeto de controle</i> | Desenvolvimento de estratégias de controle adequadas para as diferentes condições operacionais, utilizando metodologias de controle global baseadas em controladores PI ou em controladores preditivos. |
| <i>4. Reconfiguração</i> | Observação/estimação do comportamento do processo para determinar a região operacional e implementação dos esquemas de reconfiguração de controle para as diferentes variáveis controladas. |

A etapa de análise do processo é dedicada ao tratamento preliminar do problema de controle, elucidando os objetivos globais da operação. Ao se considerar a entrada de perturbações futuras, como especificações e distúrbios (ou até mesmo, possíveis falhas), têm-se informações importantes para determinar a ocorrência de diferentes regiões operacionais. Durante o projeto de controle, podem ser aplicadas quaisquer metodologias de projeto da literatura. Neste exemplo, considera-se a técnica otimizante (SKOGESTAD, 2004), que é iniciada pela determinação do ponto ótimo nominal em estado estacionário. Posteriormente, a etapa de reconfiguração refere-se ao

monitoramento da condição do processo e à modificação do sistema de controle em linha.

Note que, no entanto, a técnica otimizante não considera a implementação da diversidade de soluções de conjuntos de variáveis controladas que podem surgir, o que pode tornar a operação inviável em alguns momentos. Neste caso, é interessante considerar que alguns dos *set-points* podem ser diferentes para um determinado cenário, de modo a reconfigurar o sistema de controle e forçar apenas o controle das variáveis que sejam otimizantes em todo espaço operacional. Sendo assim, espera-se que a etapa de reconfiguração seja capaz de estender as tarefas de projeto de controle otimizante, garantindo a estabilidade e a manutenção contínua da operação em torno do ótimo econômico.

5.3. Coluna de destilação

Como exemplo, é considerada uma coluna de destilação binária convencional (Figura 5.1) encontrada em SKOGESTAD e MORARI (1987) e SKOGESTAD (1997). A modelagem matemática pode ser vista no Apêndice A e as condições nominais e parâmetros encontram-se na Tabela 5.2.

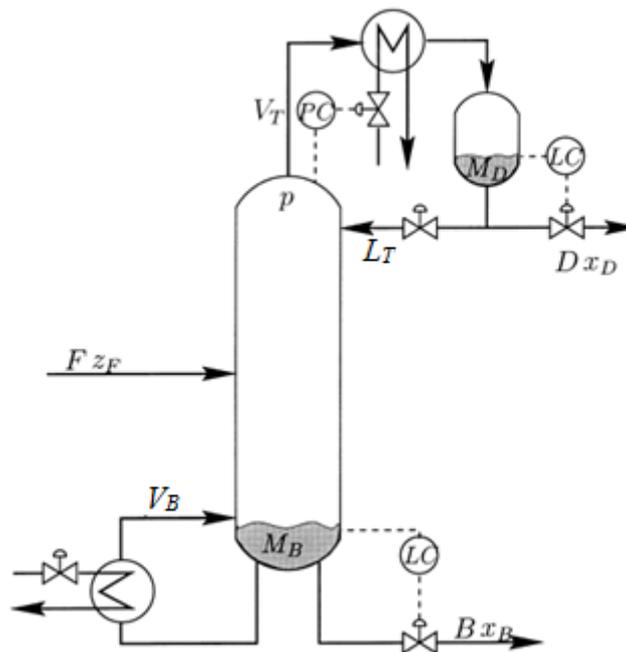


Figura 5.1 – Coluna de destilação típica com configuração de controle LV.

Este exemplo, chamado de “coluna D” pelos autores, representa a separação de uma mistura de propileno e propano. A operação se constitui da alimentação da coluna com um líquido saturado, sendo que o propileno (componente leve) é retirado como produto de topo, com uma composição de no mínimo 99,5 mol%, e o propano (componente pesado) é reciclado para um reator. Considera-se também que a coluna tem limite de processamento representado pela restrição sobre a corrente de vapor ($V_B \leq V_{max}$, onde $V_{max} = 20 \text{ kmol} \cdot \text{min}^{-1}$).

Tabela 5.2 - Condições operacionais nominais e parâmetros.

| Vazões ($\text{kmol} \cdot \text{min}^{-1}$) | | |
|---|---------------------------------------|--------|
| F | alimentação | 1,000 |
| B | fundo | 0,386 |
| D | destilado | 0,614 |
| L_T | refluxo | 11,862 |
| V_B | vapor | 12,476 |
| Composições (em mol/mol do componente leve) | | |
| z_F | alimentação | 0,650 |
| x_B | produto de fundo | 0,1011 |
| x_D | produto de destilado | 0,9951 |
| Acúmulo de líquido (kmol) | | |
| M_B | refervedor | 10,0 |
| M_D | condensador | 30,0 |
| Parâmetros | | |
| α | volatilidade relativa | 1,12 |
| q_F | fração líquida na alimentação | 1,0 |
| τ_l | constante de tempo hidráulica (min) | 0,065 |
| M_0 | acúmulo nominal dos pratos (kmol) | 1,0 |
| N_T | número total de estágios | 111 |
| N_F | localização do estágio de alimentação | 39 |

Para fins de otimização, a função objetivo Pr dada pela Equação 5.1, que é o valor do produto menos o custo da alimentação e de operação, pode ser maximizada para encontrar a melhor política a ser implementada. Nesta função, os preços $p_D = 20$, $p_B = 10 - 20x_B$, $p_F = 10$ e $p_V = 0,1$ são expressos em $\$ \cdot \text{kmol}^{-1}$.

$$Pr = p_D D + p_B B - p_F F - p_V V_B \quad 5.1$$

Apesar de a composição x_B não ter especificação de controle, o preço do produto de fundo é reduzido quando a quantidade do componente leve é aumentada nesta corrente. Isto representa um aumento nos custos operacionais, uma vez que o excesso desse componente na corrente de produto necessita de reprocessamento para reduzir perdas. Neste exemplo, busca-se garantir continuamente que a operação esteja próxima ao ótimo econômico.

5.4. Aplicação da Metodologia

5.4.1. Análise e definição das regiões operacionais

Para uma dada taxa de alimentação F e uma pressão especificada p , a análise preliminar do processo revela que a coluna D apresenta cinco graus de liberdade (GL) em estado estacionário (isto é, cada uma das cinco válvulas é um GL). Entretanto, a vazão de carga térmica no topo é empregada no controle da pressão da coluna e as vazões D e B são usadas no controle dos acúmulos de líquido no condensador e refervedor (M_D e M_B respectivamente). Essas variáveis manipuladas, embora tenham efeitos dinâmicos de um ponto de vista de controle, devem ser descartadas como GL, já que o valor das variáveis controladas não apresenta efeito estacionário sobre a economia. Em outros casos, alguns níveis de líquidos podem ter efeitos estacionários, tais como o nível em um reator de fase líquida distante do equilíbrio e níveis associados a áreas ajustáveis para transferência de calor (RANGAIAH e KARIWALA, 2012). Deste modo, restam somente dois GL, que podem ser selecionados para otimizar economicamente a operação. Neste caso, as vazões de vapor (V_B) e de refluxo (L_T) podem ser usadas para encontrar o ótimo.

Considerando a metodologia de controle otimizante, a seleção das variáveis controladas é baseada na minimização da função custo, $J = -Pr$, sujeita ao modelo não linear estacionário e às restrições operacionais. Além disso, neste momento, são consideradas também as seguintes perturbações:

- a. aumento na taxa de alimentação de 1 para $1,3 \text{ kmol} \cdot \text{min}^{-1}$ (essa faixa é suficiente para se observar a necessidade de reconfiguração);
- b. redução da composição de entrada (z_F) de 0,65 para 0,50;
- c. aumento em z_F de 0,65 para 0,75;

- d. aumento relativo de 0,10 % na pureza do produto destilado (x_D) de 0,9950 para 0,9960 (margem de segurança para erro de implementação do *set-point*).

Em suma, essas perturbações referem-se a distúrbios esperados na vazão e na composição de alimentação da coluna, cujos efeitos mais significativos incidem sobre a composição do produto. Deste modo, para atender às especificações do problema, são consideradas como candidatas a variáveis controladas as composições x_D e x_B e as razões de vazões molares D/F , L_T/F , V_B/F e L_T/D . Note que essa representação é adequada para a definição de uma configuração de controle do tipo razão (STICHLMAIR, 1995; RIGGS e KARIM, 2007). Por exemplo, quando L_T/D é usada como variável controlada, juntamente com o controle de acúmulo, compensa automaticamente perturbações na vazão de alimentação. Nesse conjunto, a razão D/F é apenas incluída para fins de comparação, pois a vazão de destilado já é empregada no controle do acúmulo do condensador.

Este problema de otimização foi resolvido em MATLAB com a função *fmincon* e o algoritmo SQP. As perturbações foram consideradas uma de cada vez e os resultados ótimos para as variáveis candidatas a controle podem ser vistos na Tabela 5.3. Os valores encontrados concordam com aqueles de SKOGESTAD (2000), que se limitou, no entanto, à aplicação da metodologia de controle auto-otimizante. Nesta tese, além da seleção da estrutura de controle, realizou-se um estudo mais avançado das condições operacionais, para definição das regiões, e a proposta de um sistema de controle baseado em reconfiguração.

Tabela 5.3 - Ponto operacional no ótimo econômico para cada perturbação.

| Condição | x_D | x_B | D/F | L_T/F | V_B/F | L_T/D | Pr/F |
|----------------------|--------|--------|--------|---------|---------|---------|--------|
| Nominal | 0,9950 | 0,0401 | 0,6387 | 15,0497 | 15,6884 | 23,5633 | 4,5281 |
| $F = 1,3$ | 0,9950 | 0,0429 | 0,6376 | 14,7470 | 15,3846 | 23,1276 | 4,5269 |
| $z_F = 0,50$ | 0,9950 | 0,0319 | 0,4860 | 15,0528 | 15,5388 | 30,9711 | 2,9783 |
| $z_F = 0,75$ | 0,9950 | 0,0445 | 0,7423 | 15,0493 | 15,7916 | 20,2752 | 5,6141 |
| $x_D = 0,9960$ | 0,9960 | 0,0423 | 0,6372 | 15,5851 | 16,2224 | 24,4584 | 4,4431 |
| <i>Desvio padrão</i> | 0,00 | 0,005 | 0,092 | 0,303 | 0,318 | 3,952 | - |

Pode-se ver que, para a perturbação de 30% na alimentação, a vazão V_B alcança seu valor máximo. Isto significa que a coluna atingiu a capacidade máxima de

processamento. Considerando as composições, a solução ótima para x_D é restrita no valor mínimo e x_B varia em torno da média 0,0403. Como a restrição de x_D é sempre ativa, esta variável deve ser controlada. Por outro lado, a razão L_T/D é muito sensível às perturbações, e não pode ser considerada como uma boa variável controlada. Um modo de verificar isto é ao se comparar o desvio padrão das soluções ótimas. Note que o desvio de todas as candidatas a variável controlada foi bem menor que a unidade, exceto aquele referente às soluções de L_T/D , que foi de 3,952. Isto revela que L_T/D ótimo varia muito com as perturbações consideradas. A determinação da segunda variável controlada deve ser feita de modo mais sistemático no conjunto remanescente de variáveis candidatas $\{x_B, D/F, L_T, L_T/F, V_B/F\}$, de modo a projetar apropriadamente a estrutura de controle para a coluna.

Outras informações interessantes a respeito da operação ótima podem ser encontradas quando se considera a taxa de alimentação como um GL. Deste modo, é necessário adicionar a restrição $F \leq F_{max}$ ao problema de otimização. O limite F_{max} é um parâmetro variante no tempo e pode ser visto como a taxa de alimentação disponível a montante. Dessa maneira, a operação estacionária pode ser otimizada, de modo a processar uma maior quantidade de alimentação, enquanto se considera a limitação de vapor da coluna. Nesta situação, pode-se ver que este limite é alcançado quando $F_{max} \geq 1,275 \text{ kmol} \cdot \text{min}^{-1}$ (Figura 5.2). Note também que a coluna não é capaz de processar uma taxa de alimentação maior que $1,585 \text{ kmol} \cdot \text{min}^{-1}$, indicando que a destilação alcança uma condição de gargalo operacional.

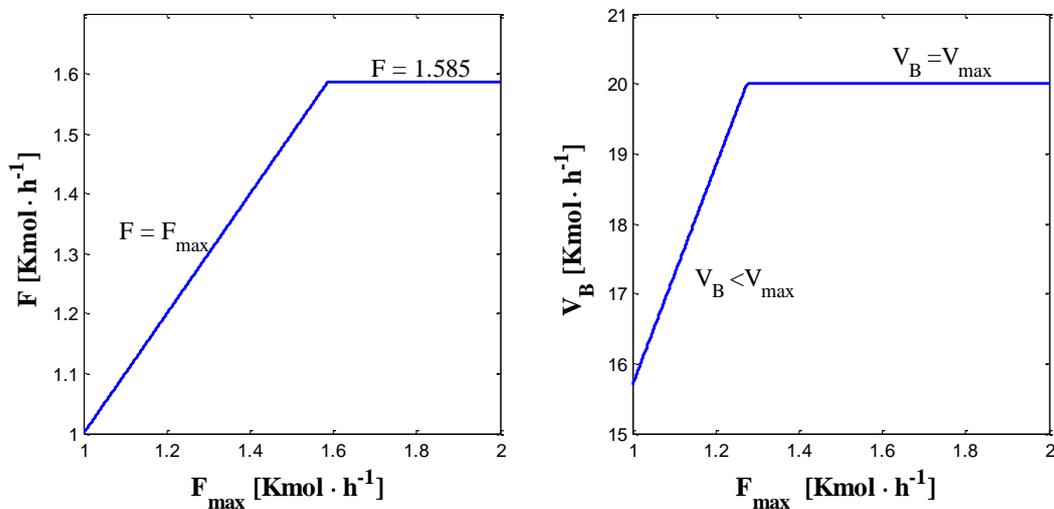


Figura 5.2 – Resultados da otimização estacionária, quando F é um grau de liberdade.

Considerando $1 \leq F_{max} \leq 2$, valores baixos de taxa de alimentação disponível (isto é, $F_{max} < 1,275$) implicam que é ótimo aumentar linearmente a taxa de alimentação, enquanto F_{max} é aumentado também. Nesta condição, o problema também é restrito em $F = F_{max}$ e as composições ótimas são as mesmas do caso nominal. Contudo, aumentar continuamente a taxa de alimentação significa que, em algum momento, a coluna atinge sua capacidade máxima de processamento, o que é traduzido pela ativação da restrição da vazão de vapor. Assim, em valores intermediários de taxa de alimentação (isto é, $1,275 \leq F_{max} \leq 1,585$), enquanto o ótimo é ainda processar o máximo da alimentação disponível ($F = F_{max}$), a vazão de vapor está restrita em V_{max} . Como a capacidade máxima de processamento foi alcançada, a quantidade de componente leve x_B é aumentada.

Quando se processa ainda mais da taxa de alimentação disponível, a solução ótima é colocar uma fração maior de componente leve na corrente de fundo e seu valor ótimo aumenta até 0,0950. Quando $F = 1,585 \text{ kmol} \cdot \text{min}^{-1}$, a coluna se torna um gargalo (no caso de a mesma ser parte de um processo maior), uma vez que não é capaz de processar uma taxa de alimentação maior. Neste caso, a otimização limita a quantidade a ser processada, de modo a manter a viabilidade da operação (ou seja, manter custo mínimo atendendo às restrições).

Uma boa maneira de resumir esses resultados, quando F é um GL, é dividir a operação em regiões operacionais estacionárias em função de F_{max} , como mostrado na Tabela 5.4.

Tabela 5.4 - Divisão das regiões operacionais em função da taxa de alimentação.

| F_{max} | 1,0 | <i>região 1</i> baixo | 1,275 | <i>região 2</i> intermediário | 1,585 | <i>região 3</i> alto | 2,0 |
|-----------|-----|--------------------------|-------|----------------------------------|-------|-------------------------|-----|
| x_D | | 0,9950 | | 0,9950 | | 0,9950 | |
| x_B | | 0,0401 | | variável | | 0,0950 | |
| F | | F_{max} | | F_{max} | | 1,585 | |
| V_B | | variável | | V_{max} | | V_{max} | |

OBS: as vazões são dadas em $\text{kmol} \cdot \text{min}^{-1}$.

Na região 1 (F_{max} baixo), a única restrição ativa, em adição à restrição de x_D , é a taxa de alimentação ($F = F_{max}$), enquanto a vazão de vapor é permitida variar. Na

região 2 ($Fmax$ intermediário), a coluna atinge sua capacidade máxima de processamento ($V_B = Vmax$) e a fração de componente leve aumenta na corrente de produto de fundo. Quando a operação é realizada na região 3 ($Fmax$ alto), a coluna se torna um gargalo. Note que a solução ótima para x_D permanece constante, ao passo que a solução para x_B aumenta de 0,0401 para 0,0950.

Retomando a busca da segunda variável controlada, a técnica de controle auto-otimizante diz que esta tarefa deve ser realizada por meio da comparação das perdas econômicas. Para esta proposta, pode-se requerer que a perda seja menor que $0,04 \text{ \$}\cdot\text{min}^{-1}$ para cada perturbação. Esse valor corresponde a uma perda total de aproximadamente $21\cdot 10^3 \text{ \$}$ por ano. Para calcular os diversos valores para as perdas, o problema de otimização pode ser considerado novamente para os casos em que as variáveis candidatas são consideradas constantes em seus valores ótimos nominais (*set-points*). Neste ponto, além das perturbações já apresentadas, erros de implementação de +20 % sobre os *set-points* foram considerados durante esta fase da seleção.

Este método de busca do conjunto de variáveis otimizantes pode ser custoso para processos de dimensão maior, já que o problema pode ser combinatorial. No entanto, alguns métodos exatos locais, juntamente com um algoritmo de otimização do tipo *Branch and Bound*, estão disponíveis na literatura (Kariwala e Cao, 2009). Neste caso, busca-se determinar uma matriz \mathbf{H} , tal que as variáveis otimizantes \mathbf{c} sejam mapeadas a partir das variáveis medidas \mathbf{y} , isto é, $\mathbf{c} = \mathbf{H}\mathbf{y}$. Assim, podem-se controlar medidas individuais ou então suas combinações lineares.

As perdas econômicas obtidas para cada alternativa são mostradas na Tabela 5.5, lembrando que os valores em negrito são maiores que a perda máxima definida e que o rótulo “inviável” implica que a operação não é possível em estado estacionário. Apesar de ser uma variável manipulada, note que foi incluída a vazão de refluxo (L_T) como uma das variáveis candidatas, pois foi a única que apresentou operação viável em todas as condições avaliadas.

Obviamente, as perdas no caso nominal são iguais a zero, visto que os *set-points* constantes correspondem a esta condição. Do mesmo modo, para os resultados para o erro de implementação em x_D , as alternativas apresentam perdas toleráveis quando a margem de segurança é requerida. As menores perdas podem ser vistas quando a composição x_B é considerada uma variável controlada. Entretanto, quando a

taxa de alimentação é aumentada para $1,3 \text{ kmol}\cdot\text{min}^{-1}$, a operação se torna inviável com um *set-point* constante em 0,0401, uma vez que a solução ótima para esta condição é aumentar x_B para 0,0429 em face desta perturbação.

Tabela 5.5 - Perdas econômicas ($\text{\$}\cdot\text{min}^{-1}$) para as alternativas de variáveis controladas em seus valores nominais ótimos.

| <i>Condição</i> | x_B | D/F | L_T | L_T/F | V_B/F | L_T/D |
|----------------------------------|------------------------------|-----------------|---------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| Nominal ^a | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| $F = 1,274$ | 0,0001 | 0,0001 | 0,4199 | 0,0001 | 0,0001 | 0,0001 |
| $F = 1,3$ | <i>inviável</i> ^b | <i>inviável</i> | 0,5184 | <i>inviável</i> | <i>inviável</i> | <i>inviável</i> |
| $z_F = 0,50$ | 0,0239 | <i>inviável</i> | 0 | 0 | <i>inviável</i> | 1,1025 |
| $z_F = 0,75$ | 0,0132 | 2,5277 | 0 | 0 | <i>inviável</i> | 0,1220 |
| $x_D = 0,996$ | 0,0012 | 0,0041 | 0,0060 | 0,0060 | 0,0059 | 0,0083 |
| <i>Erro</i> = +20 % ^c | 0,0121 | <i>inviável</i> | 0,1181 | 0,1181 | 0,1258 | <i>inviável</i> |

^a Valores nominais: $x_D = 0,995$, $z_F = 0,65$, $q_F = 1,0$.
^b a operação da coluna não é viável em estado estacionário.
^c $x_B = 0,0481$, $D/F = 0,7664$, $L_T = 18,0596$, $L_T/F = 18,0596$, $V_B/F = 18,8261$, $L_T/D = 28,2756$.

Manter as razões D/F , V_B/F ou L_T/D constantes faz com que a operação seja inviável ou tenha perdas econômicas inaceitáveis, principalmente quando a composição de alimentação muda. Isto acontece porque estas alternativas não conseguem lidar com o requerimento de controle da composição de topo. Por exemplo, se este controle puder ser relaxado quando $z_F = 0,75$ (isto é, a restrição $x_D = 0,9950$ é retirada do problema), a solução que se obtém é que a operação seria capaz de recuperar a viabilidade estacionária com a razão V_B/F constante. Em se implementando essas condições, a resposta para a composição de topo que poderia ser alcançada é de 0,9930. Apesar da super purificação de topo, isto teria um efeito negativo na economia, visto que a composição de fundo aumentaria para 0,3144.

A partir dos resultados para $F = 1,3 \text{ kmol}\cdot\text{min}^{-1}$, a vazão de refluxo é a única que permite operação viável ao preço de se ter uma perda significativa. Como esta perturbação esta acima do valor que ativa a restrição em V_B , uma simples verificação em $F = 1,274 \text{ kmol}\cdot\text{min}^{-1}$ mostra que a operação é viável para todas as alternativas. Mesmo

a perda causada pelo controle de L_T pode ser reduzida para 0,0011 se for permitido aumentar seu valor nominal em 25%. Quando $F = 1,3 \text{ kmol}\cdot\text{min}^{-1}$, se o mesmo aumento for aplicado, a perda torna-se 0,0047. No entanto, esta estratégia não é ótima. A viabilidade da operação pode ser verificada para esta perturbação ao se mudar o valor do *set-point* da composição de fundo para seu valor ótimo (Tabela 5.4). Nesse caso, a operação se torna viável e a perda é significativamente reduzida para zero como esperado.

Considerando a operação na primeira região, parece que uma boa estratégia para implementação pode ser a simples manipulação de L_T para controlar qualquer uma das candidatas remanescentes, especialmente x_D . Contudo, pode-se desejar implementar a solução ótima das outras regiões e esta estratégia certamente não é capaz de manter a viabilidade da operação. Neste ponto, conclui-se que o controle com *set-points* constantes não é praticável quando a magnitude da perturbação na taxa de alimentação é maior que 27,5%, visto que as variáveis candidatas a controle ou levam a perdas econômicas significativas ou não permitem uma operação viável em estado estacionário.

Apesar dos problemas com controle dual, a composição da corrente de fundo pode ser escolhida como a segunda variável controlada para ser mantida em seu valor ótimo, uma vez que apresenta as menores perdas na Tabela 5.5 para todas as perturbações. Dessa forma, se o *set-point* para esta composição for apropriadamente implementado, então a operação pode ser viável mesmo quando a magnitude das perturbações for maior que 27,5%. Assim, a estrutura de controle é capaz de manter a operação viável por meio de uma estratégia que garanta a reconfiguração do *set-point* da composição de fundo de acordo com a taxa de alimentação. Ao mesmo tempo, o controle da composição de topo pode ser realizado com a política auto-otimizante, já que esta variável está em sua restrição ativa em todas as condições avaliadas.

5.4.2. Estratégia de controle proposta – MPC/TC

Na seção anterior, a estrutura de controle proposta é baseada no controle dual, considerando como variáveis manipuladas as vazões de refluxo e a de vapor como na configuração LV (Figura 5.1). Como a economia da operação é dependente da magnitude das perturbações, a estratégia de controle a ser implementada deve ser capaz de prevenir operação inviável. Esta condição é principalmente determinada pela

ativação da restrição da vazão de vapor e por uma política de *set-point* constante para a composição de fundo. Dessa forma, uma boa estratégia para minimizar as perdas econômicas tem que ser capaz de manter a restrição ativa $V_B = V_{max}$ e atualizar o *set-point* de x_B , quando for necessário, ao mesmo tempo em que mantém o controle de x_D em 0,9950.

Especificamente, é empregada a estratégia de controle preditivo (MPC), como uma alternativa na camada de controle de supervisor, e de retificação de *set-points* (TC) encontrados na etapa de projeto, no intuito de atribuir capacidade de reconfiguração. Esta implementação é capaz de retificar os valores desejados para manter a viabilidade da operação. Dessa forma, no desenvolvimento deste exemplo, considera-se que a solução de MPC/TC é uma alternativa promissora para estender a solução de controle otimizante para mais de um cenário operacional, já que, ao menos, a condição de *set-points* constantes pode ser verificada. Isto é feito com o objetivo de atender ao requerimento de manutenção da operação próxima ao ótimo econômico, modificando a configuração (paramétrica) de controle supervisor quando houver necessidade.

A implementação da estratégia é iniciada com a linearização do modelo não linear em torno da condição de operação ótima. O modelo não linear é empregado posteriormente para representar a coluna D na simulação do sistema de controle. A linearização foi feita por meio de perturbação numérica dos estados e das entradas com uma magnitude de $1,0 \times 10^{-6}$ em torno do ponto nominal ótimo. O modelo obtido é representado pela Equação 5.2, em termos de variável desvio.

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{Ax} + \mathbf{Bu} \tag{5.2}$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{Cx}$$

De modo a verificar a estabilidade do processo, os $2 N_T$ polos podem ser computados a partir da matriz A , resultando que 0, 0 e -2.5×10^{-3} são os maiores valores. Os dois primeiros são devidos à presença de dois acúmulos integradores (M_B e M_D) e o último corresponde a uma constante de tempo dominante de 400 minutos para a resposta da composição. A coluna é estritamente instável em malha aberta. Por exemplo, na falta de uma malha *feedback*, uma pequena perturbação causa um grande

transiente nas composições e leva a operação inviável, porque os acúmulos de líquido crescem indefinidamente.

De acordo com MUSKE e RAWLINGS (1993), um modelo instável pode ser empregado no MPC, mas isto certamente eleva a complexidade da estratégia de controle a ser implementada. Deste modo, considerou-se que o modelo não linear da coluna foi estabilizado anteriormente à linearização conforme a configuração LV. Note que o número de variáveis manipuladas não é reduzido, uma vez que os *set-points* dos acúmulos podem ser usados pelo MPC também. Ao leitor interessado em outros tipos de configuração de controle para colunas de destilação, indica-se o trabalho de SKOGESTAD (2007) para leitura posterior.

Para verificar a acurácia do modelo linear foram aplicadas perturbações de $+0,01 \text{ kmol}\cdot\text{min}^{-1}$ nas taxas de alimentação, de refluxo e de vapor. A resposta dinâmica da coluna para ambos os modelos são apresentadas pela Figura 5.3 a Figura 5.5. É observado que o controle dos acúmulos de líquido é capaz de mantê-los fixos em seus *set-points* com dinâmica muito rápida e sem desvio estacionário. Respostas similares destas variáveis são obtidas para as outras duas perturbações. Por outro lado, as composições tem uma dinâmica muito lenta e há uma discrepância entre os modelos conforme o tempo aumenta, principalmente na resposta da composição de topo, devido à natureza não linear da coluna de destilação e operação de alta pureza. Contudo, para um horizonte de predição curto, o modelo linear apresenta uma boa aproximação da operação da coluna.

De acordo com ZHU e LIU (2005), essa diferença entre os modelos deve ser reduzida, já que pode limitar a aplicação de alguns esquemas de controle baseados na predição com modelos lineares. Na realidade, o recálculo de *set-points* pode ser negativamente afetado, uma vez que faz uso da versão estacionária do modelo linear. Contudo, como o controle da composição de topo deve ser rígido, uma maneira de contrapor esse efeito é considerar a restrição de igualdade $x_D = 0,9950$ no recálculo de *set-points* e fazer uma correção do modelo com um termo *bias* dado pela diferença entre o valor predito para o instante k e o valor medido nesse mesmo instante.

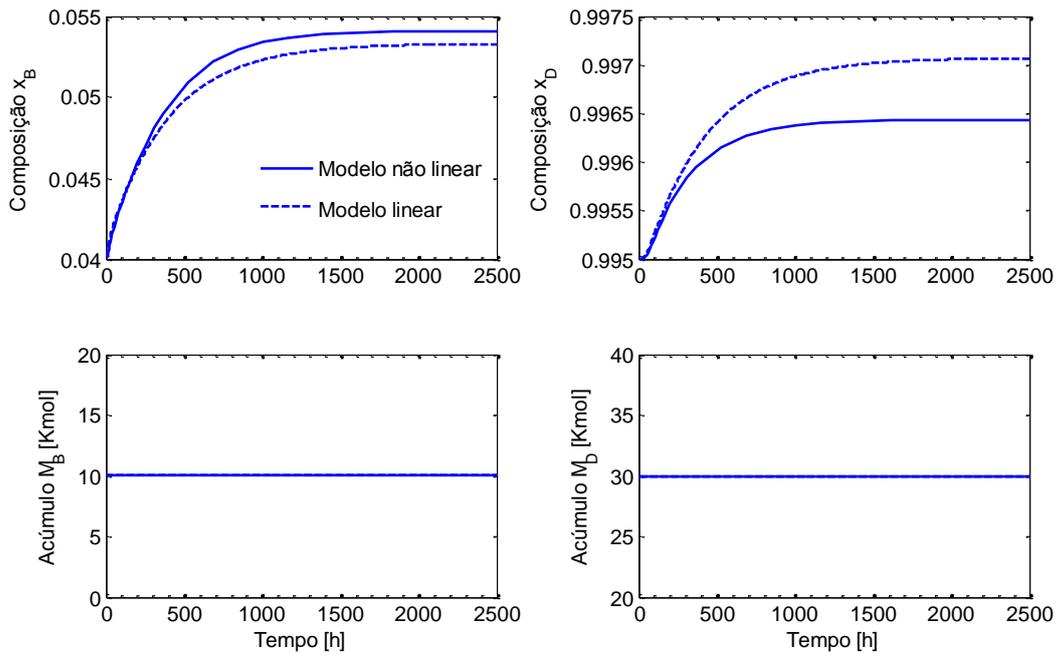


Figura 5.3 - Comparação das respostas dinâmicas para perturbação em F .

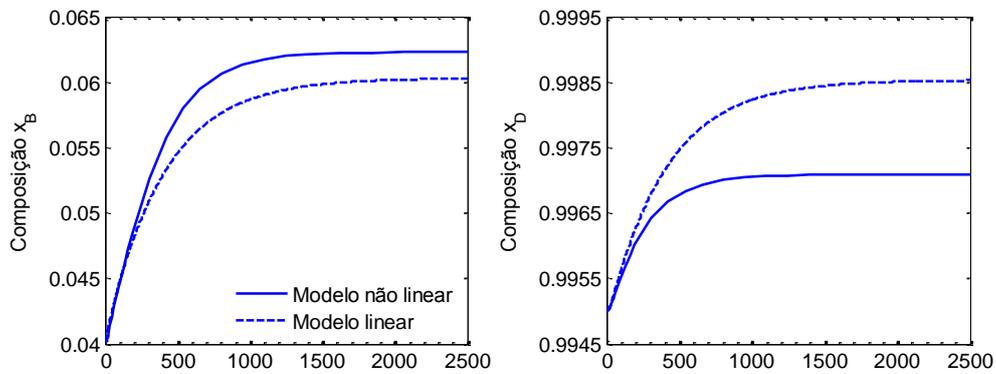


Figura 5.4 - Comparação das respostas dinâmicas para perturbação em L_T .

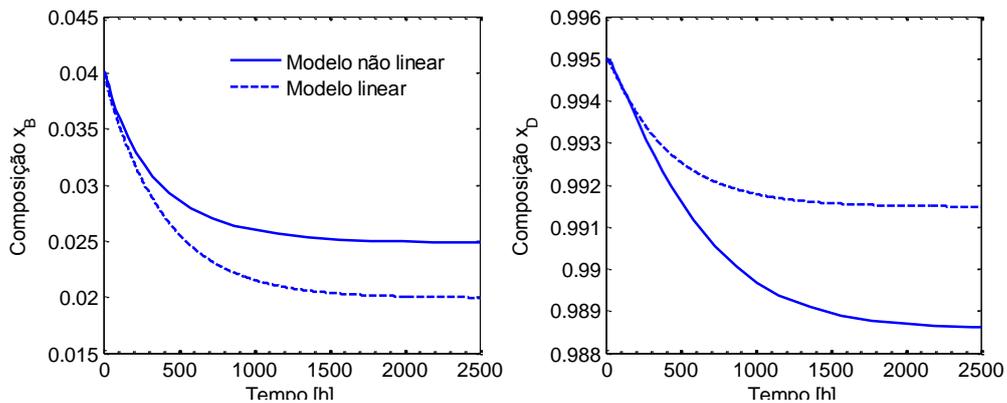


Figura 5.5 - Comparação das respostas dinâmicas para perturbação em V_B .

A consideração desse termo, representado por $\Delta\mathbf{y}$, no modelo linear também representa uma forma de considerar perturbações não medidas sobre as variáveis de saída, enquanto outras perturbações podem ser levadas em conta pelo controle preditivo (QIN e BAGDWELL, 2003). Por exemplo, o modelo empregado no recálculo de *set-points* pode ser dado pela Equação 5.3.

$$\mathbf{y}_s = \mathbf{G} \cdot \mathbf{u}_s + \Delta\mathbf{y} \quad 5.3$$

Formulação do sistema - TC/MPC

Uma vez determinado o modelo linear, o sistema de controle baseado nos algoritmos de MPC e recálculo de *set-points* pode ser implementado, conforme as formulações apresentadas nos Apêndices B e C respectivamente. Inicialmente, deve-se considerar uma camada de controle regulatório relacionada à manutenção dos acúmulos no tambor de refluxo e no fundo da coluna, com tempo de amostragem de 0,1 minutos. O período de amostragem para a composição deveria ser tomado como 1/10 da constante de tempo dominante como normalmente é feito. Contudo, como a camada supervisória tem que manter o controle simultâneo das composições e da vazão de vapor, o tempo de amostragem escolhido é de 5 minutos. Este valor está de acordo com o tempo necessário para obter as medidas de composição em uma planta química real, caso contrário, modelos de inferências podem ser empregados na prática. Com esses tempos de amostragem, é importante destacar que o TC e o MPC são repetidos a cada 50 vezes que a camada regulatória implementa suas ações de controle.

Na avaliação em estado estacionário, o algoritmo de priorização das restrições deve ser capaz de identificar quando a operação é inviável. Nesse caso, considera-se que sempre se deseja operar na condição nominal ótima (isto é, operação na região 1). Caso não seja possível manter o processo nessa condição, esse algoritmo calcula a violação da restrição de x_B que garante a viabilidade. Posteriormente, a etapa TC minimiza, por meio de uma norma quadrática, a distância entre o ponto nominal ótimo e aquele viável a ser implementado no MPC. Esse ciclo de verificação de viabilidade é realizado a cada instante de amostragem e espera-se que a operação estacionária esteja sempre próxima ao ótimo econômico para todas as perturbações.

A função objetivo considerada no MPC é dada pela Equação 5.4, onde $e_y = \mathbf{y} - \mathbf{y}_s$ representa o erro das variáveis controladas ao longo do horizonte de predição P em relação ao *set-point* \mathbf{y}_s , $\Delta \mathbf{u}$ é a variação das variáveis manipuladas, $e_u = \mathbf{u} - \mathbf{u}_s$ é o desvio em relação ao alvo requerido \mathbf{u}_s para as variáveis manipuladas no horizonte de controle M , e as matrizes \mathbf{Q} , \mathbf{R} e \mathbf{S} são as respectivas penalidades.

$$J_{\Delta u} = \mathbf{e}_y^T \mathbf{Q} \mathbf{e}_y + \Delta \mathbf{u}^T \mathbf{R} \Delta \mathbf{u} + \mathbf{e}_u^T \mathbf{S} \mathbf{e}_u \quad 5.4$$

Como no TC é desejado apenas o cômputo do valor desejado de x_B , sua função objetivo contempla apenas um termo quadrático para essa variável, sendo dado pelo desvio em relação ao valor nominal ótimo ($x_B=0,0401$). Nesse problema, a composição de topo é inserida como uma restrição continuamente ativa ($x_D = 0,995$), ao passo que a violação da restrição de x_B é sempre verificada. Adicionalmente, permite-se que as variáveis L_T , V_B e os *set-points* para os acúmulos variem de acordo com a perturbação na taxa de alimentação. Essa consideração é implementada ao se fazer os respectivos elementos de penalidade na função objetivo do TC iguais a zero.

Horizontes de controle e predição

Seguindo as orientações de LEE *et al.* (2003), a escolha para os horizontes de predição e de controle, P e M , respectivamente, não foi crítica. Com o intuito de melhorar a robustez do sistema em malha fechada ao erro de modelagem, o horizonte de predição deve ser mantido como o mais alto possível e o número de movimentos de controle pode ser reduzido. Na verdade, isto representa uma ponderação entre o esforço computacional para encontrar o movimento de controle ótimo e a agressividade permitida para o comportamento em malha fechada. Os resultados reportados aqui empregam $P = 50$ e $M = 5$. Note que o horizonte de predição é equivalente a 250 minutos de operação. Embora este tempo seja menor que a constante de tempo dominante, os resultados mostram um bom desempenho para todos os casos.

Restrições operacionais

A definição das restrições operacionais é outro passo importante. A Tabela 5.6 apresenta as restrições nominais para as variáveis controladas e manipuladas. Neste

momento, não são consideradas as taxas de variação das vazões de destilado e de produto de fundo, pois essas correntes são usadas no controle PI da camada regulatória. A restrição mais crítica é o limite superior na vazão de vapor, uma vez que traduz a capacidade máxima de processamento da coluna.

Tabela 5.6 - Restrições nominais do processo.

| <i>Variáveis manipuladas</i> | | | |
|------------------------------|------------|------------|-------------|
| | <i>min</i> | <i>max</i> | <i>Δmax</i> |
| L_T | 0,001 | 30,0 | 5 |
| V_B | 0,001 | 20,0 | 5 |
| $M_{B,set}$ | 0,001 | 10,0 | 1 |
| $M_{D,set}$ | 0,001 | 35,0 | 1 |
| <i>Variáveis controladas</i> | | | |
| $x_{B, TC}$ | 0 | 0,0401 | - |
| $x_{B, MPC}$ | 0 | 1,0 | - |
| $x_{D, TC}$ | 0,9950 | 0,9950 | - |
| $x_{D, MPC}$ | 0,9950 | 1,0 | - |

OBS: $M_{B,set}$ e $M_{D,set}$ são os *set-points* manipulados para os acúmulos do fundo da coluna e do tambor de refluxo, respectivamente.

Considerando as variáveis controladas, note que há dois tipos de restrições. Por exemplo, $x_{B, TC}$ e $x_{B, MPC}$ indicam respectivamente as restrições usadas no recálculo de *set-points* e no MPC para a composição de fundo. Além disso, as restrições nominais na variável x_B no TC se referem à primeira região operacional. Quando seu valor superior (isto é, $x_B \leq 0,0401$) tornar a operação inviável, o mesmo deve ser relaxado. Esta restrição é a única que é tratada como restrição relaxável, enquanto que a restrição de x_D é implementada como uma restrição de igualdade, visto que é viável em estado estacionário para o conjunto de perturbações considerado. Por outro lado, durante a predição no MPC, as restrições das variáveis controladas refletem seus limites físicos e a quantidade mínima requerida para o produto de topo.

Penalidades

De modo a completar a estratégia de controle, é fundamental definir apropriadamente os pesos na função objetivo do MPC para penalizar os desvios das variáveis manipuladas e controladas em relação às referências implementadas. Se o problema está escalonado, possivelmente esta tarefa se torna mais fácil de realizar. Caso

contrário, os pesos são fortemente influenciados pela escala das variáveis. Além disso, uma possível abordagem mais sistemática, para definição dos pesos e das matrizes para escalonamento do sistema é dada pela metodologia de controle robusto RPN (TRIERWEILER e FARINA, 2001).

Em todo caso, o modelo linear e as restrições não foram escalonados aqui, o que fez com que a seleção dos pesos fosse orientada pelos seguintes requerimentos de controle:

1. o controle da composição de topo deve ser rígido;
2. permite-se que os acúmulos do condensador e do retervedor variem para representarem assim graus de liberdade extras;
3. permite-se que as taxas de variação das vazões de refluxo e de vapor também variem, de modo que as ações de controle sejam tomadas facilmente em face de perturbações;
4. como o limite superior na taxa de vapor pode ser alcançado, esta variável deve ser mantida em seu valor dado calculado pelo TC.

Os valores dos pesos, que propiciaram os resultados deste trabalho, são apresentados na Tabela 5.7.

Tabela 5.7 - Pesos empregados no MPC.

| <i>Matriz de ponderação</i> | <i>Variáveis controladas e manipuladas</i> | | | | | |
|-----------------------------|--|-------|-------|-------|-------------|-------------|
| | x_B | x_D | L_T | V_B | $M_{B,set}$ | $M_{D,set}$ |
| Q | 1 | 20 | - | - | - | - |
| R | - | - | 0,01 | 0,01 | 1 | 1 |
| S | - | - | 1 | 10 | 0 | 0 |

5.5. Estratégia de controle alternativa - PID

Para fins de comparação de desempenho, um sistema de controle baseado na configuração LV pode ser considerado. Neste caso, as malhas de controle dos acúmulos e das composições são implementadas apenas com controladores PID em sua forma de algoritmo de velocidade. Como o controle da composição deve ser feito continuamente,

pode-se manipular a vazão de refluxo, visto que a mesma não atinge suas restrições na otimização estacionária para as perturbações consideradas. A vazão de vapor é usada aqui para manter a composição de fundo e, quando a taxa de alimentação aumentar para valores intermediários ou altos, é saturada em sua restrição ativa, de modo a implementar a solução ótima.

Os parâmetros dos controladores PID para o controle das composições foram encontrados em SKOGESTAD *et. al.* (1989) e, após ajuste fino em simulação dinâmica, podem ser vistos na Tabela 5.8, onde o par *CV-MV* indica que *CV* é controlado por meio da manipulação de *MV*.

Tabela 5.8 - Parâmetros de sintonia dos controladores PID em configuração LV ajustados a partir de SKOGESTAD *et. al.* (1989).

| Malhas de controle | K_P | τ_I | τ_D |
|--------------------|-------|----------|----------|
| M_B-B | -10 | 75 | - |
| M_D-D | -10 | 75 | - |
| x_B-V_B | -10 | 10 | 0,1 |
| x_D-L_T | 800 | 15,1 | 0,1 |

5.6. Simulação dinâmica

A operação da coluna foi simulada com o modelo não linear, considerando como condição inicial o ponto ótimo nominal. O sistema de equações diferenciais foi resolvido em MATLAB por meio do método de Runge-Kutta de quarta ordem e instantes de amostragem de 0,01 segundos. Para a ação de controle *feedback* no MPC, assume-se que todos os estados do processo estão disponíveis (isto é, são medidos). Embora esta consideração não seja verdadeira em muitos processos, a mesma não limita o principal objetivo desta etapa do trabalho, que é a reconfiguração do sistema de controle para implementação da solução ótima. Neste exemplo, esta reconfiguração é feita quando a operação se torna inviável. Futuras implementações podem considerar ferramentas para estimação das variáveis não medidas, como o filtro de Kalman ou a reconciliação de dados (PRATA *et al.*, 2009).

Na tentativa de avaliar as estratégias de controle, perturbações na taxa de alimentação (até + 30 %) e na composição de entrada (± 20 %), em torno dos valores nominais, são consideradas. Em todos os casos, a simulação é realizada até que a coluna

atinga seu novo estado estacionário. Nos resultados, também é feita uma comparação entre a estratégia proposta (TC/MPC) e a solução de MPC tradicional apenas com os mesmo parâmetros (P , M e pesos da função objetivo). A diferença entre a solução proposta e o MPC tradicional reside no fato de este último não considerar o termo de $\mathbf{e}_u^T \mathbf{S} \mathbf{e}_u$, que se refere à manutenção das variáveis manipuladas em torno de \mathbf{u}_s , e tampouco o mecanismo de atualização de especificação. Desse modo, espera-se que o MPC tenha desempenho comparável à proposta apenas quando a operação é realizada próximo ao ponto nominal.

5.7. Resultados e discussão

O desempenho do sistema de controle foi testado na manutenção da operação da coluna em torno de sua condição nominal ótima quando de um teste regulador dado pela perturbação de +20% na taxa de alimentação, a partir do instante de 10 min. Na Figura 5.6, são apresentadas as respostas dinâmicas das composições para esta perturbação.

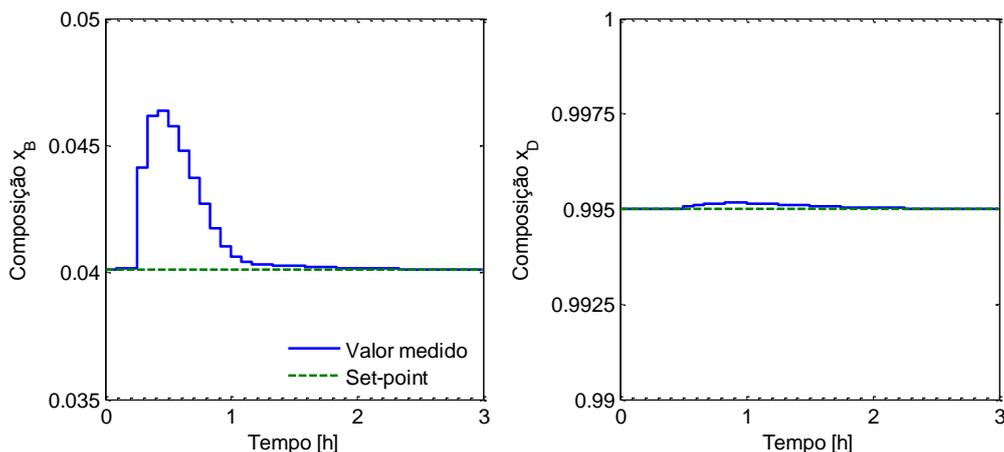


Figura 5.6 - Resposta das composições x_B e x_D para perturbação de +20% na taxa de alimentação.

Como esperado, a taxa de alimentação admitida não levou a coluna à sua capacidade máxima e o valor desejado para a composição de produto de fundo $x_B = 0,0401$ foi mantido constante pela etapa de TC, uma vez que a operação é viável (região 1) nesta condição. Adicionalmente, o controle preditivo foi capaz de manter a composição de topo x_D em sua especificação e acima de sua restrição operacional quando do transiente. Em ambos os casos, a perturbação na taxa de alimentação apenas

representou um teste regulador e as variáveis retornaram aos seus valores especificados em aproximadamente 1,5 h após a aplicação da perturbação. Possivelmente, esse valor é devido à elevada dimensão da coluna, que conta com 111 estágios.

Assim que a perturbação na taxa de alimentação ocorre, o algoritmo de controle implementa as ações de controle ótimas para L_T e V_B (Figura 5.7) para manter o controle das composições, seguindo a referência dada pelo TC. Como uma mudança nessas vazões implica em uma alteração nos acúmulos do condensador e do refeedor, o controle regulatório manipula as vazões de saída desses estágios. Como efeito, nenhum desvio é observado nos acúmulos, já que esta camada trabalha em uma frequência maior que o controle das composições. Considerando as razões ótimas, quando F é dado, repare que todas as variáveis convergiram para seus valores ótimos, mostrando que a proposta de controle é capaz de manter a operação nominal.

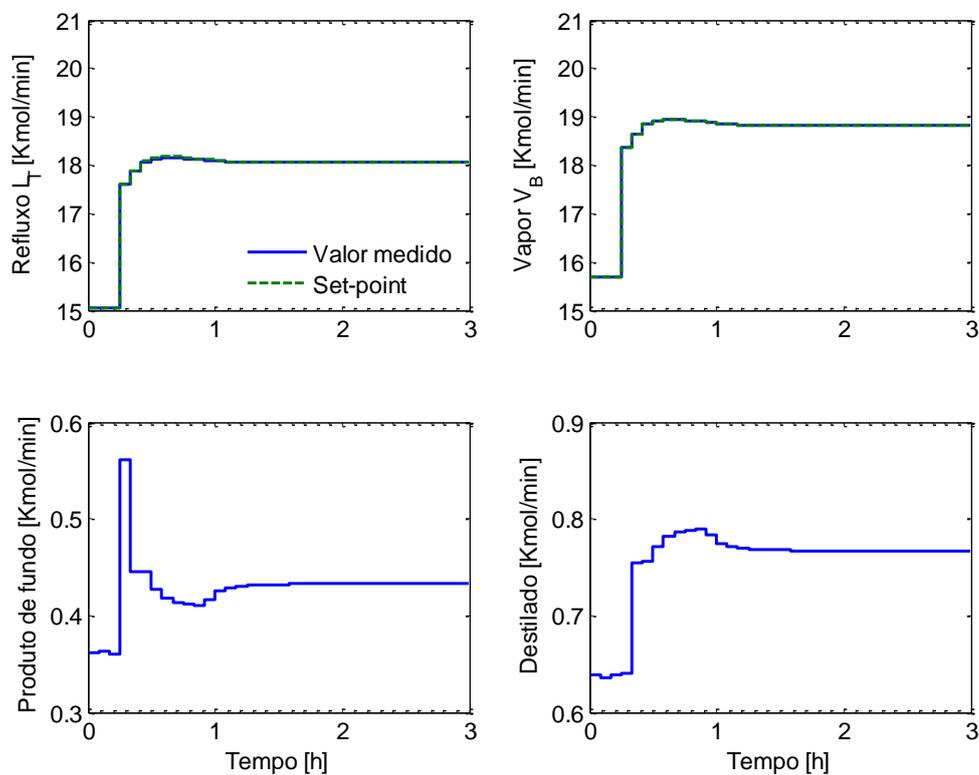


Figura 5.7 - Variáveis manipuladas para perturbação de +20% na taxa de alimentação.

Na sequência, a segunda simulação considerou uma perturbação de + 30 % na taxa de alimentação a partir de seu valor nominal. Como o valor final é maior que

1,275 kmol·min⁻¹ (limite entre as regiões 1 e 2), o algoritmo de priorização da violação das restrições é testado quanto a sua capacidade em identificar quando a operação se tornar inviável em estado estacionário e, juntamente com o recálculo de *set-points*, em atualizar a especificação para a composição de fundo para operação na região 2.

As repostas dinâmicas da operação da coluna e as manipulações de L_T , V_B e dos produtos de fundo e topo para esta perturbação podem ser observadas na Figura 5.8 e Figura 5.9.

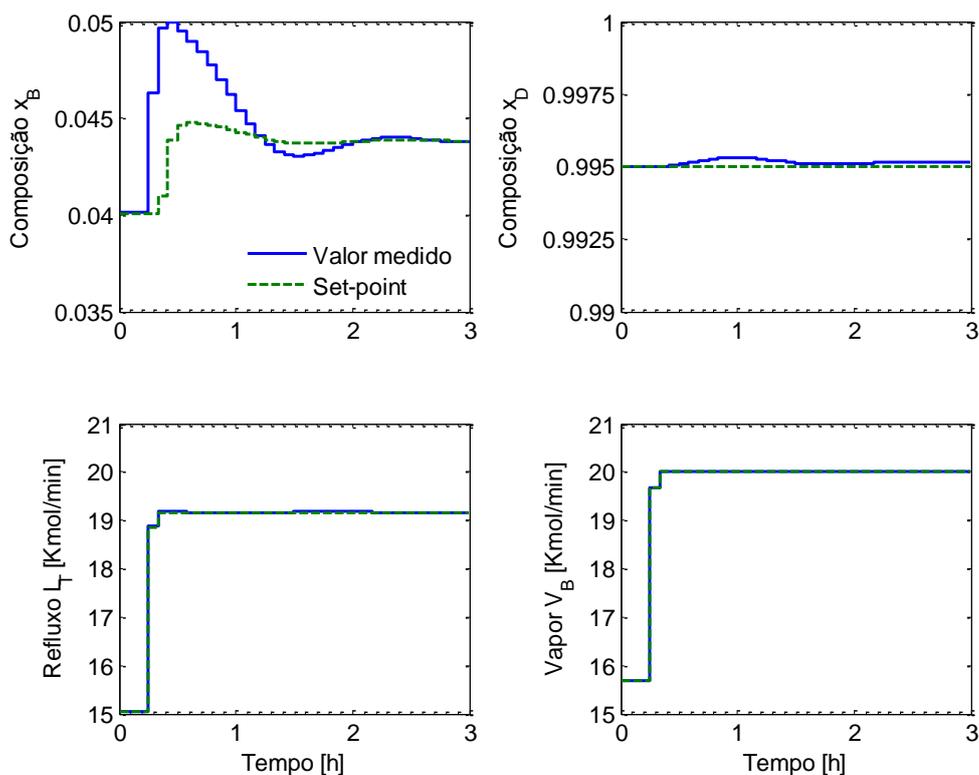


Figura 5.8 - Resposta das dinâmicas para perturbação de +30% na taxa de alimentação.

A solução de controle proposta foi capaz de manter as composições próximas a suas especificações, havendo a presença de um desvio estacionário de apenas 0,01 % no controle de x_D . Apesar de ser baixo, algum desvio já era esperado, pois, além de o sistema estar tendo uma maior quantidade de carga, sua operação está localizada em uma região de elevada pureza, a qual o modelo linear não é capaz de representar adequadamente durante a predição. Durante o controle de x_B , quando necessário, a restrição nominal $x_B \leq 0,0401$ foi violada, de modo que a etapa TC definiu suas novas especificações.

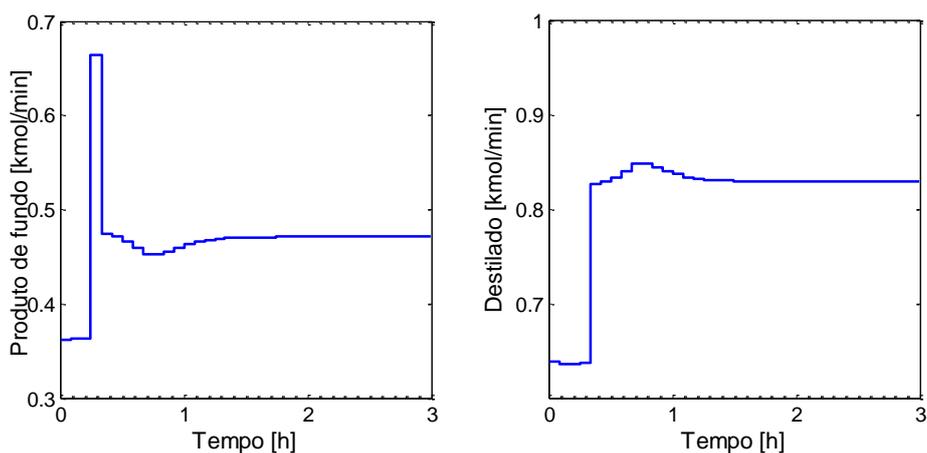


Figura 5.9 – Vazões de produto de fundo e topo para perturbação de +30% na taxa de alimentação.

Após uma transição suave, a operação atingiu o estado estacionário após 2 h, sendo que o valor final da composição de fundo foi 0,0437, que corresponde a um desvio de aproximadamente 2 % em relação ao ótimo esperado de 0,0429. Isso se deve à escolha de uma função objetivo quadrática para o algoritmo de TC, que minimiza a distância em relação ao ótimo nominal da região 1. Em aplicações futuras, pode-se esperar que a aplicação de função objetivo linear, com dados econômicos, leve ao ótimo esperado. De qualquer forma, o desvio observado não comprometeu o resultado econômico da operação, que, nesse caso, foi de 5,8747 \$/min.

Repare que o *set-point* implementado para x_B é iniciado em seu valor nominal e, após a entrada da perturbação, é constantemente modificado. Neste ponto, o uso do termo *bias* desempenha um papel importante, uma vez que corrige a distância entre o modelo estacionário linear empregado no TC e o estado atual do processo. A trajetória final converge quando esse termo se aproxima de zero, correspondendo ao desvio mínimo em relação ao valor nominal ótimo para x_B frente à perturbação considerada. Um inconveniente dessa abordagem é que sempre se assume que o termo *bias* calculado a cada amostragem seja igual ao esperado no estado estacionário. Em outros exemplos de aplicação, isso pode fazer com que o *set-point* encontrado pelo TC seja muito diferente entre as amostragens, já que o modelo linear pode não ser uma boa representação do processo.

Do mesmo modo, também foram determinadas as referências para as vazões de refluxo e de vapor a cada instante de amostragem. Como esperado, a coluna alcança sua capacidade máxima de processamento para a taxa de alimentação considerada. Desse

modo, o valor desejado para a vazão de vapor é ajustado para $20 \text{ kmol}\cdot\text{min}^{-1}$ pelo TC e implementado no processo por meio do MPC.

Os testes de perturbação considerados na composição de alimentação z_F foram sua redução para 0,50 e o aumento para 0,75, a partir do seu valor nominal no instante 10 min. As respostas das composições para o primeiro caso, assumindo que z_F não é uma variável medida, podem ser vistas na Figura 5.10.

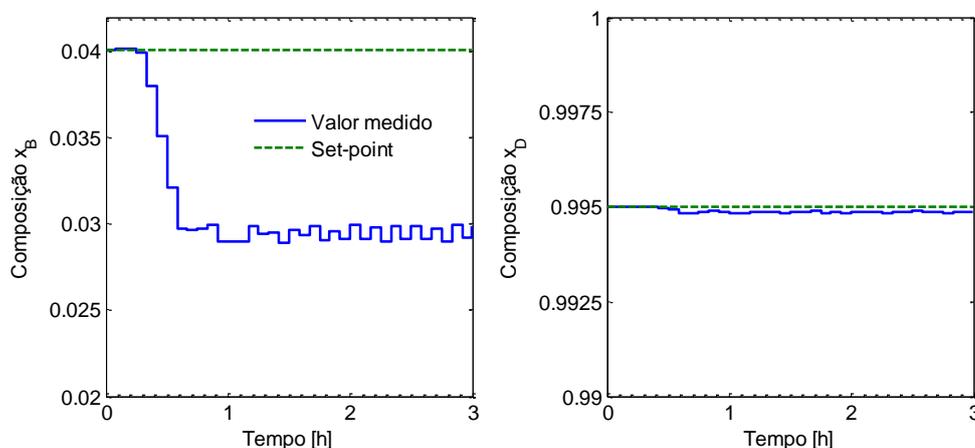


Figura 5.10 - Resposta das composições para a perturbação não medida $z_F = 0,50$.

Enquanto o controle de x_D foi realizado com um pequeno desvio, a resposta de x_B para esse teste contradiz o que foi verificado quando da busca das variáveis controladas, onde o controle desta composição com *set-point* constante é viável. Na verdade, isto revela outra limitação importante da abordagem empregada no sistema TC/MPC, já que depende explicitamente da medição das perturbações para que as especificações sejam atualizadas, incluindo as referências das variáveis manipuladas. Apenas o uso do termo *bias* não é suficiente para compensar o modelo linear, principalmente no controle preditivo, de modo que alguma alternativa para estimação da composição de alimentação seria necessária.

Por exemplo, ao se considerar que z_F é uma perturbação medida, a composição x_B pode ser controlada próxima a sua especificação nominal com um desvio estacionário máximo de aproximadamente 8 %, conforme pode ser visto na Figura 5.11. Note também que as referências para as variáveis manipuladas foram determinadas apropriadamente e, como esperado, o *set-point* de x_B inicialmente é reduzido, pois a etapa TC verifica que há menos componente leve na alimentação. Contudo, o efeito da correção do modelo com o termo *bias* faz com essa especificação retorne a 0,0401, uma

vez que é viável; ao passo em que as variáveis manipuladas convergem para seus valores finais. Adicionalmente, o controle de x_D é perfeito após 3 h de operação.

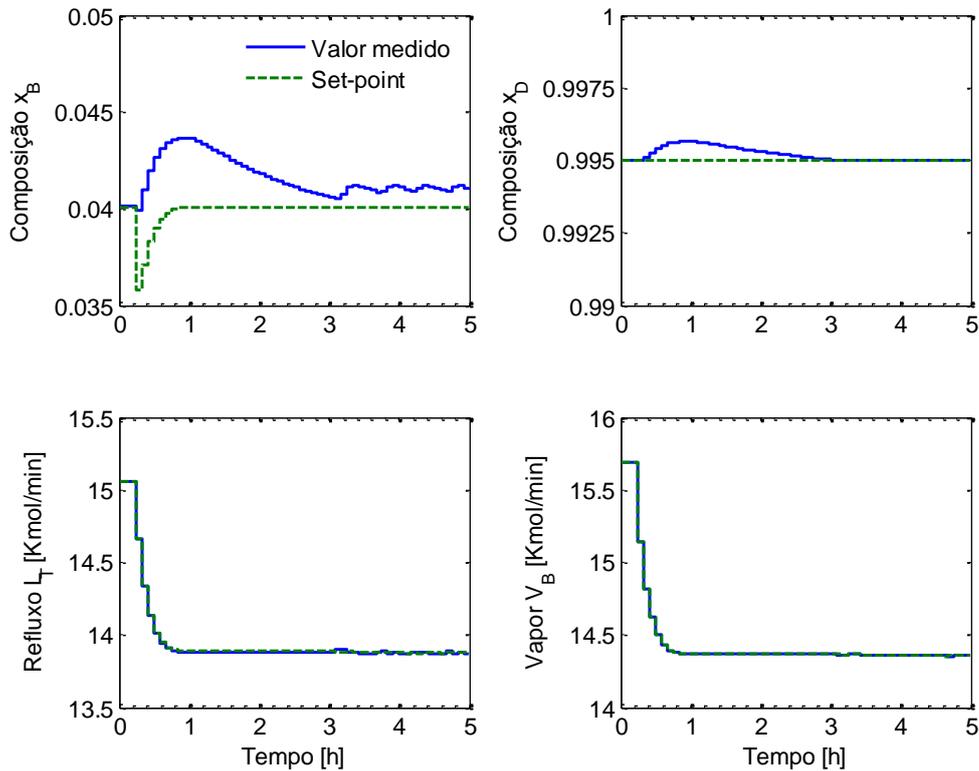


Figura 5.11 - Resposta das composições e manipulações para a perturbação medida $z_F = 0,50$.

Uma resposta similar pode ser obtida para o segundo caso (Figura 5.12), quando se aplica uma perturbação de $z_F = 0.75$. Novamente, foi possível o controle de ambas as composições próximas aos seus valores especificados, considerando que a variação em z_F pode ser medida. Repare que, uma vez que é alimentada uma fração maior de componente mais leve, o controle da composição de fundo faz com que o excesso seja extraído pelo topo da coluna. Desse modo, há um aumento dessa composição na corrente de destilado, que o controle de topo deve ser capaz de contornar. Como o controle de x_D responde de modo mais lento, o perfil dessa composição apresenta um desvio de cerca de 0,05 % para o tempo simulado. Novamente, note que, nesses testes de perturbação em z_F , a aplicação de uma função objetivo linear, com dados econômicos, na etapa de TC poderia ter levado o *set-point* de x_B para os valores dados na Tabela 5.3.

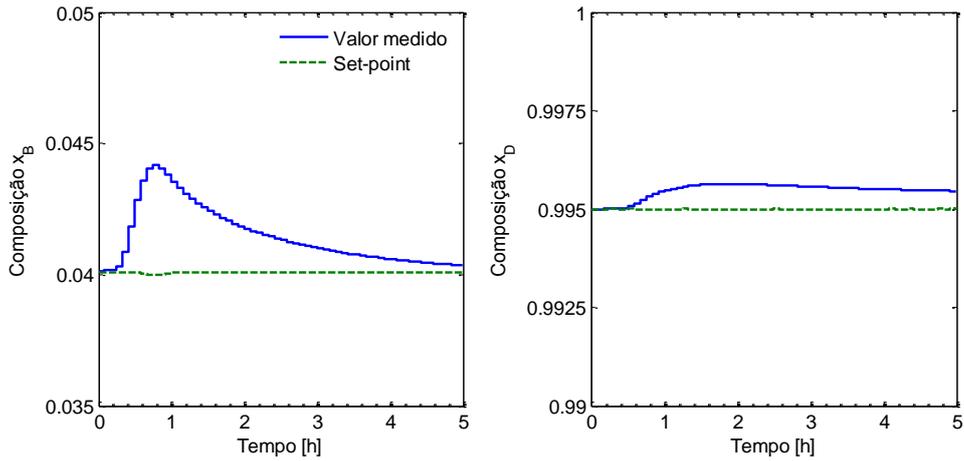


Figura 5.12 - Resposta das composições e manipulações para a perturbação medida $z_F = 0,75$.

Uma comparação do desempenho da estratégia proposta com o MPC tradicional e com a estrutura de controladores PID em arranjo LV foi feita para uma perturbação de +30 % na taxa de alimentação. Esse teste foi considerado na forma de uma função sigmoide, como apresentado na Figura 5.13, com o intuito de simular uma perturbação de dinâmica rápida que permitisse resposta estável com a estrutura em arranjo LV.

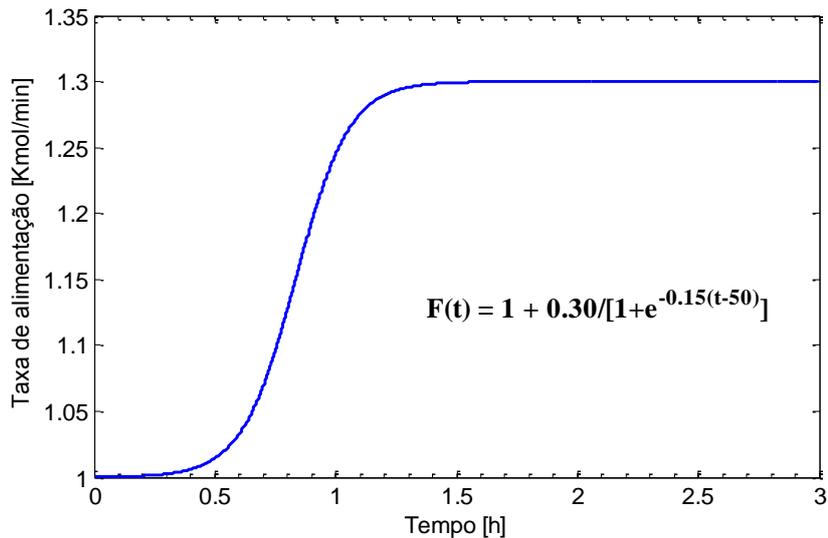


Figura 5.13 - Perturbação de +30 % na taxa de alimentação implementada na forma de uma função sigmoide.

As respostas obtidas para cada alternativa de controle podem ser vistas nas Figura 5.14 e Figura 5.15. A solução de controle proposta (MPC/TC) apresenta um

melhor desempenho transiente entre as alternativas avaliadas. Isso se deve à atualização da especificação de x_B , que é somente alterada após o instante em que a taxa de alimentação é igual a $1,2714 \text{ kmol}\cdot\text{min}^{-1}$. Além disso, já que não dispõem de algum mecanismo de reconfiguração, as outras duas alternativas (PID e MPC tradicional) assumem que a operação deve ser sempre mantida próxima ao ponto nominal, o que provoca a ocorrência de sobre-elevação no controle de x_B . Em relação à Figura 5.8, a diferença da resposta do sistema MPC/TC é que a mudança do *set-point* de x_B foi mais suave quando a dinâmica da perturbação na taxa de alimentação foi admitida como uma sigmoide.

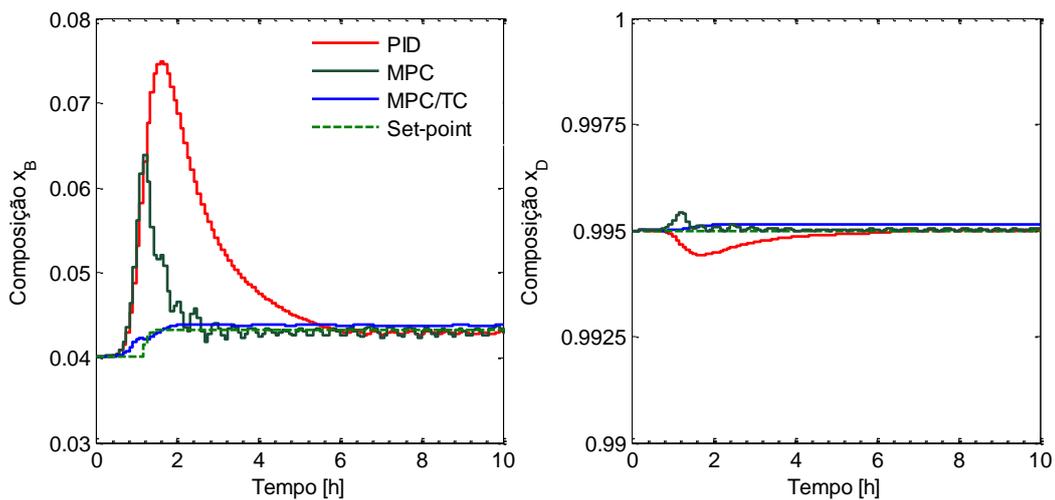


Figura 5.14 - Comparação do desempenho entre as alternativas de controle para as variáveis controladas.

No entanto, em todos os casos, as respostas finais para x_B são equivalentes, uma vez que o valor observado se refere a uma solução estacionária da coluna quando a vazão de vapor se torna restrita. Na verdade, as respostas das alternativas MPC e PID, que utilizam a especificação de x_B fixada em 0,0401, apresentam um desvio estacionário em relação a esse valor. Isso indica que essas alternativas não conseguem alcançar o seu objetivo de controle desta variável, já que o grau de liberdade, que exerce maior efeito, é perdido quando a vazão de vapor está em seu valor máximo.

Adicionalmente, as alternativas de controle se diferenciam bastante quanto às manipulações das variáveis. Surpreendentemente, o controle PID se mostra mais suave para esta perturbação, com manipulações mais suaves que o MPC. No entanto, como a operação nesses dois casos demora a alcançar a restrição da vazão de vapor, há a produção de uma grande quantidade de produto de fundo fora de especificação.

Ademais, a operação com o MPC fora da região de sua especificação sacrifica as correntes de fundo e de destilado para manter o controle dos acúmulos. Sendo assim, a proposta MPC/TC é a melhor alternativa entre as avaliadas.

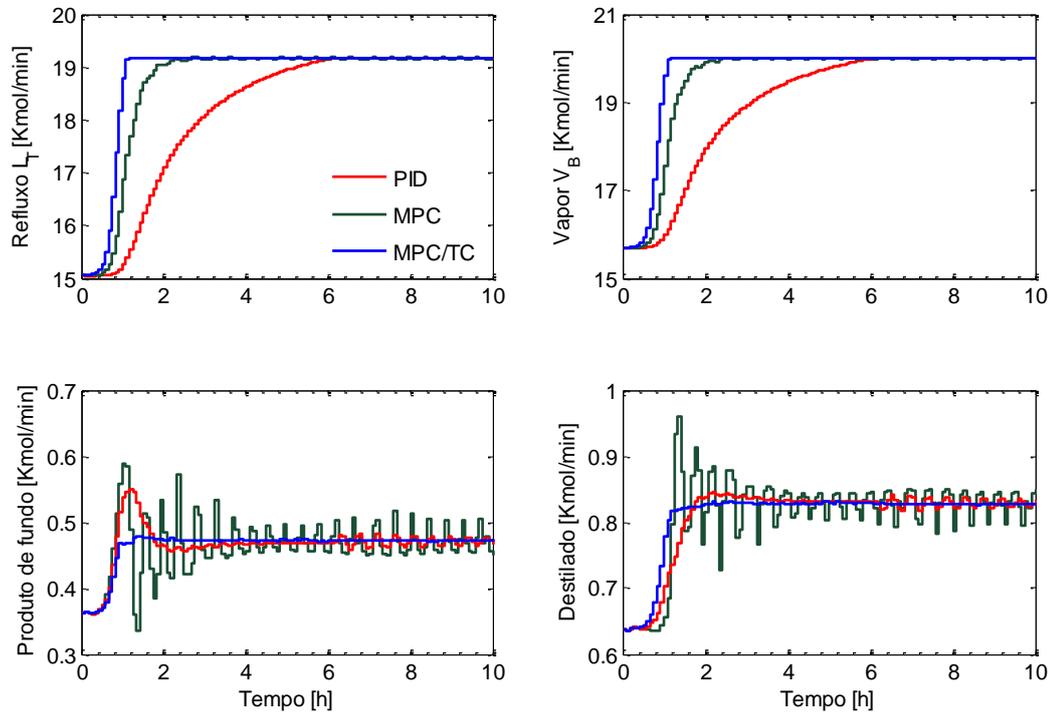


Figura 5.15 - Comparação do desempenho entre as alternativas de controle para as variáveis manipuladas.

5.8. Comentários finais

Normalmente, o controle de processos industriais é representado por sistemas de grande escala no qual o número de sensores e atuadores pode ser elevado. Nesse caso, a metodologia de controle auto-otimizante é muito promissora, uma vez que permite o projeto da estrutura de controle que deve ser imposta ao sistema, principalmente quando, se deseja operação próxima ao ótimo econômico. Neste capítulo, mostrou-se como essa metodologia pode guiar sistematicamente a seleção do conjunto de variáveis controladas, de modo a manter mínima a perda econômica e evitar o uso de algoritmos complexos para otimização em tempo real. Ademais, quando a política de *set-points* constantes não é viável, a extensão do projeto de controle com a

solução de recálculo representa uma alternativa intuitiva para atualização desses valores.

O exemplo da coluna de destilação avaliado representa um caso típico de controle dual, onde as variáveis apresentam uma forte interação, o que é intensificado por se operar em uma região de elevada pureza. A proposta de controle foi capaz de garantir o requisito mínimo de controle, que é a manutenção da estabilidade do processo, e a operação em torno de seu ótimo econômico. O sucesso desse resultado é devido ao emprego de malhas *feedback* e à atualização do *set-point* da composição de fundo e das referências para as variáveis manipuladas para o controle preditivo. Valem registrar que os desvios observados nos *set-points* de x_B , em relação ao esperado, podem ser devido ao emprego de uma função objetivo quadrática no lugar de uma função de dados econômicos. De qualquer forma, os resultados mostram o porquê da popularidade deste tipo de controle avançado em processos industriais, uma vez que é capaz de manejar restrições, não só nas variáveis de entrada como também nas de saída. A implementação do sistema MPC/TC representa uma ferramenta de trabalho que pode ser aplicada facilmente a outros exemplos, exigindo apenas que o modelo dos mesmos seja dado em espaço de estados.

6. Controle de um Reator de Polimerização

Este capítulo apresenta inicialmente um modelo matemático para descrever o comportamento dinâmico da polimerização de propeno em um reator contínuo, assumindo que três catalisadores podem ser usados. O modelo leva em conta balanços de massa, energia e de momentos do polímero, a partir dos quais algumas propriedades, como índice de fluidez (MI), podem ser obtidas. Uma vez que os catalisadores diferem quanto à sensibilidade a hidrogênio, a proposta do esquema de controladores PI considera que a malha de controle de MI pode ser reconfigurada, quando os catalisadores são trocados. Seguindo uma lista de produção, os resultados da simulação indicam que a estabilidade do reator pode ser mantida, mesmo durante os períodos de troca, e que as propriedades finais são alcançadas satisfatoriamente. É mostrado que a reconfiguração de controle representa uma alternativa para superar limites operacionais e recuperar a operabilidade do processo. Dessa forma, o modelo apresentado e o tratamento dado com a reconfiguração são as contribuições secundárias desta tese, já que não constam na literatura aberta abordagens semelhantes.

6.1. Introdução

Polipropileno (PP), polietileno (PE) e Policloreto de vinila (PVC) representam uma classe de materiais muito importantes desenvolvidos pela indústria química. Estes polímeros têm grande destaque devido à variabilidade de aplicações na manufatura de uma faixa larga de bens duráveis e de consumo. Isto significa que existe um forte interesse econômico, fazendo com que o mercado tenha margem e volumes elevados de

produção. Por exemplo, já em 1996, a produção mundial total foi aproximadamente de US\$ 50 bilhões; e, especificamente, a capacidade de produção de PP e PE foi de 140 milhões de toneladas (MOORE JR e LARSON, 1996; CHUM e SWOGGER, 2008). Uma projeção do Instituto Central de Plásticos de Engenharia e Tecnologia (CIPET), na Índia, indica que o consumo de plásticos e polímeros deve atingir a marca de 227 milhões de toneladas em 2015 (NAYAK, 2009). Neste cenário, a China é o maior consumidor de PP, com uma taxa anual de crescimento de consumo em torno de 10% (ZHANG *et al.*, 2010), indicando que este mercado pode crescer ainda mais.

Por estas razões, muitas pesquisas acadêmicas e industriais na Engenharia Química têm se dedicado ao entendimento das reações envolvidas e do comportamento dos reatores de polimerização. No caso da produção de PP, que é uma atividade estratégica resultante do refino de petróleo, existem diferentes tipos de processos de polimerização, incluindo tanques e reatores de fluxos empistonado operados principalmente em lama a baixa pressão, em massa a elevada pressão e em fase gasosa (MATTOS NETO e PINTO, 2001). Adicionalmente, para promover a reação, diferentes tipos de catalisadores podem ser usados para propósitos específicos, já que as propriedades do polímero dependem dos mecanismos cinéticos (CHO *et al.*, 2000; KIPARISSIDES, 1996). Entretanto, além do projeto do processo, as pesquisas também têm que buscar a determinação de políticas adequadas para alcançar e controlar a qualidade da produção, de modo a assegurar capacidade econômica competitiva.

Considerando esta importante tarefa, é comum encontrar processos projetados para operarem em múltiplos modos para produzir resinas com diferentes propriedades finais e atender a demanda. Esta flexibilidade na operação pode ser alcançada por diversas maneiras como, por exemplo, (1) usar uma série de reatores, que podem estar em diferentes condições como temperatura, pressão e concentração de hidrogênio; ou (2) fazer uso de diferentes catalisadores (CHO *et al.*, 2000). Os custos envolvidos na primeira opção podem ser altos, uma vez que os reatores podem requerer frequente manutenção e exigir a disponibilidade de grande espaço físico. Em relação à segunda maneira, ainda há um espaço aberto para o estudo dos problemas de controle causados pelo uso de misturas de catalisadores ou pela troca dos mesmos na planta, já que poucos trabalhos na literatura podem ser encontrados.

Diversos tipos de catalisadores foram propostos para produzir resinas de PP, sendo que o sistema de catalisadores Ziegler-Natta (ZN) é o mais conhecido. Por

exemplo, em 2001, aproximadamente 15 % da produção mundial empregavam este tipo de catalisador (MATOS *et al.*, 2001), possivelmente devido ao baixo custo. No entanto, como obter produtos com propriedades especiais tornou-se importante, uma geração de catalisadores metalocênicos (MC) para polimerização das olefinas foi desenvolvida. Na prática, a diferença entre os dois sistemas é que os catalisadores ZN são sensíveis à presença de hidrogênio no meio reacional. Além disso, os catalisadores MC apresentam alta atividade e permitem obter propriedades finais que podem ser inviáveis via catalisadores ZN. Por exemplo, um sistema metalocênico pode prover uma distribuição de peso molecular mais estreita e um índice de polidispersão próximo de dois, o que significa que as cadeias do polímero são formadas por sítios catalíticos idênticos (MARQUES *et al.*, 2002). As simulações apresentadas aqui mostram que alguns limites operacionais podem ser alcançados pelos dois tipos de catalisadores. Neste caso, de modo a manter a operabilidade do processo, torna-se necessário determinar uma estratégia apropriada para realizar a troca do catalisador no reator sempre que possível.

Entretanto, como a cinética destes catalisadores é diferente, é muito importante saber quais variáveis afetam o comportamento do processo. De acordo com o catalisador empregado, a operação pode responder diferentemente às variáveis manipuladas, fazendo com que a configuração de controle não seja única. Especificamente, o controle do índice de fluidez (MI) é realizado por meio da vazão de alimentação de hidrogênio (ALI *et al.*, 2006). No entanto, os catalisadores MC não respondem às variações da concentração de hidrogênio no reator, forçando o uso de outras variáveis para o controle de MI. No exemplo considerado aqui, o único grau de liberdade é a manipulação da temperatura do reator. Com isso, a malha de controle de MI é dependente do tipo de catalisador, implicando que o esquema de controle deve ter uma estratégia para realizar a reconfiguração desta malha.

A pesquisa presente neste capítulo foi desenvolvida no contexto exposto acima e buscou explorar o problema de controle da polimerização em massa do propileno, usando três catalisadores distintos com o requerimento de múltiplas qualidades de produto. Para este fim, é proposto um esquema de controle com duas camadas para a troca dos catalisadores em linha, com o intuito de atender às especificações, levando em conta as cinéticas envolvidas e restrições operacionais. Este esquema considera que se dispõe de uma lista de produção, que notifica as qualidades finais requeridas, o catalisador adequado para a operação e os instantes de tempo para realizar a mudança da

produção. De modo a realizar a lista, o sistema de controle deve fazer as mudanças necessárias na camada supervisória (atualizar os valores desejados e reconfigurar a malha de controle de MI para manipular a entrada adequada); ao passo que a camada regulatória não deve ser modificada. Como os resultados mostram, esta abordagem permite alcançar as propriedades finais desejadas e principalmente manter a operabilidade do processo.

Para tanto, este capítulo apresenta o processo de polimerização do propileno considerado como estudo de caso, para o qual foram propostos um modelo simples com a consideração simultânea da cinética dos catalisadores e as configurações de controle. De modo a desenvolver a estratégia para a troca dos catalisadores, alguns testes preliminares foram feitos para se verificar as oportunidades e limitação da operação com cada um dos catalisadores. Em seguida, são considerados quatro cenários operacionais para ilustrar o desempenho e a viabilidade da estratégia proposta. Por fim, são apresentadas algumas conclusões a partir dos resultados das simulações e as vantagens da proposta.

6.2. O processo de polimerização

O processo considerado foi inspirado no trabalho de PRATA *et al.* (2009). Estes autores apresentaram a descrição de um processo similar por meio de um modelo bastante simplificado para a reconciliação de dados com dados industriais em tempo real. A principal diferença é que esta tese considera simultaneamente a cinética das reações dos três catalisadores, o uso do balanço dos momentos do polímero para descrever as propriedades finais e o projeto da configuração de controle também.

É considerado um processo de polimerização em massa a partir da alimentação de propeno puro. A produção de PP é realizada em um reator de $3 \cdot 10^4$ L com agitação contínua e operado a alta pressão, permitindo que o propeno líquido seja usado como meio de suspensão para as partículas de polímero – tecnologia LIPP (*Liquid Pool Polymerization*). Além disso, como a polimerização é exotérmica, um condensador no topo do reator é usado para remover o calor.

Assume-se que são empregados os aditivos trietil-alumínio (TEA) e para-etoxi-etil-benzoato (PEEB), hidrogênio como agente de transferência de cadeia e três tipos de catalisadores distintos, incluindo dois compostos ZN e outro composto MC. Também se

considera que o monômero é alimentado em fase líquida, uma vez que o processo é operado em uma pressão aproximadamente de 30 atm. Os catalisadores e os outros agentes são introduzidos mediante suas correntes de alimentação também em fase líquida.

A corrente de saída do reator é basicamente composta de propeno não reagido e da resina PP. Na prática industrial, a lama proveniente do reator é separada por uma redução significativa da pressão de operação, a partir da qual o polímero é separado dos componentes voláteis (PRATA *et al.*, 2009). Neste caso, o propeno não reagido pode ser reciclado ou enviado para outro reator se houver uma série de reatores. No entanto, por razões específicas desta tese, os catalisadores e os demais aditivos são diluídos na massa de PP, sem necessidade de purificação adicional, e o propeno não reagido é descartado ou enviado para estocagem para processamento posterior.

O fluxograma simplificado para esse processo de polimerização está apresentado na Figura 6.1.

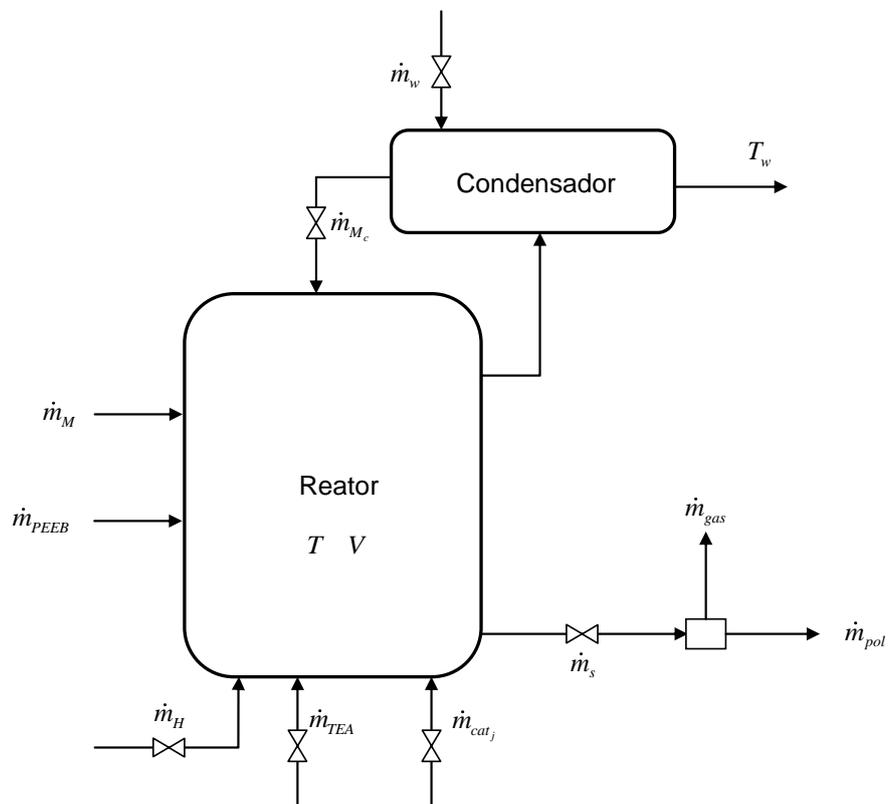


Figura 6.1 - Diagrama simplificado do reator de polimerização.

A Tabela 6.1 especifica os catalisadores considerados para a simulação e resume as principais características nominais dos polímeros que podem ser obtidos.

Assumindo que as taxas de reação são de primeira ordem em relação aos reagentes, o modelo cinético considerado para cada catalisador é apresentado na Tabela 6.2. Pode-se ver que o mecanismo inclui etapas clássicas de iniciação, propagação, transferência e terminação. Note que apenas os catalisadores ZN (nomeados de Cat₁ e Cat₂) têm a reação de transferência de cadeia com hidrogênio, que é importante para o controle do tamanho da cadeia do polímero. Por outro lado, o catalisador MC (Cat₃) é o único que apresenta reação de transferência de cadeia espontânea, regenerando o catalisador para o meio.

Tabela 6.1 - Catalisadores empregados na polimerização.

| Catalisador | Tipo | Propriedades finais do polímero |
|-------------|---------------|-----------------------------------|
| 1 | Ziegler-Natta | Alta massa molar e baixa rigidez |
| 2 | Ziegler-Natta | Baixa massa molar e baixa rigidez |
| 3 | Metaloceno | Alta massa molar e alta rigidez |

Tabela 6.2 - Resumo do modelo cinético proposto para a polimerização do propeno.

| Etapa | Reação | Taxa | Cat ₁ | Cat ₂ | Cat ₃ |
|-------------------------|--|---------------------------------|------------------|------------------|------------------|
| Iniciação da cadeia | $C_j + M \xrightarrow{k_{c,j}} P_{1,j}$ | $R_{c,j} = k_{c,j}MC_j$ | ● | ● | ● |
| Propagação da Cadeia | $P_{i,j} + M \xrightarrow{k_{p,j}} P_{i+1,j}$ | $R_{p,j} = k_{p,j}MP_{i,j}$ | ● | ● | ● |
| Transferência de Cadeia | $P_{i,j} + H_2 \xrightarrow{k_{tH,j}} D_{i,j} + C_j$ | $R_{tH,j} = k_{tH,j}H_2P_{i,j}$ | ● | ● | ○ |
| | $P_{i,j} + M \xrightarrow{k_{tM,j}} D_{i,j} + C_j$ | $R_{tM,j} = k_{tM,j}MP_{i,j}$ | ○ | ● | ○ |
| Desativação do Sítio | $P_{i,j} \xrightarrow{k_{ts,j}} D_{i,j} + C_j$ | $R_{ts,j} = k_{ts,j}P_{i,j}$ | ○ | ○ | ● |
| | $P_{i,j} \xrightarrow{k_{d,j}} D_{i,j}$ | $R_{d,j} = k_{d,j}P_{i,j}$ | ○ | ● | ● |

Observações: (1) o símbolo “●” indica a presença de uma determinada etapa na cinética de reação do catalisador j e “○” a ausência da mesma, onde j = 1, 2 e 3 (2) as constantes $k_{c,j}$, $k_{p,j}$, $k_{tH,j}$, $k_{ts,j}$, $k_{tM,j}$ e $k_{d,j}$ são representadas por expressões em função da temperatura do tipo de Arrhenius.

Nesta representação, C_j é a concentração de sítios ativos livres do catalisador j ; M , a concentração de monômero; H_2 , a concentração de hidrogênio; $P_{i,j}$ e $D_{i,j}$, as concentrações de polímero vivo e morto respectivamente, com tamanho de cadeia i a partir do catalisador j ; R e k , a taxa e a constante cinética respectivamente de cada reação; $j = 1, 2$ e 3 correspondem respectivamente a Cat_1 , Cat_2 e Cat_3 ; e $i = 1$ a ∞ se refere ao tamanho da cadeia polimérica.

6.3. Modelagem matemática

A partir dessas informações, o modelo matemático para a homopolimerização do propeno pode ser escrito, considerando os balanços de massa, dos momentos do polímero e de energia. Contudo, é importante enumerar as hipóteses simplificadoras que foram consideradas no desenvolvimento do modelo:

- a. Sistema reacional constituído de três fases (gasosa, líquida e sólida), as quais estão em equilíbrio termodinâmico;
- b. Reações ocorrem na fase sólida e não há efeitos difusivos significativos;
- c. Mistura perfeita e ideal (calor de mistura é nulo);
- d. Distribuição do tempo de residência idêntica à do CSTR ideal;
- e. Dinâmica desprezível nos tubos e conexões;
- f. Não é considerado acúmulo de massa na etapa de separação;
- g. O trabalho de eixo efetuado pelo sistema de mistura é considerado desprezível;
- h. Os termos relativos às energias cinética e potencial são desprezíveis;
- i. Não são considerados efeitos da aeração (borbulhamento);
- j. Aditividade de volumes.

6.3.1. Taxas de reação por componente

Baseando-se na taxa individual de cada etapa, são definidas abaixo as expressões das taxas de reação total de todos os componentes.

Monômero (R_M)

$$R_M = -\sum_{j=1}^3 R_{c,j} - \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^{\infty} R_{p,j} = -\sum_{j=1}^3 \left(k_{c,j} MC_j + k_{p,j} M \sum_{i=1}^{\infty} P_{i,j} \right) \quad 6.1$$

Catalisadores (R_{cat})

$$R_{cat_j} = -R_{c,j} + \sum_{i=1}^{\infty} (R_{tH,j} + R_{ts,j}) = -k_{c,j} MC_j + (k_{tH,j} H_2 + k_{ts,j}) \sum_{i=1}^{\infty} P_{i,j} \quad 6.2$$

Hidrogênio

$$R_H = -\sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^{\infty} R_{tH,j} = -\sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^{\infty} k_{tH,j} H_2 P_{i,j} \quad 6.3$$

Polímeros vivos (R_P)

A taxa de variação de todas as espécies é o resultado da soma das equações do balanço de $P_{i,j}$ para $i=1, \dots, \infty$.

Para $i=1$, vem que:

$$R_P|_{i=1} = \sum_{j=1}^3 \left[k_{c,j} MC_j - (k_{p,j} M + k_{tH,j} H_2 + k_{ts,j} + k_{d,j}) P_{1,j} \right] \quad 6.4$$

Para $i > 1$, tem-se que:

$$R_P|_{i>1} = \sum_{j=1}^3 \left[k_{p,j} M P_{i-1,j} - (k_{p,j} M + k_{tH,j} H_2 + k_{ts,j} + k_{d,j}) P_{i,j} \right] \quad 6.5$$

Polímeros mortos (R_D)

$$R_D = \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^{\infty} (R_{tH,j} + R_{ts,j} + R_{d,j}) = \sum_{j=1}^3 (k_{tH,j} H_2 + k_{ts,j} + k_{d,j}) \sum_{i=1}^{\infty} P_{i,j} \quad 6.6$$

6.3.2. Técnica dos Momentos

Em muitos casos, deseja-se caracterizar o polímero produzido apenas em termos dos valores médios, como a massa molar média, a polidispersão, o índice de fluidez, o teor de solúveis em xileno, etc. O uso do método dos momentos permite o cômputo de algumas dessas propriedades, a partir dos balanços de massa das espécies presentes no sistema. Por exemplo, multiplicando ambos os lados da Equação 6.5 por i^k e aplicando o operador somatório $\sum_{i=2}^{\infty}$, chega-se a:

$$\sum_{i=2}^{\infty} i^k R_P \Big|_{i>1} = \sum_{j=1}^3 \left[k_{p,j} M \sum_{i=2}^{\infty} P_{i-1,j} - (k_{p,j} M + k_{tH,j} H_2 + k_{ts,j} + k_{d,j}) \sum_{i=2}^{\infty} P_{i,j} \right] \quad 6.7$$

Somando a Equações 6.4 e 6.7,

$$R_P \Big|_{i=1} + \sum_{i=2}^{\infty} i^k R_P \Big|_{i>1} = \sum_{i=1}^{\infty} i^k R_P \Big|_{\forall i}$$

$$\sum_{i=1}^{\infty} i^k R_P \Big|_{\forall i} = \sum_{j=1}^3 \left[k_{c,j} M C_j + k_{p,j} M \left(\sum_{i=2}^{\infty} i^k P_{i-1,j} - \sum_{i=1}^{\infty} i^k P_{i,j} \right) - (k_{tH,j} H_2 + k_{ts,j} + k_{d,j}) \sum_{i=1}^{\infty} i^k P_{i,j} \right] \quad 6.8$$

O momento de ordem k de uma distribuição de tamanhos de cadeia de um polímero vivo, produzido pelo catalisador j , pode ser definido como:

$$\lambda_{k,j} = \sum_{i=1}^{\infty} i^k P_{i,j} \quad 6.9$$

Assim, tem-se que

$$R_{\lambda_k} = \sum_{i=1}^{\infty} i^k R_P \Big|_{\forall i}$$

$$R_{\lambda_k} = \sum_{j=1}^3 \left[k_{c,j} M C_j + k_{p,j} M \left(\sum_{i=2}^{\infty} i^k P_{i-1,j} - \lambda_{k,j} \right) - (k_{tH,j} H_2 + k_{ts,j} + k_{d,j}) \lambda_{k,j} \right] \quad 6.10$$

Sabendo que $\sum_{i=2}^{\infty} i^k P_{i-1,j} = \sum_{i=1}^{\infty} (1+i)^k P_{i,j}$, as expressões finais das taxas para os

momentos de ordem k , onde $k = 0, 1$ e 2 , para o polímero vivo são dadas por:

Momento de polímero vivo de ordem zero

$$R_{\lambda_0} = \sum_{j=1}^3 \left[k_{c,j} MC_j - (k_{tH,j} H_2 + k_{ts,j} + k_{d,j}) \lambda_{0,j} \right] \quad 6.11$$

Momento de polímero vivo de ordem um

$$R_{\lambda_1} = \sum_{j=1}^3 \left[k_{c,j} MC_j + k_{p,j} M \lambda_{0,j} - (k_{tH,j} H_2 + k_{ts,j} + k_{d,j}) \lambda_{1,j} \right] \quad 6.12$$

Momento de polímero vivo de ordem dois

$$R_{\lambda_2} = \sum_{j=1}^3 \left[k_{c,j} MC_j + k_{p,j} MV (2\lambda_{1,j} + \lambda_{0,j}) - (k_{tH,j} H_2 + k_{ts,j} + k_{d,j}) V \lambda_{2,j} \right] \quad 6.13$$

Mantendo o mesmo raciocínio utilizado para a determinação dos momentos do polímero vivo, podem-se encontrar as taxas para os momentos do polímero morto. Nesse caso, define-se a seguinte expressão como momento de ordem k de uma distribuição de tamanhos de cadeia de um polímero morto:

$$\mu_{k,j} = \sum_{i=1}^{\infty} i^k D_{i,j} \quad 6.14$$

Dessa forma, as taxas são dadas por:

Momento de polímero morto de ordem zero

$$R_{\mu_0} = \sum_{j=1}^3 (k_{tH,j} H_2 + k_{ts,j} + k_{d,j}) \lambda_{0,j} \quad 6.15$$

Momento de polímero morto de ordem um

$$R_{\mu_1} = \sum_{j=1}^3 (k_{tH,j} H_2 + k_{ts,j} + k_{d,j}) \lambda_{1,j} \quad 6.16$$

Momento de polímero morto de ordem dois

$$R_{\mu_2} = \sum_{j=1}^3 (k_{tH,j} H_2 + k_{ts,j} + k_{d,j}) \lambda_{2,j} \quad 6.17$$

6.3.3. Balanços de massa

Conforme a Figura 6.1, os balanços de massa dinâmicos para cada espécie do sistema podem ser dados pelas equações diferenciais abaixo.

Balanço de massa global

$$\rho \frac{dV}{dt} = \dot{m}_M + \dot{m}_H + \dot{m}_{TEA} + \dot{m}_{PEEB} - \dot{m}_S \quad 6.18$$

Na Equação 6.18, V é o volume da mistura reacional; \dot{m}_M , \dot{m}_H , \dot{m}_{TEA} , \dot{m}_{PEEB} e \dot{m}_S representam respectivamente as vazões mássicas de alimentação do monômero fresco, de hidrogênio, dos cocatalisadores (TEA e PEEB) e a de saída de lama do reator; a densidade do meio é representada por ρ .

Balanço de massa para os catalisadores

Segundo MELO (2000), o número de espécies com atividade catalítica ativa (ou catalisador total $j - Cat_j$) é determinado pela seguinte expressão: $Cat_j = \lambda_{0,j} + C_j$, em que $\lambda_{0,j} \gg C_j$. Dessa forma, os balanços dinâmicos do catalisador j são dados em função das espécies cataliticamente ativas, e não apenas dos sítios ativos livres:

$$\frac{d(V \cdot Cat_j)}{dt} = \dot{m}_{Cat,j} - \left(\frac{\dot{m}_S}{\rho} \right) Cat_j - V k_{d,j} Cat_j \quad 6.19$$

Nesta representação, Cat_j é a concentração das espécies catalíticas j ; $\dot{m}_{Cat,j}$, a vazão de alimentação do catalisador j ; $k_{d,j}$, a constante cinética de Desativação.

Balanço de massa para o monômero

$$\frac{d(V \cdot M)}{dt} = \frac{\dot{m}_M - w_M \dot{m}_S}{PM_M} - VM \sum_j (k_{p,j} + k_{tM,j}) Cat_j \quad 6.20$$

Balanço de massa para o hidrogênio

$$\frac{d(V \cdot H_2)}{dt} = \frac{\dot{m}_H}{PM_H} - \left(\frac{\dot{m}_s}{\rho} \right) H_2 - V H_2 \sum_j k_{tH,j} Cat_j \quad 6.21$$

Nas Equações 6.20 e 6.21, M e w_M são respectivamente a concentração e a fração mássica de monômero dentro do reator; H_2 , a concentração de hidrogênio; PM_M e PM_H , os pesos molares do monômero e do hidrogênio respectivamente; $k_{p,j}$, $k_{tM,j}$ e $k_{tH,j}$, as constantes cinéticas de propagação e de transferência de cadeia por monômero e por hidrogênio respectivamente.

Balanço de massa para o polímero

$$\frac{dPol}{dt} = R_{Pol} - \dot{m}_{pol} \quad 6.22$$

$$R_{Pol} = -PM_M \cdot V \cdot M \sum_j k_{p,j} Cat_j \quad 6.23$$

Balanço de massa para os cocatalisadores

$$\frac{dTEA}{dt} = \dot{m}_{TEA} - \left(\frac{TEA}{Pol} \right) \dot{m}_{pol} \quad 6.24$$

$$\frac{dPEEB}{dt} = \dot{m}_{PEEB} - \left(\frac{PEEB}{Pol} \right) \dot{m}_{pol} \quad 6.25$$

Balanço de massa nos divisores de corrente

$$\dot{m}_{Pol} = \dot{m}_S - \dot{m}_{gas} \quad 6.26$$

$$\dot{m}_{gas} = (1 - w_M) \dot{m}_S \quad 6.27$$

Nas representações acima, Pol , TEA e $PEEB$ são as massas de polímero e de cocatalisadores no reator, R_{Pol} , a taxa de polimerização; \dot{m}_{TEA} , \dot{m}_{PEEB} , \dot{m}_{pol} e \dot{m}_{gas} , as vazões de alimentação de TEA e PEEB e de saída de polímero produzido e de monômero e outros componentes não reagidos respectivamente.

Densidade do meio reacional

$$\rho = w_M \rho_M + w_{Pol} \rho_{Pol} \quad 6.28$$

Na Equação 6.28, w_{pol} , ρ_{pol} e ρ_M são respectivamente a fração mássica de polímero no reator e densidade de polímero e de monômero.

Balances de momentos do polímeros vivo e morto

$$\frac{d\lambda_{0,j}}{dt} = \frac{dCat_j}{dt} \quad 6.29$$

$$\frac{d(V \cdot \lambda_{1,j})}{dt} = -\left(\frac{\dot{m}_s}{\rho}\right)\lambda_{1,j} + V\left[k_{p,j}MCat_j - (k_{tH,j}H_2 + k_{ts,j} + k_{d,j})\lambda_{1,j}\right] \quad 6.30$$

$$\frac{d(V \cdot \lambda_{2,j})}{dt} = -\left(\frac{\dot{m}_s}{\rho}\right)\lambda_{2,j} + V\left[k_{p,j}M(Cat_j + 2\lambda_{1,j}) - (k_{tH,j}H_2 + k_{ts,j} + k_{d,j})\lambda_{2,j}\right] \quad 6.31$$

$$\frac{d(V \cdot \mu_{k,j})}{dt} = -\left(\frac{\dot{m}_s}{\rho}\right)\mu_{k,j} + (k_{tH,j}H_2 + k_{ts,j} + k_{d,j})\lambda_{k,j}V \quad 6.32$$

6.3.4. Balances de energia

Equação para a temperatura de saída da lama

Na maioria das reações de polimerização, a etapa que tem grande contribuição para o balanço de energia é a taxa de reação de propagação. Dessa forma, tem-se que

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{m}_M c_{p,M}(T_e) \cdot (T_e - T) + (-\Delta H)R_{Pol} - Q_1}{PM_M c_{p,M}(T)VM + c_{p,Pol}(T)Pol} \quad 6.33$$

$$Q_1 = \dot{m}_{M_c} \left[c_{p,M}(T) \cdot (T - T_c) + \lambda_M(T) \right]$$

Nesta representação, $c_{p,M}$ e $c_{p,pol}$ são respectivamente os valores específicos do monômero e do polímero; T_e , a temperatura de alimentação do monômero; T e T_c , as temperaturas de saída do reator e do condensador respectivamente; ΔH , o calor de reação; λ_M , o calor latente de vaporização do monômero; \dot{m}_{M_c} , a vazão de troca entre o reator e o condensador; Q_1 , a quantidade de calor total retirada pelo condensador de topo.

Equação para a temperatura do condensador

$$\frac{dT_c}{dt} = \frac{Q_1 - Q_2}{M_c \cdot c_{p,M}(T_c)} \quad 6.34$$

Equação para a temperatura da camisa

$$\frac{dT_w}{dt} = \frac{\dot{m}_w c_{p,w}(T_{we}) \cdot (T_{we} - T_w) + Q_2}{M_{cw} \cdot c_{p,w}(T_w)} \quad 6.35$$

$$Q_2 = UA(T_c - T_w) \quad 6.36$$

Nas Equações 6.34 a 6.36, T_{we} , T_w e T_c são respectivamente as temperaturas de entrada e saída de água na camisa de refrigeração e a do interior do condensador; \dot{m}_w , a vazão de alimentação de água; M_c e M_{cw} , as massas de monômero e de água respectivamente no condensador e na camisa, admitidas constantes; $c_{p,w}$, o calor específico da água; UA , o coeficiente global de transferência de calor; Q_2 , a quantidade de calor total retirada pela camisa de refrigeração do condensador.

Algumas propriedades físicas, como densidade, calor específico e calor latente de vaporização, são funções conhecidas da temperatura conforme as Equações 6.37 a 6.43 (MATTOS NETO e PINTO, 2000; WILKINSON e DOLE, 1962).

$$\rho_M(T) = -1,0878 \cdot 10^{-5} T^2 + 4,7376 \cdot 10^{-3} T + 6,0983 \cdot 10^{-2} \quad 6.37$$

$$\rho_{Pol}(T) = -2,0888 \cdot 10^{-6} T^2 + 9,5767 \cdot 10^{-4} T + 8,0950 \cdot 10^{-1} \quad 6.38$$

$$c_{p,M}(T) = 1,98685 \cdot 10^{-3} \cdot \delta(T)^{-2} + 0,646454 - 0,846918 \cdot \delta(T) + 1,3177 \cdot \delta(T)^2 - 3,00842 \cdot \delta(T)^3 + 14,04220 \cdot \delta(T)^4 - 17,4783 \cdot \delta(T)^5 \quad 6.39$$

$$c_{p,pol}(T) = 0,3669 + 0,00242(T - 273,15) \quad 6.40$$

$$c_{p,w}(T) = 3,6653 - 2,77195 \cdot 10^{-2} T_w + 1,07756 \cdot 10^{-4} T_w^2 - 1,87210 \cdot 10^{-7} T_w^3 - 1,24269 \cdot 10^{-10} T_w^4 \quad 6.41$$

$$\lambda_M(T) = \frac{2,6380 \cdot 10^7}{4,1855 \cdot PM_M} \delta(T)^{0,37261} \quad 6.42$$

$$\delta(T) = 1 - \frac{T}{364,9} \quad 6.43$$

6.3.5. Propriedades finais

Geralmente, utilizam-se algumas propriedades do polímero para caracterizá-lo como o peso molecular médio, a polidispersão, a composição, o índice de fluidez, o teor de solúveis em xileno (XS), entre outros. Por exemplo, XS indica rigidez do material, uma vez que este teor está relacionado à fração de material atático na resina final. O peso molecular médio mássico (M_w), o peso molecular médio numérico (M_n) e o índice de polidispersão (PD) podem ser obtidos a partir dos balanços de momento do polímero (MATTOS NETO *et al.*, 2005). Do mesmo modo, uma equação empírica para MI é dada (LATADO *et al.*, 2001) e um outra baseada em estudos dinâmicos foi proposta recentemente para XS (MACHADO e PINTO, 2011). Estas propriedades são calculadas por meio das Equações 6.44 a 6.48.

$$M_w = PM_M \frac{\sum_{j=1}^3 (\lambda_{2,j} + \mu_{2,j})}{\sum_{j=1}^3 (\lambda_{1,j} + \mu_{1,j})} \quad 6.44$$

$$M_n = PM_M \frac{\sum_{j=1}^3 (\lambda_{1,j} + \mu_{1,j})}{\sum_{j=1}^3 (\lambda_{0,j} + \mu_{0,j})} \quad 6.45$$

$$PD = M_w / M_n \quad 6.46$$

$$\log(MI) = a_1 \log(M_w) + a_2 \quad 6.47$$

$$\frac{dXS}{dt} = \frac{R_p}{Pol} \left[XS^R + K_{XS} \cdot \left(\frac{TEA}{PEEB} - 1 \right) - XS \right] \quad 6.48$$

Após a obtenção do modelo dinâmico para o processo de polimerização, o mesmo foi implementado em MATLAB, uma vez que este ambiente computacional oferece ferramentas para resolução numérica das equações diferenciais e para visualização gráfica. Especificamente, a rotina de integração selecionada é a *ode15s.m*, por ser tratar de um programa adequado para sistemas de equações rígidas, uma vez que as mudanças dinâmicas associadas às espécies catalíticas intermediárias são mais rápidas que àquelas referentes aos outros estados do modelo (SHAMIRI *et al.*, 2010).

Para tanto, foram empregadas as constantes cinéticas presentes na Tabela 6.3 para a expressão de Arrhenius (Equação 6.49), considerando que os valores da energia de ativação, em cada uma das etapas das reações, são iguais para os três catalisadores.

Tabela 6.3 - Constantes cinéticas das reações de polimerização do propeno.

| Etapa | Energia de ativação [10 ³ cal·Kg ⁻¹] | | Fator pré- exponencial | Catalisador | | |
|---------------|--|-----|---|---------------------|----------------------|----------------------|
| | | | | Cat ₁ | Cat ₂ | Cat ₃ |
| Iniciação | E _c | 5,0 | k _{c0} [L·mol _{cat} ⁻¹ ·h ⁻¹] | 1·10 ⁴ | 1·10 ⁴ | 1,2·10 ⁴ |
| Propagação | E _p | 5,0 | k _{p0} [L·mol _{cat} ⁻¹ ·h ⁻¹] | 7,5·10 ³ | 5·10 ³ | 8,15·10 ³ |
| Transferência | E _{tH} | 7,0 | k _{tH0} [L·mol _{cat} ⁻¹ ·h ⁻¹] | 5·10 ² | 7,5·10 ² | - |
| | E _{tM} | 7,0 | k _{tM0} [L·mol _{cat} ⁻¹ ·h ⁻¹] | - | 27,5 | - |
| | E _{ts} | 7,0 | k _{ts0} [h ⁻¹] | - | - | 18,5 |
| Desativação | E _d | 7,0 | k _{d0} [h ⁻¹] | - | 2,0·10 ⁻² | 5,0·10 ⁻² |

$$k(T) = k_0 \cdot \exp \left[- \left(\frac{E}{R} \right) \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}} \right) \right] \quad 6.49$$

Os parâmetros adicionais para o modelo do processo e para os catalisadores utilizados são mostrados na Tabela 6.4 e Tabela 6.5. Note que os parâmetros necessários para o cálculo de XS são diferentes, indicando que cada catalisador é capaz de produzir um polímero com grau de rigidez específico.

De modo a manter a operação do processo com valores viáveis, um conjunto de restrições apresentadas na Tabela 6.6 foi também implementado para levar em conta ações de controle inadequadas e representar limites operacionais.

Tabela 6.4 - Parâmetros do processo usados na simulação.

| Parâmetro | Descrição | Valor | |
|------------------|--|-------------------|--|
| M_c | massa total no condensador | $1 \cdot 10^3$ | Kg |
| M_{cw} | massa total de líquido refrigerante | $1 \cdot 10^3$ | Kg |
| PM_H | peso molecular do hidrogênio | 2,0 | $\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$ |
| PM_M | peso molecular do propeno | 42,08 | $\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$ |
| R | constante universal dos gases | 1,987 | $\text{cal} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ |
| T_{ref} | temperatura de referência | 343,15 | K |
| UA | coeficiente global de transferência de calor | $5,5 \cdot 10^3$ | $\text{Kcal} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{h}^{-1}$ |
| ΔH | calor da reação de propagação | $-142 \cdot 10^3$ | $\text{cal} \cdot \text{Kg}^{-1}$ |

Tabela 6.5 - Parâmetros adicionais para o cálculo de XS.

| Parâmetro | Catalisador | | |
|--------------------------------|------------------------|------------------------|------------------------|
| | Cat₁ | Cat₂ | Cat₃ |
| XS _R [%p/p] | 3,10 | 4,80 | 0,30 |
| K _{XS} [adimensional] | 2,25 | 3,50 | 4,25 |

Tabela 6.6 - Restrições operacionais para simulação.

| Variável | Limite inferior | Limite superior |
|-----------------|------------------------|------------------------|
| \dot{m}_H | 0 | 3,5 |
| \dot{m}_w | 0 | $4,0 \cdot 10^4$ |
| \dot{m}_{M_c} | 0 | $1,5 \cdot 10^6$ |
| T | 335 | 360 |

6.4. Configuração de controle

O sistema de controle foi dividido em duas camadas hierárquicas, que estão separadas pela escala de tempo para aplicação da ação de controle. A camada inferior de controle (regulatório) é responsável em assegurar a estabilidade do processo, mantendo algumas variáveis em torno de seus valores nominais. Esta camada tem que ser realizada mais frequentemente que a camada superior de controle (supervisório) para atenuar os efeitos de perturbações sobre a estabilidade. Para esta proposta, foi considerado que os tempos de amostragem das camadas regulatória e supervisória são iguais a 1 e 10 min respectivamente, que concordam com o tempo necessário para obter as medidas de qualidade em uma planta real (RICHARDS e CONGALIDIS, 2006). Deste modo, a camada superior é ativada a cada dez vezes que a inferior é realizada.

A camada regulatória é composta pelas malhas de controle do volume do reator e das temperaturas do reator e de saída do líquido refrigerante, empregando como variáveis manipuladas respectivamente as vazões de lama do reator, de propeno condensado e de líquido refrigerante. Além disso, de modo a manter características adequadas para a mistura reacional, a produtividade definida por \dot{m}_{Pol}/\dot{m}_M foi também controlada nesta camada por meio da manipulação da vazão de alimentação do catalisador.

Visto que a camada supervisória está relacionada à manutenção da qualidade final, a mesma provê as ações de controle para alcançar os valores desejados de XS e MI. Para o controle da primeira qualidade, é suficiente considerar a manipulação da razão $\dot{m}_{TEA}/\dot{m}_{PEEB}$, uma vez que as massas de TEA e PEEB dentro do reator afetam XS em estado estacionário. Em relação a MI, a configuração de controle depende do tipo de catalisador empregado na operação. A vazão de alimentação de hidrogênio tem que ser usada como variável manipulada para os catalisadores ZN. Por outro lado, no caso do catalisador MC, esta variável deve ser substituída pelo *set-point* da temperatura do reator. Na verdade, este é o único grau de liberdade remanescente que tem efeito sobre MI.

Com esta topologia, a malha de controle de MI, durante a operação com o catalisador MC, é a malha principal em um arranjo de controle em cascada com a

manutenção da temperatura do reator. Na prática industrial, a temperatura do reator também pode ser modificada para controlar o índice de fluidez. Entretanto, isto é evitado quando se emprega catalisadores ZN, uma vez que a estrutura do catalisador pode ser afetada.

As estruturas de controle propostas podem ser vistas nas Figura 6.2 e Figura 6.3, que representam respectivamente a configuração de controle para operação com os catalisadores ZN e MC.

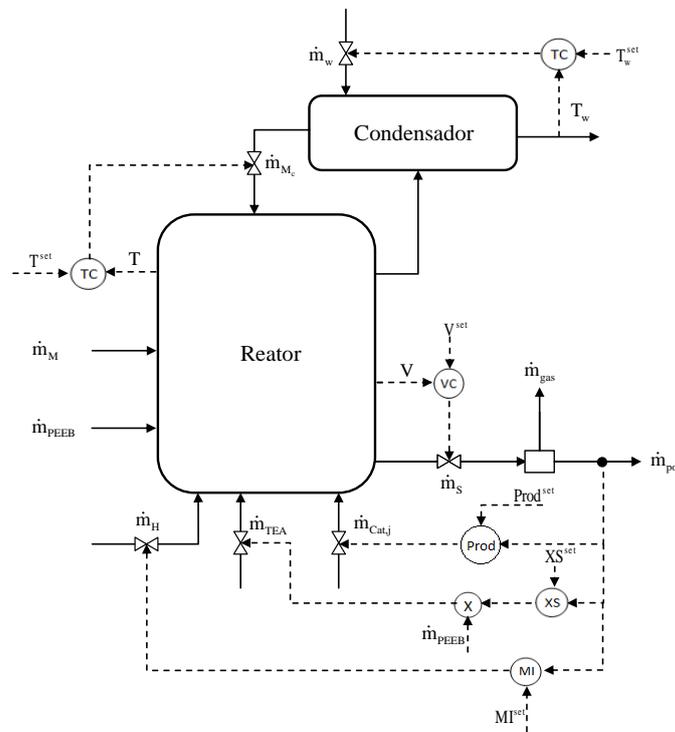


Figura 6.2 - Representação da estrutura da controle para a operação os catalisadores Ziegler-Natta.

Os parâmetros usados nos controladores PI são mostrados na Tabela 6.7. Os mesmos foram determinados por meio da observação do comportamento das variáveis de estados frente a mudanças nas variáveis de entrada. Desta maneira, os sinais e a magnitude dos ganhos dos controladores foram encontrados e refinados ao longo das simulações. Os controladores PI foram implementados de acordo com o algoritmo de velocidade discreto dado pela Equação 6.50. Vale salientar que problemas de estabilidade, que possivelmente existam devidos à possibilidade de respostas inversas, por exemplo, não foram investigados.

$$u(t_k) = u(t_{k-1}) + K_C \left(e(t_k) - e(t_{k-1}) + T_s \frac{e(t_k)}{\tau_I} \right)$$

6.50

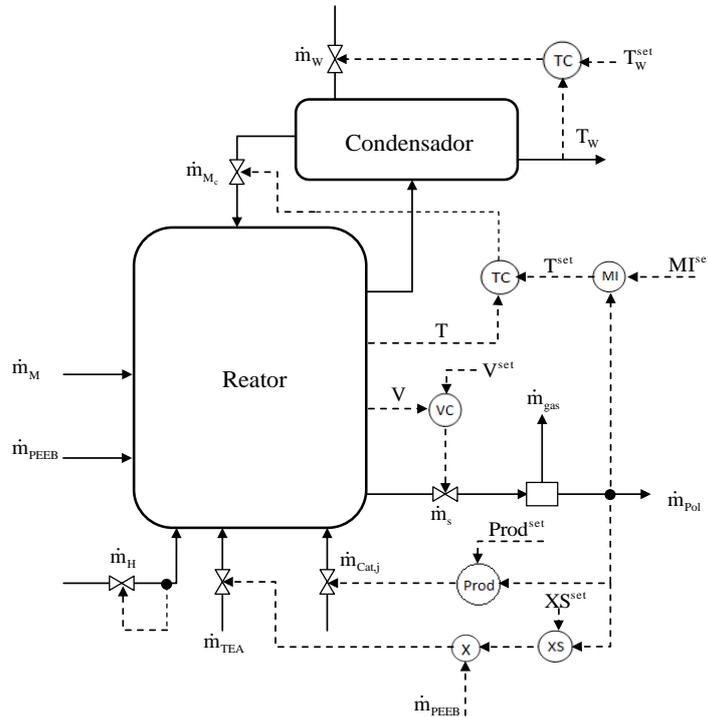


Figura 6.3 - Representação da estrutura da controle para a operação com o catalisador metalocênico.

Tabela 6.7 - Parâmetros dos controladores PI.

| Parâmetro | Malhas de controle | | | | | | |
|--------------|-------------------------------|-----------------------------------|---------------------------------|---|--|--------------------------------|------------------------------|
| | $V \leftrightarrow \dot{m}_S$ | $T \leftrightarrow \dot{m}_{M_c}$ | $T_w \leftrightarrow \dot{m}_w$ | $XS \leftrightarrow \frac{\dot{m}_{TEA}}{\dot{m}_{PEEB}}$ | $Prod \leftrightarrow \dot{m}_{Cat,j}$ | $MI \leftrightarrow \dot{m}_H$ | $MI \leftrightarrow T_{set}$ |
| K_C | $-10^{a)}$ | $-5 \cdot 10^2^{b)}$ | $-1 \cdot 10^3^{b)}$ | $0,25^{c)}$ | $0,015^{d)}$ | $0,05^{e)}$ | $2,5^{f)}$ |
| τ_I [h] | 10 | 10 | 2,5 | 2,0 | 0,2 | 1,2 | 0,5 |

Observação: (1) a sintaxe $y \leftrightarrow u$ significa que y é controlado pela manipulação de u . (2) a unidade do ganho K_C para cada malha é ^{a)} $\text{Kg} \cdot \text{L}^{-1} \cdot \text{h}^{-1}$; ^{b)} $\text{Kg} \cdot \text{L}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$; ^{c)} adimensional; ^{d)} $\text{mol} \cdot \text{h}^{-1}$; ^{e)} $10 \text{ min} \cdot \text{Kg} \cdot \text{h}^{-1} \cdot \text{g}^{-1}$; ^{f)} $10 \text{ min} \cdot \text{K} \cdot \text{g}^{-1}$. (3) as duas últimas colunas apresentam as sintonias para cada malha de controle de MI.

6.5. Testes preliminares

Os testes iniciais consideram o rastreamento simultâneo das três especificações nominais do polímero (Tabela 6.8) com apenas um catalisador, em vez de se efetuar a troca do mesmo em linha, com o intuito de verificar as oportunidades e limitações de cada um para a produção. De modo a evitar mudanças bruscas nas variáveis manipuladas entre os tempos de amostragem, foi também usada uma restrição na taxa de variação relativa dessas variáveis.

Tabela 6.8 - Especificações nominais do polímero para cada catalisador.

| Catalisador | Índice de fluidez [g·(10 min) ⁻¹] | Extraíveis em xileno [%p/p] |
|--------------------|---|---------------------------------------|
| Cat ₁ | 10 | 3,0 |
| Cat ₂ | 20 | 5,0 |
| Cat ₃ | 5 | 0,5 |

As respostas obtidas podem ser vistas nas Figura 6.4 a Figura 6.8. De modo geral, a operação é estável com todos os catalisadores, mesmo quando as especificações são diferentes de seus valores nominais. A manipulação das variáveis de entrada foi suave e o uso dos mesmos controladores PI mostrou que os parâmetros implementados conferem certo grau de robustez às estruturas de controle.

A operação com os catalisadores ZN é versátil no atendimento das especificações do produto final. Vale a pena notar que uma menor quantidade de Cat₁ é necessária para manter o controle da produtividade (Figura 6.4). Entretanto, este catalisador requer uma vazão de alimentação de hidrogênio maior para o controle de MI (Figura 6.5 e Figura 6.6). A razão que provavelmente promove este evento é que a relação entre as constantes cinéticas de propagação e de transferência de cadeia por hidrogênio é maior para Cat₁, isto é, $k_{p,1}/k_{tH,1} = 15$ e $k_{p,2}/k_{tH,2} = 6,67$ na temperatura de reação. Isto implica que quanto maior a probabilidade de propagação da cadeia, maior é a quantidade de hidrogênio requerida para controlar o tamanho molecular.

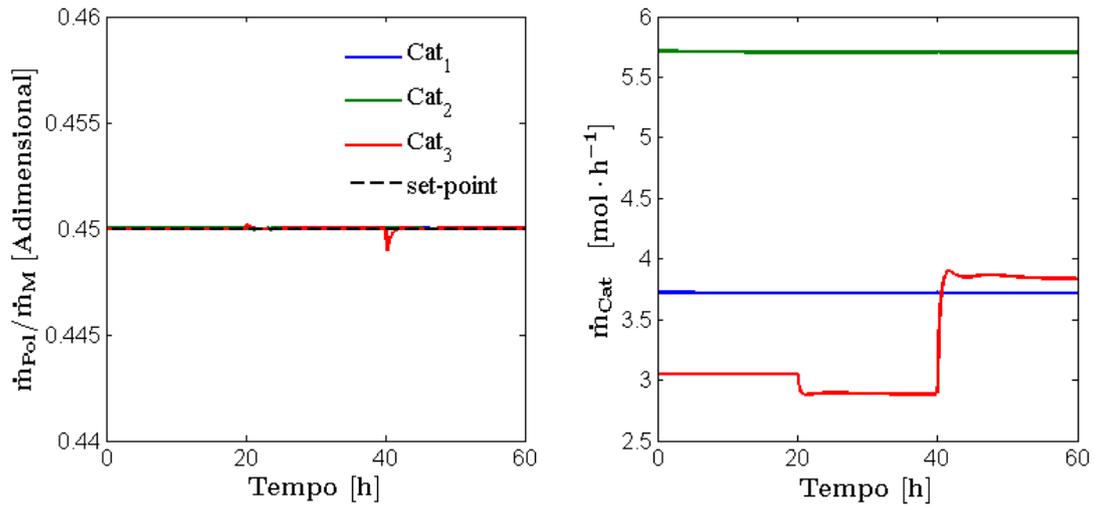


Figura 6.4 – Manutenção da produtividade operacional e a ação de controle sobre a alimentação dos os catalisadores.

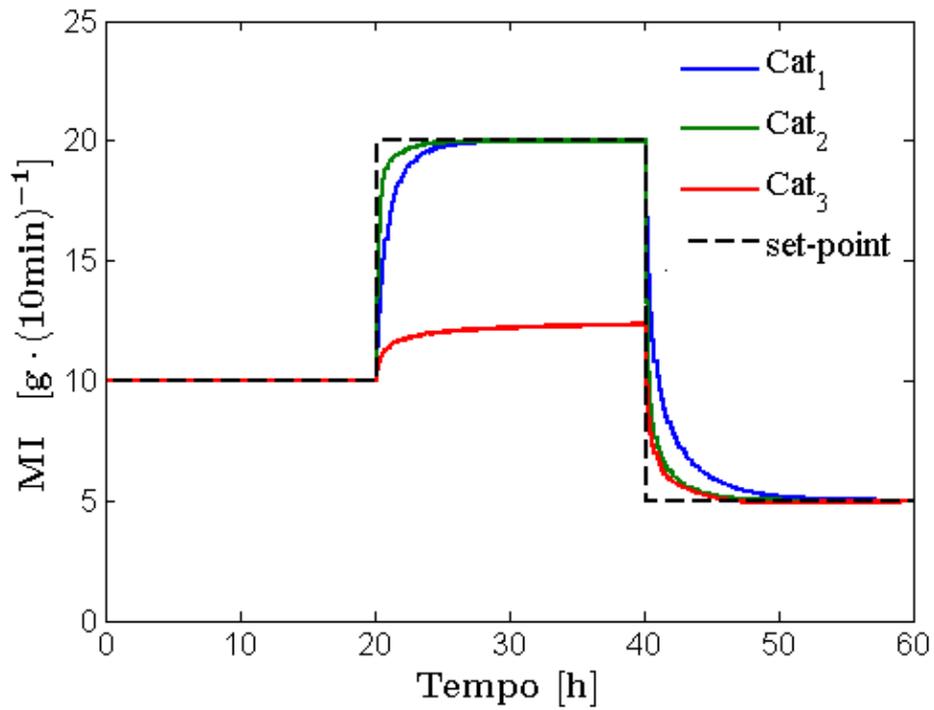


Figura 6.5 – Comportamento dinâmico do índice de fluidez frente às especificações.

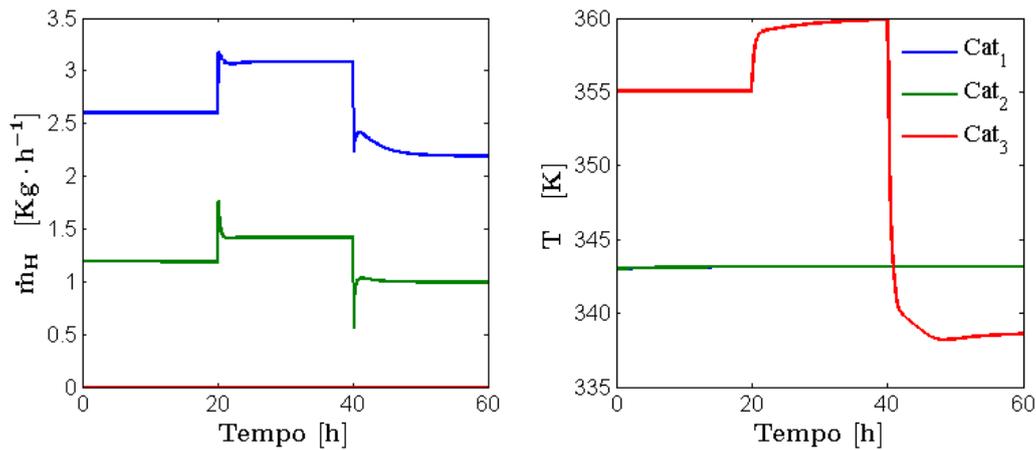


Figura 6.6 – Manipulação da alimentação de hidrogênio durante a operação com catalisadores ZN e da temperatura do reator quando Cat₃ é usado.

Quando se trabalha com Cat₃, a produtividade é afetada superficialmente pela manipulação da temperatura do reator como pode ser observado na Figura 6.4. Entretanto, modificar a vazão de alimentação deste catalisador é suficiente para assegurar a manutenção da produtividade. A resposta de MI mostra que quanto maior é seu valor desejado, maior deve ser a temperatura operacional, o que força o reator a operar nas proximidades do valor máximo de temperatura. Quando a especificação de $20 \text{ g} \cdot (10 \text{ min})^{-1}$ é imposta para o polímero, uma importante limitação surge como visto na Figura 6.5, já que a temperatura do reator atinge seu valor máximo ($T_{\text{max}} \leq 360 \text{ K}$). Neste ponto, a restrição da temperatura, não só coloca um limite de estabilidade da mistura reacional, mas também um limite operacional para Cat₃, que permite um valor máximo para MI de $12,35 \text{ g} \cdot (10 \text{ min})^{-1}$. Como resultado, a impossibilidade de produzir um polímero com maiores valores de MI representa uma razão para trocar em linha o catalisador empregado. Neste caso, a reconfiguração da malha de controle de MI deve ser levada em conta do mesmo modo.

Em relação ao atendimento das especificações de XS, a Figura 6.7 mostra que o controle foi adequado quando a especificação coincidiu com o valor nominal do catalisador empregado, levando a uma razão $\dot{m}_{TEA} / \dot{m}_{PEEB}$ próxima da unidade (Figura 6.8). Entre os catalisadores, a operação com Cat₃ é a que exibiu transição mais rápida, o que implica em uma menor quantidade de produto fora de especificação.

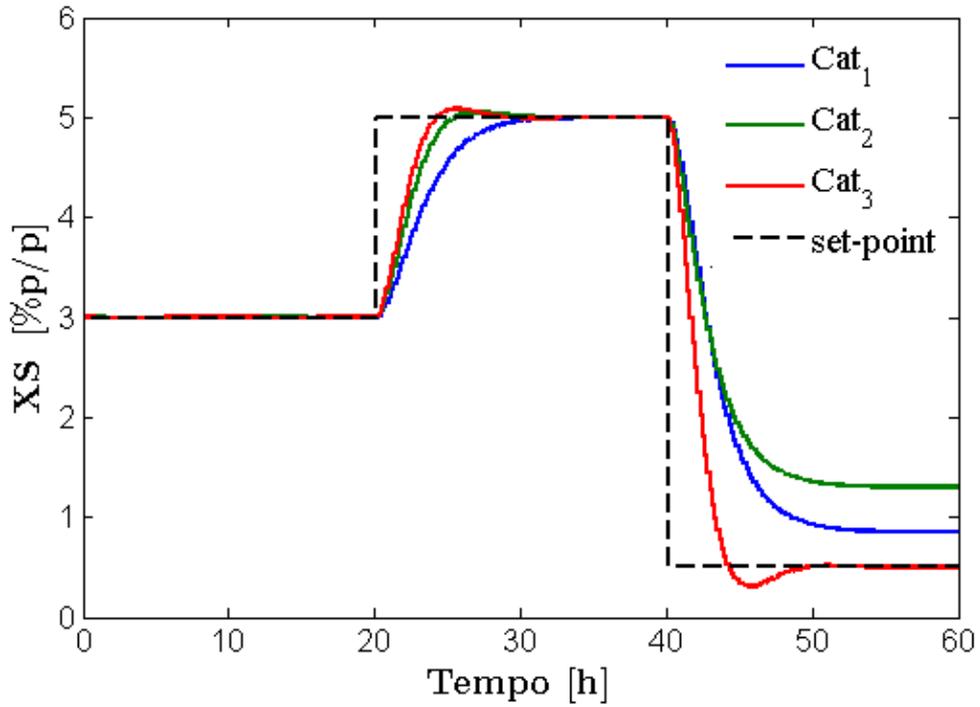


Figura 6.7 – Comportamento dinâmico de XS frente às especificações, com a observação de desvio estacionários com Cat_1 e Cat_2 .

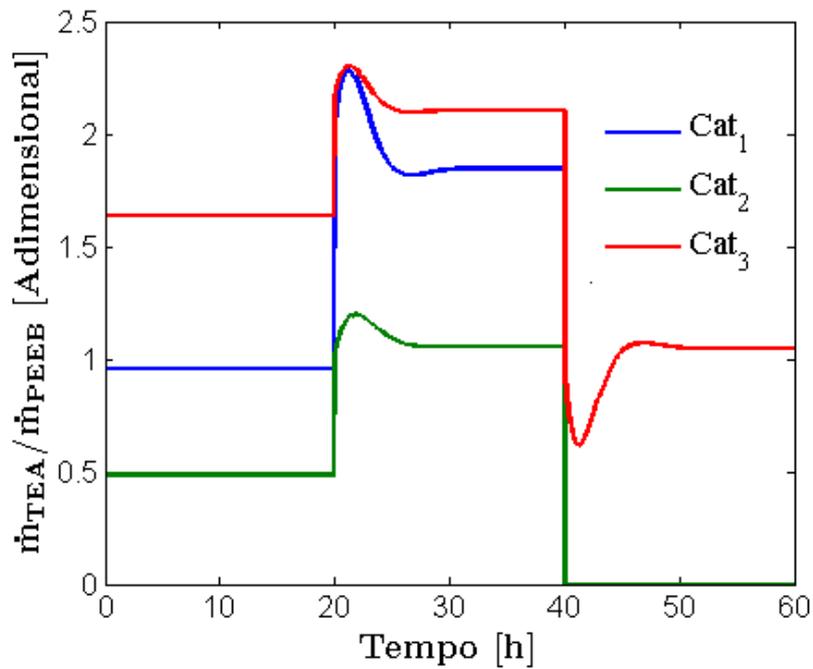


Figura 6.8 – Manipulação da razão $\dot{m}_{TEA} / \dot{m}_{PEEB}$ para o controle de XS .

A resposta de XS revela outra importante limitação quando é desejado obter um polímero com 0,5 %p/p, visto que há um desvio estacionário com Cat₁ ou Cat₂, cujos valores finais foram 0,85 e 1,30 %p/p respectivamente. De acordo com o balanço estacionário de XS, em ambos os casos seria necessário operar com uma razão mássica TEA/PEEB negativa no reator para alcançar 0,5 %p/p. Neste sentido, como o menor valor viável é zero, a malha de controle fecha a vazão de alimentação de TEA após o tempo de 40 horas. Deve ser notado que esta limitação não é provinda da configuração de controle, mas somente das propriedades do catalisador, uma vez que todas as especificações de XS possíveis com Cat₃ são obtidas sem desvio estacionário. No entanto, o custo a ser pago é o uso de uma maior vazão de cocatalisador quando se exigem todas as especificações de XS com Cat₃.

A partir destes resultados preliminares, algumas questões práticas e orientações podem ser resumidas (Tabela 6.9).

Tabela 6.9 – Resumo das propriedades dos catalisadores.

| Catalisador | Discussão |
|--------------------|--|
| Cat ₁ | Este catalisador com cinética de um Ziegler-Natta é indicado para a produção de um polipropileno com larga faixa de massa molar e rigidez. Contudo, seu uso requer uma quantidade maior de hidrogênio quando comparado a Cat ₂ . Em relação à rigidez, é recomendado quando esta propriedade deve ser ajustada em valores baixos a moderados, uma vez que manter a razão mássica TEA/PEEB em torno da unidade é suficiente. Isto é adequado para evitar que a controlabilidade seja afetada no caso de haver flutuações na alimentação de PEEB. |
| Cat ₂ | Com cinética de Ziegler-Natta, este catalisador também torna disponíveis polímeros com larga faixa de massa molar e rigidez. Como exige o emprego de vazões menores de hidrogênio para controlar o índice de fluidez, é indicado para quando se deseja reduzir o uso deste componente. Quanto à rigidez, preferencialmente produz polímeros com valores baixos (XS alto) e quando for necessário aumentar esta propriedade, um desvio estacionário importante pode surgir. |
| Cat ₃ | Este catalisador tem cinética de um metaloceno e é adequado para a produção de polipropileno com altos valores de massa molar e rigidez (valores baixos de MI e XS). Na verdade, a necessidade de se manter a temperatura do reator em níveis maiores, com o objetivo de controlar a atividade do catalisador, é o que limita a capacidade de aumentar o índice de fluidez. No que se refere à rigidez, qualquer valor especificado pode ser obtido; entretanto, isto pode ser custoso já que o consumo de cocatalisador pode aumentar. |

A principal conclusão neste ponto é que, se for desejado produzir um polímero com diferentes propriedades, quaisquer dos catalisadores podem ser empregados. Por exemplo, quando o objetivo é produzir uma resina com valores baixos de XS e MI, é interessante trabalhar com Cat₃, e no caso de MI alto, Cat₁ e Cat₂ podem ser usados. Outro exemplo é usar Cat₂ no lugar de Cat₁ quando é preciso reduzir o consumo de hidrogênio, enquanto se mantém um valor alto de MI. Finalmente, de modo a satisfazer o requerimento de controle rígido das propriedades finais, é necessário levar em consideração as limitações impostas pelo processo e principalmente as propriedades dos catalisadores. Portanto, quando for preciso operar o reator em um largo espaço operacional, uma estratégia deve ser estabelecida para realizar a troca dos catalisadores na planta, considerando a estabilidade do processo e a reconfiguração da malha de controle de MI.

6.6. Esquema de controle proposto

Para a proposta de um esquema de controle, é considerado que a operação é realizada com a alimentação de somente um catalisador por vez (ou seja, não é possível a alimentação de um mistura de catalisadores) e que a troca de catalisador em linha é possível. Além da motivação mostrada acima, podem existir diferentes razões para se realizar a troca como, por exemplo, o decaimento da atividade catalítica e problemas de sensibilidade a hidrogênio (quando se tem que aumentar muito sua concentração para obter pouca variação em MI). Entretanto, este estudo considera somente os casos em que a troca é necessária para satisfazer os requerimentos das propriedades finais ou recuperar operabilidade quando da perda de um grau de liberdade causado por restrição ativa.

O esquema proposto para a troca dos catalisadores envolve diretamente a reconfiguração da malha de controle de MI. Visto que as cinéticas são diferentes, duas estratégias são propostas de acordo com o comportamento imposto ao processo e às mudanças operacionais envolvidas. Vale a pena ressaltar que a temperatura do reator é uma variável importante para estabilidade do processo. Então, durante o desenvolvimento do esquema de reconfiguração, somente as alternativas que não comprometem seu controle e permitem transição suave foram consideradas. O esquema de reconfiguração final é uma abordagem baseada em atributos lógicos, uma vez que

requer que certas condições sejam atendidas, antes que o novo catalisador seja alimentado e a campanha seja realizada efetivamente.

6.6.1. Estratégia A

Quando é desejado empregar o catalisador Cat_3 , poder-se-ia sugerir alimentar este catalisador apenas no instante em que MI atinge sua nova especificação ainda usando o catalisador da campanha anterior (Cat_1 ou Cat_2). Porém, como o controle de MI tem que ser feito pela manipulação da temperatura do reator, poderia haver problemas com o balanço de energia do processo. Então, é considerado que Cat_3 é alimentado assim que a nova campanha é requerida. Com o objetivo de realizar esta tarefa, o controle da produtividade deve manipular a taxa de alimentação de Cat_3 , enquanto que a corrente de hidrogênio e a alimentação do catalisador anterior devem ser cessadas por meio de um filtro de primeira ordem. Neste ponto, seria possível reduzir bruscamente a alimentação de hidrogênio, mas isto não é considerado para evitar que MI seja afetado pelas espécies catalíticas ativas de Cat_1 ou Cat_2 ainda presentes no reator durante a transição.

No início da troca, como a concentração de hidrogênio é reduzida e as espécies catalíticas aumentam no reator, espera-se que o MI seja reduzido, o que leva a um produto fora de especificação. Na verdade, a estratégia ideal seria levar o processo à temperatura de operação da nova campanha com Cat_3 . Entretanto, é impossível definir antecipadamente qual seria a temperatura correta que garante a qualidade da produção. De qualquer maneira, espera-se que a manutenção de MI seja tomada pelo controle da temperatura depois da reconfiguração.

6.6.2. Estratégia B

Para os momentos em que Cat_1 ou Cat_2 devem ser empregados no lugar de Cat_3 , a definição do caminho de volta não é tão direta. A primeira ideia é levar a temperatura do reator para o valor nominal de operação dos catalisadores ZN. No entanto, não há grau de liberdade para realizar isto, e mesmo que existisse, poderia afetar o controle de MI. Para contornar este problema, outra ideia é implementar a troca do catalisador mantendo as mesmas especificações da campanha prévia com Cat_3 , e enviar as especificações da nova campanha posteriormente. Esta estratégia considera

que o novo cenário pode ser mantido na mesma temperatura do mesmo modo; mas, se for necessário, o *set-point* da temperatura pode ser também atualizado para seu valor nominal.

Assim, o controle de MI em torno do valor desejado pode ser reconfigurado, com a manipulação da vazão de alimentação de hidrogênio. Entretanto, se este componente for apenas alimentado ao reator quando a reconfiguração é ativada, pode haver um transiente significativo no controle de MI. A Figura 6.9 ilustra este fato, para uma janela de 12 horas de operação. Neste caso, há uma mudança de *grade* de MI de 7,5 para $15 \text{ g} \cdot (10 \text{ min})^{-1}$ no instante de 30 horas.

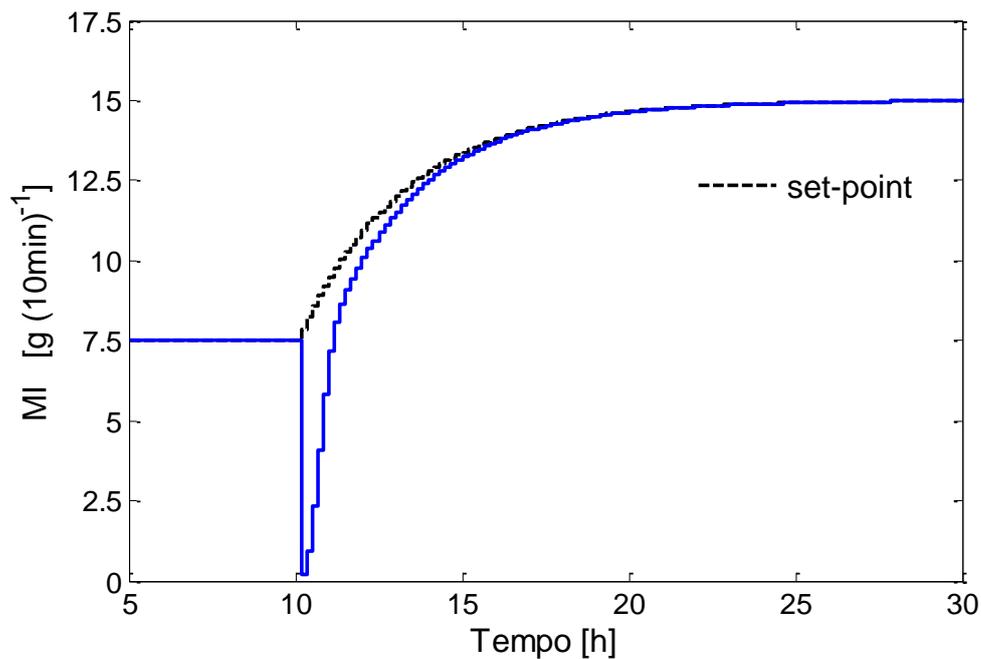


Figura 6.9 – Exemplo de uma produção fora de especificação durante a troca de catalisador, devido a quantidade de hidrogênio no reator.

Note que ao alimentar hidrogênio apenas quando o controle é reconfigurado, um polímero fora de especificação é produzido por cerca de 4 horas. Outro fato, que também pode estar envolvido, é a presença excessiva de catalisador (Cat_1 ou $\text{Cat}_2 + \text{Cat}_3$) durante a transição, fazendo com que a quantidade de hidrogênio seja insuficiente para atenuar este efeito. Como a troca do catalisador é uma tarefa agendada (isto é, os instantes de troca são conhecidos), a solução proposta é assegurar que a mistura reacional já tenha uma quantidade suficiente de hidrogênio quando é alimentado Cat_1 ou Cat_2 .

Por exemplo, pode-se assumir que a reconfiguração da malha de controle é realizada somente quando a concentração molar de hidrogênio é de $0,01 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$. Neste sentido, basta aumentar a alimentação de hidrogênio continuamente até que seja observado tal valor de concentração na saída do reator. Para completar esta estratégia, o controle da produtividade é responsável pela alimentação do catalisador da nova campanha, enquanto que a alimentação de Cat_3 tem que ser fechada e o controle de MI deve corrigir o valor da vazão de alimentação de hidrogênio para fornecer o MI desejado.

A Figura 6.10 mostra uma simples representação das duas estratégias envolvidas no esquema proposto. Por exemplo, a troca de Cat_3 por Cat_1 , de modo a prover valores altos de MI, tem que ser realizada por meio da estratégia B.

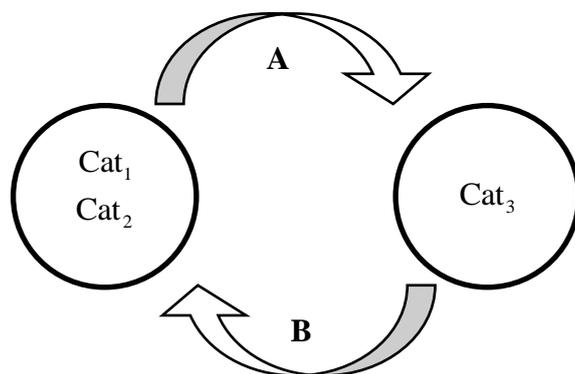


Figura 6.10 - Representação simplificada do esquema de troca de catalisador.

Ambas as estratégias foram implementadas com o objetivo de realizar automaticamente a lista de produção. Esta lista deve informar as propriedades finais desejadas para a resina e os instantes nos quais as mudanças necessárias devem ser feitas no processo e no sistema de controle. Esta informação constitui uma série temporal de especificações requeridas (SP_n) para um dado catalisador disponível ou apropriado ($\text{Cat}_{j,n}$, onde $j = 1, 2, 3$). A Tabela 6.10 mostra um exemplo de como a lista de produção pode ser escrita.

Quando uma lista está disponível, uma etapa de verificação é realizada para ver se o catalisador atual corresponde ao planejado. Se a resposta for positiva, a campanha é continuada até o próximo instante de amostragem do controle supervisão. Contudo, a mudança de algumas especificações operacionais e do polímero pode ser feita. Se o catalisador não é o indicado na lista de produção, então as orientações das estratégias A e B devem ser levadas em conta para implementar o catalisador correto para a nova

campanha, nas condições operacionais esperadas. Como explicado, esta tarefa depende do tipo de catalisadores envolvidos na troca.

Tabela 6.10 – Exemplo de uma lista de produção.

| Instante (t_n) | t_0 | t_1 | t_2 | ... | t_n |
|---|--------------------|--------------------|--------------------|-----|--------------------|
| Catalisador ($Cat_{j,n}$) | Cat _{1,0} | Cat _{3,1} | Cat _{2,2} | ... | Cat _{1,n} |
| <i>Propriedade finais</i> (SP_n) | | | | | |
| XS [%p/p] | 3,4 | 0,5 | 5,0 | ... | 3,1 |
| MI [$g \cdot (10 \text{ min})^{-1}$] | 7,5 | 7,5 | 18,0 | ... | 15,0 |

A Figura 6.11 mostra um diagrama que permite entender melhor como as tarefas de verificação da condição atual do processo e de reconfiguração da malha de controle são realizadas.

6.7. Testes de troca de catalisadores

Nesta segunda seção de testes, quatro cenários operacionais são considerados com mudanças de *grades* e da taxa de produção. A troca do catalisador foi simulada como indicado por uma lista para obter um polímero de qualidade próxima às especificações. Os valores desejados foram enviados para a camada de controle supervisorio a partir do instante de 10 horas de operação e implementados por meio de um filtro de primeira ordem dado pela Equação 6.51. Quando um catalisador deve ser retirado do reator, este filtro também pode ser usado para fechar as respectiva corrente de alimentação.

$$y_k^{set} = \alpha \cdot y_{k-1}^{set} + (1 - \alpha) y_{new}^{set} \quad 6.51$$

Na Equação 6.51, y_k^{set} representa a implementação do *set-point* das variáveis de saída no tempo k e y_{new}^{set} são os novos *set-points* que devem ser enviados para os controladores. O parâmetro α é o único que deve ser ajustado. No entanto, a maior parte das simulações empregou um valor de 0,95. Nos casos em que importantes desvios foram observados nas propriedades finais controladas, optou-se por um valor mais conservador de 0,99.

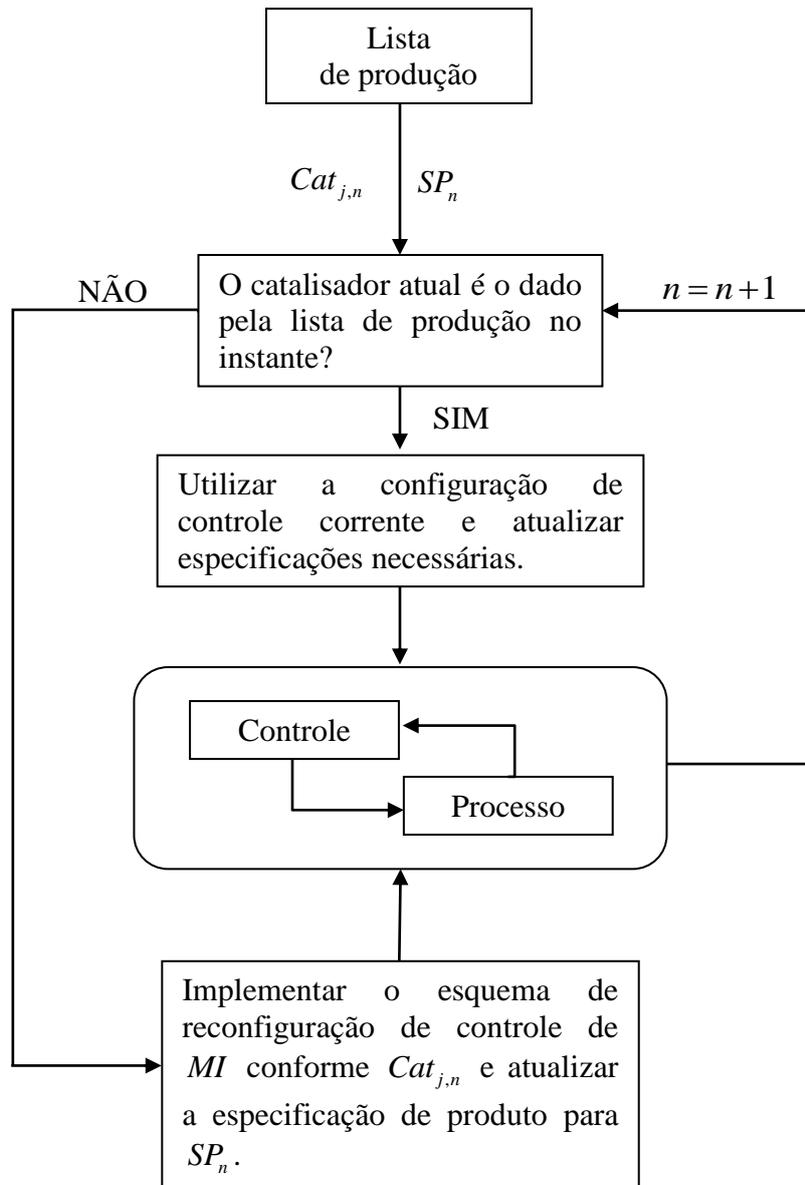


Figura 6.11 - Diagrama do esquema de troca de catalisador em linha.

6.7.1. $Cat_1 - Cat_3$

A motivação para esta troca é a manutenção da produção de polipropileno com alta massa molar (baixo MI), enquanto se aumenta a rigidez (baixo XS) do material. A implementação desta troca exige que a estratégia A seja considerada, com a reconfiguração da malha de controle de MI para manipular o *set-point* da temperatura do reator. O valor final desta propriedade deve ser mantido fixo em $7,5 \text{ g} \cdot (10 \text{ min})^{-1}$, ao passo que XS é reduzido de 3,0 para 0,5%p/p.

Pode ser visto na Figura 6.12 que a troca do catalisador foi implementada no instante de 10 horas de operação e que o tempo envolvido foi de aproximadamente 1 hora. Ao passo em que \dot{m}_{Cat_1} foi reduzido, \dot{m}_{Cat_3} foi aumentado com o filtro de primeira ordem, cujo parâmetro α foi igual a 0,95. O controle contínuo da produtividade, com leve decréscimo durante a transição, foi possível por meio da manipulação da alimentação de ambas os catalisadores em cada campanha.

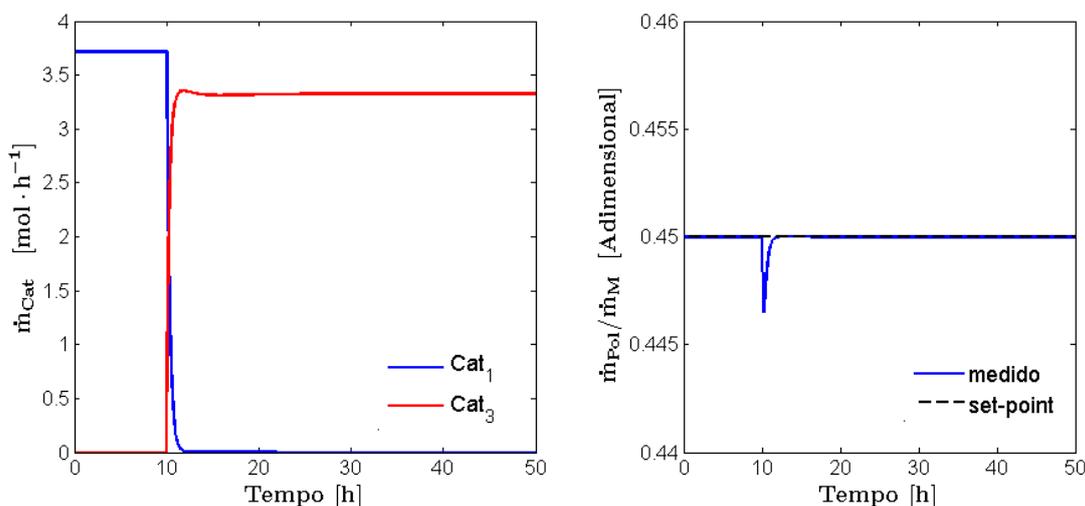


Figura 6.12 – Resposta dinâmica da troca de catalisadores no teste Cat₁-Cat₃: manipulação da alimentação dos catalisadores e manutenção da produtividade.

Em relação à resposta de XS, a Figura 6.13 mostra que a mudança em seu valor desejado foi realizada satisfatoriamente, alcança a proximidade do valor final em cerca de 2 horas de operação sem a ocorrência de desvio estacionário. Após a troca, a vazão de alimentação do cocatalisador TEA permaneceu próxima à unidade como esperado. Ambos os resultados são devidos ao fato de que Cat₃ é usado e a malha de controle MI reconfigurada.

O índice de fluidez também apresenta um comportamento dinâmico aceitável (Figura 6.14). Na verdade, o controle desta propriedade é um problema regulador, visto que seu valor desejado é constante. Pode ser visto que houve desvios significantes somente em um intervalo menor que 3 horas de operação, sendo que o desvio máximo é da ordem de 25%, como resultado do período de transição. Possivelmente, este efeito foi causado pelo excesso de espécies catalíticas no meio.

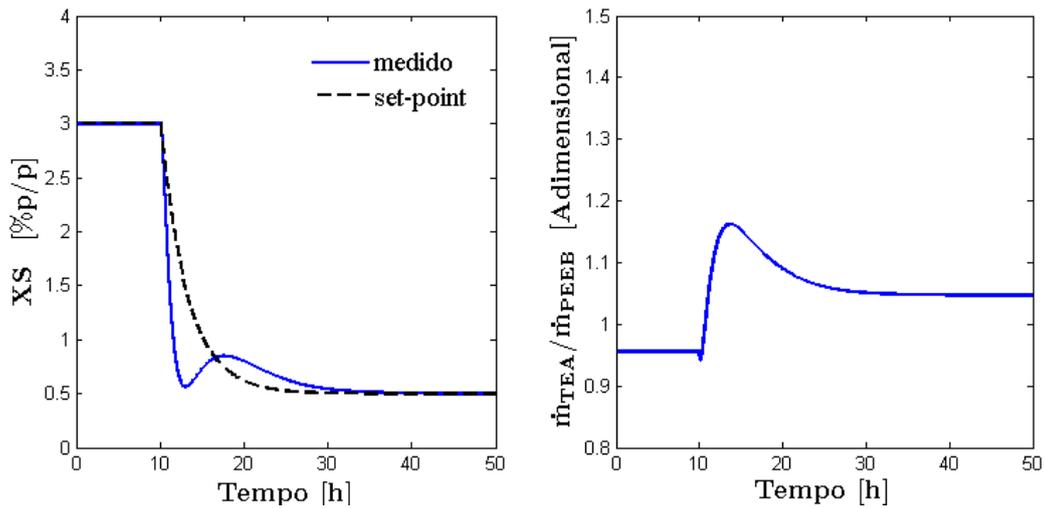


Figura 6.13 - Desempenho da estratégia de controle para mudança de grade de XS com a manipulação de $\dot{m}_{TEA} / \dot{m}_{PEEB}$, durante a troca Cat₁-Cat₃.

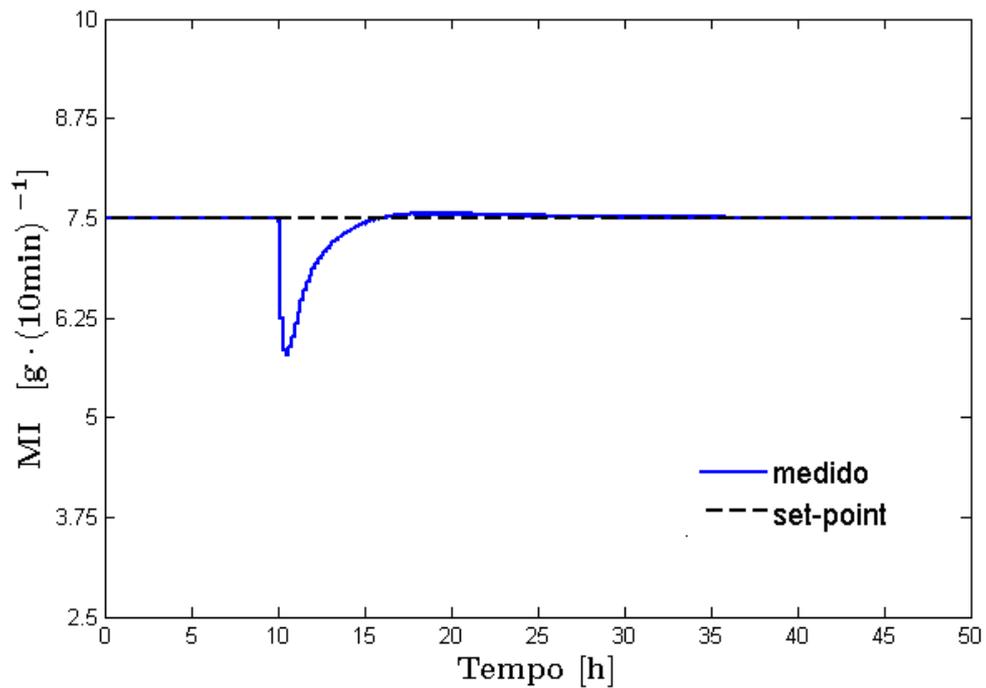


Figura 6.14 –Resposta dinâmica do índice de fluidez, durante a troca Cat₁-Cat₃.

O controle de MI em cada campanha foi feito pela manipulação da alimentação de hidrogênio e do *set-point* da temperatura do reator (Figura 6.15). Uma vez que o sistema de controle é notificado, a vazão \dot{m}_H foi continuamente reduzida e a

temperatura do reator aumentada para cerca de 350 K para que a atividade fornecesse o índice de fluidez desejado.

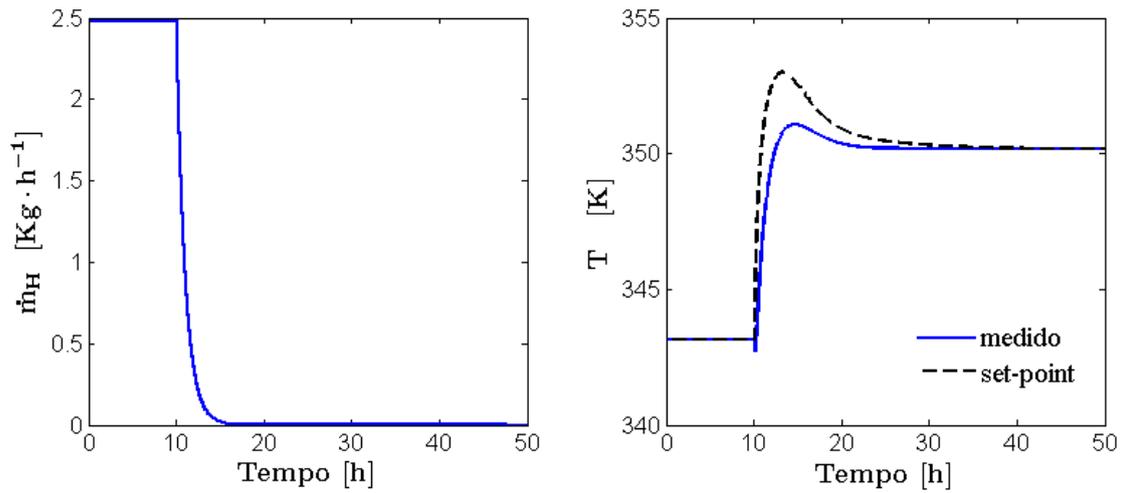


Figura 6.15 – Manipulação da alimentação de hidrogênio e da temperatura do reator.

De modo a observar a presença de outros efeitos dinâmicos, foi também considerado que MI deve ser reduzido para $5,0 \text{ g} \cdot (10 \text{ min})^{-1}$. Neste caso, a resposta apresentada pela Figura 6.16 foi obtida. Note que o controle de MI foi possível após a troca de catalisador e a temperatura operacional foi reduzida em aproximadamente 2 K.

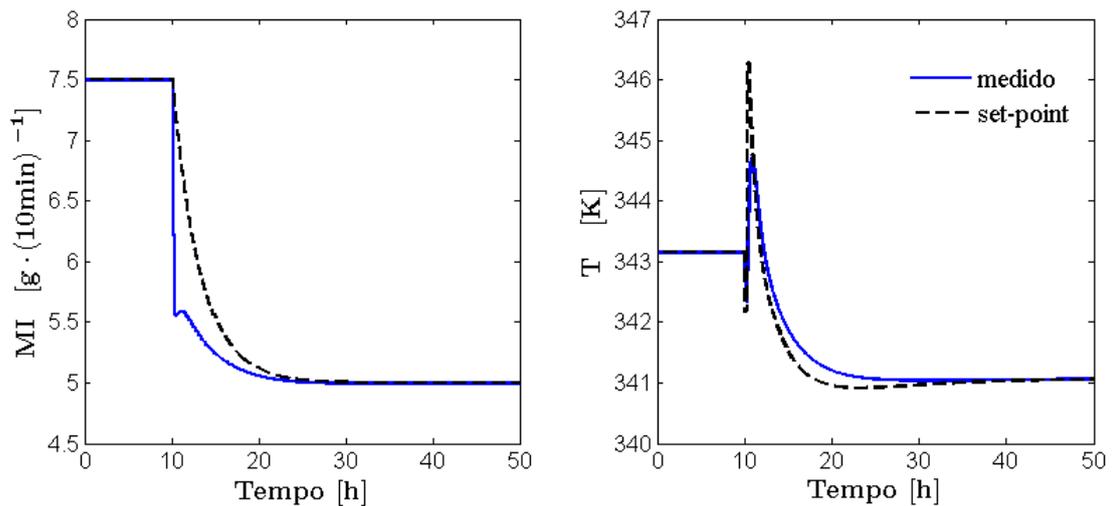


Figura 6.16 – Desempenho de controle quando é desejado reduzir MI e a manipulação da temperatura do reator, durante a troca Cat_1 - Cat_3 .

6.7.2. Cat₃ – Cat₂

Neste exemplo, é requerido aumentar o índice de fluidez além do valor viável dado por Cat₃ e manter constante a fração de extraíveis em xileno, tendo como meta o baixo consumo de hidrogênio. A reconfiguração de controle é implementada por meio da estratégia B, que indica que MI é controlado pela alimentação de hidrogênio. Especificamente, a lista de produção requer uma mudança de *grade* de 7,5 para o valor de 15 g·(10 min)⁻¹, ao passo que XS é mantida constante em 5,0 %p/p e temperatura do reator em 348,4 K.

Neste caso, a troca dos catalisadores em linha foi também possível e a resposta do controle da produtividade apresentou um pequeno desvio durante a transição (Figura 6.17), que não comprometeu o desempenho final. Observe que a troca demorou cerca de 10 horas para ser realizada. Este tempo de transição é dado pelo ajuste do parâmetro α do filtro, que foi igual a 0,99 nesta simulação. No caso de querer reduzir este tempo, efeitos significativos podem surgir sobre a produtividade e MI.

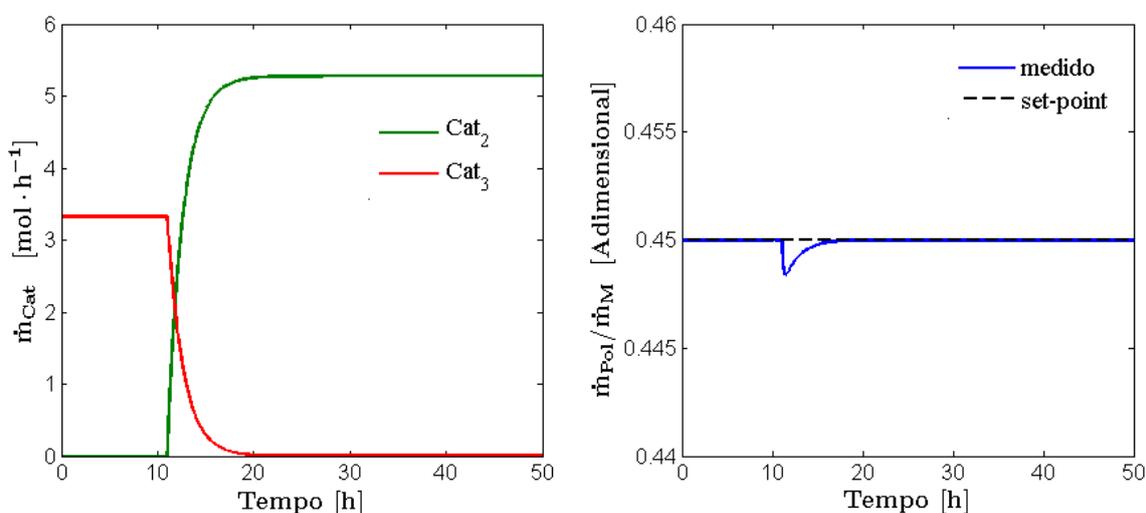


Figura 6.17 – Manutenção da produtividade durante a troca Cat₃-Cat₂ e a respectiva manipulação da alimentação de catalisadores.

Em relação a esta propriedade final, a resposta obtida apresenta uma redução brusca e curta quando a troca do catalisador é iniciada (Figura 6.18). Como dito antes, possivelmente isto é devido ao excesso de espécies catalíticas no reator. Entretanto, tão logo a corrente de hidrogênio é aumentada, o controle é capaz de seguir a trajetória desejada.

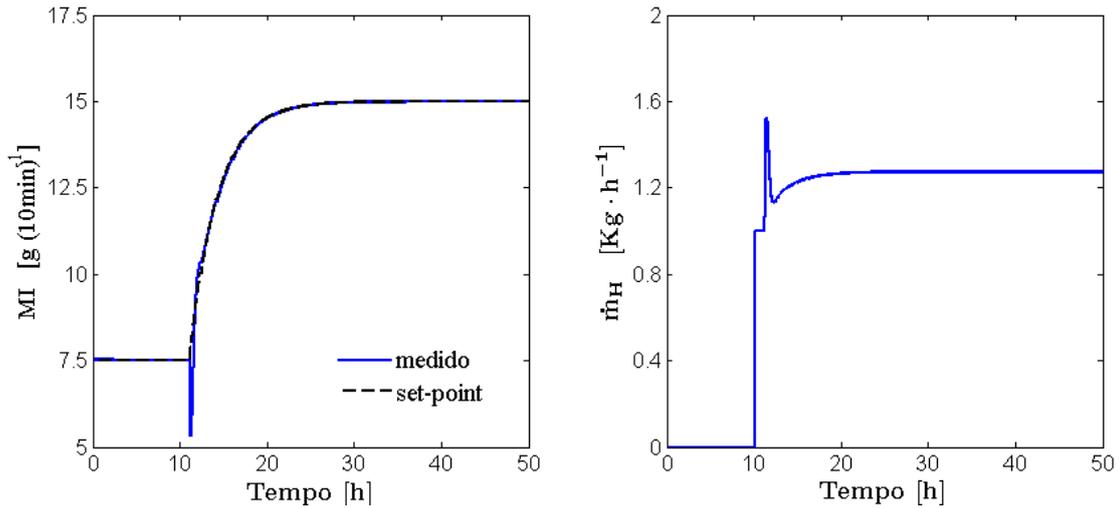


Figura 6.18 – Resposta dinâmica do índice de fluidez para mudança de *grade* e a manipulação da alimentação de hidrogênio no teste Cat₃-Cat₂.

Do mesmo modo, a estratégia de controle permitiu manter constante XS conforme mostrado na Figura 6.19, ainda que tenha um desvio máximo de 6,7 %p/p durante o período de transição. Após a troca, a razão $\dot{m}_{TEA} / \dot{m}_{PEEB}$ é mantida próxima à unidade, uma vez que XS corresponde à condição nominal de Cat₂.

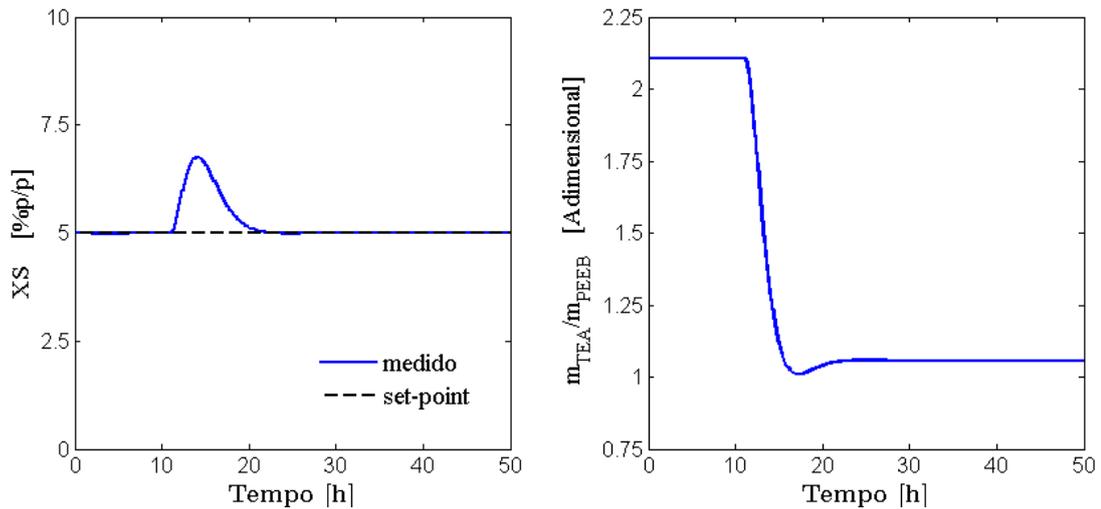


Figura 6.19 – Desempenho do esquema de controle na manutenção de XS constante, durante a troca Cat₃-Cat₂ e a manipulação dos cocatalisadores.

6.7.3. Cat₃ – Cat₂ – Cat₁

Este terceiro exemplo mostra um caso hipotético que poderia ser representativo do processo de produção de uma resina para a confecção de copos de PP, cujo objetivo

principal é obter cadeias com tamanho moderado. Isto implica em que o peso molecular deve ser controlado para assegurar processamento posterior da resina. Na simulação, foi requerido que MI fosse mantido constante em $7,5 \text{ g} \cdot (10 \text{ min})^{-1}$ e que XS fosse modificada de acordo com a especificação nominal de cada catalisador das três campanhas.

Note que a primeira troca de catalisador pode ser justificada pelo fato de se utilizar um catalisador menos custoso para produzir o mesmo polímero. Na prática industrial, isto implicaria em assumir que valores maiores de PD são aceitáveis. A segunda é motivada nos casos em que se deseja empregar menor quantidade de catalisador para melhorar a economia do processo. A mudança de $\text{Cat}_3 - \text{Cat}_2$ deve ser realizada conforme a estratégia B para a reconfiguração do controlador. No entanto, a segunda troca não necessita de nenhuma das estratégias, já que ambos os catalisadores envolvidos fazem uso da mesma configuração de controle. Na verdade, a taxa de troca dos catalisadores é a variável mais provável a afetar a manutenção das especificações desejadas.

A troca dos catalisadores ao longo das três campanhas foi implementada como visto na Figura 6.20, considerando que a alimentação dos mesmos foi realizada pelo controle da produtividade. Ambas as propriedades finais foram alcançadas de acordo com a Figura 6.21. Contudo, a resposta de MI exhibe desvios importantes em relação ao valor desejado durante a transição. O desvio mais significativo ocorre quando a troca $\text{Cat}_2 - \text{Cat}_1$ é feita, visto que a quantidade de hidrogênio no reator não é bastante. Neste sentido, a vazão de alimentação \dot{m}_H é aumentada com a consequente redução do desvio da resposta de MI. Por exemplo, esta propriedade alcança a proximidade de 10% do valor final após cerca de 5 horas.

Em relação às variáveis manipuladas, pode ser visto que as ações de controle são suaves (Figura 6.22). Especificamente, o pico inicial observado na vazão \dot{m}_H é devido a requerimento da quantidade mínima de hidrogênio no reator. Neste exemplo, foi suficiente impor que esta deveria ser maior que 0,60 Kg antes que o catalisador Cat_2 fosse alimentado. Comparando com a resposta dada na Figura 6.9, note que este requerimento permitiu que o desvio fosse reduzido. Além disso, a razão $\dot{m}_{TEA} / \dot{m}_{PEEB}$ foi manipulada em torno da unidade, o que garantiu um bom desempenho de controle de XS.

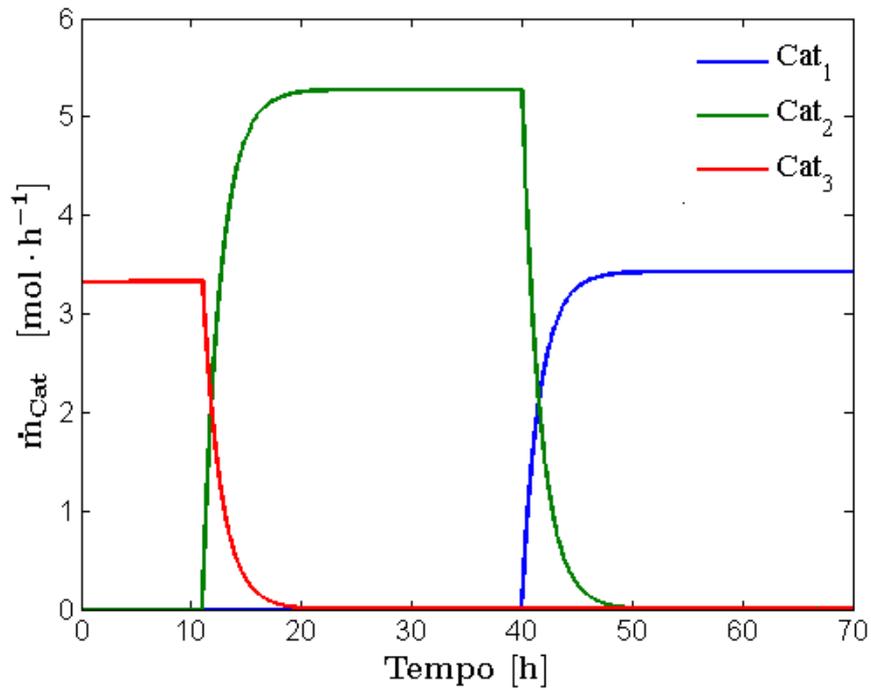


Figura 6.20 – Série de troca de catalisadores para a manutenção da produtividade constante quando o teste Cat₃ – Cat₂ – Cat₁ é realizado.

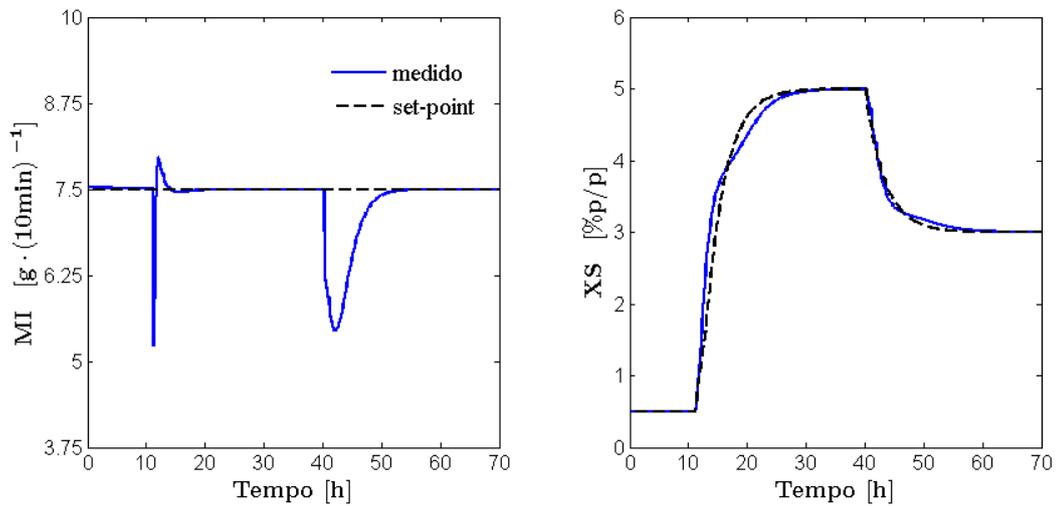


Figura 6.21 – Controle de MI e XS durante o teste Cat₃ – Cat₂ – Cat₁.

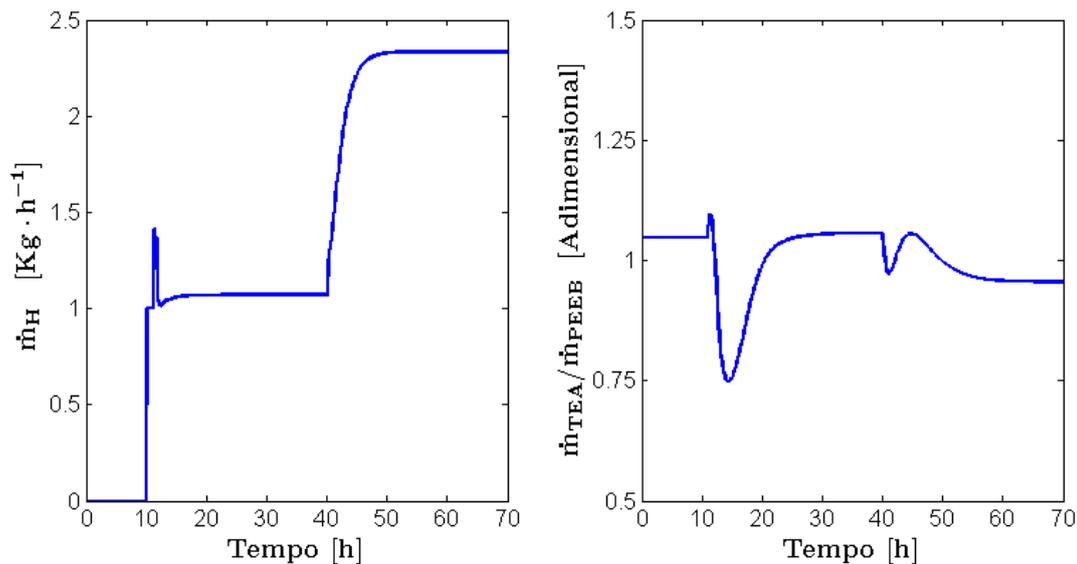


Figura 6.22 – Manipulação das taxas de alimentação de hidrogênio e cocatalisadores durante a troca $\text{Cat}_3 - \text{Cat}_2 - \text{Cat}_1$.

6.7.4. Aumento da taxa de produção em + 25%

Quando for necessário aumentar a taxa de produção, o único grau de liberdade disponível é a vazão de alimentação de propeno fresco. Neste exemplo, supõe-se que aumentar \dot{m}_M em 25% é suficiente para atender a demanda do mercado. Caso a operação seja realizada com o catalisador Cat_1 , não é possível alcançar altos valores de MI. Por exemplo, se se deseja um valor de $20 \text{ g} \cdot (10 \text{ min})^{-1}$, a restrição operacional sobre a vazão \dot{m}_H se torna ativa, visto que uma maior quantidade de propeno tem que ser processada. Como não é possível obter a qualidade desejada, a produção fica totalmente fora de especificação.

Neste caso, note que o reator que não tem graus de liberdade para recuperar sua operabilidade. Na verdade, a única alternativa viável é considerar possível a troca de catalisador em linha. A escolha direta é operar com Cat_2 , desde que este catalisador necessita de menor quantidade de hidrogênio para manter o mesmo valor de MI. Poder-se-ia pensar em utilizar Cat_3 , mas a valor requerido de MI está além do valor viável com este catalisador. Considerando suficiente a troca $\text{Cat}_1 - \text{Cat}_2$, não é preciso realizar reconfiguração de controle, mas somente a troca para lidar com o aumento da taxa de produção e evitar a restrição ativa sobre a alimentação de hidrogênio.

Como pode ser visto na Figura 6.23, os resultados para esta troca representam uma maneira para recuperar a operabilidade e produzir uma resina próxima à qualidade requerida, quando a vazão de alimentação de propeno é de $2,5 \cdot 10^4 \text{ Kg} \cdot \text{h}^{-1}$. Nas primeiras 10 horas de operação, \dot{m}_H é uma restrição ativa e, portanto, causa um importante desvio estacionário em MI. Contudo, após a troca do catalisador para Cat_2 , o requerimento se torna possível, visto que uma quantidade menor de hidrogênio é suficiente para controlar o tamanho das cadeias de polímero. A sobre-elevação inicial na resposta de MI é de cerca de 20% e provavelmente é causada pela grande quantidade de hidrogênio que ainda está no reator desde a campanha anterior com Cat_1 .

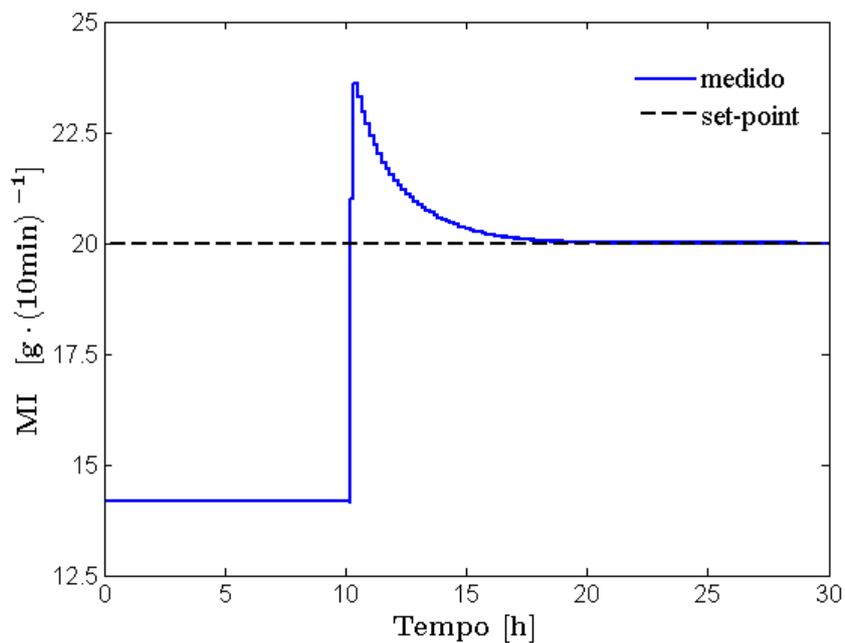


Figura 6.23 – Restauração do controle do índice de fluidez devido a restrição operacional na taxa de alimentação de hidrogênio por meio da troca Cat_1 - Cat_2 .

As ações de controle sobre as vazões \dot{m}_H e de alimentação de catalisador são exibidas na Figura 6.24. Tão logo a troca é iniciada, \dot{m}_H é reduzido de 3,5 para aproximadamente $1,75 \text{ Kg} \cdot \text{h}^{-1}$. Isto implica que ainda há espaço operacional para aumentar ainda mais a produção de polímero ou o valor de MI. No entanto, como a alimentação de Cat_2 é aumentada até $8,9 \text{ mol} \cdot \text{h}^{-1}$, de modo a manter o controle da produtividade, a restrição superior sobre esta vazão pode ser alcançada, se a mesma existir na prática.

Em relação à resposta de XS, o desempenho de controle também é satisfatório (Figura 6.25). Porém, como o *set-point* é mantido constante, há a presença de sobre-elevação em torno de 25% de sua referência. Isto pode ser devido a dois eventos simultâneos: (1) a redução inicial da extensão da reação de propagação, como é sugerida pela razão $k_{p,2}/k_{p,1} = 0,7143$ a 343.15 K e (2) e o aumento de XS_R de 3,10 para 4,80, que são valores inerentes de cada catalisador.

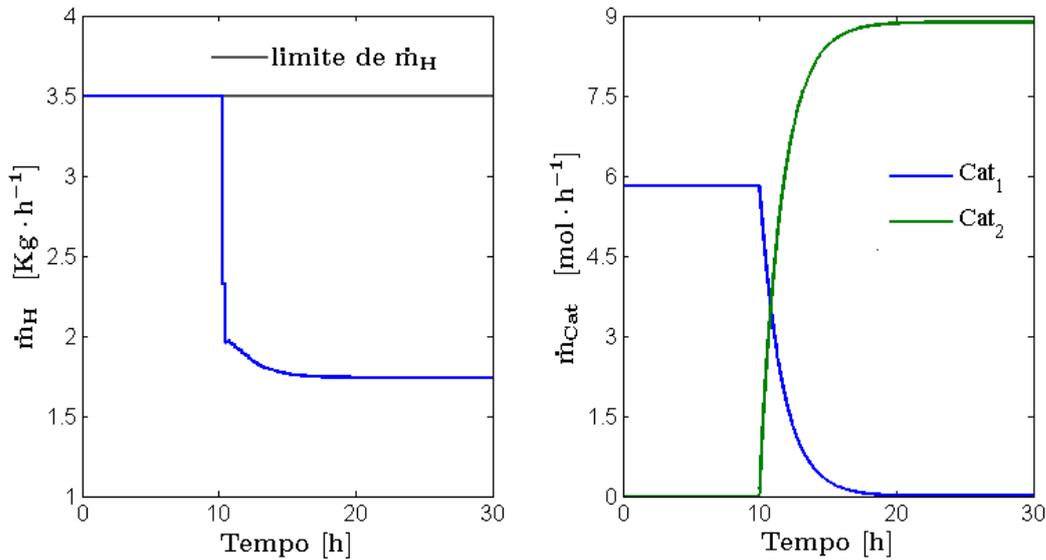


Figura 6.24 - Manipulações sobre a alimentação de hidrogênio e catalisadores quando a taxa de produção é aumentada.

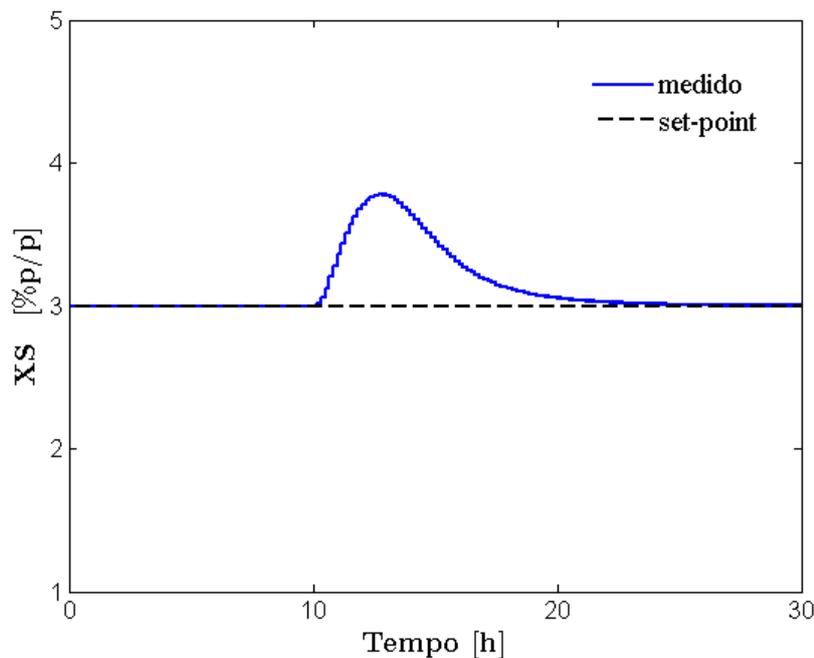


Figura 6.25 – Controle de XS quando a taxa de produção é aumentada e o catalisador Cat_1 é trocado por Cat_2 .

A partir da primeira hipótese, a massa de polímero dentro do reator é levemente reduzida e o balanço dinâmico de XS é afetado, produzindo uma resina menos rígida no início da troca. Ao mesmo tempo, como a extensão da reação de propagação tem que ser aproximadamente a mesma para manter a produtividade, a vazão de alimentação de catalisador é aumentada e XS é mantida como mostrado. Com relação ao segundo evento, pode-se lembrar de que a propriedade XS_R dos catalisadores é o valor nominal quando a razão mássica TEA/PEEB é igual à unidade. Quando a troca é realizada, esta razão dentro do reator está próxima deste valor, o que faz com que XS tenda ao valor dado por XS_R de Cat_2 . Neste sentido, o controle desta qualidade reduz a vazão \dot{m}_{TEA} , com o objetivo de reduzir TEA/PEEB e manter XS constante.

6.8. Comentários finais

Teoricamente, quaisquer das propriedades poderiam ser alcançadas ao se modificar as condições operacionais (isto é, empregar quantidades diferentes de catalisador e mudar a temperatura do reator). No entanto, como mostrado aqui, dependendo de qual catalisador é utilizado no processo, algumas das propriedades finais podem não ser satisfatoriamente alcançadas. Neste caso, a troca em linha do mesmo por outro mais adequado é justificada para realizar uma lista de produção, com larga variabilidade de especificações, para atender a demanda do mercado.

A este respeito, esta pesquisa propôs um esquema de controle baseado na troca de catalisador em linha. Isto permitiu alcançar satisfatoriamente as diferentes especificações de qualidade, evitando a produção fora de especificação. Como os catalisadores diferem quanto à sensibilidade ao hidrogênio, o esquema também apresentou duas estratégias para a reconfiguração da malha de controle do índice de fluidez. Vale notar a consideração de se manejar a quantidade de hidrogênio no reator para reduzir o desvio no índice de fluidez, já que pode ser vista como uma ação de *start-up* do reator para operar com os catalisadores ZN.

Os testes preliminares indicaram as condições operacionais mais adequadas para cada um dos catalisadores e também revelaram importantes limitações sobre a operação do processo. Por exemplo, é interessante operar com Cat_1 ou Cat_2 para obter um polímero com rigidez baixa a moderada e Cat_3 é adequado para produzir somente

polímeros de alta massa molecular. Isto permite selecionar os catalisadores mais adequados para compor a lista de produção.

Considerando a troca do catalisador em linha, os resultados mostraram que a estabilidade do reator pôde ser mantida, mesmo durante os períodos de transição. Isto é principalmente devido ao controle contínuo da temperatura do reator e da produtividade. Especificamente, quando MI deve ser mantido constante, houve desvios dinâmicos significativos em relação ao valor desejado. No entanto, este problema pode ser reduzido se (1) uma quantidade suficiente de hidrogênio está presente no reator quando um catalisador ZN deve ser usado; (2) Cat_1 é substituído por Cat_2 somente quando é interessante aumentar substancialmente MI; e (3) e, do mesmo modo é considerada a troca de Cat_2 por Cat_1 quando MI tem que ser reduzido.

7. Conclusões e Sugestões

Este capítulo apresenta algumas conclusões gerais sobre o tema de controle de processos com esquemas de reconfiguração, as contribuições mais relevantes deste trabalho e algumas sugestões para trabalhos futuros.

7.1. Conclusões e contribuições

A eficiência dos processos químicos é um assunto de estudo bastante discutido na Engenharia Química. Contudo, isto é percebido mais fortemente atualmente quando se trata do controle, já que o mesmo pode garantir a competitividade no mercado, reduzir custos operacionais e atender às restrições ambientais. Devido às características intrínsecas desses processos (como a não linearidade, o elevado grau de acoplamento das variáveis e a dinâmica das perturbações), pode ser necessário implementar sistemas de controle complexos para manutenção da operabilidade contínua da planta.

A operabilidade pode ser afetada pela mudança dos cenários de qualidade de produto, da possibilidade de falhas e pela busca da manutenção do ponto ótimo. Para minimizar os efeitos sobre esse importante fator, na literatura são encontradas diversas alternativas de controle avançado. Contudo, a configuração de controle selecionada geralmente é dependente da condição nominal considerada. Neste caso, como o desempenho global do processo pode ser comprometido, a contribuição deste trabalho foi a consideração de esquemas de reconfiguração do sistema de controle.

A contribuição desta proposta se faz ao considerar conjuntamente as abordagens projeto de estruturas de controle com a ideia de reconfiguração de controle. Desse modo, estabeleceu-se uma filosofia de controle pautada na modificação do sistema de controle ou por meio da adaptação de seus parâmetros ou da reestruturação das malhas de controle. De modo geral, buscou-se determinar diretrizes para facilitação

da aplicação prática, envolvendo alterações mínimas e limitadas apenas às variáveis cujo controle pode ser prejudicado ao longo das condições operacionais. As diretrizes apresentadas foram aplicadas a dois sistemas da Engenharia Química, cuja validação dos esquemas de reconfiguração propostos foi realizada por meio de simulações dinâmicas.

No primeiro exemplo, constituído por uma coluna de destilação binária, a seleção das melhores variáveis controladas foi feita por meio da técnica de controle otimizante e o controle do processo realizado com o sistema MPC/TC, que foi capaz de realizar as etapas de monitoramento, controle e reconfiguração (com o recálculo de *set-point* para a composição de fundo da coluna sempre que esta atinge sua capacidade máxima de processamento). Comparado a outras soluções de controle avaliadas, o sistema MPC/TC permitiu obter resultados mais satisfatórios. Contudo, a abordagem atual para este exemplo ainda não atende outros casos mais complexos, uma vez que a estrutura de controle permanece inalterada, tendo apenas seus *set-points* reconfigurados.

O segundo caso de estudo considerou um reator de polimerização com o uso de três catalisadores. Para este sistema, foram desenvolvidos a modelagem matemática (envolvendo os balanços de massa e energia e a técnica de momentos) com predições de propriedades finais e o projeto de sistema de controle baseado em reconfiguração. Foram apresentadas duas configurações de controle de acordo com o tipo de catalisador empregado, já que os mesmos diferem quanto à sensibilidade ao hidrogênio. Quando é necessário alargar as especificações, a troca dos catalisadores em linha é justificada e, conseqüentemente, a reconfiguração de controle também. Os resultados mostraram que foi possível alcançar satisfatoriamente as diferentes especificações de qualidade e que existem condições operacionais mais adequadas para cada um dos catalisadores. Neste caso, a troca de catalisadores também representa uma alternativa para a manutenção da estabilidade do reator, uma vez que, ao se aumentar a taxa de produção, o limite operacional de temperatura pode ser evitado. Além disso, este exemplo também permitiu obter as contribuições secundárias desta tese, na medida em que não há disponíveis informações na literatura sobre o tratamento deste tipo de problema.

De modo geral, destacou-se a necessidade de reconfiguração e foram apresentadas diretrizes que permitem estabelecer as etapas do projeto de controle com esquema de reconfiguração. De modo a obter uma metodologia, no entanto, são necessárias novas pesquisas para tratar o problema sistematicamente.

7.2. Pesquisas futuras

Ainda que tenha sido despendido um significativo esforço neste trabalho, existem questões não exploradas. Além disso, ambos os sistemas estudados permitiram também observar uma importante limitação desta tese. Embora a natureza combinatorial da busca do conjunto de variáveis otimizantes possa ser contornada com metodologias da literatura (por exemplo, com o método local exato e busca *Branch and bound*), ainda resta a questão de como estabelecer a melhor trajetória entre as diferentes configurações de controle para realizar a tarefa de reconfiguração do sistema de controle em linha. Na prática, é fácil identificar quando é necessário reconfigurar para atender o critério de manutenção da operabilidade. No entanto, é menos óbvio quando e como proceder essas modificações estruturais e/ou paramétricas.

Um possível tratamento para este problema seria a consideração de regiões operacionais como um conjunto (*cluster*) que compartilha as mesmas propriedades estruturais. Neste caso, em vez de se reconfigurar em função de uma determinada condição operacional, pode-se pensar em reconfigurar de acordo com as necessidades estruturais do problema. A definição do ponto de operação pode ser dada pela camada de controle supervisorio a partir da programação da produção ou da otimização em tempo real ou do recálculo de *set-points*.

Para esses problemas de otimização, uma importante limitação da solução proposta nesta tese surge quando as perturbações, que entram no processo, não podem ser medidas. Isto implica que algumas ferramentas inferenciais devem ser levadas em conta na etapa de projeto de controle de alguns processos. Uma solução a ser considerada é empregar técnicas de estimação como a reconciliação de dados.

Outro ponto de pesquisa refere-se ao reator de polimerização, já que é interessante estender o problema a outros casos, por exemplo, com o reciclo do gás não reagido ou com o emprego de uma série de reatores. Igualmente, para minimizar o tempo de transição, pode ser feita uma otimização para determinar qual a melhor lista de produção a ser enviada para o sistema de controle. Neste caso, possivelmente dentro de um problema MINLP, a sequência temporal dos tipos de catalisadores (juntamente com as trajetórias para a alimentação de hidrogênio e dos valores desejados de temperatura do reator) poderia ser encontrada no intuito de minimizar a produção fora de especificação.

8. Referências Bibliográficas

- ALI, M. A., BETLEM, B., ROFFEL, G. WEICKERT, 2006, “Isothermal liquid propylene polymerization with a highly active Ziegler-Natta catalyst in a fully-filled batch reactor”, *AIChE Journal*, v. 52, 1866.
- ALSTAD, V., SKOGESTAD, S., 2007. “Null space method for selecting optimal measurement combinations as controlled variables”. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, v. 46, 846–853.
- ALSTAD, V., SKOGESTAD, S., HORI, E. S., 2009, “Optimal measurement combinations as controlled variables”. *Journal of Process Control*, v. 19, n. 1, pp. 138-148.
- ANDRADE, G. V. N., 2008, *Projeto de Estrutura de Controle de uma Planta de Produção de Etanol*. Dissertação de mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- ANTELO, L. T., OTERO-MURAS, I., BANGA, J. R., ALONSO, A. A., 2007, “A systematic approach to plant-wide control based on thermodynamics”. *Computers and Chemical Engineering*, v. 31, n.5-6, pp. 677-691.
- ARAÚJO, A. C. B., 2007, *Studies on Plantwide Control*. PhD thesis, The Norwegian University of Science and Technology, Trondheim, Norway.
- ASKE, E. M. B.; SKOGESTAD, S.; STRAND, S., 2007, “Throughput maximization by improved bottleneck control”. In: *8th International Symposium on Dynamics and Control of Process Systems (DYCOPS)*, Cancun, Mexico.
- ASTEASUAIN, M., BANDONI, A., SARMORIA, C., BRANDOLIN, A., 2006,

- “Simultaneous process and control system design for grade transition in styrene polymerization”. *Chemical Engineering Science*, v. 61, n. 10, pp. 3362-3378.
- ÅSTRÖM, K. J., WITTENMARK, B., 1997, *Computer-controlled Systems: Theory and Design*. 3 ed. New York, Prentice Hall.
- BENÍTEZ-PÉREZ, H., CÁRDENAS-FLORES, F., GARCÍA-NOCETTI, F., 2007, “An implementation of reconfigurable network control based upon automata proposal for three conveyor belt case study”. *International Journal of Computers, Communications and Control*, v. 2, n. 4, pp. 314-327.
- BENOSMAN, M., 2010, “Review Article: a survey of some recent results on nonlinear fault tolerant control”. *Mathematical Problems in Engineering*, pp. 1-25.
- BLANKE, M., KINNAERT, M., LUNZE, J. STAROSWIECKI, M., 2006, *Diagnosis and Fault-Tolerant Control*, 2 ed., Springer-Verlag: Heidelberg.
- BOUSSAID, B., AUBRUN, C., ABDELKRIM N., BEN GAYED, M., 2011, “Performance evaluation based fault tolerant control with actuator saturation avoidance”. *International Journal of Applied Mathematics and Computer Science*, v. 21, n. 3, pp. 457-466.
- BRENNAN, R. W., VRBA, P., TICHY, P. *et al.*, 2008, “Developments in dynamic and intelligent reconfiguration of industrial automation”. *Computers in Industry*, v. 59, pp. 533-547.
- BUCKLEY, P. S., 1964, *Techniques of process control*. New York, John Wiley and Sons.
- CAO, Y., 2003. “Self-optimizing control structure selection via differentiation”. In: *Proceedings of the European Control Conference*, pp. 445-453.
- CAO, Y., KARIWALA, V., 2008, “Bidirectional Branch and Bound for Controlled Variable Selection Part I: Principles and minimum singular value criterion”. *Computers and Chemical Engineering*, v. 32, n. 10, pp. 2306–2319.
- CHEONG, S. Y., SAFONOV, M. G., 2008, “Bumpless transfer for adaptive switching

- controls". In: *Preprints of the 17th IFAC World Congress*, Seoul, South Korea.
- CHO, H. S., CHUNG, J. S., LEE, W. Y., 2000, "Control of molecular weight distribution for polyethylene catalyzed over Ziegler–Natta/Metallocene hybrid and mixed catalysts", *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical*, v. 159, n. 2, pp. 203-213.
- CHUM, P. S., SWOGER, K. W., 2008, "Olefin polymer technologies - History and recent progress at the Dow Chemical Company", *Progress in Polymer science*, v. 33, pp. 797-819.
- CHYLLA, R. W., HAASE, D. R., 1993, "Temperature control of semibatch polymerization reactor". *Computers and Chemical Engineering*, v. 17, n. 3, pp. 257-264.
- CORRADINI, M. L., ORLANDO, G., 2002, "A switching controller for the output feedback of uncertain intervals via sliding modes". *IEEE Transactions on Automatic Control*, v. 47, n. 12, pp. 2101-2107.
- DARBY, M. L., NIKOLAOU, M., JONES, J., NICHOLSON, D., 2011, "RTO: An overview and assessment of current practice". *Journal of Process Control*, v. 21, pp. 874–884.
- DARBY, M. L.; NIKOLAOU, M., 2012, "MPC: Current practice and challenges". *Control Engineering Practice*, v. 20, n. 4, pp. 328-342.
- DOWNS, J. J., SKOGESTAD, S., 2011, "An industrial and academic perspective on plantwide control", *Annual Reviews in Control*, n. 35, pp. 99-110.
- DOWNS, J. J., VOGEL, E. F., 1993, "A plant-wide industrial process control problem". *Computers and Chemical Engineering*, v. 17, pp. 245-255.
- DUNN, R. F., EL-HALWAGI, M. M., 2003, "Process integration technology review: background and applications in the chemical process industry". *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*, v. 78, pp. 1011–1021.
- EICK, R. S., 2003, *A reconfiguration scheme for flight control adaptation to fixed-*

- position actuator failures*. Master thesis, University of Florida, USA.
- EMBIRUÇU, M., LIMA, E. L., PINTO, J. C., 1996, “A survey of advanced control of polymerization reactors”. *Polymer Engineering and Science*, v. 36, pp. 433
- ENGELL, S., 2007, “Feedback control for optimal process operation”. *Journal of Process Control*, v. 17, n. 3, pp. 203-219.
- ETERNO, J. S., WEISS, J. L., LOOZE, D. P., Willsky, A. S., 1985, “Design issues for fault tolerant-restructurable aircraft control”. In: *Proceedings of the 24th IEEE conference on decision and control*, pp. 900-905, Florida, USA.
- FEITAL, T. S., 2011, *Monitoramento da Condição de Processos Químicos Industriais*. Tese de Doutorado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- FORBES, J. F., MARLIN, T. E., 1996, “Design cost: A systematic approach to technology selection for model-based real-time optimization systems”. *Computers and Chemical Engineering*, v. 20, n. 6-7, pp. 717-734.
- FOSS, A. S., 1973, “Critique of chemical process control theory”. *AIChE Journal*, v. 19, p. 209-214.
- FOSS, B. A., JOHANSEN, T. A., SORENSEN, V. A., 1995, “Nonlinear predictive control using local models, applied to a batch fermentation process”. *Control Engineering Practice*, v. 3, pp. 389-396.
- FREITAS, K. F., 2009, *Ferramentas Estatísticas para Monitoramento de Modelos Interfaciais*. Dissertação de mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- GARDUNO-RAMIREZ, R., LEE, K. Y., 2007, “Fuzzy gain-scheduling PID + decoupling control for power plant wide-range operation”. In: *Preprints of the International Conference on Intelligent Systems Applications to Power Systems (ISAP)*, Kaohsiung, Taiwan.
- GOMES, M. V. C., 2007, *Otimização Sequencial por Aproximações - Uma Aplicação em Tempo Real Para o Refino de Petróleo*. Tese de Doutorado, COPPE/UFRJ,

Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

GONÇALVES, J. D. P., 2009, *Reconfigurable Flight Control using Model Predictive Control*. Master thesis, Technical University of Lisbon, Portugal.

GONZÁLEZ, A. H., ODLOAK, D., 2009, “A stable MPC with zone control”. *Journal of Process Control*, v. 19, n. 1, pp. 110-122.

GRANCHAROVA, A., JOHANSEN, T., KOCIJAN, J., 2004, “Explicit model predictive control of gas-liquid separation plant via orthogonal search tree partitioning”. *Computers and Chemical Engineering*, v. 28, pp. 2481-2491.

HALVORSEN, I. J., SKOGESTAD, S., MORUD, J. C., ALSTAD, V., 2003, “Optimal selection of controlled variables”. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, v. 42, n. 14, pp. 3273-3284.

HOVD, M., 2007, “Improved target calculation for model predictive control”. *Modeling, Identification and Control*, v. 28, n. 2, pp. 81-86.

HU, W., UMAR, L. M., XIAO, G., KARIWALA, V., 2012, “Local self-optimizing control of constrained processes”. *Journal of Process Control*, v. 22, pp. 488-493.

JACOBSEN, M. G., 2011, *Identifying active constraint regions for optimal operation of process plants - with application to LNG and distillation processes*. PhD thesis, The Norwegian University of Science and Technology, Trondheim, Norway.

JACOBSEN, M. G., SKOGESTAD, S., 2011, “Active Constraint Regions for Optimal Operation of Chemical Processes”. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, v. 50, n. 19, pp. 11226-11236.

JAGTAP, R., KAISTHA, N., SKOGESTAD, S., 2011, “Plantwide Control for Economic Operation of a Recycle Process with Side Reaction”. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, v. 50, n. 14, pp. 8571-8584.

JENSEN, L. D., 1997, “Need for dynamic configuration and other augmentation of distributed control systems for improved alarm management”. In: *IEE*

Colloquium on Stemming the Alarm Flood, London, UK.

- KADAM, J. V., MARQUARDT, W., SRINIVASAN, B., BONVIN, D., 2007, "Optimal grade transition in industrial polymerization processes via NCO tracking". *AIChE Journal*, v. 53, n. 3, pp. 627-639.
- KAMRANI, A. K.; PARSAEI, H. R.; CHAUDHRY, M. A., 1993, "A survey of design methods for manufacturing cells". *Computers and Industrial Engineering*, v. 25, n. 1-4, pp. 487-490.
- KARIWALA, V., CAO, Y., 2009, "Bidirectional branch and bound for controlled variable selection. Part II: Exact local method for self-optimizing control." *Computers and Chemical Engineering*, v. 33, n. 8, pp. 1402-1412.
- KARIWALA, V., CAO, Y., 2010, "Bidirectional Branch and Bound for Controlled Variable Selection Part III: Local Average Loss Minimization". *IEEE Transactions on Industrial Informatics*, v. 6, n. 1, pp. 54-61.
- KARIWALA, V., CAO, Y., JANARDHANAN, S., 2008, "Local self-optimizing control with average loss minimization". *Industrial and Engineering Chemistry Research*, v. 47, n. 4, pp. 1150-1158.
- KASSIDAS, A., PATRY, J., Marlin, T., 2000, "Integrating process and controller models for the design of self-optimizing control". *Computers and Chemical Engineering*, v. 24, n. 12, pp. 2589-2602.
- KASSMANN, D. E., BADGWELL, T. A., HAWKINS, R. B., 2000, "Robust Steady-State Target Calculation for Model Predictive Control". *AIChE Journal*, v. 46, pp. 1007-1024.
- KIPARISSIDES, C., 1996, "Polymerization reactor modeling: a review of recent developments and future directions", *Chemical Engineering Science*, v. 51, n. 10, pp. 1637-1659.
- KOBI, A.; NOWAKOWSKI, S.; RAGOT, J., 1994, "Fault detection-isolation and control reconfiguration". *Mathematics and Computer in Simulation*, v. 37, pp. 111-117.

- KONSTANTOPOULOS, I. K., ANTSAKLIS, P. J., 1999, "An optimization approach to control reconfiguration". *Dynamics and Control*, v. 9, n. 3, pp. 255-270.
- KOOKOS, I. K., PERKINS, J. D., 2002, "Regulatory control structure selection of linear systems". *Computers and Chemical Engineering*, v. 26, n. 6, pp. 875-887.
- KORDON, A., DHURJATI, P., FUENTES, Y. O., OGUNNAIKE, B., 1999, "An intelligent parallel control system structure for plants with multiple operating regimes". *Journal of Process Control*, v. 9, pp. 453-460.
- KOUMBOULIS, F. N.; KING, R. E.; STATHAKIB, A., 2007, "Logic-based switching controllers – A stepwise safe switching approach". *Information Sciences*, v. 177, n. 13, pp. 2736-2755.
- KULKARNI, S., RAMADGE, P., 1996, "Model and controller selection policies based on output prediction errors". *IEEE Transactions on Automatic Control*, v. 41, n. 11, pp. 1594-1604.
- LAGERBERG, A., BREITHOLTZ, C., 1997, "A study of gain scheduling control applied to an exothermic CSTR". *Chemical Engineering and Technology*, v. 20, pp. 435-444.
- LAKSHMINARAYANAN, S., EMOTO, G., EBARA, S., TOMIDA, K., SHAH, L. S., 2001, "Closed loop identification and control loop reconfiguration: an industrial case study". *Journal of Process Control*, v. 11, n. 5, pp. 587-599.
- LARSSON, T., SKOGESTAD, S., 2000, "Plant-wide control: a review and a new design procedure". *Modelling, Identification and Control*, v. 42, pp. 209-240.
- LATADO, A., EMBIRUÇU, M., MATTOS NETO, A. G., PINTO, J. C., 2001, "Modeling of end-use properties of poly(propylene/ethylene) resins". *Polymer Testing*, v. 20, pp.419-439.
- LEE, Y. I., KOUVARITAKIS, B. , CANNON, M., 2003, "Constrained receding horizon predictive control for nonlinear systems", *Automatica*, v. 38, n12,

pp. 2093-2102.

LERSBAMRUNGSUK, V., SRINOPHAKUN, T., NARASIMHAN, S., SKOGESTAD, S., 2008, “Control structure design for optimal operation of heat exchanger networks”, *AIChE Journal*, v. 54, n. 1, pp. 150-162.

LIBERZON, D., MORSE, A. S., 1999, “Basic problems in stability and design of switched systems”. *IEEE on Control Systems*, v. 19, n. 5, pp. 59-70.

LONG, S., BUJAC, P. D. B., WOODCOCK, D. C. *et al.*, 2000, “Engineering line diagram development from process flowsheets. Part 1: Shortfalls in current practice”. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, v. 13, n. 6, pp. 459-465.

LUNZE, J., 2007, “Control reconfiguration after actuator failures: The generalised virtual actuator”. *Fault Detection, Supervision and Safety of Technical Processes 2006*, pp. 1240–1245.

LUYBEN, W. L., TYREUS, B. D., LUYBEN, M. L., 1998, *Plantwide Process Control*, New York, USA, McGraw-Hill Co.

MACHADO, F., PINTO, J. C., 2011, “Modeling the Dynamics of the Xylene Soluble Fraction (XS) in a Bulk Propylene Polymerization Process”. *Macromolecular Reaction Engineering*, v. 5, n. 2, pp. 129-139.

MACIEJOWSKI, J. M., 2002. *Predictive Control with Constraints*. Prentice Hall.

MAGALHÃES, O. I. B., 2010, *Desenvolvimento de um Sistema de Otimização Dinâmica em Tempo Real*. Dissertação de mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

MANUM, H., NARASIMHAN, S., SKOGESTAD, S., 2008, “A new approach to explicit MPC using self-optimizing control”. In: *Proceedings of the American Control Conference*, Seattle, Washington, USA.

MARQUES, M. F. V., POLOPONSKY, M., CHAVES, E. G., 2002, “Estudo Comparativo de Polimerização de Propileno com Diferentes Catalisadores

- Metalocênicos Através de um Planejamento de Experimentos”. *Polímeros*, v.12, n. 1, pp. 48-59.
- MATHWORKS, 2010. MATLAB version 7.10.0 (R2010a). Natick, Massachusetts: The MathWorks Inc.
- MATOS, V., MATTOS NETO, A. G., PINTO, J. C., 2001, “Method for Quantitative Evaluation of Kinetic Constants in Olefin Polymerizations. I. Kinetic Study of a Conventional Ziegler–Natta Catalyst Used for Propylene Polymerizations” *Journal of Applied Polymer Science*, v. 79, pp. 2076–2108.
- MATTOS NETO, A. G., FREITAS, M. F. , NELE, M. PINTO, J. C., 2005, “Modeling Ethylene/1-Butene Copolymerizations in Industrial Slurry Reactors”. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, v. 44, n. 8, pp. 2697–2715.
- MATTOS NETO, A. G., PINTO, J. C., 2000, SIMULPOL 3.0 – A software for steady state simulation of slurry and bulk olefin polymerization. Registrado no INPI/Brasil com o N° 00031540.
- MATTOS NETO, A. G., PINTO, J. C., 2001, “Steady-State Modeling of Slurry and Bulk Propylene Polymerizations”, *Chemical Engineering Science*, v.56, pp. 4043-4057.
- MCAVOY, T. J., 1999, “Synthesis of plantwide control systems using optimization”. *Industrial and Chemical Engineering Research*, v. 38, pp. 2984-2994.
- MCAVOY, T., YE, N., 1994, “Base control of the Tennessee Eastman problem”. *Computers and Chemical Engineering*, v. 18, pp. 383-413.
- MCFARLANE, R. C., REINEMAN, R. C., BARTEE, J. F., GEORGAKIS, C., 1993, “Dynamic simulator for a Model IV fluid catalytic cracking unit”. *Computers and Chemical Engineering*, v. 17, n. 3, pp. 275-300.
- MCKETTA, J. J., 1977, *Benzene design problem*. Encyclopedia of Chemical Processing and Design. Dekker: New York, USA.
- MELO, P. A., 2000, *Dinâmica e Estabilidade de Reatores Tubulares de Polimerização*

com Reciclo. Tese de Doutorado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

MOORE JR, E. P., LARSON, G. A., 1996, "Introduction to PP business", In: *Polypropylene handbook*. Hanser Publishers, Cincinnati, USA.

MORARI, M, ARKUN, Y., STEPHANOPOULOS, G., 1980, "Studies in the synthesis of control structures for chemical processes. Part I". *AIChE Journal*, v. 26, pp. 220-231.

MORARI, M., ZAFIRIOU, E., 1989, *Robust Process Control*. Englewood Cliffs, New Jersey, Prentice-Hall..

MUSKE, K. R., RAWLINGS, J. B., 1993, "Linear model-predictive control of unstable processes". *Journal of Process Control*, v. 3, pp. 85-96.

NARASIMHAN, S., SKOGESTAD, S., 2007, "Implementation of optimal operations using off-line computations". In: *Proceedings of the 8th international IFAC Symposium on Dynamics and Control of Process Systems (DYCOPS)*, Cancun, Mexico.

NARRAWAY, L. T., PERKINS, J. D., 1993, "Selection of process control structure based on linear dynamic economics". *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 32, n. 11, pp. 2681-2692.

NARRAWAY, L. T., PERKINS, J. D., 1994, "Selection of process control structure based on economics". *Computers and Chemical Engineering*, v. 18, n. 1, pp. S511-S515.

NAYAK, S. K., 2009, "Trends - Plastics Industry: Numbers Speak". Disponível em: <http://www.cipet.gov.in/pdfs/dg_article-july09.pdf>. Acesso em: 04 jun. 2012.

NG, C., STEPHANOPOULOS, G., 1998, "Plant-Wide control structures and strategies". In: *Preprints of the 5th IFAC Symposium on Dynamics and Control of Process Systems, Dycops '98*, pp. 1-16.

OGUNNAIKE, B. A., 1996, "A contemporary industrial perspective on process control

- theory and practice”. *Annual Reviews in Control*, v. 20, pp. 1-8.
- OLIVEIRA, J. C. P., RESENDE, P.; MAIA, C. A., 1997, “Controle Neural gain scheduling de tanques interativos”. In: *Anais do 3º Simpósio Brasileiro de Automação Inteligente – Vitória/ES*, pp. 224-228.
- PAGANO, R. L., 2009, *Modelagem, Simulação e Otimização de Processos Contínuos de Produção de Materiais Compósitos*. Tese de Doutorado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- PANAHI, M., 2011, *Plantwide Control for Economically Optimal Operation of Chemical Plants - Applications to GTL plants and CO2 capturing processes*. PhD thesis, The Norwegian University of Science and Technology, Trondheim, Norway.
- PATTON, R. J., 1997, “Fault-tolerant control: the 1997 situation. In: *Proceedings of IFAC Symposium on Fault Detection, Supervision and Safety for Technical Processes – SAFEPROCESS’97*, v. 2, pp. 1033-1055.
- PISTIKOPOULOS, E., DUA, V., BOZINIS, N., BEMPORAD, A., MORARI, M., 2000, “On-line optimization via off-line parametric optimization tools”. *Computers and Chemical Engineering*, v. 24, pp. 175-185.
- PRATA, D. M., 2009, *Reconciliação Robusta de Dados para Monitoramento em Tempo Real*. Tese de Doutorado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- PRATA, D. M., SCHWAAB, M., LIMA, E. L., PINTO, J. C., 2009, “Nonlinear dynamic data reconciliation and parameter estimation through particle swarm optimization: Application for an industrial polypropylene reactor”. *Chemical Engineering Science*, v. 64, pp. 3953-3967.
- PRETT, D. M., MORARI, M., 1986, *Shell Process Control*, Stoneham, MA, Butterworth Publishers.
- PRICE, R. M., GEORGAKIS, C., 1993, “A plant wide regulatory control design procedure using a tiered framework”. *Industrial and Chemical Engineering Research*, v. 32, n. 11, pp. 2693–2705.

- PRICE, R., LYMAN, P. R., GEORGAKIS, C., 1994, "Throughput manipulation in plantwide control structures". *Industrial and Chemical Engineering Research*, v. 33, pp. 1197-1207.
- QIN, S. J., BADGWELL, T. A., 2003, "A survey of industrial model predictive control technology". *Control Engineering Practice*, pp. 733-764.
- QUINTO, T. C., 2010, *Abordagem Algébrico-Diferencial da Otimização Dinâmica de Processos com Índice Flutuante*. Dissertação de mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- RANGAIAH, G. P., KARIWALA, V., 2012, *Plant-wide Control: Recent Developments and Applications*, 1 ed., Chichester, UK, John Wiley & Sons Ltd.
- RANGEL, F. B., 2010, *Avaliação do Desempenho de Configurações de Controle Dual em Colunas de Destilação*. Dissertação de mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- RAWLINGS, J. B., 2000, "Tutorial overview of model predictive control". *IEEE Control Systems Magazine*, v. 3, n. 20, pp. 38-52.
- RAWLINGS, J., MAYNE, D., 2009. *Model Predictive Control Theory and Design*. Nob Hill Pub.
- RICHARDS, J. R., CONGALIDIS, J. P., 2006, "Measurement and control of polymerization reactors". *Computers and Chemical Engineering*, v. 30, n. 10-12, pp. 1447-1463.
- RICHTER, J. H., SCHLAGE, T., LUNZE, J., 2007, "Control reconfiguration of a thermofluid process by means of a virtual actuator". *Control Theory & Applications*, v. 1, n. 6, pp. 1606-1620.
- RICKER, N. L., 1996, "Decentralized control of the Tennessee Eastman challenge problem". *Journal of Process Control*, v. 6, pp. 205-221.
- RICKER, N. L., LEE, J. H., 1995, "Nonlinear model predictive control of the Tennessee Eastman challenge process". *Computers and Chemical*.

Engineering, v. 19, pp. 961-981.

RIGGS, J. B., 2000, *Comparison of advanced distillation control methods - Final Technical Report April 1994 – March 1999*. Office of Industrial Technologies, U.S. Department of Energy, Washington, DC.

RIGGS, J. B., KARIM, M. N., 2007, *Chemical and Bio-Process Control*, 3 ed., Texas Tech University, Ferret Publishing.

ROBINSON, D., CHEN, R., MCAVOY, T., SCHNELLE, P. D., 2001, “An optimal control based approach to designing plantwide control system architectures”. *Journal of Process Control*, v. 11, n. 2, pp. 223-236.

RODRIGUEZ, A., ROMAGNOLI, J. A., GOODWIN, G. C., 2003, “Supervisory multiple regime control”. *Journal of Process Control*, n. 13, pp. 177-191.

ROSSITER, J. A., 2004, *Model-based predictive control – a practical approach*. CRC Press, New York.

SAAD, S. M., 2003, “The reconfiguration issues in manufacturing systems”. *Journal of Materials Processing Technology*, v.138, n. 1-3, pp. 277-283.

SEBORG, D. E., EDGAR, T. F., MELLICHAMP, D. A., 2011, *Process Dynamics and Control*, 3rd Edition. New York, USA, John Wiley and Sons.

SHAMIRI, A., HUSSAIN, M. A., MJALLI, F. S., MOSTOUFI, N., 2010, “Kinetic modeling of propylene homopolymerization in a gas-phase fluidized-bed reactor”, *Chemical Engineering Journal*, v. 161, n. 1-2, pp. 240-249.

SIGURD, K., 2003, *Reconfiguration control in adaptive networks*. PhD Thesis. Department of Electrical Engineering and Computer Science MIT, Boston, USA.

SKOGESTAD, S., JACOBSEN, E. W., MORARI, M., 1989, “DB-control of distillation columns”. *AIChE Annual Meeting*, Paper 167Bx, San Francisco, USA.

SKOGESTAD, S., 1997. “Dynamics and control of distillation columns: A tutorial

- introduction”. *Chemical Engineering Res. and Design*, v. 75, n. 6, pp. 539–562.
- SKOGESTAD, S., 2000, “Plantwide control: the search for the self-optimizing control structure”. *Journal of Process Control*, v. 10, pp. 487-507.
- SKOGESTAD, S., 2004, “Control structure design for complete chemical plants”. *Computers and Chemical Engineering*, v. 28, pp. 219-234.
- SKOGESTAD, S., MORARI, M., 1987, “Control configuration selection for distillation columns”, *AIChE Journal*, v. 33, n.10, pp. 1620-1635.
- SKOGESTAD, S., POSTLETHWAITE, L., 2005, *Multivariable Feedback Control*, New York, John Wiley and Sons.
- SOUZA, P. N. M., 2010, *Modelagem e Controle das Polimerizações de SBR Carboxilado em Emulsão*. Dissertação de mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- SRINIVASAN, B., BONVIN, D., VISSER, E., PALANKI, S., 2003, “Dynamic optimization of batch processes: II. Role of measurements in handling uncertainty”. *Computers and Chemical Engineering*, v. 27, n. 1, pp. 27-44.
- SRINIVASAN, R., QIAN, M. S., 2006, “Online fault diagnosis and state identification during process transitions using dynamic locus analysis”. *Chemical Engineering Science*, v. 61, n. 18, pp. 6109-6132.
- SRINIVASAN, R., VISWANATHAN, P., VEDAM, H., NOCHUR, A., 2005, “A framework for managing transitions in chemical plants”. *Computers and Chemical Engineering*, v. 29, n. 2, pp. 305-322.
- STEFFEN, T., 2005, *Control Reconfiguration of Dynamical System: Linear Approaches and Structural Tests*, Springer-Verlag: Heidelberg.
- STEPHANOPOULOS, G., NG, C., 2000, “Perspectives on the synthesis of plant-wide control structures”. *Journal of Process Control*, v.10, pp. 97-111.
- STICHLMAIR, J., 1995, “Conceptual design of the control configurations of distillation

- columns". *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, v. 34, n. 2, pp. 61-69.
- STRAND, S., SAGLI, J., 2003. "MPC in Statoil—Advantages with in-house technology". In *International Symposium on Advanced Control of Chemical Processes (ADCHEM)*, Hong Kong, pp. 97–103.
- SUNDARAM, R. M., 1990, "Some new approaches for designing cellular manufacturing systems". *Mathematical and Computer Modeling*, v. 14, pp. 1035-1039.
- SUNDARRAMAN, A., SRINIVASAN, 2003, "Monitoring transitions in chemical plants using trend analysis". *Computers and Chemical Engineering*, v. 27, n. 10, pp. 1455-1472.
- TAKAGI, T., SUGENO, M., 1985, "Fuzzy identification of systems and its applications to modeling and control". *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics*, v. SMC-15, pp. 116-132.
- TAN, W.; MARQUEZ, H. J.; CHEN, T., 2004, "Operating point selection in multimodel controller design". In: *Proceedings of the 2004 American Control Conference*, Boston, USA.
- TATJEWSKI, P., ŁAWRYNCZUK, M., MARUSAK, P., 2006, "Linking nonlinear steady-state and target set-point optimization for model predictive control". *Proceedings of the Control Conference 2006*, Glasgow, UK.
- TRAN, T. H., STURSBURG, O., ENGELL, S., 2007, "Reconfiguration of discretely controlled hybrid systems for changing specifications". In: *Pre-prints of the 1st IFAC Workshop on Dependable Control of Discrete Systems (DCDS'07)*, Paris, France.
- TRIERWEILER, J. O., FARINA, L. A., DURAIK, R. G., 2001, "RPN Tuning Strategy for Model Predictive Control". In: *Preprints of DYCOPS-2001*, pp. 283-288.
- UMEDA, T., KURIYAMA, T., ICHIKAWA, A., 1978, "A logical structure for process

- control system synthesis”. In: *IFAC Congress*, Helsinki, Finland.
- VADA, J., 2000, *Prioritized Infeasibility Handling in Linear Model Predictive Control: Optimality and Efficiency*. PhD thesis, The Norwegian University of Science and Technology, Trondheim, Norway
- VAN DER WAL, M., JAGER, B., 2001, “A review of methods for input/output selection”. *Automatica*, v. 37, n. 4, pp. 487-510.
- VENKATASUBRAMANIAN, V., RENGASWAMY, R., KAVURI, S. N., 2003b, “A review of process fault detection and diagnosis. Part II. Qualitative models and search strategies”. *Computers and Chemical Engineering*, v. 27, n. 3, pp. 313–326.
- VENKATASUBRAMANIAN, V., RENGASWAMY, R., KAVURI, S. N., YIN, K., 2003c, “A review of process fault detection and diagnosis. Part III. Process history based methods”. *Computers and Chemical Engineering*, v. 27, n. 3, pp. 327–346.
- VENKATASUBRAMANIAN, V., RENGASWAMY, R., YIN, K., KAVURI, S. N., 2003a, “A review of process fault detection and diagnosis. Part I. Quantitative model-based methods”. *Computers and Chemical Engineering*, v. 27, n. 3, pp. 293–311.
- WANG, Y., ZHOU, D., QIN, S. J., WANG, H., 2008, “Active Fault-Tolerant Control for a Class of Nonlinear Systems with Sensor Faults”. *International Journal of Control, Automation, and Systems*, v. 6, n. 3, pp. 339-350.
- WARD, J. D., MELLICHAMP, D. A., DOHERTY, M. F., 2004, “Importance of Process Chemistry in Selecting the Operating Policy for Plants with Recycle”, *Industrial and Engineering Chemistry Research*, v. 43, pp. 3957-3971.
- WILKINSON, R. W., DOLE, M., 1962, “Specific heat of synthetic high polymers. X. Isotactic and atactic polypropylene”, *Journal of Polymer Science*, v.58, pp. 1089-1106.
- YELCHURU, R., 2012, *Quantitative methods for controlled variables selection*. PhD

thesis, The Norwegian University of Science and Technology, Trondheim, Norway.

YING, C. M., JOSEPH, B., 1999, "Performance and stability analysis of LP-MPC and QP-MPC cascade control systems". *AICHE Journal*, 45, n. 7, pp. 1521-1534.

ZACCARIAN, L., TEEL, A. R., 2004, "The L_2 (l_2) bumpless transfer problem: its definition and solution". In: *Preprints of the 43rd IEEE Conference on Decision and Control*, v. 5, pp. 5505-5510.

ZHANG, X, LU, K., LI, X, 2010, "Optimization and Simulation of Automatic Control System for Polypropylene Reaction Process", In: *Second International Conference on Intelligent Human-Machine Systems and Cybernetics*, Nanjing, China.

ZHANG, Y., JIANG J., 2008, "Bibliographical review on reconfigurable fault-tolerant control systems". *Annual Reviews in Control*, v.32 , pp. 229–252.

ZHANG, Y., JIANG, J., YANG, Z., HUSSAIN, A., 2005, "Managing Performance Degradation in Fault Tolerant Control Systems". In: *Preprints of the 16th IFAC Triennial World Congress (IFAC'05)*, Prague, Czech Republic.

ZHENG, A., MAHAJANNAMAND, R.V., DOUGLAS, J. M., 1999, "Hierarchical procedure for plant-wide control system synthesis". *AICHE Journal*, v. 45, pp. 1255–1265.

ZHU, Y., LIU, X. G., 2005, "Dynamics and control of high purity heat integrated distillation columns". *Industrial and Engineering Chemical Research*, v. 44, pp.8806-8814.

9. Apêndices

9.1. Apêndice A - Modelo da coluna de destilação

A coluna de destilação binária foi tomada como exemplo a partir de dois trabalhos da literatura^{1, 2}. A coluna é considerada na configuração LV, ou seja, as vazão de refluxo (L_T) e de vapor (V_B) são graus de liberdade disponíveis para otimização em estado estacionário. As considerações do modelo são mistura binária, pressão constante, volatilidade relativa constante, fluxos molares constantes, ausência de acúmulo de vapor, dinâmica linear para a fase líquida, equilíbrio em todos os estágio e condensador total.

Já que o refeedor é também um estágio de equilíbrio, a coluna apresenta $N_T = 110$ estágios mais o condensador total. O fundo é numerado com o estágio 1 e a alimentação é feita no estágio $N_F = 39$. Como o modelo dinâmico dado abaixo contempla a descrição dos acúmulos e das composições da fase líquida em todos os estágios, então a dimensão do modelo é $2(N_T + 1)$ estados.

Neste caso, o modelo matemático considerado leva em conta o balanços de massa em cada estágio i da coluna (Equações A. 1 a A. 3), onde $i = 1$ a $N_T + 1$, e algumas relações algébricas (Equações A. 4 a). Nestas representações, M_i é o acúmulo de líquido; L_i , a vazão molar de líquido que deixa o estágio i ; V_i , a vazão molar de vapor que entra no estágio i ; x_i e y_i , as composições molares das fases líquida e vapor respectivamente no estágio i ; e α , a volatilidade da mistura.

¹ SKOGESTAD, S., MORARI, M., 1987, "Control configuration selection for distillation columns", *AIChE Journal*, n. 33, v. 10, pp. 1620-1635.

² SKOGESTAD, S., 1997. "Dynamics and control of distillation columns: A tutorial introduction". *Chemical Engineering Research and Design*, v. 75, n. 6, pp. 539-562.

Balanço de massa total no estágio i

$$\frac{dM_i}{dt} = L_{i+1} - L_i + V_{i-1} - V_i \quad \text{A. 1}$$

Balanço de massa para o componente leve no estágio i

$$\frac{d(M_i x_i)}{dt} = L_{i+1} x_{i+1} - L_i x_i + V_{i-1} y_{i-1} - V_i y_i \quad \text{A. 2}$$

A Equação A. 2 leva à seguinte expressão para a derivada da fração molar da fase líquida em relação ao tempo:

$$M_i \frac{dx_i}{dt} = \frac{d(M_i x_i)}{dt} - x_i \frac{dM_i}{dt} \quad \text{A. 3}$$

Equações algébricas

A composição do vapor é relacionada com a composição da fase líquida do mesmo estágio por meio da equação de equilíbrio líquido-vapor:

$$y_i = \frac{\alpha x_i}{1 + (\alpha - 1) x_i} \quad \text{A. 4}$$

A partir da consideração de fluxo molar constante e de ausência de dinâmica de vapor, aplica-se a seguinte expressão para a vazões de vapor:

$$V_i = V_{i-1} \quad \text{A. 5}$$

Contudo, se a corrente de alimentação é parcialmente vaporizada, então a expressão para a vazão de vapor no estágio de alimentação é dada pela Equação A. 6, em que q_F é a fração liquefeita e F a vazão de alimentação da coluna.

$$V_{N_F} = V_{N_F-1} + (1 - q_F)F \quad \text{A. 6}$$

A vazão de líquido depende do acúmulo de líquido nos estágios e da vazão de vapor de acordo com a formulação linearizada apresentada pela Equação A. 7.

$$L_i = LO_i + \tau_i(M_i - MO_i) + \lambda(V_{i-1} - VO_{i-1}) \quad \text{A. 7}$$

Nesta representação, MO_i , LO_i e VO_i são respectivamente os valores nominais para o acúmulo de líquido e para as vazões molares de líquido e de vapor no estágio i . O vapor que chega a um estágio pode também afetar o acúmulo de líquido. O parâmetro λ pode ser positivo porque mais vapor pode produzir mais bolhas e conseqüentemente pode impelir mais líquido para fora do estágio (isto é, maiores valores de L_i). Por outro lado, se o aumento da queda de pressão causada por vazões elevadas de vapor resulta em um maior acúmulo nos estágios (isto é, menores valores de L_i), então o valor de λ pode ser negativo. No entanto, normalmente é difícil estimar λ para colunas com pratos. Para colunas com recheios, o valor de λ é usualmente tomado como nulo. Finalmente, o parâmetro τ_i representa a constante de tempo para a dinâmica da vazão de líquido em cada estágio.

As representações acima podem ser aplicadas a todos os estágios da coluna, com exceção do topo (condensador), do estágio de alimentação e do fundo (refervendor). Neste caso, as Equações também devem ser incluídas no modelo matemático.

Estágio de alimentação com composição z_F ($i = N_F$, $x_{N_F} = x_F$)

$$\frac{dM_{N_F}}{dt} = L_{N_F+1} - L_{N_F} + V_{N_F-1} - V_{N_F} + F \quad \text{A. 8}$$

$$\frac{d(M_{N_F} \cdot x_{N_F})}{dt} = x_{N_F+1}L_{N_F+1} - x_{N_F}L_{N_F} + y_{N_F-1}V_{N_F-1} - y_{N_F}V_{N_F} + z_F F \quad \text{A. 9}$$

Condensador total ($i = N_T + 1$, $M_{N_T+1} = M_D$, $L_{N_T+1} = L_T$, $x_{N_T+1} = x_D$)

$$\frac{dM_D}{dt} = V_{N_T-1} - L_T - D \quad \text{A. 10}$$

$$\frac{d(M_D \cdot x_D)}{dt} = y_{N_T-1}V_{N_T-1} - x_D L_T - x_D D \quad \text{A. 11}$$

Refervedor ($i = 1, M_1 = M_B, V_1 = V_B, x_1 = x_B$)

$$\frac{dM_B}{dt} = L_2 - V_B - B \quad \text{A. 12}$$

$$\frac{d(M_B \cdot x_B)}{dt} = x_2 L_2 - y_1 V_B - x_B B \quad \text{A. 13}$$

9.2. Apêndice B - Formulação de MPC baseado em espaço de estados

Na formulação em espaço de estados de controle preditivo com restrições, uma função objetivo quadrática dada pela Equação B. 1, deve ser minimizada em uma etapa de otimização, de modo a atender as restrições do processo representada pelas Equações B. 2 e B. 3.

$$J_{\Delta \mathbf{u}}(k) = \sum_{i=1}^P \|\mathbf{y}(k+i) - \mathbf{y}_s(k+i)\|_{\mathbf{Q}(i)}^2 + \sum_{i=0}^M \|\Delta \mathbf{u}(k+i)\|_{\mathbf{R}(i)}^2 + \sum_{i=0}^{M-1} \|\mathbf{u}(k+i) - \mathbf{u}_s(k+i)\|_{\mathbf{S}(i)}^2 \quad \text{B. 1}$$

$$\mathbf{y}_{\min} \leq \mathbf{y}(k) \leq \mathbf{y}_{\max} \quad \text{B. 2}$$

$$\mathbf{u}_{\min} \leq \mathbf{u}(k) \leq \mathbf{u}_{\max} \quad \text{B. 3}$$

onde P é o horizonte de predição do modelo do processo, M é horizonte de controle no qual se buscam as ações de controle $\Delta \mathbf{u}$, \mathbf{Q} é matriz de ponderação das variáveis controladas, e \mathbf{R} é matriz de ponderação das variáveis manipuladas.

Como pode ser visto na Equação B. 1, a minimização da função objetivo é feita em relação à variação $\Delta \mathbf{u}$, em vez de se utilizar diretamente \mathbf{u} . Isso é muito conveniente, já que o efeito do valor médio \mathbf{u} de é removido.

Considere o modelo linear, discreto e invariante no tempo (LTI) representado em espaço de estado dado pela Equação B. 4

$$\begin{aligned} \mathbf{x}(k+1) &= \mathbf{\Phi} \mathbf{x}(k) + \mathbf{\Gamma} \mathbf{u}(k) \\ \mathbf{y}(k) &= \mathbf{C} \mathbf{x}(k) \end{aligned} \quad \text{B. 4}$$

onde $\mathbf{x}(k) \in \mathfrak{R}^n$ é o vetor de estados do sistema, $\mathbf{u}(k) \in \mathfrak{R}^m$ é o vetor de variáveis de entrada, e $\mathbf{y}(k) \in \mathfrak{R}^p$ é o vetor de variáveis de saída.

De modo a introduzir $\Delta \mathbf{u}$ na função objetivo, o modelo em espaço de estados deve ser aumentado pelas variáveis de saída, conforme representado pelo vetor de estados ξ :

$$\xi(k) = \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{x}(k) \\ \mathbf{y}(k) \end{bmatrix} \quad \text{B. 5}$$

onde $\Delta \mathbf{x}(k) = \mathbf{x}(k) - \mathbf{x}(k-1)$.

A partir da Equação B. 4, vem que:

$$\mathbf{x}(k) = \Phi \mathbf{x}(k-1) + \Gamma \mathbf{u}(k-1) \quad \text{B. 6}$$

Subtraindo a Equação B. 6 da Equação B. 4, obtém-se que:

$$\Delta \mathbf{x}(k+1) = \Phi \Delta \mathbf{x}(k) + \Gamma \Delta \mathbf{u}(k) \quad \text{B. 7}$$

Do mesmo modo, a predição da saída do processo apenas um passo a frente é dada por:

$$\begin{aligned} \mathbf{y}(k+1) &= \mathbf{C} \mathbf{x}(k+1) \\ &= \mathbf{C} [\Delta \mathbf{x}(k+1) + \mathbf{x}(k)] \\ &= \mathbf{C} [\Phi \Delta \mathbf{x}(k) + \Gamma \Delta \mathbf{u}(k)] + \mathbf{y}(k) \end{aligned} \quad \text{B. 8}$$

Assim, o modelo do sistema em sua forma aumentada é definido como:

$$\begin{bmatrix} \Delta \mathbf{x}(k+1) \\ \mathbf{y}(k+1) \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \Phi & \mathbf{0} \\ \mathbf{C}\Phi & \mathbf{I} \end{bmatrix}}_{\hat{\Phi}} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{x}(k) \\ \mathbf{y}(k) \end{bmatrix} + \underbrace{\begin{bmatrix} \Gamma \\ \mathbf{C}\Gamma \end{bmatrix}}_{\hat{\Gamma}} \Delta \mathbf{u}(k) \quad \text{B. 9}$$

$$\mathbf{y}(k) = \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{bmatrix}}_{\hat{\mathbf{C}}} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{x}(k) \\ \mathbf{y}(k) \end{bmatrix}$$

Isto é,

$$\begin{aligned} \xi(k+1) &= \hat{\Phi} \xi(k) + \hat{\Gamma} \Delta \mathbf{u}(k) \\ \mathbf{y}(k) &= \hat{\mathbf{C}} \xi(k) \end{aligned} \quad \text{B. 10}$$

Assumindo que $\Delta \mathbf{u}(k+j) = 0$ para $M < j \leq P$ (isto é, as mudanças nas ações de controle são definidas como nulas após o horizonte de controle) e usando o modelo

em espaço de estado aumentado, a trajetória dos estados pode se estimada a partir da expressão dada por:

$$\Xi = \begin{bmatrix} \xi(k+1) \\ \vdots \\ \xi(k+P) \end{bmatrix} = \mathbf{F}\xi(k) + \mathbf{G}\Delta\mathbf{U}(k) \quad \text{B. 11}$$

onde $\Delta\mathbf{U}(k) = [\Delta\mathbf{u}(k), \dots, \Delta\mathbf{u}(k+M-1)]^T$.

As matrizes \mathbf{F} e \mathbf{G} são definidas como:

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \hat{\Phi} \\ \hat{\Phi}^2 \\ \vdots \\ \hat{\Phi}^{P-1} \end{bmatrix} \quad \text{B. 12}$$

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} \hat{\Gamma} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \hat{\Phi}\hat{\Gamma} & \hat{\Gamma} & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{\Phi}^{M-1}\hat{\Gamma} & \hat{\Phi}^{M-2}\hat{\Gamma} & \dots & \hat{\Gamma} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{\Phi}^{P-1}\hat{\Gamma} & \hat{\Phi}^{P-2}\hat{\Gamma} & \dots & \hat{\Phi}^{P-M}\hat{\Gamma} \end{bmatrix} \quad \text{B. 13}$$

Dessa forma, a função objetivo J a ser minimizada pode ser expandida e reescrita como:

$$J_{\Delta\mathbf{u}}(k) = \Delta\mathbf{U}(k)^T \left[\mathbf{G}^T \mathbf{C}^T \mathbf{Q} \mathbf{C} \mathbf{G} + \mathbf{R} \right] \Delta\mathbf{U}(k) + 2 \left[\mathbf{F} \xi(k) \right]^T \mathbf{C}^T - \bar{\mathbf{y}}(k)^T \mathbf{Q} \mathbf{C} \mathbf{G} \Delta\mathbf{U}(k) + \chi(k) \quad \text{B. 14}$$

onde

$$\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} \mathbf{Q}(1) & & \\ & \ddots & \\ & & \mathbf{Q}(P) \end{bmatrix} \quad \mathbf{R} = \begin{bmatrix} \mathbf{R}(1) & & \\ & \ddots & \\ & & \mathbf{R}(M) \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{C}}(1) & & \\ & \ddots & \\ & & \hat{\mathbf{C}}(P) \end{bmatrix} \quad \bar{\mathbf{y}}(k) = [\mathbf{r}(k+1)^T, \dots, \mathbf{r}(k+P)^T]^T$$

Por não ter efeito sobre a solução ótima, o termo $\mathbf{X}(k)$ pode ser retirado da função objetivo. Para uma redução da formulação, considere que $\mathbf{A} = \mathbf{G}^T \mathbf{C}^T \mathbf{Q} \mathbf{C} \mathbf{G} + \mathbf{R}$ e que $\mathbf{B} = \left[[\mathbf{F} \boldsymbol{\xi}(k)]^T \mathbf{C}^T - \bar{\mathbf{y}}(k)^T \right] \mathbf{Q} \mathbf{C} \mathbf{G}$. Então, buscando-se o gradiente de $J(k)$ e o igualando a zero, encontra-se a solução ótima para o sistema:

$$\Delta \mathbf{U}(k) = -\frac{1}{2} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}^T \quad \text{B. 15}$$

Esta lei de controle do MPC dada é linear e válida apenas para os casos em que não há restrições nas variáveis. Felizmente, a consideração de restrições existentes no sistema é simples e sistemática. Na verdade, esse é o fato que justifica a atração pelo uso do MPC. Nesta formulação, as restrições são definidas em relação à magnitude das variáveis manipuladas, à taxa de variação das ações de controle e aos estados do sistema.

Restrições nas variáveis de entrada: normalmente, em quase todos os processos, os atuadores têm um intervalo de variação finito. Portanto, restrições nessas variáveis devem ser definidas na magnitude da ação de controle para prevenir saturação do atuador. As restrições desse tipo são definidas como:

$$\mathbf{m}_{\min}(k) \leq \mathbf{u}(k) \leq \mathbf{m}_{\max}(k)$$

$$\mathbf{M} \cdot \mathbf{m}_{\min}(k) \leq \mathbf{U}(k) \leq \mathbf{M} \cdot \mathbf{m}_{\max}(k) \quad \text{B. 16}$$

$$\boldsymbol{\alpha} \leq \mathbf{U}(k) \leq \boldsymbol{\beta}$$

$$\text{onde } \mathbf{M} = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_m \\ \vdots \\ \mathbf{I}_m \end{bmatrix}, \mathbf{M} \in \mathfrak{R}^{M \times m}$$

Como a variável de decisão na busca da solução ótima é a taxa de variação das variáveis manipuladas, as restrições devem ser também definidas em termos de $\Delta\mathbf{U}$. Isto pode ser feito por meio da expressão:

$$\mathbf{u}(k+i-1) = \mathbf{u}(k-1) + \sum_{j=0}^{i-1} \Delta\mathbf{u}(k+j) \quad \text{B. 17}$$

que em notação matricial é dada por $\mathbf{U}(k) = \Lambda\Delta\mathbf{U}(k) + \mathbf{I} \cdot \mathbf{u}(k-1)$, onde a matriz Λ é

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_m & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{I}_m & \mathbf{I}_m & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{I}_m & \mathbf{I}_m & \mathbf{I}_m & \mathbf{I}_m \end{bmatrix}$$

Assim, as restrições nas variáveis de entrada podem ser expressas facilmente em termos de $\Delta\mathbf{U}$.

Restrições na taxa de variação das variáveis manipuladas: do mesmo modo, em um processo real, as variáveis manipuladas também têm limite em suas taxas de variação temporal, conforme:

$$\mathbf{l}_{min}(k) \leq \Delta\mathbf{u}(k) \leq \mathbf{l}_{max}(k)$$

$$\mathbf{M} \cdot \mathbf{l}_{min}(k) \leq \Delta\mathbf{U}(k) \leq \mathbf{M} \cdot \mathbf{l}_{max}(k) \quad \text{B. 18}$$

$$\boldsymbol{\psi} \leq \Delta\mathbf{U}(k) \leq \boldsymbol{\omega}$$

Restrições nas variáveis de estado/saída: na maior parte dos processos, este tipo de restrição é o mais importante, pois, por exemplo, representam a qualidade de produto, os limites de segurança e o atendimento à legislação ambiental. Nesta formulação de MPC, as restrições nas variáveis de estados são definidas como

$$\mathbf{n}_{min}(k) \leq \boldsymbol{\xi}(k) \leq \mathbf{n}_{max}(k)$$

$$\mathbf{N} \cdot \mathbf{m}_{min}(k) \leq \boldsymbol{\Xi}(k) \leq \mathbf{N} \cdot \mathbf{m}_{max}(k) \quad \text{B. 19}$$

$$\boldsymbol{\gamma} \leq \boldsymbol{\Xi}(k) \leq \boldsymbol{\delta}$$

$$\text{onde } \mathbf{N} = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{n+p} \\ \vdots \\ \mathbf{I}_{n+p} \end{bmatrix}, \mathbf{N} \in \mathfrak{R}^{P(n+p) \times (n+p)}$$

Da mesma maneira que as restrições das variáveis manipuladas, restrições nas variáveis de estados devem ser expressas em termos de $\Delta \mathbf{U}$. Essa mudança pode ser feita por meio do mapeamento dessas restrições sobre as restrições em $\Delta \mathbf{U}$ por meio da Equação B. 11.

Portanto, a formulação do MPC com restrições pode ser dada pelas Equações B. 20 e B. 21.

$$\min \Delta \mathbf{U}^T \mathbf{A} \Delta \mathbf{U} + \mathbf{B} \Delta \mathbf{U} \quad \text{B. 20}$$

sujeito às restrições lineares de desigualdade

$$\mathbf{D} \Delta \mathbf{U} \leq \boldsymbol{\varepsilon} \quad \text{B. 21}$$

onde

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Lambda} \\ -\boldsymbol{\Lambda} \\ \mathbf{I} \\ -\mathbf{I} \\ \mathbf{G} \\ -\mathbf{G} \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\beta} - \mathbf{I} \cdot \mathbf{u}(k-1) \\ \boldsymbol{\alpha} - \mathbf{I} \cdot \mathbf{u}(k-1) \\ \boldsymbol{\omega} \\ -\boldsymbol{\psi} \\ \boldsymbol{\delta} - \mathbf{F} \cdot \boldsymbol{\xi}(k) \\ -\boldsymbol{\gamma} + \mathbf{F} \cdot \boldsymbol{\xi}(k) \end{bmatrix}$$

Deste modo, a solução ótima para o problema de controle formulado é encontrada por meio de programação quadrática (QP). Apenas o primeiro termo da sequência de ações de controle calculada é implementado no processo. Posteriormente, o controle ótimo é computado novamente no próximo tempo de amostragem e a ação de controle deve ser aplicada continuamente de modo recorrente.

A escolha pelo MPC é justificada pela facilidade com que as restrições podem ser incorporadas, e, do mesmo modo, o algoritmo de programação quadrática permite obter soluções ótimas para variáveis manipuladas. A sintonia do algoritmo, por meio das matrizes de ponderação \mathbf{Q} e \mathbf{R} , ao longo dos horizontes, também permite que se alcance o comportamento desejado em malha fechada. Considerando que as variáveis de entrada e de saída estejam apropriadamente escaladas, é suficiente empregar

ponderações maiores nas variáveis manipuladas que aquelas utilizadas para as variáveis controladas, de modo a penalizar as variações e obter ações de controle suaves. Contudo, o desempenho do algoritmo pode ser severamente prejudicado (isto é, ser capaz de fazer ações correctivas mais agressivas) se o sistema se aproxima de suas restrições.

9.3. Apêndice C - Algoritmo de recálculo de *set-points* e priorização de restrições

Considere o modelo linear em estado estacionário dado pela Equação C. 1, onde as matrizes de ganho são dadas por $\mathbf{G} = \mathbf{C}(\mathbf{I}-\Phi)^{-1}\Gamma_u$, $\mathbf{G}_d = \mathbf{C}(\mathbf{I}-\Phi)^{-1}\Gamma_d$ e $\Gamma = [\Gamma_d \Gamma_u]$ e Δy é o *bias* atual.

$$\mathbf{y}_s = \mathbf{G} \cdot \mathbf{u}_s + \mathbf{G}_d \cdot \mathbf{d}_s + \Delta y \quad \text{C. 1}$$

O problema de recálculo de *set-points* pode ser expresso pelas Equações C. 2 a C. 4, onde os *set-points* \mathbf{y}_{set} e \mathbf{u}_{set} correspondem aos valores ótimos econômicos estacionários para as variáveis de saída e de entrada respectivamente.

$$\min_{\mathbf{y}_s, \mathbf{u}_s} \|\mathbf{y}_{set} - \mathbf{y}_s\|_{W_1}^2 + \|\mathbf{u}_{set} - \mathbf{u}_s\|_{W_2}^2 \quad \text{C. 2}$$

sujeito

$$\mathbf{y}_s = \mathbf{G} \cdot \mathbf{u}_s + \mathbf{G}_d \cdot \mathbf{d}_s \quad \text{C. 3}$$

$$\hat{\mathbf{H}} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{u}_s \\ \mathbf{y}_s \end{bmatrix} \leq \hat{\mathbf{b}} \quad \text{C. 4}$$

A solução para $(\mathbf{y}_s, \mathbf{u}_s)$ representa a nova especificação que deve ser implementada no MPC, de modo a atualizar os valores das variáveis para a perturbação \mathbf{d}_s . Deste modo, esse algoritmo considera a medida atual (ou o valor esperado) das perturbações e calcula os *set-points* das variáveis de saída e entrada para que a operação seja viável e mantido próximo ao seu ótimo. Esse cálculo é realizado a cada instante de amostragem, sempre antes do MPC ser ativado³.

De modo a violar apenas as restrições necessárias, pode-se forçar uma prioridade estrita entre as restrições que podem ser relaxadas. Assim, uma dada restrição é violada apenas se a violação arbitrária de outras restrições de prioridade inferior não garantir a viabilidade do problema. A implementação desta ideia é feita

³ DARBY, M. L., NIKOLAOU, M., JONES, J., NICHOLSON, D., 2011, "RTO: An overview and assessment of current practice". *Journal of Process Control*, v. 21, pp. 874-884.

com o uso de variáveis de folga δ , inserindo mais termos de penalização na função objetivo (isto é, $\mathbf{z}^T \delta + \delta^T \mathbf{Z} \delta$) e as restrições $\hat{\mathbf{H}} \cdot \mathbf{v} \leq \hat{\mathbf{b}} + \hat{\mathbf{L}} \delta$ e $\delta \geq 0$, onde \mathbf{z} e \mathbf{Z} são respectivamente o vetor e a matriz de penalização das variáveis de folga e $\mathbf{v} = [\mathbf{u}_s \quad \mathbf{y}_s]^T$.

Os elementos da matriz $\hat{\mathbf{L}}$, que podem ser 0 ou 1, indicam as restrições que podem ser violadas e são escritos de acordo com a lista de priorização. Se uma linha contém um elemento igual a 1, então a restrição correspondente pode ser relaxada.

Entretanto, em vez de se assumir *a priori* uma matriz $\hat{\mathbf{L}}$, antes de se iniciar o recálculo de *set-points*, pode se realizar uma série de programas lineares (LP) de modo a encontrar as restrições que devem ser violadas a cada instante e os valores de cada variável de folga. Pare este fim, o seguinte algoritmo pode ser aplicado⁴:

Passo 1

Defina:

- i. $\hat{\mathbf{H}}_r$ igual às linhas de $\hat{\mathbf{H}}$ correspondentes às restrições que não podem ser relaxáveis,
- ii. $\hat{\mathbf{b}}_r$ igual aos elementos correspondentes em $\hat{\mathbf{b}}$,
- iii. e $\mathbf{c}_r = [\mathbf{0}_u \quad \mathbf{0}_y \quad 1 \quad \dots \quad 1]^T$, onde os zeros devem ser interpretados com vetores de zeros com dimensão das entradas e saídas consideradas neste passo.

Resolva o problema LP:

$$\min_{\mathbf{y}_s, \mathbf{u}_s, \delta} \mathbf{c}_r^T \begin{bmatrix} \mathbf{u}_s \\ \mathbf{y}_s \\ \delta \end{bmatrix},$$

⁴ HOVD, M., 2007, "Improved target calculation for model predictive control". *Modeling, Identification and Control*, v. 28, n. 2, pp. 81-86

sujeito ao modelo do processo,
$$\begin{bmatrix} \hat{\mathbf{H}}_r & -\mathbf{I}_{n_u+n_y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{y}_s \\ \mathbf{u}_s \\ \boldsymbol{\delta} \end{bmatrix} \leq \hat{\mathbf{b}}_r \text{ e } \boldsymbol{\delta} \geq \mathbf{0}.$$

Ajustar \mathbf{c}_r dessa maneira é uma maneira de forçar que a magnitude das variáveis de folga tenda a zero durante a minimização. Se o ponto ótimo para o problema LP é maior que zero, então o conjunto de variáveis consideradas em $\hat{\mathbf{H}}_r$ tornam o problema inviável.

Proceda para o próximo passo apenas se o problema for viável.

Passo 2

Adicione:

As restrições relaxáveis mais importantes podem ser consideradas sistematicamente nesse passo, seguindo a lista de priorização a partir da restrição mais importante para menos importante. Assim, considere \mathbf{h}_i e b_i , correspondentes à linha de $\hat{\mathbf{H}}$ e ao elemento de $\hat{\mathbf{b}}$, em $\hat{\mathbf{H}}_r$ e $\hat{\mathbf{b}}_r$ respectivamente. Desse modo,

$$\hat{\mathbf{H}}_r = \begin{bmatrix} \left(\begin{matrix} \hat{\mathbf{H}}_n \\ \mathbf{h}_i \end{matrix} \right) & \left(\begin{matrix} \mathbf{0} \\ -1 \end{matrix} \right) \end{bmatrix},$$

onde $\hat{\mathbf{H}}_n$ é a matriz de restrições não relaxáveis e das com violação já conhecida.

Observe que o número de linhas em $\hat{\mathbf{H}}_r$ é aumento de acordo com o número de restrições relaxáveis.

Encontre:

A violação mínima das restrições que tornam o problema viável também é encontrada por meio do mesmo problema LP. Para isto, ajuste \mathbf{c}_r para $[\mathbf{0} \ \mathbf{0} \ 1]^T$. Os zeros em \mathbf{c}_r são ainda vetores zeros de dimensão apropriada, enquanto o número 1 é um escalar.

Passo 3

A contribuição da violação das restrições é o valor correspondente à variável de folga e tem que ser considerada em $\hat{\mathbf{b}}_r$. Isto é, deve-se modificar $\hat{\mathbf{b}}_r$ para $\hat{\mathbf{b}}_r + [0 \ 0 \ \dots \ 1]^T \delta$. Se houver mais restrições relaxáveis, volte para o Passo 2.

Passo 4

Quando todas as restrições forem sido consideradas e uma solução viável existir, então o problema QP inicialmente definido para o recálculo de *set-points*, com o conjunto de restrições modificadas, pode ser resolvido.