

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

KPI ORIENTED APPROACH FOR REAL-TIME OPTIMIZATION

TESE DE DOUTORADO

José Eduardo Weber dos Santos

Porto Alegre

2021

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

KPI ORIENTED APPROACH FOR REAL-TIME OPTIMIZATION

José Eduardo Weber dos Santos

Tese de Doutorado (D.Sc.) apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Engenharia.

Área de concentração:

Pesquisa e Desenvolvimento de Processos

Linha de Pesquisa:

Projeto, Simulação, Modelagem, Controle e Otimização de Processos.

Orientadores:

Prof. Dr. Jorge Otávio Trierweiler

Prof. Dr. Marcelo Farenzena

Porto Alegre

2021

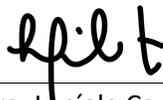
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

A Comissão Examinadora, abaixo assinada, aprova a Tese *KPI oriented approach for Real-time Optimization*, elaborada por José Eduardo Weber dos Santos, como requisito parcial para obtenção do Grau de Doutor em Engenharia.

Comissão Examinadora:



Prof. Dr. Darci Odloak / USP



Profa. Dra. Lucíola Campestrini / UFRGS



Profa. Dra. Viviane Botelho / UFCSPA

Resumo

Indicadores-chave de desempenho (*Key-performance Indicators - KPIs*) são ferramentas capazes de medir e avaliar o nível de desempenho e sucesso econômico e/ou operacional de um dado processo. Além disso, a busca pelo maior lucro através de um melhor consumo de matéria-prima e energia garantindo uma maior qualidade e conformidade de especificações é facilitada pela aplicação de técnicas de otimização em tempo real. Essas técnicas aliadas à KPIs e a controladores preditivos baseado em modelo possibilitam o controle e otimização de sistemas com maior número de variáveis controladas do que manipuladas, sistemas que operam em faixas (também chamadas *soft-constraints*) e presença de restrições operacionais. No entanto, distúrbios externos não-medidos e a má qualidade de modelos prejudicam o funcionamento robusto do processo levando o sistema a operar fora das especificações, ou em regiões sub-ótimas. Por isso, esta tese aborda um estudo sobre estratégias de otimização em tempo real (*Real-time Optimization - RTO*) e suas aplicações. As principais contribuições do trabalho são: (1) revisão bibliográfica sobre estratégias de RTO abordando suas principais características e aplicações; (2) estratégia preliminar de controlador MPC estendido, capaz de abordar controle e otimização em uma única camada; (3) emprego de estimadores de estado e medições do processo para atualização do KPI operacional, considerado uma variável controlada através de *set-point* pelo controlador MPC; (4) análise da influência do ponto de operação dos modelos utilizados para o KPI e para o controlador MPC linear, estimando-os e atualizando-os através de técnicas de estimação de distúrbios não medidos e parâmetros, baseados em medições do modelo dinâmico não-linear; e (5) influência de fatores de robustez para MPC econômico orientado à KPIs capaz de manter as variáveis controladas através de faixas de operação impondo restrições para as variáveis de entrada e saída do modelo baseado na magnitude do distúrbio. As técnicas propostas são avaliadas e testadas em estudos de caso simulados de forma a exemplificar aplicações industriais corroborando a metodologia proposta ao controlar a função custo no valor ótimo (dado pelo KPI), rejeitando distúrbios e mantendo as saídas do processo nas especificações de forma robusta e sem elevado tempo computacional.

Palavras-chave: Indicador-chave de Desempenho, Controle Preditivo, Otimização em Tempo Real, Estimadores de estado, Atualização de Modelo.

Abstract

Key-performance Indicators (KPIs) are tools capable of measure and evaluate the economic and/or operational development and success of a given process. Besides that, the search for higher operational profit through better consumption of raw materials and energy ensuring greater quality and specifications is facilitated by the application of Real-time Optimization techniques. These techniques allied to KPIs and combined with model-based predictive controllers allow the control and optimization of systems with a greater number of controlled than manipulated variables, systems that operate in ranges (also called soft-constraints), and the presence of operational constraints. However, unmeasured external disturbances and poor model quality jeopardize the robust process operation, leading the system to operate outside specifications, or in sub-optimal regions. For this reason, this thesis addresses a study about Real-time Optimization strategies and their applications. The main contributions of this work are (1) bibliographic review about RTO strategies and their main characteristics and applications; (2) preliminary strategy of extended MPC controller, capable of handle control and optimization in one layer; (3) employment of state estimators and process measurements to update the operational KPI, considered as a controlled variable through set-point by the MPC controller; (4) analysis of the operation points of the models employed in the KPI and the linear MPC, estimating and updating them through parameters and unmeasured disturbance estimations techniques, based on measurements of the dynamic nonlinear model; and (5) robustness factors influence for Economic MPC oriented by KPIs, capable of keeping the controlled outputs in ranges and imposing constraints in the inputs and outputs according to the disturbance magnitude. The proposed techniques are evaluated and tested in simulated case studies to exemplify industrial applications corroborating the proposed methodology by controlling the cost function at the optimal value (given by the KPI), rejecting disturbances, and keeping the process outputs in the specifications in a robust way and without higher computational load.

Keywords: Key-performance Indicator, Predictive Control, Real-time Optimization, State estimator, Model updating.

SUMÁRIO

Capítulo 1 – Introdução	1
1.1 Motivação.....	1
1.2 Objetivos	5
1.3 Contribuições	5
1.4 Resumo Gráfico	6
1.5 Estrutura.....	6
1.6 Produção Científica	7
1.6.1 Capítulos deste trabalho:.....	7
1.6.2 Trabalhos completos publicados em anais de congresso:	7
Capítulo 2 – Revisão Bibliográfica	9
2.1 RTO Estático	10
2.2 RTO Dinâmico.....	12
2.3 MPC Econômico	14
2.4 RTO Híbrido	15
2.5 Outras técnicas para otimização de processos em tempo real	17
2.5.1 Self-Optimizing Control.....	17
2.5.2 NCO tracking.....	18
2.5.3 Extremum Seeking Control.....	19
2.5.4 Modifier Adaptation	20
2.5.5 Feedback RTO	20
2.6 Comparação das técnicas de Otimização em Tempo Real	21
Capítulo 3 – Abordagem de Controlador MPC+Otimizador em uma camada	25
3.1 Introdução	25
3.2 Estrutura Clássica LP-MPC em Cascata	27
3.3 Estrutura de Controlador MPC+Otimizador.....	29
3.4 Estudo de Caso – CSTR com coluna de separação e reciclo.....	30
3.5 Conclusão	35
3.6 Agradecimentos	35
Capítulo 4 – Economic performance tracking for nonsquare MPCs based on a two-layer approach 37	
4.1 Introduction.....	37
4.2 Background.....	39
4.2.1 Model Predictive Control.....	39
4.2.2 Real-time Optimization.....	40
4.2.3 Discrete-time extended Kalman filter	42
4.3 An Unified Structure for Control and Optimization	43
4.4 Illustrative Example	45
4.5 Conclusions.....	54
Capítulo 5 – Model update based on transient measurements for Model Predictive Control and Hybrid Real-time Optimization	57
5.1 Introduction.....	58
5.2 Background.....	59
5.2.1 MPC and RTO approaches	59
5.2.2 Unscented Kalman Filter.....	61
5.3 Problem Formulation	62
5.4 Case Study	66
5.5 Conclusions.....	73

Capítulo 6 – Robust Economic Range Model Predictive Control	75
Capítulo 7 – Considerações Finais	77
7.1 Conclusões.....	77
7.2 Sugestões para trabalhos futuros	79
Referências	81

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1: CSTR com coluna de separação e reciclo. Fonte: (SANTOS; TRIERWEILER; FARENZENA, 2019)	2
Figura 1.2: Resumo gráfico relacionando os objetivos e contribuições do trabalho.	6
Figura 2.1: Estrutura de um RTO estático. (Adaptado de: TRIERWEILER (2013)).....	10
Figura 2.2: Estrutura de um DRTO. (Adaptado de: KRISHNAMOORTHY; FOSS; SKOGESTAD (2018))	13
Figura 2.3: (a) Estrutura padrão de MPC + otimizador e (b) estrutura de EMPC.	15
Figura 2.4: RTO Híbrido. (Adaptado de: KRISHNAMOORTHY; FOSS; SKOGESTAD (2018)).	16
Figura 2.5: Estrutura do SOC.	18
Figura 2.6: Estratégia de otimização NCO <i>tracking</i>	19
Figura 2.7: Esquema representativo do ESC.	19
Figura 2.8: Feedback RTO.....	21
Figura 2.9: Classificação das Estratégias de Otimização em Tempo Real.....	22
Figura 3.1: Malha de retroalimentação.	28
Figura 3.2: Estrutura LP-MPC em cascata.	29
Figura 3.3: Estrutura de MPC+Otimizador	30
Figura 3.4: CSTR com coluna de separação e reciclo	31
Figura 3.5: Variáveis controladas (a) e manipuladas (b) para estrutura clássica.	34
Figura 3.6: Variáveis controladas (a) e manipuladas (b) para estrutura proposta.	34
Figura 3.7: Comparação entre o custo de operação para a estrutura clássica e proposta.	35
Figure 4.1: Real-time optimization (RTO) + model predictive controller (MPC) implementation.	41
Figure 4.2: Extended model predictive controller (MPC) capable of handling economic aspects.....	45
Figure 4.3: Schematic representation of continuous stirred-tank reactor (CSTR).	46
Figure 4.4: Economic cost function behavior varying Fin and QK	48
Figure 4.5: Economic cost function behavior related to disturbances.	49
Figure 4.6: Disturbance variations.	50
Figure 4.7: Controlled (by range) outputs of the proposed approach; dashed lines represent the soft-constraints and solid lines the outputs.....	51
Figure 4.8: Set-point (dashed line) and controlled cost function (solid line) of the proposed methodology.	51
Figure 4.9: Manipulated inputs of the proposed approach; dashed lines represent the hard constraints and solid lines the inputs.	52
Figure 4.10: Controlled (by range) outputs for the traditional real-time optimization (RTO) implementation; dashed lines represent the soft-constraints and solid lines the outputs.	52
Figure 4.11: Manipulated inputs of the traditional implementation: magenta dashed lines represent the target values, solid lines the inputs and coral dashed lines the hard constraints	53
Figure 4.12: Achieved cost operation in the proposed approach (solid blue) and in the traditional implementation (dash-dot green); the optimal static set-point (magenta).	53
Figure 4.13: Integral of the achieved cost operation in the proposed approach (solid blue) and in the traditional implementation (solid green).....	54
Figure 5.1: Classical MPC+RTO scheme.....	61
Figure 5.2: Model update based on transient measurements for MPC and RTO.	64
Figure 5.3: Williams-Otto Reactor.....	66

Figure 5.4: Real data and estimated model by augmented UKF for Williams-Otto reactor.	68
Figure 5.5: Unmeasured disturbance (and estimated values) and manipulated inputs for Williams-Otto reactor.....	68
Figure 5.6: Real data, Updated Linear Model, and $P01$ and $P02$ models for Williams-Otto reactor.	69
Figure 5.7: Controlled outputs (by range) and cost function tracking for the William-Otto reactor applying the proposed approach.....	70
Figure 5.8: Manipulated inputs and disturbance compensation for the William-Otto reactor applying the proposed approach.....	71
Figure 5.9: Controlled outputs (by range) and cost function tracking for the Williams-Otto reactor considering a fixed controller model.....	72
Figure 5.10: Manipulated inputs and disturbance for the Williams-Otto reactor considering a fixed controller model.....	72
Figura 7.1: <i>Estratégia KPI oriented approach for Real-time Optimization</i>	78

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1: Ponto de Operação, <i>Soft-</i> e <i>Hard-constraints</i>	32
Tabela 3.2: Parâmetros dos controladores MPC.	33
Table 4.1: Nominal Operating Point.....	48
Table 5.1: Material balances for plant and approximate model.	67

Capítulo 1 – Introdução

Indicadores-chave de desempenho, do inglês *Key-Performance Indicators* (KPIs), são métricas formadas a partir de variáveis de processo que indicam desempenho operacional, desempenho econômico (lucro ou custo), rendimento de equipamentos e operações, conversão de reagentes em produtos dentre outros. A maximização (considerando lucro, rendimento, conversão) ou minimização (considerando custo operacional) desses indicadores proporciona uma melhor alocação de recursos, consumo consciente de matéria-prima e energia, crescimento sustentável, e minimização de impactos ambientais, elencando fatores determinantes para o sucesso econômico e operacional de unidades industriais.

O presente trabalho visa à elaboração de estratégias de otimização em tempo real orientadas a KPIs. Este capítulo introduz o trabalho apresentando as motivações, objetivos, contribuições e estrutura de desenvolvimento do projeto.

1.1 Motivação

A modernização da indústria de processos através do avanço tecnológico de sensores e atuadores, qualidade de informações e rapidez no processamento de sinais trouxe consigo uma necessidade de aprimoramento viabilizando técnicas para otimização em tempo real. No entanto, a diferença entre as abordagens acadêmica e industrial ainda é um fator limitante para a transferência do conhecimento gerado nas universidades para o chão de fábrica de forma rápida e articulada. O objetivo dessa seção é mostrar a relevância dessa necessidade em um exemplo simples, através do estudo de caso de um Reator Contínuo agitado (CSTR) com coluna de destilação e reciclo adaptado em Schultz *et al.* (2016b) e Santos *et al.* (2019) e ilustrado na Figura 1.1.

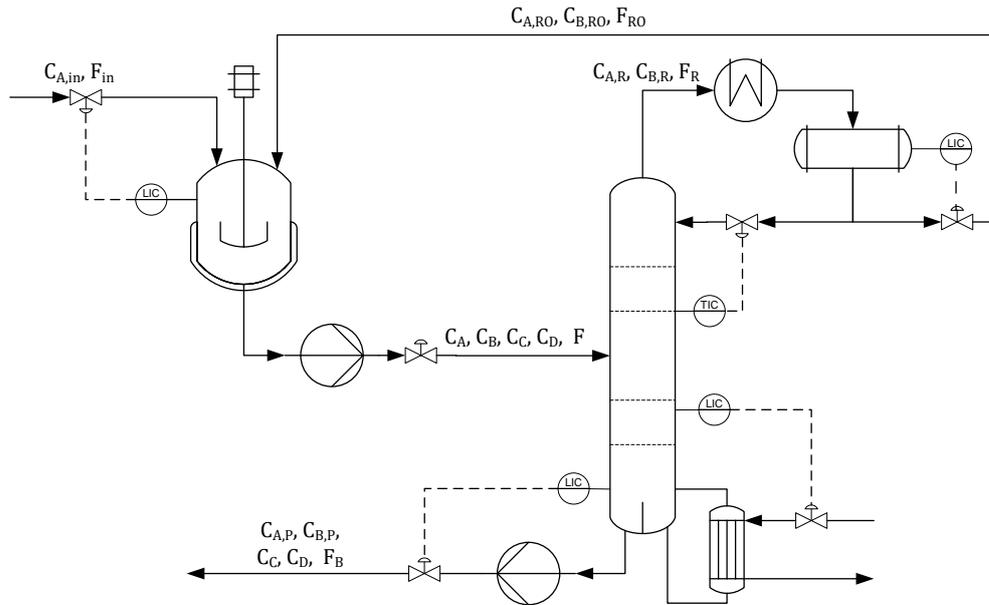
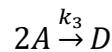
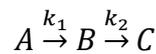


Figura 1.1: CSTR com coluna de separação e reciclo.

Fonte: (SANTOS; TRIERWEILER; FARENZENA, 2019)

Esse sistema consiste em um reator CSTR onde ocorre uma reação química com cinética de Van de Vusse:



O componente A é alimentado no reator visando gerar o produto B e o resíduo que não reagiu é separado na coluna de destilação, junto com os subprodutos C e D , e reciclado. É considerado que a corrente de reciclo possui apenas os componentes A e B , os componentes pesados C e D são totalmente removidos pela corrente de fundo da coluna.

Esse estudo de caso pode ser aplicado em:

- **Determinação de KPI operacional:** pelo fato de um KPI se tratar de uma métrica formada a partir de variáveis presentes em processos industriais, e se tratando de um processo Multi-Input-Multi-output (MIMO), é possível determinar diferentes tipos de Indicadores-chave de desempenho, dentre eles:
 - a) KPI energético – considerando a quantidade de energia fornecida e o rendimento energético para ocorrer a reação química no CSTR, para a separação dos componentes da corrente de saída F do reator, e dos diversos trocadores de calor presentes no processo;
 - b) KPI ambiental – analisando a quantidade de resíduo não reciclado que será descartado na corrente de fundo da coluna de destilação com vazão F_P e concentração $C_{A,P}$, $C_{B,P}$, C_C e C_D ;

- c) KPI econômico – considerando o lucro operacional ao relacionar o valor dos produtos obtidos, no caso o produto de interesse C_B sendo o que possui o maior valor agregado, em relação ao custo de matéria prima $C_{A,in}$ e energia para reação e separação;
 - d) KPI de qualidade do produto – ao considerar um valor agregado diferente para cada produto, a pureza e concentração de C_B , por exemplo, irão modificar o valor desse indicador-chave; Além da influência dos resíduos (C_A, C_C e C_D) que irão alterar negativamente esse KPI;
 - e) KPI de satisfação do cliente – indicador-chave de desempenho que considera o custo da operação (relacionado valor dos reagentes, produtos e energia), pureza do produto (concentração do produto final e quantidade de resíduos) e minimização de resíduos para o meio ambiente.
- **Controle preditivo para sistemas não-quadrados através de faixas:** no estudo de caso podem ser estabelecidas faixas de operação para as variáveis controladas C_B, C_C e C_D de forma não-quadrada, isto é, de maior número em relação às variáveis de entrada F_{in} e F_R , permitindo que essas variáveis de saída permaneçam em um determinado range de operação, ao invés de seguir um valor de *set-point*.
 - **Análise do modelo do processo:** o modelo desse processo pode apresentar incerteza em relação à planta real, sendo possível a partir dele estudar robustez de métodos e influência de pontos de operação em controladores preditivos baseados em modelo.
 - **Estimação de parâmetros e distúrbios:** ao considerar um modelo incerto, e apresentar valores de distúrbios, é possível através de estimadores de estado e dados de planta, reconciliar o modelo ajustando-o através de estimação de valores desconhecidos de distúrbios e parâmetros.
 - **Otimização em tempo real:** baseado em KPI operacional e com auxílio de estimadores de parâmetros/distúrbios é possível determinar estratégia de otimização em tempo real capaz de reconciliar o modelo do processo e calcular valores ótimos de *targets/set-points* para variáveis manipuladas, capazes de otimizar a operação.
 - **MPC econômico:** ao considerar o KPI operacional como função objetivo do controlador MPC, visando otimizá-lo através minimização dessa métrica determinando ações ótimas de controle para as variáveis manipuladas, rejeitando distúrbios e respeitando as faixas de operação.
 - **Aplicação em MPC industriais:** por ser um modelo representativo com forte interação entre as variáveis, ele é capaz de representar de forma coerente um processo industrial, sendo então, utilizado como referência para determinação de estratégias.
 - **Aplicação em estratégias híbridas de controle e otimização:** Ao considerar um modelo capaz de exemplificar um processo real é possível estabelecer técnicas de controle e otimização em uma camada capazes de manter as variáveis controladas nas suas respectivas especificações, rejeitando distúrbios, sensíveis à variação dos pontos de operação, sem exceder os

valores limites das variáveis manipuladas (suprimindo suas ações de controle de forma robusta) e de forma ótima.

Além disso, destacam-se alguns problemas fundamentais que devem ser superados a fim de garantir o sucesso de um processo produtivo (QIN, S Joe; BADGWELL, 2003b):

- Necessidade de adequação das estratégias a fim de garantir uma operação industrial ótima;
- Necessidade de redução de custos operacionais, através da integração dos processos;
- Normas ambientais e de segurança cada vez mais restritas;
- Necessidade de alto desempenho.

De acordo com Skogestad (2005; 2000a) a combinação de controle preditivo baseado em modelo, do inglês *Model Predictive Control* (MPC), e Otimização em Tempo Real, do inglês *Real-Time Optimization* (RTO), é amplamente utilizada na indústria química e petroquímica como forma de otimizar processos contínuos garantindo uma maior eficiência, qualidade do produto final, segurança operacional, baixo impacto ambiental e etc. (GRACIANO *et al.*, 2015). Entretanto, apesar do grande número de trabalhos publicados relacionados a esse assunto, algumas áreas ainda necessitam de ajustes:

- 1) **Inexistência de trabalho de revisão dos métodos** – As estratégias para otimização em tempo real aliadas a controle preditivo possuem inúmeras aplicações específicas considerando: importância atualização de modelos, necessidade de atualização de parâmetros, influência de distúrbios, robustez, inclusão de restrições, limitações dinâmicas etc. Essas particularidades apresentadas em cada método comprometem o entendimento e novos desenvolvimentos na área.
- 2) **Baixa conexão entre indústria e meio acadêmico** – Em relação a controladores preditivos industriais, essa diferença fica evidente ao implementar MPCs não-quadrados em faixas de operação (BOTELHO *et al.*, 2019), uma vez que a grande maioria de artigos científicos relacionados a controle preditivo e otimização em tempo real considera MPCs com o mesmo número de variáveis controladas e manipuladas operando em *set-points*.
- 3) **Pouca aplicabilidade industrial dos métodos** – Pelo fato das técnicas desenvolvidas em ambiente acadêmico não representarem, na maioria das vezes, estratégias comuns em ambientes industriais, ou ainda, representarem estratégias capazes de comprometer a estabilidade do processo, sua implementação acaba sendo prejudicada.
- 4) **Metodologias imprecisas, não robustas e ineficientes para aplicações industriais** – O sucesso econômico de uma unidade varia de acordo com a presença de distúrbios no processo e o custo relativo às demandas e produtos. Dessa maneira, distúrbios frequentes têm de ser corrigidos de maneira rápida, robusta e não devem exigir altas demandas computacionais a fim de garantir que o processo permaneça o maior tempo possível no ponto ótimo evitando assim, perdas econômicas.

A necessidade de uma eficiente e adequada estratégia de otimização em tempo real, com a possibilidade de integração a KPIs, leva a uma operação com maior retorno econômico juntamente com uma diminuição no consumo de matéria-prima e energia. Conforme dados do Relatório de Sustentabilidade da Petrobras de 2017, as ações de melhoria no desempenho energético possibilitaram uma economia de 2910 TJ/ano, equivalente ao consumo de energia elétrica de uma cidade com 113 mil habitantes por um ano (PETROBRAS, 2017). Dessa maneira, torna-se fundamental desenvolver tecnologias aplicáveis industrialmente de forma a garantir a qualidade final do produto de forma econômica e sustentável.

1.2 Objetivos

O presente trabalho tem como objetivo principal determinar estratégias de otimização em tempo real orientadas a KPIs para processos industriais, de modo a garantir uma operação ótima, robusta e estável. Dentre os objetivos específicos, destacam-se:

- OB1 – Revisar a literatura sobre temas relacionados à Otimização em tempo Real;
- OB2 – Propor técnica capaz de superar a diferença entre os tempos de amostragem entre a camada de otimização e supervisória;
- OB3 – Propor técnica de otimização sem a necessidade de elevado tempo computacional;
- OB4 – Propor técnica robusta e sensível à variação do modelo do processo;
- OB5 – Utilizar medidas do processo para atualizar o modelo e estimar parâmetros/distúrbios;
- OB6 – Propor técnica de otimização em tempo real com bom desempenho que atende às particularidades dos ambientes industriais;

1.3 Contribuições

Têm-se como contribuições do trabalho:

- C1 – Revisão e classificação dos métodos de RTO;
- C2 – Estrutura unificada que abrange o controle regulatório, através de faixas de operação, e a otimização do processo;
- C3 – Estratégia aplicável em controladores que atendem as demandas e características industriais;
- C4 – Análise da influência e atualização do modelo baseado em medidas de processo e estimadores de estados;
- C5 – Desenvolvimento de técnica capaz de controlar Indicadores-chave de desempenho (KPIs);
- C6 – Desenvolvimento de estratégias robustas capazes de computar ações ótimas de controle e otimização;

1.4 Resumo Gráfico

A Figura 1.2 apresenta um resumo gráfico que relaciona os objetivos deste trabalho com as contribuições resultantes de cada capítulo da tese.

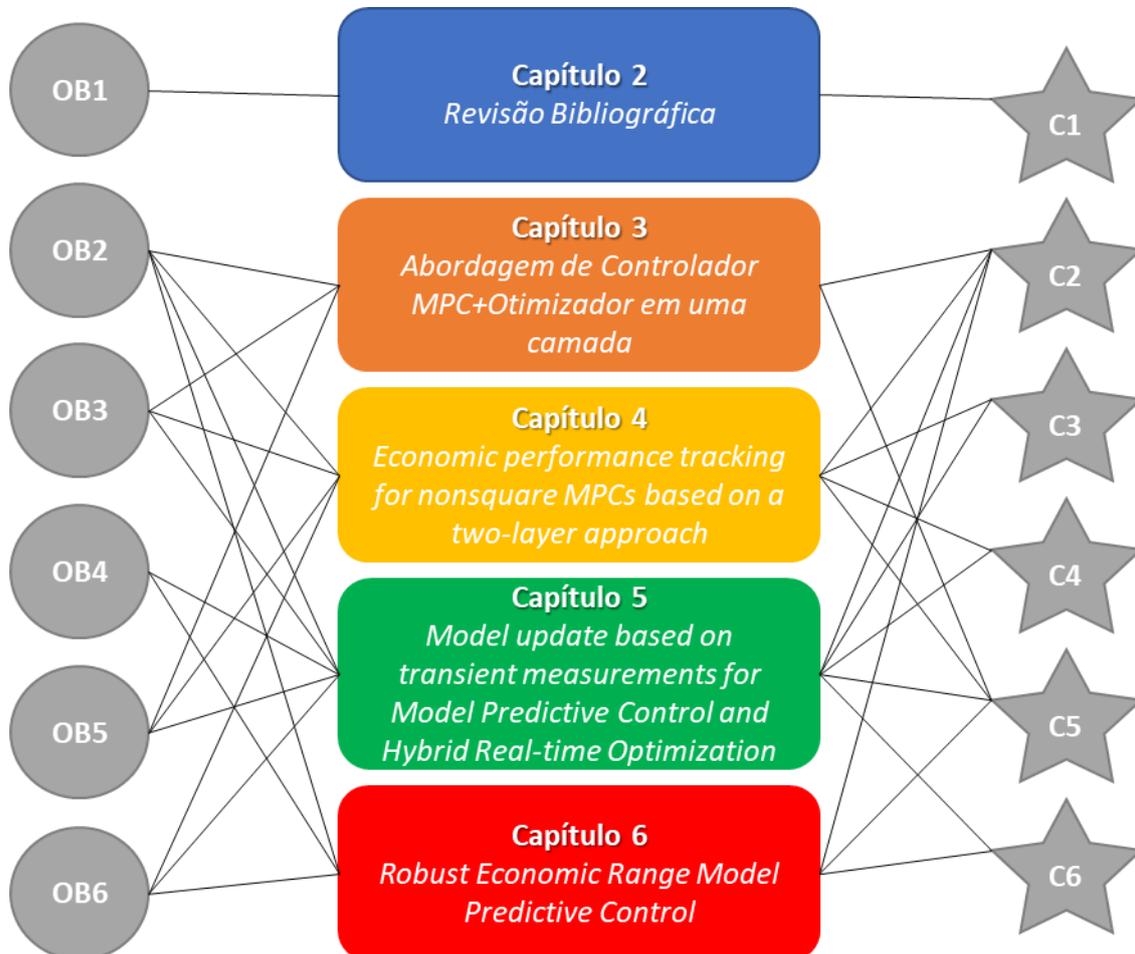


Figura 1.2: Resumo gráfico relacionando os objetivos e contribuições do trabalho.

1.5 Estrutura

O presente trabalho está estruturado em 6 capítulos. Neste capítulo é apresentada a motivação principal do trabalho, objetivos, contribuições, estrutura e produção científica desenvolvida durante o seu projeto.

O Capítulo 2 é composto por uma revisão bibliográfica sobre os principais métodos de otimização em tempo real, abordando-os e classificando-os de acordo com as suas principais características.

O Capítulo 3 apresenta uma abordagem preliminar que visa estruturar um controlador preditivo baseado em modelo (MPC) estendido, capaz de abranger controle e otimização em uma única camada, servindo como base para as demais metodologias.

No Capítulo 4 é apresentada uma proposta de otimização em tempo real na qual trata da inclusão de aspectos econômicos em MPCs industriais através do controle direto do lucro/custo operacional em um controlador preditivo.

No Capítulo 5 é analisada a importância da atualização do modelo do processo, através de medidas e estimadores de estados, e como essa atualização implica na otimização de um processo industrial.

No Capítulo 6 é apresentada uma estratégia de Controlador MPC Econômico orientado a KPIs com particularidades relacionadas à operação através de faixas e à inclusão de critérios de robustez.

O trabalho finaliza com as conclusões e sugestões para trabalhos futuros.

1.6 Produção Científica

O desenvolvimento deste trabalho originou a produção científica listada a seguir:

1.6.1 Capítulos deste trabalho:

CAP3: SANTOS, J.E.W.; TRIERWEILER, J.O.; FARENZENA, M.; Abordagem de Controlador MPC+Otimizador em uma camada. Publicado nos Anais do XXII Congresso Brasileiro de Automática.

CAP4: SANTOS, J.E.W.; TRIERWEILER, J.O.; FARENZENA, M.; Economic performance tracking for nonsquare MPCs based on a two-layer approach. Publicado no *The Canadian Journal of Chemical Engineering*.

CAP5: SANTOS, J.E.W.; TRIERWEILER, J.O.; FARENZENA, M.; Model Update Based on Transient Measurements for Model Predictive Control and Hybrid Real-Time Optimization. Publicado no *Industrial & Engineering Chemistry Research*.

CAP6: SANTOS, J.E.W.; TRIERWEILER, J.O.; FARENZENA, M.; ALLGÖWER, F.; Robust Economic Range Model Predictive Control. Será submetido em revista a ser definida.

1.6.2 Trabalhos completos publicados em anais de congresso:

CONG1: SANTOS, J.E.W.; TRIERWEILER, J.O.; FARENZENA, M.; Formulação MPC estendida com função econômica. Publicado no Simpósio Brasileiro de Automação Inteligente, 2017.

CONG2: SANTOS, J.E.W.; APIO, A.; TRIERWEILER, J.O.; FARENZENA, M.; Abordagem de Controlador MPC+Otimizador em uma camada. Publicado no Congresso Brasileiro de Automática, 2018.

CONG3: APIO, A.; DIEHL, F. C.; SANTOS, J. E. W.; FARENZENA, M.; TRIERWEILER, J.O.; Comparação entre filtros de Kalman para estimação da PDG na produção de petróleo offshore. Publicado no Congresso Brasileiro de Automática, 2018.

CONG4: SANTOS, J.E.W.; TRIERWEILER, J.O.; FARENZENA, M.; PID tuning for nonminimum phase systems: setting attainable limits for a stable behaviour. Publicado no 12th IFAC Symposium on Dynamics and Control of Process Systems including Biosystems, 2019.

Capítulo 2 – Revisão Bibliográfica

Um problema de otimização trata-se de uma formulação que visa encontrar a melhor solução entre todas as soluções viáveis, isto é, determinar os valores extremos de uma função (o maior ou o menor valor que a função pode assumir em determinado intervalo) (DARBY *et al.*, 2011). Matematicamente, orientado à KPIs devido à proposta desse trabalho, um problema-base é formulado da seguinte maneira:

$$u^*, y^* = \arg \min_{u, y} \|KPI_{TARGET} - KPI(u, y; \theta)\|_2 \quad (2.1)$$

$$g(u, y; \theta) \leq 0 \quad (2.2)$$

$$h(u, y; \theta) = 0 \quad (2.3)$$

onde u e y são as variáveis de decisão e θ representam os parâmetros do modelo. $KPI(u, y; \theta)$ representa o Indicador-chave de desempenho, KPI_{TARGET} o valor desejado, podendo ser zero no caso de, por exemplo um KPI vinculado a uma função custo o qual normalmente se quer minimizar, g e h representam as restrições de desigualdade e igualdade, respectivamente, podendo ser os limites físicos e/ou operacionais do processo a ser otimizado, modelo estático, etc.

Otimização em tempo real (RTO) engloba uma família de métodos de otimização que incorpora as medidas do processo na estrutura de otimização para direcionar o processo real (ou planta) para o seu desempenho ótimo, respeitando as restrições (MARCHETTI, G. A. *et al.*, 2016).

A maneira com que esse problema de otimização (Equação 2.1) é implementado exemplifica as diferentes estratégias de otimização em tempo real aplicada a processos, que variam conforme: o modelo do processo, estratégia em camadas, comunicação entre as camadas, atualização do modelo e do custo etc.

Neste capítulo são abordadas algumas metodologias de Otimização em Tempo Real, aplicáveis a processos, propostas na literatura juntamente com as suas principais características de implementação, desempenho computacional, robustez e eficiência.

2.1 RTO Estático

Otimização em tempo real (RTO) tem como objetivo principal otimizar a operação levando em conta diretamente termos econômicos e um modelo rigoroso do processo. Isso ocorre através do rastreamento das variações na operação ótima causadas por mudanças em baixas frequências (qualidade da matéria-prima e composição, desativação de catalizador, distúrbios na carga, entre outros) (TRIERWEILER, 2013).

A estrutura típica de um sistema de RTO estático é apresentada na Figura 2.1 e é composta por subsistemas para detecção do estado estacionário, reconciliação e validação de dados, atualização do modelo do processo e otimização estática.

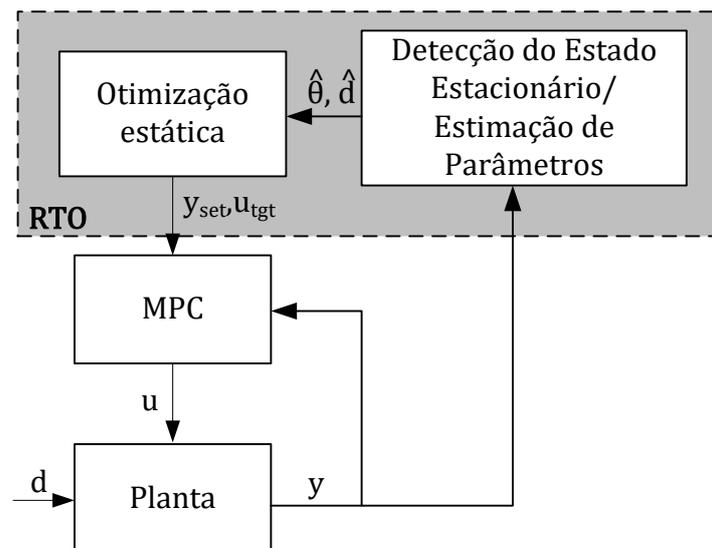


Figura 2.1: Estrutura de um RTO estático. (Adaptado de: TRIERWEILER (2013))

A execução do loop de um RTO estático convencional começa com a detecção do estado estacionário, onde é determinado se a planta está operando perto suficiente do valor de equilíbrio, isto é, uma constância aceitável das medidas dado um determinado período de tempo. Essa determinação pode ser dificultada principalmente devido ao ruído do processo, mas é de fundamental importância, pois, a partir dessa detecção, será disparada ou não, a sequência que levará a otimização (CÂMARA; QUELHAS; PINTO, 2016).

A etapa subsequente consiste na reconciliação de dados e ocorre a fim de ajustar, através de técnicas de regressão, os parâmetros do modelo rigoroso do processo de forma que as saídas oriundas desse modelo correspondam aos valores medidos (KRISHNAMOORTHY; FOSS; SKOGESTAD, 2018).

Por fim, dada uma função objetivo que relaciona o custo ótimo de operação ou KPI, restrições operacionais do processo (valores limites máximos e mínimos para as variáveis controladas e manipuladas) e um modelo rigoroso atualizado, são calculados valores ótimos de *set-points/targets* através de métodos de otimização (DARBY *et al.*, 2011). Os valores de *set-points/targets* provenientes desse problema de otimização são tomados como referência para a camada inferior, geralmente sendo um controlador preditivo baseado em modelo (MPC).

Krishnamoorthy *et al.* (2018) considera o modelo matemático de um RTO estático através de um processo não linear dado por

$$x_{k+1} = f(x_k, u_k; \theta_k) \quad (2.4)$$

$$y_k = h(x_k, u_k) \quad (2.5)$$

onde $x_k \in \mathbb{R}^{n_x}$, $u_k \in \mathbb{R}^{n_u}$ e $y_k \in \mathbb{R}^{n_y}$ são os estados, entradas e saídas do processo no instante k , respectivamente. O modelo é parametrizado através de parâmetros que variam no tempo e distúrbios, juntamente representados por $\theta_k = [p_k^T, d_k^T]^T \in \mathbb{R}^{n_\theta}$. As equações de modelo são representadas por $f: \mathbb{R}^{n_x} \times \mathbb{R}^{n_u} \times \mathbb{R}^{n_\theta} \rightarrow \mathbb{R}^{n_x}$ e $h: \mathbb{R}^{n_x} \times \mathbb{R}^{n_u} \rightarrow \mathbb{R}^{n_y}$. O modelo estático do processo é representado por

$$y = f_{ss}(u, \theta) \quad (2.6)$$

onde $f_{ss}: \mathbb{R}^{n_u} \times \mathbb{R}^{n_\theta} \rightarrow \mathbb{R}^{n_y}$.

A partir da detecção do estado estacionário, que pode ser obtida através de métodos heurísticos ou estatísticos (TRIERWEILER, 2013), os parâmetros do modelo atualizado são determinados através da minimização do erro entre o modelo predito e os valores medidos em um problema de estimação estático:

$$\hat{\theta}_k = \arg \min_{\theta} \|y_{meas} - f_{ss}(u_k, \theta)\|_2^2 \quad (2.7)$$

onde $y_{meas} \in \mathbb{R}^{n_y}$ são os valores medidos da saída.

É fundamental salientar a importância dessa etapa uma vez que ao estimar parâmetros do modelo estático, baseados em dados transientes, haverá a propagação de erros na rotina de otimização levando conseqüentemente para erros no cálculo dos *targets/set-points* do RTO (CÂMARA; QUELHAS; PINTO, 2016).

Os parâmetros atualizados $\hat{\theta}_k$ são então utilizados em um problema de otimização estático que computa os valores ótimos u^* capazes de otimizar o desempenho do processo, satisfazendo restrições operacionais, tal que

$$u_{k+1}^* = \arg \min_u J(y, u) \quad (2.8)$$

s.a.

$$y = f_{ss}(u, \hat{\theta}_k) \quad (2.9)$$

$$g(y, u) \leq 0 \quad (2.10)$$

onde $J: \mathbb{R}^{n_u} \times \mathbb{R}^{n_y} \rightarrow \mathbb{R}$ representa a função objetivo e $g: \mathbb{R}^{n_u} \times \mathbb{R}^{n_y} \rightarrow \mathbb{R}^{n_c}$ descreve o vetor de restrições não lineares (restrições de processo, restrições operacionais, valores máximos e mínimos).

De acordo com Darby *et al.* (2011) apesar de a estrutura clássica possuir inúmeras aplicações tanto em ambientes acadêmico como industrial, ainda existem alguns desafios que dificultam sua maior implementação: (i) custo para o desenvolvimento e atualização do modelo (custo *off-line* para atualização do modelo); (ii) valores errôneos dos parâmetros do modelo e dos distúrbios do processo, devido à lenta atualização do modelo; (iii) técnica

não robusta relacionada a custo computacional; (iv) mudanças frequentes devido a distúrbios (*grade changes*) que fazem a otimização em estado estacionário irrelevante; (v) limitações dinâmicas, incluindo inviabilidade numérica devido à violação de restrições; e (vi) modelos estruturalmente incorretos.

Dessa maneira, o RTO estático é aplicado com sucesso quando um processo industrial encontra-se operando em estado estacionário. Por sua vez, quando a operação é submetida a distúrbios frequentes permanecendo por longos períodos transientes é necessária uma abordagem capaz de capturar a dinâmica do processo e a partir daí estimar os valores ótimos de trajetória.

2.2 RTO Dinâmico

Ao considerar a necessidade da planta se encontrar no estado estacionário para a execução do loop de otimização, na abordagem de RTO estático, ocorre a limitação da frequência de otimização não utilizando graus de liberdade disponíveis e, por conseguinte, resultando em desempenhos econômicos sub-ótimos (TOSUKHOWONG *et al.*, 2004). Dessa maneira, o DRTO (do inglês *Dynamic Real-time Optimization*) é sugerido a fim de superar os problemas relativos aos instantes transientes de operação.

O DRTO em uma de suas abordagens apresenta-se de forma similar ao *Nonlinear Model Predictive Control* (NMPC) uma vez que ambas as abordagens tratam de problemas de otimização dinâmica visando a melhor operação de processos complexos não-lineares. O DRTO está relacionado a uma função custo (geralmente uma função econômica) enquanto o NMPC está relacionado à uma função de minimização de erro entre as medidas e valores de referência (WÜRTH; HANNEMANN; MARQUARDT, 2009).

A estrutura típica de um DRTO, que é apresentada na Figura 2.2, consiste em uma abordagem em duas etapas que estima valores ótimos de *targets/set-points* através de um modelo dinâmico do processo, ao invés de um modelo estático (abordado na estratégia de RTO estático convencional) (FERREIRA *et al.*, 2017).

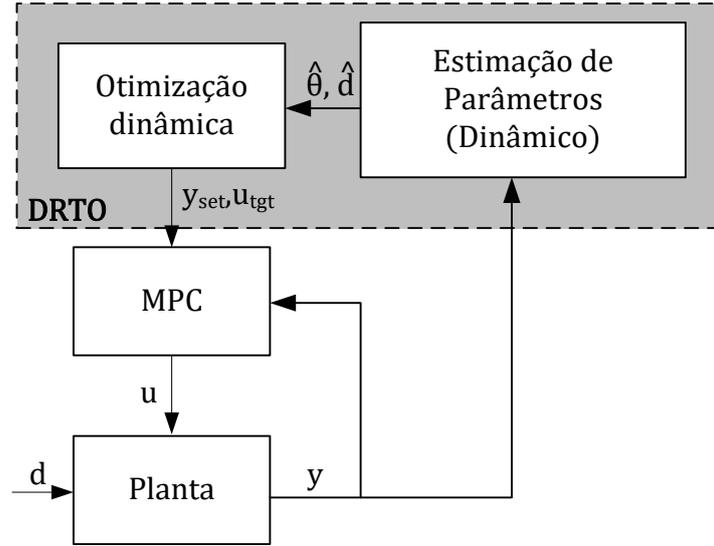


Figura 2.2: Estrutura de um DRTO. (Adaptado de: KRISHNAMOORTHY; FOSS; SKOGESTAD (2018))

A primeira etapa de um loop de DRTO consiste na estimação dinâmica dos parâmetros e dos distúrbios do modelo rigoroso do processo. Isso ocorre através das medidas do processo no devido instante de tempo e, frequentemente, estimadores de estados. Essa etapa, assim como a etapa de detecção de estado estacionário e estimação de parâmetros no RTO estático, é de extrema importância, pois irá determinar um modelo dinâmico capaz de prever a trajetória ótima de saída após a resolução do problema de otimização.

A segunda, e última etapa, trata da otimização dinâmica, onde dada uma função objetivo que relaciona o custo de operação do processo (KPI), restrições operacionais e o modelo dinâmico atualizado na etapa anterior, são calculados valores ótimos de *target/set-points* através de métodos de otimização.

Considerando um processo não linear dado por (2.4) e (2.5) a estimação dinâmica dos parâmetros e distúrbios é dada por (KRISHNAMOORTHY; FOSS; SKOGESTAD, 2018):

$$\hat{\theta}_k = \arg \min_{\theta} \|y_{meas,k} - h(x_k, u_k)\| \quad (2.11)$$

s.a.

$$x_k = f(x_{k-1}, u_{k-1}, \theta) \quad (2.12)$$

onde o vetor $\hat{\theta}_k$ representa os parâmetros e distúrbios que variam com o tempo. A partir daí é realizada a etapa de otimização dinâmica, dada por

$$u_t^* = \arg \min_{u_t} \sum_{t=k}^{k+T} J(y_t, u_t) \quad (2.13)$$

s.a.

$$x_{t+1} = f(x_t, u_t, \hat{\theta}_k) \quad (2.14)$$

$$y_t = h(x_t, u_t) \quad (2.15)$$

$$g(y_t, u_t) \leq 0 \quad (2.16)$$

$$x_k = \hat{x}_k \quad \forall t \in \{k, \dots, k + T\} \quad (2.17)$$

onde o subscrito $*_t$ representa cada instante de amostragem no horizonte de otimização de comprimento T .

Essa estratégia, da mesma maneira que o RTO estático, é proposta através de camadas com diferentes escalas de amostragem e, embora ocorra o uso de modelos dinâmicos para etapa reconciliação de dados, eliminando a necessidade de detecção de estado estacionário, resolver um problema de otimização dinâmico não linear ainda é uma tarefa desafiadora principalmente para sistemas em larga escala (LI; SWARTZ, 2018).

Dentre os principais desafios presentes na implementação de um RTO dinâmico, destaca-se a necessidade de gerenciar a complexidade do DRTO relacionada à (i) obtenção e manutenção de um modelo dinâmico representativo; (ii) custo computacional para resolver problemas de otimização não-lineares em larga escala ; (iii) robustez relacionada aos erros de modelo e incerteza na predição dos parâmetros que conseqüentemente implicam na estabilidade do processo (JAMALUDIN; SWARTZ, 2017).

Além disso, o RTO dinâmico pode ser empregado de maneira centralizada, isto é, sem a necessidade do emprego de um controlador MPC na camada imediatamente inferior (estratégia em camadas, descentralizada) gerando ações ótimas de controle ao invés de valores de referências para *targets/set-points*.

2.3 MPC Econômico

O MPC econômico, do inglês *Economic Model Predictive Control* (EMPC), é considerado um variante da estratégia clássica de controladores preditivos baseados em modelo (MPCs) motivado pela indústria de processos ao incorporar a função de custo econômico diretamente no controlador MPC (ao invés de abordar estratégias em camadas) (MULLER; ALLGOWER, 2017).

A principal diferença do EMPC da estratégia de MPC padrão é que a função custo não é escolhida para ser positiva definida em relação a um dado erro de *set-point*, mas em relação a alguma função genérica (possivelmente relacionada ao custo econômico do sistema considerado) resultando no fato que o sistema em malha fechada pode não convergir para um valor de equilíbrio (estado estacionário), já que podem existir outras trajetórias com melhor desempenho econômico (RAWLINGS; ANGELI; BATES, 2012). A Figura 2.3 apresenta um comparativo entre o MPC clássico + camada superior de otimização (RTO/DRTO) e o EMPC.

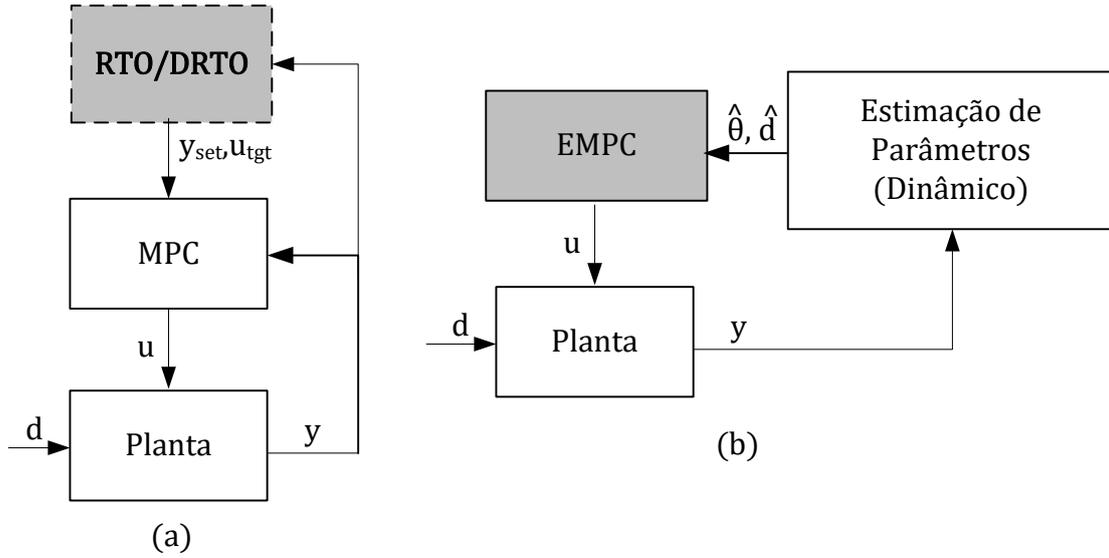


Figura 2.3: (a) Estrutura padrão de MPC + otimizador e (b) estrutura de EMPC.

Considerando um processo não linear dado por (2.4) e (2.5) a função que representa um MPC econômico é dado pelo seguinte problema de otimização:

$$\min_u \sum_{k=0}^{N-1} \ell(x_k, u_k; \hat{\theta}, \hat{d}) \quad (2.18)$$

s.a.

$$x_{k+1} = f(x_k, u_k; \hat{\theta}, \hat{d}) \quad (2.19)$$

$$y_k = h(x_k, u_k; \hat{\theta}, \hat{d}) \quad (2.20)$$

$$g(y_k, u_k; \hat{\theta}, \hat{d}) \leq 0 \quad (2.21)$$

onde a função objetivo, que é usualmente convexa e contínua para sistemas lineares, corresponde à soma dos custos ℓ de cada estágio até um horizonte finito N .

Para garantir a estabilidade do sistema em malha fechada existe uma variedade de alternativas destacando-se o emprego de restrições terminais para os estados, custos terminais e regiões terminais (ao invés restrições terminais de igualdade) e modificações no custo de cada estágio (ELLIS; DURAND; CHRISTOFIDES, 2014; TRAN; LINGA; MACIEJOWSKI, 2017).

Apesar de essa estratégia ser uma alternativa centralizada para o DRTO, que permite maiores taxas de amostragem, sua aplicação possui limitantes em relação à carga computacional, obtenção e manutenção de modelos dinâmicos e incertezas relacionadas a parâmetros uma vez que transforma o problema de otimização em um problema de programação não-linear (NLP).

2.4 RTO Híbrido

Como forma de contornar as operações sub-ótimas relacionadas ao tempo de espera da detecção do estado estacionário na estratégia de RTO estático, e ao elevado tempo computacional necessário para resolver o DRTO e EMPC, Krishnamoorthy *et al.* (2018)

propõem uma alternativa, ao considerar que o principal objetivo é otimizar o desempenho em estado estacionário do processo, através do *Hybrid Real-time Optimization* (HRTO).

A partir da premissa principal, é levado em conta que os termos dinâmicos no modelo devem ser introduzidos apenas na etapa de reconciliação de dados. Dessa maneira, dados transientes podem ser utilizados para atualizar o modelo e, os parâmetros do modelo atualizados são então utilizados no modelo estático, considerado para a otimização. A Figura 2.4 ilustra o HRTO.

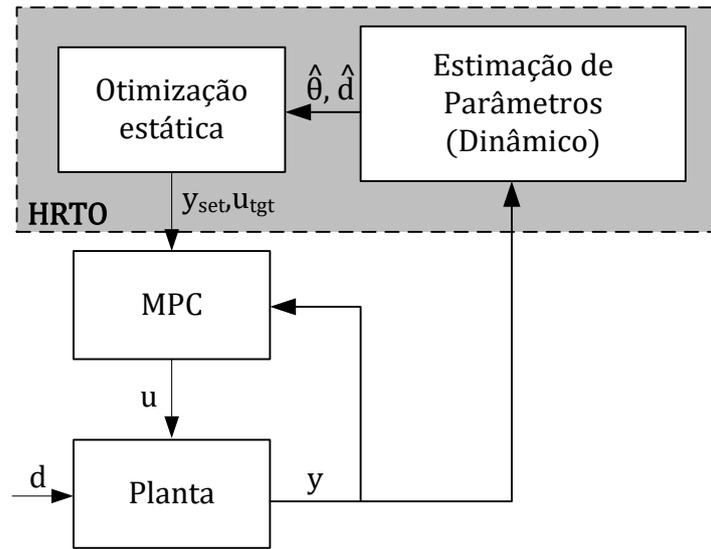


Figura 2.4: RTO Híbrido. (Adaptado de: KRISHNAMOORTHY; FOSS; SKOGESTAD (2018))

O HRTO consiste em uma abordagem em duas etapas, onde a primeira é exatamente a mesma utilizada no DRTO. Em cada instante de tempo k , um estimador dinâmico de estados fornece uma estimativa dos valores dos parâmetros e distúrbios. Baseado nesses parâmetros, é resolvido um problema de otimização estático com o modelo atualizado a fim de encontrar os novos valores ótimos no estado estacionário para o ponto de operação.

Dado um modelo não-linear do processo conforme (2.4) e (2.5) a etapa de estimação dinâmica das variáveis incertas do modelo do processo é dada por:

$$\hat{\theta}_k = \arg \min_{\theta} \|y_{meas,k} - h(x_k, u_k)\| \quad (2.22)$$

s.a.

$$x_k = f(x_{k-1}, u_{k-1}, \theta) \quad (2.23)$$

onde o vetor $\hat{\theta}_k$ representa os parâmetros e distúrbios que variam com o tempo. A partir daí, é realizada a etapa de otimização estática dada por:

$$u_{k+1}^* = \arg \min_u J(y, u) \quad (2.24)$$

s.a.

$$y = f_{ss}(u, \hat{\theta}_k) \quad (2.25)$$

$$g(y, u) \leq 0 \quad (2.26)$$

É importante ressaltar que, ao contrário da estratégia convencional de RTO, o problema de otimização estático é resolvido em cada instante de amostragem k resultando em valores ótimos de *set-point/targets* que serão enviados para o controlador MPC. Além disso, existem outras alternativas para a determinação de variáveis desconhecidas (parâmetros/distúrbios) em modelos dinâmicos se destacando o uso recursivo de mínimos quadrados (LI *et al.*, 2014), variantes não lineares do Filtro de Kalman como *Extended Kalman Filter* (EKF) e *Uncented Kalman Filter* (UKF) e métodos de otimização como *Moving Horizon Estimator* (MHE) (LJUNG, 1979).

O HRTTO apresenta vantagens em relação ao DRTO e EMPC relacionado ao tempo computacional (robustez numérica) uma vez que apenas a etapa de estimação de parâmetros é dinâmica, sendo essa etapa fundamental para o sucesso da metodologia. Além disso, essa estratégia também apresenta vantagens em relação ao RTO estático ao resolver em cada instante de amostragem um problema de otimização em estado estacionário gerando valores de referências ótimos ao controlador MPC baseado em um modelo atualizado.

2.5 Outras técnicas para otimização de processos em tempo real

Outras técnicas para otimização em tempo real de processos surgiram como alternativas para as estratégias amplamente abordadas, apresentadas anteriormente, onde o sistema de controle é descrito através de camadas (QIN, S Joe; BADGWELL, 2003b; SKOGESTAD, Sigurd, 2000a).

Essas técnicas baseiam-se na determinação e controle de uma função custo no valor ótimo. A partir dessa premissa, as estratégias determinam como obter os valores estimados dessa função (e respectivas derivadas) para processos reais. Essas técnicas serão descritas aqui juntamente com suas principais características.

2.5.1 Self-Optimizing Control

“Self-optimizing control (SOC) is when we can achieve an acceptable loss with constant setpoint values for the controlled variables (without the need to reoptimize when disturbance occur)” (SKOGESTAD, 2000b).

A definição de SOC descrita anteriormente representa o desejo de transladar objetivos econômicos em objetivos de controle através da determinação de uma função das variáveis de processo c que, quando mantida em um valor constante, leva automaticamente para o ajuste ótimo das variáveis manipuladas e, conseqüentemente, uma operação ótima.

Para isso, torna-se necessário uma camada superior de otimização que computa os valores ótimos de *set-point* c_s para as variáveis controladas e uma camada de controle *feedback* que implementa os *set-points*, para alcançar $c \approx c_s$. A Figura 2.5 exemplifica a estrutura proposta.

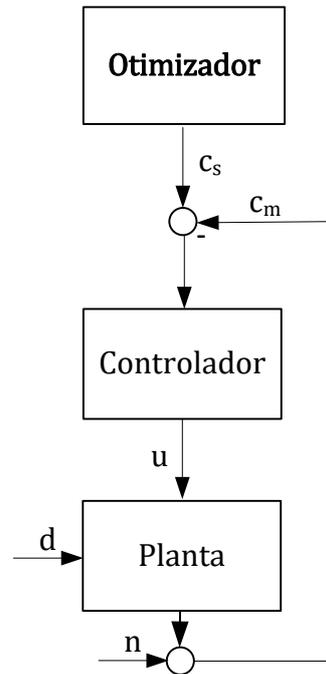


Figura 2.5: Estrutura do SOC.

O principal desafio dessa estratégia consiste na determinação da função c como uma combinação das medidas y . O trabalho original apresenta um procedimento sistemático de seleção das variáveis controladas baseado na avaliação de perda aceitável ($J - J_{opt}$) para possíveis valores de distúrbios. Dentre alternativas para essa determinação destaca-se também a proposta por Alstad & Skogestad (2007) que se baseia no espaço nulo para determinação da combinação das variáveis medidas, tal que $c = Hy$. A determinação de H é determinada por $HF = 0$, onde $F = (\partial \mathbf{y}^{opt} / \partial \mathbf{d}^T)$ é a matriz de sensibilidade.

2.5.2 NCO tracking

Como forma de compensar os efeitos das incertezas, dadas por distúrbios de processo ou por diferenças entre modelo e planta, é proposto nessa abordagem forçar o sistema, através das medidas, para as condições necessárias de otimalidade, do inglês *Necessary Conditions of Optimality* (NCO) (SRINIVASAN; BONVIN, 2005). Isso ocorre, pois, as entradas computadas, através de um modelo, tipicamente não satisfazem as NCOs para um processo real. Dessa maneira são utilizadas medidas a fim de corrigir as incertezas e, por fim, forçar as NCOs para um processo real (JÄSCHKE; SKOGESTAD, 2011; YE *et al.*, 2013). A Figura 2.6 exemplifica a estratégia.

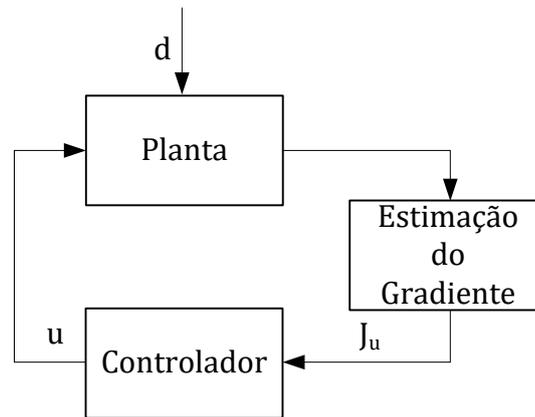


Figura 2.6: Estratégia de otimização NCO *tracking*.

Considerando uma função custo J que representa um valor escalar a ser minimizado, no ponto ótimo de operação, as condições necessárias de otimalidade devem ser asseguradas, isto é, $J_u = \partial J / \partial u = 0$, para um sistema sem restrições. Para otimização em estado estacionário com restrições as condições KKT representam as condições de otimalidade (JÄSCHKE; SKOGESTAD, 2011).

Se os valores das medidas do gradiente são disponíveis online (ou estimados), eles podem ser controlados através de um controlador *feedback* (por exemplo um controlador PI) que, irá atualizar o valor de u em cada instante de amostragem de forma satisfazer as NCOs. Para isso existem alternativas capazes de determinar e atualizar o gradiente de forma a direcioná-lo para o valor nulo (FRANÇOIS; SRINIVASAN; BONVIN, 2005; JÄSCHKE; SKOGESTAD, 2011b; KRISHNAMOORTHY; JAHANSHAH; SKOGESTAD, 2019).

2.5.3 Extremum Seeking Control

Extremum Seeking Control (ESC) é uma estratégia de otimização que não necessita de um modelo do processo e o desempenho ótimo em estado estacionário é baseado puramente nas medidas do custo. O objetivo é direcionar o valor estimado do gradiente do custo $J_u = 0$ (STRAUS; KRISHNAMOORTHY; SKOGESTAD, 2019).

Para estimar o gradiente, excita-se o sistema com um sinal senoidal e posteriormente utiliza-se uma correlação baseada em filtros passa-baixa, passa-alta e uma ação integral (KRSTIĆ; WANG, 2000). A Figura 2.7 representa essa estratégia.

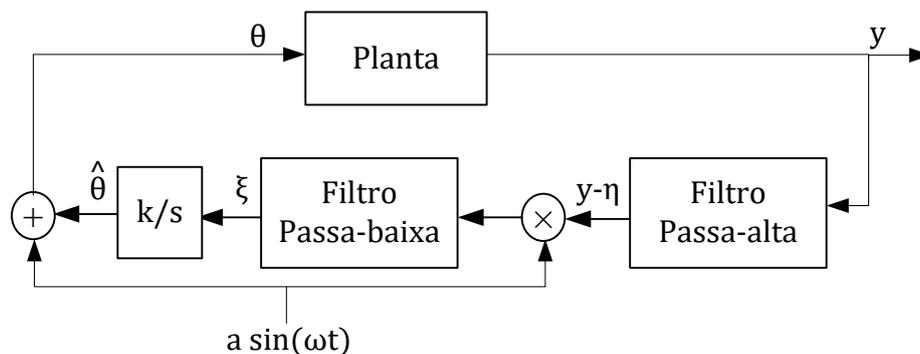


Figura 2.7: Esquema representativo do ESC.

A principal vantagem desse método está no fato de não necessitar de um modelo de planta, permitindo assim otimizar o desempenho de sistemas complexos com modelos desconhecidos ou imprecisos. Entretanto, necessita de medidas da função custo e sua convergência pode ser bastante lenta uma vez que é necessário haver perturbação na planta.

2.5.4 *Modifier Adaptation*

O sucesso para qualquer esquema de otimização baseado em modelo depende da qualidade desse modelo sendo a etapa de sua construção e manutenção o gargalo no desenvolvimento de soluções de RTO (GAO; WENZEL; ENGELL, 2016).

Modifier Adaptation (ou *Gradient Adaptation*) implementa correções no *bias* e no gradiente da função objetivo e das restrições em um procedimento iterativo sendo capaz de lidar com sistemas que apresentam considerável discrepância entre o processo e o modelo (MARCHETTI; CHACHUAT; BONVIN, 2009). Isso ocorre através da determinação de *modifiers*, que expressam a diferença entre o valor medido ou estimado e o predito das condições necessárias de otimização.

Tipicamente, um problema de otimização baseado em modelo consiste na minimização de uma função custo J , respeitando as restrições operacionais g . A estratégia proposta modifica o problema de otimização de forma que

$$u_{k+1}^* = \arg \max_u J(u) + \lambda_{J,k}^T u \quad (2.27)$$

$$g_{mod} = g(u) + \epsilon_{C,k} + \lambda_{C,k}^T (u - u_k) \quad (2.28)$$

sendo ϵ e λ os *modifiers* (MATIAS; JÄSCHKE, 2019).

Essa estratégia é eficiente para lidar com a discrepância entre o modelo e a planta, pois combina propriedades do modelo e medidas, convergindo de forma iterativa para o valor ótimo.

2.5.5 *Feedback RTO*

Essa estratégia de otimização é baseada em uma estimação do gradiente da função custo e em medidas transientes das variáveis de processo. A partir de então, controla-se esse valor estimado utilizando controle retroalimentado (KRISHNAMOORTHY; JAHANSHAH; SKOGESTAD, 2019). A estrutura encontra-se na Figura 2.8.

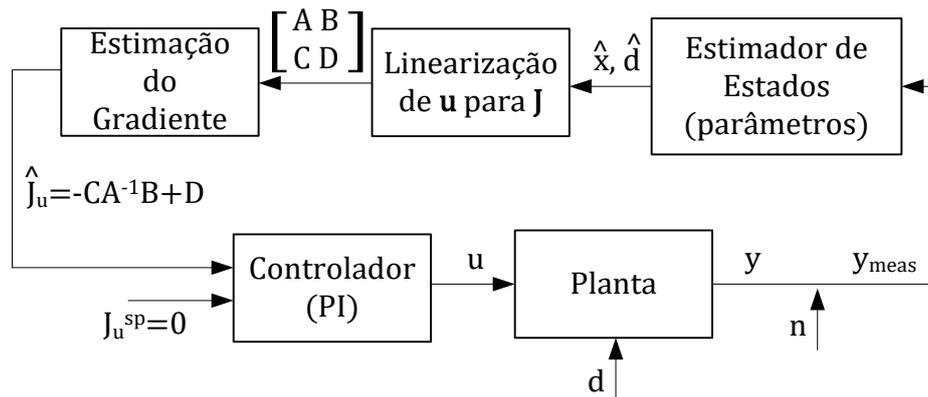


Figura 2.8: Feedback RTO.

Considerando um sistema não-linear, assume-se que o problema de otimização pode ser convertido em um problema de controle ao manter o gradiente em estado estacionário J_u em um *setpoint* constante $J_u^{sp} = 0$. O desafio então se torna determinar o gradiente de forma eficiente. No trabalho original utiliza-se Filtro de Kalman para estimar os estados e parâmetros do modelo não-linear e, a partir dessas medidas, lineariza-se o modelo dinâmico e a função custo de modo que o valor estimado do gradiente se torna $\hat{J}_u = -CA^{-1}B + D$. A partir daí, utiliza-se um controlador (PI, por exemplo) que irá direcionar o processo para o valor ótimo. Essa estratégia pode ser considerada uma aplicação do *NCO-tracking* uma vez que considera a estimação do gradiente a fim de controlá-lo nas condições necessárias de otimalidade.

2.6 Comparação das técnicas de Otimização em Tempo Real

Neste capítulo foram apresentadas algumas técnicas utilizadas para otimização em tempo real de processos. Essas abordagens possuem particularidades que justificam sua aplicação para cada tipo de processo industrial sendo, na maioria das vezes, restrita a trabalhos acadêmicos ou aplicações em sistemas simples.

Na Figura 2.9 é apresentado um esquema de classificação das principais estratégias abordadas.

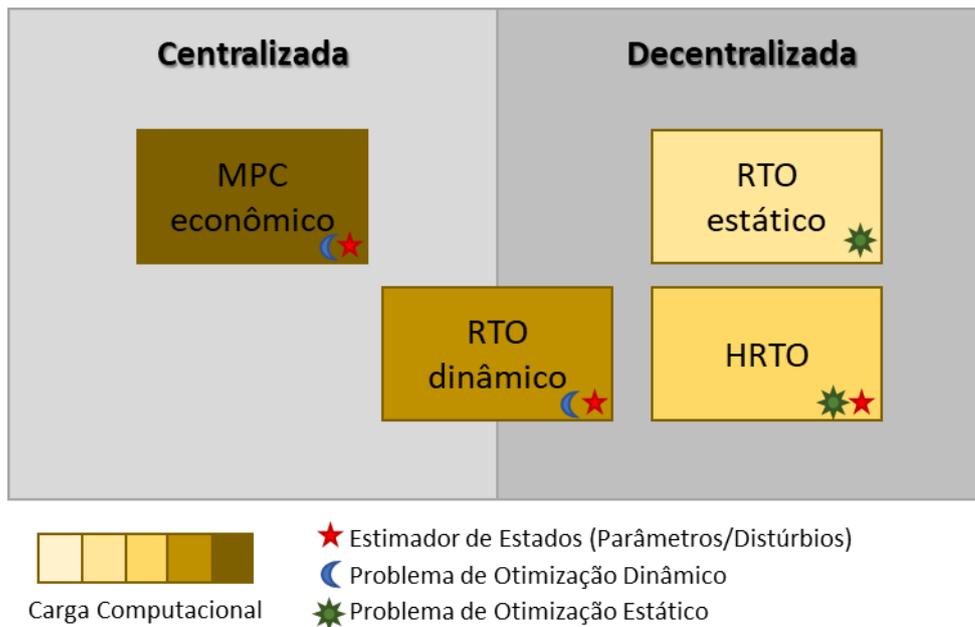


Figura 2.9: Classificação das Estratégias de Otimização em Tempo Real.

A Figura 2.9 divide as estratégias em dois grandes grupos: centralizada onde o problema de otimização é resolvido e a solução enviada diretamente à planta; e decentralizada onde o resultado do problema de otimização são valores de referência (*targets/set-points*) a serem enviados a um controlador (frequentemente um MPC) que calcula as ações de controle ótimas a serem enviadas à planta. O RTO dinâmico, possui implementações nas duas maneiras. Além disso, a Figura 2.9 mostra as estratégias que empregam problemas de otimização dinâmica sendo mais adequadas para processos em batelada, com distúrbios frequentes, variação de modelo, ou que não operam no estado estacionário (TRIERWEILER, 2013); apresenta também quais estratégias utilizam estimadores de estado para adaptação do modelo disponível aos dados de planta e, por fim, um comparativo sobre a demanda computacional para execução do loop de otimização.

Dentre as particularidades de cada abordagem destacam-se:

- Necessidade de estabilização da planta e algoritmo para detecção do estado estacionário para o RTO estático;
- DRTO, HRTO e *Self-Optimizing Control*: estratégias capazes de compensar de forma adequada valores equivocados de parâmetros do modelo do processo e rejeição de distúrbios não medidos;
- Não utilização de modelo do processo para *Extremum Seeking Control*;
- Dentre as estratégias que demandam menor carga computacional para resolver o problema de otimização destacam-se *Feedback RTO* e *Self-Optimizing Control* ao considerar valores transientes para estimação do gradiente e uma análise *off-line* do processo, respectivamente;

- Problemas relacionados a mudanças de *grade*, que fazem a otimização em estado estacionário menos relevante, e a limitações dinâmicas são sanados pela implementação do DRTO, EMPC e HRTO;
- Por fim, quando não há uma coerência entre a estrutura do modelo e o processo deve-se considerar *Modifier Adaptation*.

Cabe-se salientar que a viabilidade de aplicação das estratégias aqui abordadas depende do processo, da velocidade de resposta, da dinâmica, da robustez computacional disponível etc. Essas características inerentes a cada processo também são influenciadas pelo tipo de controlador empregado (PIs, PIDs, MPCs) e pela forma de controle (SISO, MIMO, operando em faixas, operando em *set-points*) sendo para cada alternativa considerada diferentes estratégias de ajuste.

Capítulo 3 – Abordagem de Controlador MPC+Otimizador em uma camada

O presente capítulo é reprodução do trabalho publicado no *XXII Congresso Brasileiro de Automática*.

Resumo: A busca pela otimização de processos, visando o maior retorno econômico e o menor consumo de matéria-prima e energia ainda é um desafio a ser superado na indústria. A maior parte dos trabalhos publicados na literatura que envolve otimização em tempo real, utilizam dados em estado estacionário, algoritmos não lineares e estruturas hierarquizadas em camadas. Na falta de uma camada de otimização em tempo real (RTO), frequentemente é proposta uma camada de otimização estática que calcula, através de problemas de programação quadrática/linear, valores ótimos para os *targets* da camada dinâmica (MPC). Entretanto, a influência de distúrbios e a discrepância dos tempos de amostragem entre essas camadas não garante que o sistema irá operar no ponto ótimo de forma estável. Nesse estudo, é proposta uma estrutura em duas camadas que difere das estruturas já abordadas ao controlar o valor do custo ótimo da camada superior, ao invés do valor dos *targets*. Essa abordagem é feita através de uma única função custo para o MPC, capaz de abranger o uso do controle preditivo (camada regulatória) e otimização econômica. Um exemplo industrial foi descrito a fim de corroborar a eficiência da abordagem proposta comparando com a estratégia clássica em duas camadas.

Palavras-chave: Otimização econômica, otimização em tempo real, controle preditivo, camadas.

3.1 Introdução

Algumas mudanças nos objetivos de produção ou compensação de distúrbios, a fim de alcançar a operação ótima do processo, ainda são estabelecidas através de heurísticas ou experiência dos engenheiros de processos (GOUVÊA; ODLOAK, 1998). Além disso, é frequentemente utilizada na indústria a estrutura hierarquizada de controle (QIN;

BADGWELL, 2003) que relaciona controle preditivo e otimização em tempo real. Ambas as técnicas de otimização são empregadas a fim de obter um melhor retorno econômico da unidade (seja através da maximização do lucro ou minimização do custo de operação).

O otimizador em tempo real (RTO) é baseado em um modelo do processo, complexo e geralmente não linear, e implementa a decisão ótima (como valores de referência *targets* e *setpoints*) em uma escala de tempo menor que o tempo de amostragem da planta (HINOJOSA *et al.*, 2017). O MPC por sua vez, calcula ações de controle que tendem a levar a planta o mais próximo possível dos valores calculados pela camada superior, considerando o modelo dinâmico do processo, além de restrições físicas e critérios de estabilidade (NIKANDROV; SWARTZ, 2009). A diferença entre essas duas camadas, ao considerar diferentes funções custo, e a forma de comunicação entre elas pode causar problemas no desempenho econômico e valores inalcançáveis como referência, uma vez que os novos valores de *setpoint/target* são normalmente calculados quando a planta está estabilizada.

Outra maneira frequentemente abordada é através da utilização de problemas de otimização simplificados na camada imediatamente superior ao MPC, onde geralmente é abordado um problema de programação quadrática (QP) ou programação linear (LP) (YING; JOSEPH, 1999). Esse problema de otimização, utiliza modelos estáticos consistentes com o modelo dinâmico do controlador MPC e fornece *targets* atingíveis para a camada dinâmica de forma sequencial e com o mesmo tempo de amostragem (ALVAREZ; ODLOAK, 2014). Essa característica permite a compensação de distúrbios não medidos e, uma vez que esse problema de otimização possui as mesmas restrições do controlador, o cálculo de valores de referência alcançáveis.

Como forma de superar o conflito de comunicação entre as camadas, os diferentes tempos de amostragem e a compensação de distúrbios não medidos, foram propostas abordagens em uma camada única (ADETOLA; GUAY, 2010; SOUZA; ODLOAK; ZANIN, A. C., 2010; ZANIN; TVRZSKA DE GOUVEA; ODLOAK, 2002). Aqui o problema de controle e otimização são resolvidos juntos com vantagens em relação à compensação de distúrbios e ainda a possibilidade de utilização de técnicas conhecidas de ajuste para o controlador estendido. Esses estudos relacionam a função custo complexa do RTO ou ainda o gradiente dessa função como uma parcela no problema de otimização do controlador MPC, com a principal desvantagem relacionada ao tempo computacional necessário para resolver os problemas de otimização não lineares, e a não garantia de obtenção de ótimos globais.

Nesse trabalho será abordada uma metodologia capaz de integrar a camada de otimização estática e simplificada na camada dinâmica (MPC). A inclusão da camada de otimização na camada regulatória irá ocorrer através da ponderação da função custo do problema LP na função custo do controlador MPC, obtendo assim um controlador com otimizador. A camada superior continuará existindo a fim de gerar os valores de referência para o custo ótimo do problema LP. Essa abordagem considera o controlador preditivo operando através de faixas, nas variáveis controladas, sendo enviados valores de *setpoint* apenas para o custo ótimo de operação do processo.

O trabalho está organizado da seguinte maneira: a Seção 3.2 apresenta e discute a estrutura clássica de LP-MPC em cascata. Na Seção 3.3 é apresentada a proposta que inclui

na função custo do MPC a otimização estática e a forma de comunicação com a camada imediatamente superior. Na Seção 3.4 é apresentado um estudo de caso para ilustrar a metodologia em comparação com a metodologia clássica e, na Seção 3.5, as conclusões são descritas.

3.2 Estrutura Clássica LP-MPC em Cascata

Em um controlador preditivo, as variáveis controladas (CVS) e manipuladas (MVS) possuem valores definidos de *setpoint* e *target*, respectivamente. Esses valores são calculados através de problemas de otimização que utilizam uma função objetivo econômica, i.e., com objetivo de gerar um menor gasto de matéria-prima, energia, ou ainda um maior retorno financeiro da unidade. Além disso, são incluídas restrições de máximo e mínimo nas CVS e MVS e de variação de movimento nas MVS. A função que representa o problema a ser resolvido pelo MPC é:

$$\min_u J = \min_u \left[\sum_{j=0}^P \|\hat{y}(t+j|t) - y_{set}(t+j)\|_{Q_y}^2 + \sum_{j=0}^M \|u(t+j|t) - u_{tgt}(t+j)\|_{Q_u}^2 + \sum_{j=0}^M \|\Delta u(t+j-1)\|_W^2 + \|\hat{\epsilon}\|_{\rho_\epsilon}^2 \right] \quad (3.1)$$

s.a.

$$\begin{aligned} u_{min} &\leq u(t+j|t) \leq u_{max} \\ \Delta u_{min} &\leq u(t+j|t) - u(t-1) \leq \Delta u_{max} \\ \underbrace{y_{min}^{soft} - \epsilon_k}_{y_{min}^{hard}} &\leq \hat{y}(t+j|t) \leq \underbrace{y_{max}^{soft} + \epsilon_k}_{y_{max}^{hard}} \end{aligned} \quad (3.2)$$

onde $\hat{y}(t+j|t)$ é a saída predita pelo modelo j instantes de amostragem no futuro, $y_{set}(t+j)$ é a trajetória de referência para as variáveis controladas, $u(t+j|t)$ são as ações de controle calculadas pelo controlador, $u_{tgt}(t+j)$ é a trajetória de referência para as ações de controle, $\Delta u(t) = u(t+j|t) - u(t-1)$ é o incremento nas ações de controle, $\hat{\epsilon}$ é a máxima folga utilizada para as variáveis controladas. Os parâmetros de ajuste do controlador são o horizonte de predição (P), horizonte de controle (M), matriz-peso do erro de desvio do *setpoint* (Q_y), matriz-peso do erro de desvio do *target* (Q_u), e penalização da violação da *soft-constraint* (ρ_ϵ). $\|x\|_W^2 = x^T W x$ é a norma-peso Euclidiana de $x \in \mathfrak{R}^n$, com $W \in \mathfrak{R}^{n \times n}$.

Ao definir o valor da matriz-peso do erro das variáveis controladas (Q_y) nulo, as saídas correspondentes não irão seguir a sua trajetória de referência (*setpoint*) e irão permanecer nas faixas especificadas (com penalização ao serem violadas). As faixas brandas, chamadas de *soft-constraints* permitem violações enquanto as faixas rígidas, *hard-constraints* não.

Na camada imediatamente superior ao MPC, é resolvido o problema de programação linear que determina os valores de *target* para as variáveis manipuladas do controlador MPC. O problema de otimização é descrito por:

$$\min_{\Delta u_{tgt}} J_{LP} = \min_{\Delta u_{tgt}} \sum_{i=1}^n \beta_i \Delta u_{tgt,i} \quad (3.3)$$

s.a.

$$\begin{aligned} \Delta u_{tgt,i_{min}} &\leq \Delta u_{tgt} \leq \Delta u_{tgt,i_{max}} \\ K \cdot \Delta u_{tgt} &\leq b \end{aligned} \quad (3.4)$$

onde β_i é o custo da variável manipulada i e n o número total de variáveis manipuladas. Esse problema de otimização possui restrições de máximo e mínimo para os valores de *target* calculados, e restrições de desigualdade. Aqui foram consideradas as variáveis através de desvio em relação ao valor anterior, uma vez que o modelo linear do processo é dado através de uma variação de saída frente a uma variação de entrada.

As restrições de desigualdade são atualizadas em cada instante de amostragem a fim de compensar o distúrbio não medido (Φ), através do modelo estático do processo. Considerando que as variáveis controladas do processo estão definidas em faixas de operação, a definição do ganho do processo, na restrição de desigualdade fica:

$$\begin{aligned} K &= \frac{\Delta y(t \rightarrow \infty)}{\Delta u(t \rightarrow \infty)} = \frac{\Delta y^{set}}{\Delta u_{tgt}} \Rightarrow K \cdot \Delta u_{tgt} = \Delta y^{set} \\ K \cdot \Delta u_{tgt} &\leq \frac{\Delta y_{max}^{soft} - \Phi}{b} \\ K \cdot \Delta u_{tgt} &\geq \frac{\Delta y_{min}^{soft} - \Phi}{b} \end{aligned} \quad (3.5)$$

onde K é o ganho estático do processo, Δu_{tgt} é a variação do *target*, Δy_{min}^{soft} e Δy_{max}^{soft} é o valor da faixa inferior e superior, respectivamente, das variáveis controladas corrigidas em variáveis desvio e Φ é o distúrbio não medido. O valor de Φ é determinado através do esquema proposto na Figura 3.1 e descrito na Equação. 3.6.

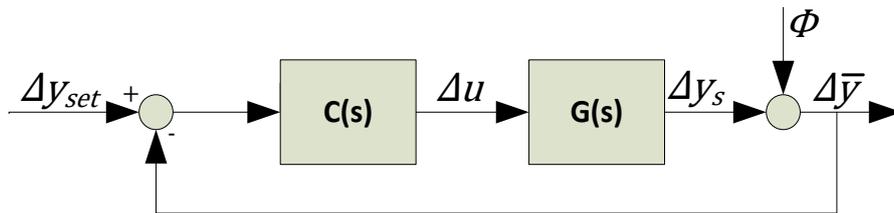


Figura 3.1: Malha de retroalimentação.

$$\begin{aligned} \Delta \bar{y} &= \Phi + \Delta y_s \\ \Phi &= \Delta y_s - \Delta \bar{y} \end{aligned} \quad (3.6)$$

onde Φ é o distúrbio não medido, Δy_s é o valor simulado do modelo da planta utilizada no controlador MPC ($G(s)$) com a entrada Δu oriunda do próprio controlador e $\Delta \bar{y}$ é a leitura de saída atual. Neste trabalho não foi considerada a variação do custo de cada variável manipulada, mantendo o mesmo constante. O valor ótimo do *target* é enviado como valor de referência para o controlador MPC.

O esquema em duas camadas está resumido na Figura 3.2

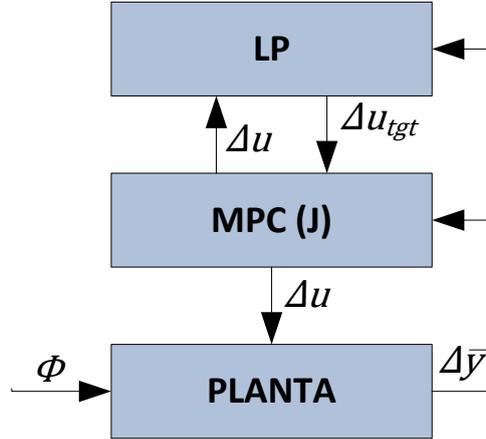


Figura 3.2: Estrutura LP-MPC em cascata.

Outros exemplos de estruturas LP-MPC em cascata utilizados na indústria são abordados em Nagrath, Prasad, & Bequette (2000), Nikandrov & Swartz (2009) e Ying & Joseph (1999).

3.3 Estrutura de Controlador MPC+Otimizador

Nessa abordagem é proposta uma nova função custo para o controlador MPC. Ao considerar que as saídas do sistema estão sendo controladas através de *soft-constraints*, a parcela da função custo do MPC (3.1) que relaciona o desvio das saídas do valor de *setpoint* é desprezada juntamente com a parcela que relaciona os valores das entradas com os *targets* oriundos da camada de otimização LP. Em contrapartida uma nova parcela que minimiza o valor do custo ótimo de um valor de referência para o problema de programação linear (calculada na camada superior) é incorporada na função a ser resolvida pelo MPC. A função custo proposta encontra-se em (3.7).

$$\min_u J_1 = \min_u \left[\sum_{j=0}^P \|J_{LP}(t+j|t) - J_{LP,set}(t+j)\|_{Q_j}^2 + \sum_{j=0}^M \|\Delta u(t+j-1)\|_W^2 + \|\hat{\epsilon}\|_{\rho_\epsilon}^2 \right] \quad (3.7)$$

s.a.

$$\begin{aligned} u_{min} &\leq u(t+j|t) \leq u_{max} \\ \Delta u_{min} &\leq u(t+j|t) - u(t-1) \leq \Delta u_{max} \\ \underbrace{y_{min}^{soft} - \epsilon_k}_{y_{min}^{hard}} &\leq \hat{y}(t+j|t) \leq \underbrace{y_{max}^{soft} + \epsilon_k}_{y_{max}^{hard}} \end{aligned} \quad (3.8)$$

onde $J_{LP} = \sum_{i=1}^n \beta_i \Delta u_{tgt,i}$ representa o problema LP na função custo do MPC e $J_{LP,set}$ é o valor ótimo da função objetivo resolvida na camada superior. As demais variáveis e parâmetros da função custo do MPC permanecem as mesmas da estrutura clássica.

O esquema proposto está resumido na Figura 3.3.

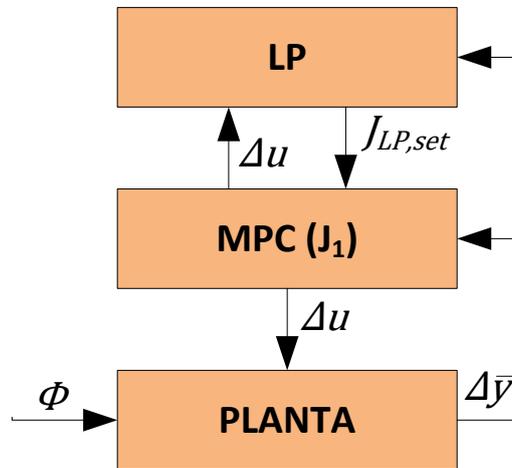


Figura 3.3: Estrutura de MPC+Otimizador

A principal diferença entre as duas abordagens está relacionada à comunicação entre as duas camadas. Na estrutura clássica LP-MPC em cascata, a camada de otimização envia ao controlador MPC valores ótimos de *targets* para as MVS. Já na estrutura proposta, a camada de otimização serve para calcular o valor ótimo da função objetivo e enviá-lo como valor de referência (*setpoint*) já que o custo é considerado uma variável controlada. O valor de $J_{LP,set}$ é calculado com base num problema estático em cada instante de amostragem e enviado ao controlador MPC, que calcula de forma dinâmica as ações de controle que irão levar a planta para a melhor condição operacional.

Em modelos com várias entradas, essa abordagem permite uma maior flexibilidade ao controlador já que ao invés de calcular ações de controle que possuam o menor desvio possível dos valores de referência para as entradas (*targets*), o controlador irá calcular ações de controle que possuam o menor desvio possível de uma única CV, o valor ótimo do custo ($J_{LP,set}$). Além disso, não há alteração no tempo computacional necessário para resolver o problema de otimização e o controlador MPC, já que se trata de uma função linear.

3.4 Estudo de Caso – CSTR com coluna de separação e reciclo

Como estudo de caso, considerou-se um sistema composto por um reator CSTR, e uma coluna de separação e reciclo (SCHULTZ; TRIERWEILER; FARENZENA, 2016a), conforme mostrado na Fig. 3.4.

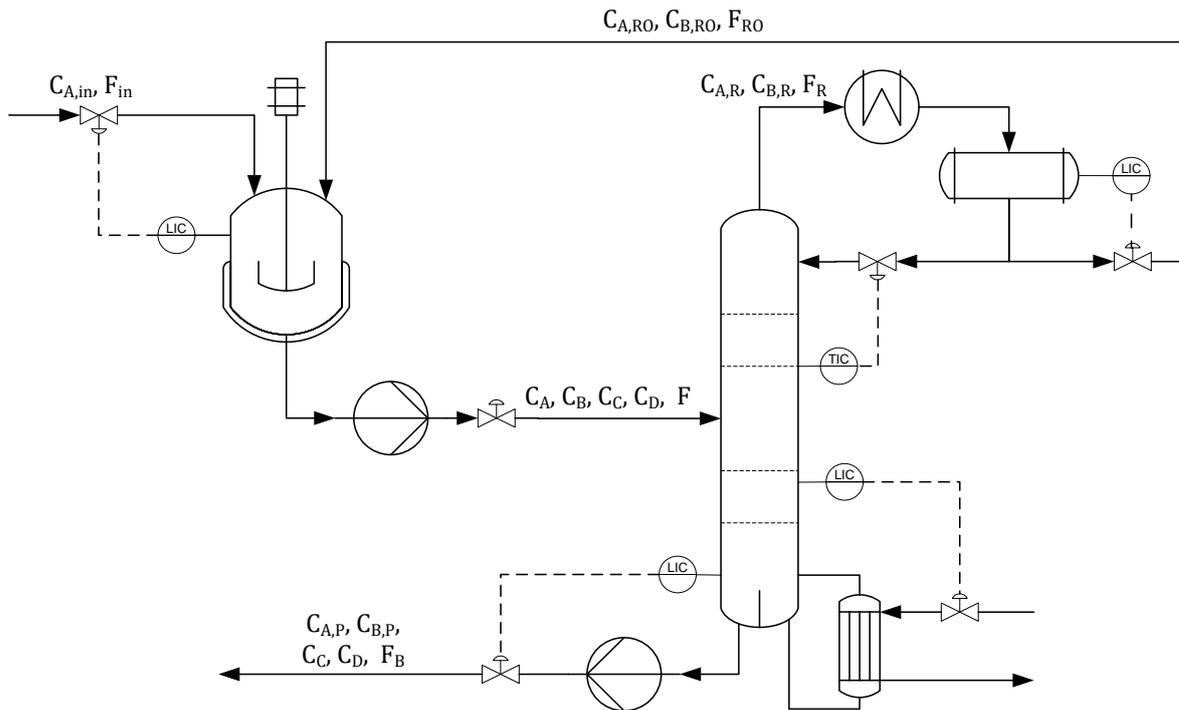
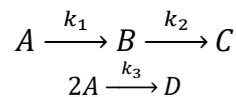


Figura 3.4: CSTR com coluna de separação e reciclo

O processo possui quatro componentes (A, B, C e D). Apenas o componente A é alimentado no reator, onde ocorre uma reação que segue a cinética de Van de Vusse:



No processo, considera-se o controle perfeito de temperatura (T) e volume de reação (V_R), o qual é modelado por (3.9).

$$V_R \frac{dC_A}{dt} = F_{in} C_{A,in} + F_{RO} C_{A,RO} - F C_A - V_R (k_1 C_A + 2k_3 C_A^2)$$

$$V_R \frac{dC_B}{dt} = F_{RO} C_{B,RO} - F C_B - V_R (k_2 C_B - k_1 C_A)$$

$$V_R \frac{dC_C}{dt} = -F C_C + V_R k_2 C_B$$

$$V_R \frac{dC_D}{dt} = -F C_D + V_R k_3 C_A^2$$

$$\left(\frac{0.1}{(1 - ya)^{0.7}} \right) \frac{dC_{A,RO}}{dt} = C_{A,R} - C_{A,RO}$$

$$\left(\frac{0.1}{(1 - ya)^{0.7}} \right) \frac{dC_{B,RO}}{dt} = C_{B,R} - C_{B,RO}$$

$$(0.1) \frac{dF_{RO}}{dt} = F_R - F_{RO}$$

(3.9)

onde C_A , C_B , C_C e C_D são as concentrações dos componentes A, B, C e D , respectivamente, $C_{A,RO}$ e $C_{B,RO}$ são as concentrações de A e B na corrente de reciclo e $C_{A,in}$ é a concentração de A na alimentação. F_{in} , F e F_{RO} são as vazões na alimentação, na saída do reator e na saída do refluxo, respectivamente. y_A é a fração molar de A na corrente de refluxo e $k_1, k_2, k_3, C_{A,R}, C_{B,R}$ e F_R são definidos por (3.10).

$$\begin{aligned}
 k_1 &= 1.2870 \times 10^{12} \exp\left(-\frac{9758.3}{T[^\circ\text{C}] + 273.15}\right) \\
 k_2 &= 1.2870 \times 10^{12} \exp\left(-\frac{9758.3}{T[^\circ\text{C}] + 273.15}\right) \\
 k_3 &= 4.5215 \times 10^9 \exp\left(-\frac{8560}{T[^\circ\text{C}] + 273.15}\right) \\
 C_{A,R} &= \sqrt{y_A(C_A + C_B + C_C + C_D)C_A} \\
 C_{B,R} &= -\frac{\sqrt{y_A(C_A + C_B + C_C + C_D)C_A}(y_A - 1)}{y_A} \\
 F_R &= \frac{\sqrt{y_A(C_A + C_B + C_C + C_D)C_A F}}{y_A(C_A + C_B + C_C + C_D)} \tag{3.10}
 \end{aligned}$$

Esse modelo foi linearizado, a fim de ser utilizado no controlador MPC. O Ponto de Operação, as *soft* e *hard-constraints* definidos para o modelo estão na Tabela 3.1

Tabela 3.1: Ponto de Operação, *Soft-* e *Hard-constraints*.

Parâmetros	Ponto de Operação	<i>Soft-Constraint</i>	<i>Hard-Constraint</i>	Δu_{max}
V_R [m ³]	0,611	-	-	-
F [kmol/h]	30	-	-	-
T [°C]	135	-	$95 \leq T \leq 135$	$0 \leq \Delta T \leq 8$
y_A	0,977	-	$0 \leq y_A \leq 1,0$	$0 \leq \Delta y_A \leq 0,2$
$C_{A,in}$ [kmol/m ³]	5,1	-	-	-
C_A [kmol/m ³]	1,2786	$1,0 \leq C_A \leq 2,0$	$0 \leq C_A \leq 3,0$	-
C_B [kmol/m ³]	0,6796	$0,5 \leq C_B \leq 1,0$	$0 \leq C_B \leq 3,0$	-
C_C [kmol/m ³]	0,7369	$0,5 \leq C_C \leq 1,0$	$0 \leq C_C \leq 3,0$	-
C_D [kmol/m ³]	0,1173	$0,08 \leq C_D \leq 1,0$	$0 \leq C_D \leq 3,0$	-
$C_{A,RO}$ [kmol/m ³]	1,8742	-	-	-
$C_{B,RO}$ [kmol/m ³]	0,0443	-	-	-
F_{RO} [kmol/h]	20,4655	-	-	-

Como variáveis controladas em faixas foram consideradas as concentrações dos componentes A, B, C e D . Como variáveis manipuladas foram consideradas a fração molar de A na corrente de reciclo (y_A) e a temperatura de reação (T). Além disso, considerou-se

que o volume de reação (V_R) encontra-se perfeitamente controlado através da manipulação da vazão de entrada (F_{in}), e o valor da vazão de saída do reator (F) é mantido constante. O sistema foi submetido a distúrbios na concentração de alimentação do reator ($C_{A,in}$) a fim de observar o comportamento do custo de operação do processo.

O custo definido para a Fração Molar de A na corrente de reciclo é $\beta_{y_A} = 2,047$, e para a Temperatura da reação é $\beta_T = 0,0074$. O valor do custo de y_A foi normalizado e definido maior que o da temperatura ao considerar que a energia gasta para separar A na coluna de destilação é mais “cara” que a energia gasta para aquecer a mistura reacional no reator CSTR fazendo com que a camada LP atue como uma camada de otimização simplificada.

O modelo não linear do processo foi feito em OMEdit – OpenModelica Connection Editor v1.9.6. Esse programa trata-se de um *software* livre que proporciona uma interface gráfica de fácil implementação e simulação, onde os modelos podem ser descritos através de linha de comando ou blocos. A simulação do modelo não linear e do controlador MPC foi feita no *software* livre Spyder 3.0 (do inglês *Scientific PYTHON Development EnviRonment*) que se trata de um ambiente avançado de criação e edição para a linguagem Python.

Considerando que o objetivo desse trabalho não é avaliar o ajuste do controlador, e sim a comparação entre as estratégias de otimização, manteve-se o controlador com os mesmos parâmetros, conforme Tabela 3.2.

Tabela 3.2: Parâmetros dos controladores MPC.

Parâmetros	Estrutura Clássica	Estrutura Proposta
T_s		1
P		20
M		5
Q_u	$diag[0,05; 0,05]$	-
Q_j	-	[0,05]
W		$diag[0,75; 0,75]$
ρ_ϵ		$diag[5; 5; 5]$

Observa-se que as variáveis de saída estão controladas através de faixas ($Q_y = 0$) e que o peso dos *targets* (estrutura clássica) e peso da ponderação da função custo (estrutura proposta) são iguais.

Foram feitos distúrbios na forma de degraus na concentração na corrente de alimentação, nos tempos $t = 150$ s e $t = 300$ s. O tempo de amostragem foi de $T_s = 1$ s e o tempo final de simulação foi $t_f = 500$ s. Os resultados encontram-se nas Figuras 3.5, e 3.6.

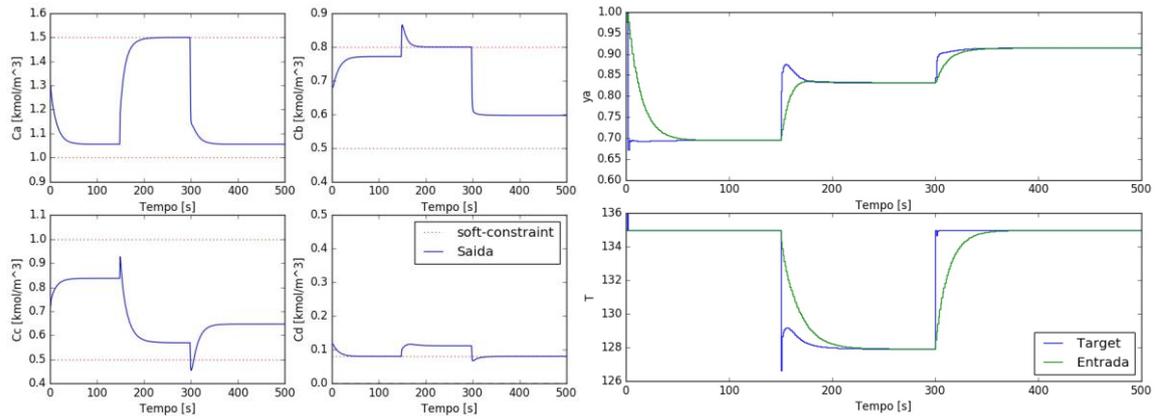


Figura 3.5: Variáveis controladas (a) e manipuladas (b) para estrutura clássica.

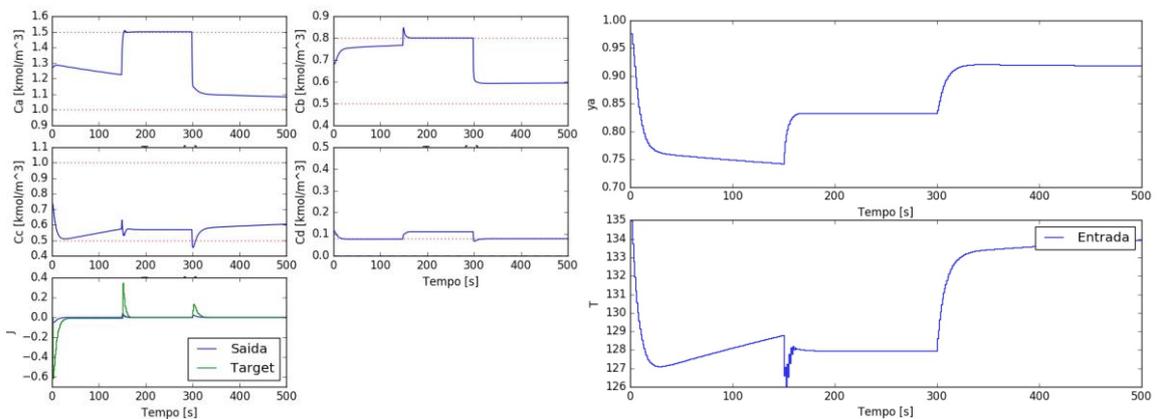


Figura 3.6: Variáveis controladas (a) e manipuladas (b) para estrutura proposta.

É possível observar através das figuras, que o modelo proposto apresenta uma menor variação nas ações de controle a fim de obter um resultado semelhante para as saídas. Isso era esperado, já que esse modelo proposto possui apenas 1 variável controlada através de *setpoint*, ou seja, o sistema possui uma maior liberdade nas ações de controle a fim de obter o resultado ótimo de custo de operação. Pode-se observar no problema clássico, que as variáveis manipuladas tendem a seguir valores bruscos de variação do *target*, o que é indesejável para uma operação robusta. Há uma diferença nos valores estacionários para as saídas e entradas devido ao fato de que na estrutura proposta o controlador tem como referência apenas o custo ótimo $J_{LP,set}$. A integral do erro quadrático (*ISE*) da violação da *soft-constraint* para as variáveis controladas na estrutura proposta foi $ISE_1 = 0,0165$ enquanto para estrutura clássica foi $ISE = 0,0405$.

Os custos de operação das duas estratégias, que correspondem aos valores da função objetivo do problema LP, encontram-se na Figura 3.7.

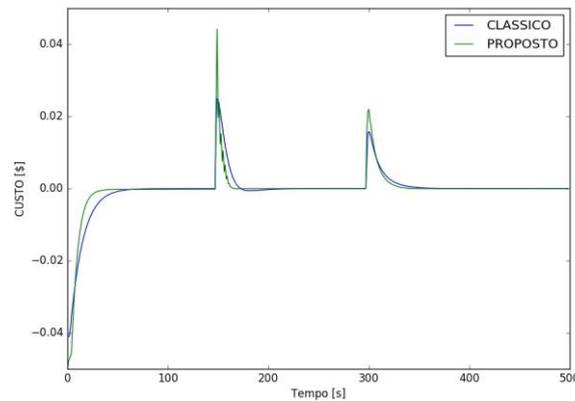


Figura 3.7: Comparação entre o custo de operação para a estrutura clássica e proposta.

É possível observar graficamente que o custo de operação ótimo é similar para a estratégia proposta em relação ao da estratégia clássica. Além disso, calculou-se a variância das variáveis manipuladas a fim de observar o quanto agressivas foram as ações de controle para manter as variáveis controladas nas faixas especificadas. Para a metodologia proposta foi encontrado o valor $VAR_1 = 7,65$ e para a metodologia clássica o valor $VAR = 8,90$.

3.5 Conclusão

Esse trabalho aborda uma estrutura unificada de controle e otimização de forma a superar as dificuldades (compensação de distúrbios, discrepância de modelo, diferenças de tempo de amostragem e etc.) presentes na estrutura clássica. A estrutura proposta de controlador+otimizador deu-se através da modificação da função custo do MPC, que ao invés de colocar valores de referência para as variáveis manipuladas (*targets*) e controladas (*setpoints*), estabeleceu valores de referência para o custo ótimo do processo. Essa abordagem permite uma maior flexibilidade ao permitir que cada entrada contribua de forma diferente da estrutura clássica, no objetivo econômico.

Como forma de exemplificar a proposta de controle e otimização em uma única camada, foi utilizado o modelo não-linear de um reator com uma coluna de destilação e reciclo. Esse exemplo foi capaz de corroborar a estrutura proposta, mostrando um custo de operação similar, uma menor variação nas ações de controle necessárias para manter as variáveis controladas nas faixas especificadas e uma menor violação das *soft-constraints* durante a operação.

3.6 Agradecimentos

A CAPES, PETROBRAS e ANP por suporte financeiro à pesquisa.

Capítulo 4 – Economic performance tracking for nonsquare MPCs based on a two-layer approach

O presente capítulo é reprodução do manuscrito que foi publicado na revista *The Canadian Journal of Chemical Engineering*.

Abstract: Range tracking for nonsquare systems is frequently adopted in process industries and its implementation is developed by model predictive control technologies. However, these approaches differ from those most considered in academia, with set-point tracking and the same number of controlled and manipulated variables. In this scope, real-time optimization (RTO) emerges as a diffused technology to improve the economic performance considering process, safety, and environmental constraints. In this work, a way to integrate economic aspects in industrial model predictive controllers (MPCs) by treating the nonlinear economic function as an output of the process model is proposed. The tracking error of the cost function is monitored, and its real value is estimated by a state estimator. The approach was applied to a nonsquare range system, exemplifying a continuous stirred-tank reactor (CSTR) with Van de Vusse kinetics, and showed that it is capable of tracking the minimum cost operation robustly. The paper also compares the proposed strategy to the traditional RTO implementation, which provides optimized targets, and presents slight improvement in the steady-state operation regarding the optimal cost seeking.

Keywords: economic profit, industrial MPCs, optimization, state estimator.

4.1 Introduction

Industrial model predictive controllers (MPCs) present some features that differ from those most studied in academia, boosting their application and the development of new algorithms. The main differences are related to operations in ranges instead of set-points, aiming to keep all its outputs in zones, (RODRIGUES *et al.*, 2019) implementing, for

example: soft-constraints; applications in non-square systems, with a different number of inputs and outputs and negative degrees of freedom (presenting more controlled than manipulated variables)(SANTOS; TRIERWEILER; FARENZENA, 2017); and the joint operation with an upper layer, responsible for driving the system to achieve the optimal profit through the economic improvement.(HINOJOSA *et al.*, 2017; SKOGESTAD, 2000b)

Since the late 1980s, refineries and chemical plants have implemented optimization technologies in a hierarchical structure with the successive refinement of time scales and scope scales from plant-wide optimization at the top, to regulatory control via single proportional-integral-derivative (PID) loops at the bottom (DARBY *et al.*, 2011; SKOGESTAD; POSTLETHWAITE, 2005). As an example, Wenzel *et al.* (2018) proposed an application of this hierarchical optimization system to coordinate the optimization of a large scale central energy facility relating to the energy consumption and participation in demand response programs. Jäschke and Skogestad (2011) classified the approaches for optimal process into three categories: (a) model used online (e.g., real-time optimization (RTO)(TRIERWEILER, 2013)); (b) model used offline (e.g., self-optimizing control (SOC) (JÄSCHKE; CAO; KARIWALA, 2017)); and, (c) explicit model not used, but in this case a necessary conditions of optimality (e.g., NCO-tracking (SRINIVASAN; BIEGLER; BONVIN, 2008)). All of these categories are measure dependent and/or model dependent, that is, they depend on online measurements and accurate plant models to estimate the best economic profit and send targets/set-points to the plant.

The integration between RTO (and other optimization strategies) and MPC is frequently employed due to the necessity to operate the plant as close to optimality as possible,(CAIRANO; KOLMANOVSKY, 2018) and it is facilitated by the inclusion of different layers in the process control. The fundamental role of this integration is providing optimizing setpoints to the dynamic layer (MPC) that calculates optimal control actions to be sent to the plant considering constraints, stability, and dynamics criteria (HINOJOSA *et al.*, 2017). The MPC approach features (e.g., feedforward tracking, multivariable control, including constraints and output variables controlled by range) provide the best control strategy for tracking the economic profit at the same time.

According to D'Jorge *et al.* (2017), the main drawback of the hierarchical structure is related to the communication between the economic and the dynamic layers, which could be inconsistent due to the differences between models and time scales. These inconsistencies may bring set-points unreachability, poor transient/stationary economic profit, oscillations, instability, and so on. This occurs because the new targets are usually calculated when the plant is stabilized, which makes it difficult to infer the current operation point and load characteristics influenced by frequent disturbances. It results in the controller and the optimizer not dealing with the same pieces of information. Also, traditional RTO faces some challenges such as model uncertainty, frequent grade changes, dynamic limitations, and cost of developing and updating the model (KRISHNAMOORTHY; FOSS; SKOGESTAD, 2018).

Rawlings *et al.* (2012), Mayne (2014), and Angeli and Müller (2019) proposed alternatives to the hierarchical decomposition replacing the objective function of the control system for an economic objective called economic model predictive control

(EMPC). This approach aims to minimize, over a receding prediction horizon, the cost function operation in a single optimization layer, controlling the plant and optimizing its economic performance.

To overcome the drawbacks related to hierarchical structures, excluding solutions with high computational demand such as dynamic real-time optimization (DRTO) (JAMALUDIN; SWARTZ, 2017) and non-linear EMPC (ANGELI; MÜLLER, 2019; FERRAMOSCA; LIMON; CAMACHO, 2014; MAYNE, 2014), single layer approaches composed by optimization and regulatory layer are considered. In this arrangement, the optimization problem and control are solved together, providing extended MPC controllers (ZANIN; TVRZSKA DE GOUVEA; ODLOAK, 2002) and other approaches (HINOJOSA *et al.*, 2017). These structures are based on nonlinear optimization problems that are difficult to solve within the controller sampling time, suitable only for systems which present very slow dynamics. Moreover, most of the optimization strategies are strongly dependent on measurements collected online, to estimate the process parameters and, based on those measurements, to update the model for calculating the optimal values.

To circumvent the characteristics related to layered structure and transient optimization, we propose here an extended controller where the economic objective function is embedded as a set-point controlled variable. The inclusion of the optimization layer into the regulatory layer will occur through the ponderation of the economic objective function error in the MPC cost function. The upper layer will be replaced by a static nonlinear optimization problem, supported by a state estimator (discrete extended Kalman filter (DEKF)), aiming to estimate the best set-point for the controller. This approach represents an alternative by combining an optimization problem (range MPC) with economic decision tracking, differing from the usual approaches that estimate set-point (or target) values for controlled and manipulated variables.

The paper is structured as follows: in section 4.2, the necessary backgrounds are presented, followed by the proposed unified structure for control and optimization in section 4.3, which is the main contribution of this work. The illustrative example, in section 4.4, shows a case study to corroborate the methodology, and in section 4.5, the conclusions are drawn.

4.2 Background

This section briefly describes the main features of MPC, RTO, and DEKF required to understand the proposed approach.

4.2.1 Model Predictive Control

MPC frequently uses a discrete model of the process, and, based on this model, control actions are accomplished, minimizing the error between the outputs and the reference trajectories and also penalizing the control effort of the inputs. Industrial applications of MPC sometimes force the controlled variables (CVs) to stay within high and low boundaries, by treating them as range or zone control variables through the implementation of soft-constraints, and use target values as a reference for the manipulated variables (MVs) (QIN, S Joe; BADGWELL, 2003c). A general MPC cost function is presented in (4.1) and its constraints in Equation

(4.2):

$$\min_{\mathbf{u}, \boldsymbol{\varepsilon}} J = \min_{\mathbf{u}, \boldsymbol{\varepsilon}} \left[\sum_{j=0}^P \|\hat{\mathbf{y}}(k+j|k) - \mathbf{y}_{set}(k+j|k)\|_{Q_y}^2 + \sum_{j=0}^M \|\hat{\mathbf{u}}(k+j|k) - \mathbf{u}_{tgt}(k+j|k)\|_{Q_u}^2 + \sum_{j=0}^M \|\Delta \hat{\mathbf{u}}(k+j|k)\|_W^2 + \|\boldsymbol{\varepsilon}_k\|_{\rho_\varepsilon}^2 \right] \quad (4.1)$$

subject to the following:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{x}}(\mathbf{k} + \mathbf{j} + \mathbf{1}|\mathbf{k}) &= \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}}(\mathbf{k} + \mathbf{j}|\mathbf{k}) + \mathbf{B}\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k} + \mathbf{j}|\mathbf{k}) \\ \hat{\mathbf{y}}(\mathbf{k} + \mathbf{j}|\mathbf{k}) &= \mathbf{C}\hat{\mathbf{x}}(\mathbf{k} + \mathbf{j}|\mathbf{k}) + \mathbf{D}\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k} + \mathbf{j}|\mathbf{k}) \\ \mathbf{u}_{min} &\leq \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k} + \mathbf{j}|\mathbf{k}) \leq \mathbf{u}_{max} \\ \Delta \mathbf{u}_{min} &\leq \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k} + \mathbf{j}|\mathbf{k}) - \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k} + \mathbf{j} - \mathbf{1}|\mathbf{k}) \leq \Delta \mathbf{u}_{max} \\ \mathbf{y}_{min}^{soft} - \boldsymbol{\varepsilon}_k &\leq \hat{\mathbf{y}}(\mathbf{k} + \mathbf{j}|\mathbf{k}) \leq \mathbf{y}_{max}^{soft} + \boldsymbol{\varepsilon}_k \end{aligned} \quad (4.2)$$

where $\hat{\mathbf{y}}(k+j|k)$ is the predicted outputs, $\mathbf{y}_{set}(k+j|k)$ is the set-point values for the outputs, $\hat{\mathbf{u}}(k+j|k)$ is the predicted control actions, $\mathbf{u}_{tgt}(k+j|k)$ is the target values for the inputs, $\Delta \hat{\mathbf{u}}(k+j|k)$ is the control moves and $\boldsymbol{\varepsilon}_k$ is the slack deviation of the soft-constraints. The tuning parameters are prediction horizon (P), control horizon (M), weighting-matrix of the set-point error (Q_y), weighting-matrix of the target error (Q_u), move suppression weighting-matrix (W), and soft-constraint violation penalty weight (ρ_ε). The Euclidean weighted-norm of $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^n$, with $R \in \mathbb{R}^{n \times n}$ is represented by $\|\mathbf{z}\|_R^2 = \mathbf{z}^T R \mathbf{z}$. The constraints presented in Equation (4.2) represent the linearized state-space model being A, B, C and D (the linearization matrices) and limit the lower and upper values for the outputs ($\mathbf{y}_{min}^{soft}, \mathbf{y}_{max}^{soft}$), inputs ($\mathbf{u}_{min}, \mathbf{u}_{max}$), and input variations ($\Delta \mathbf{u}_{min}, \Delta \mathbf{u}_{max}$).

The classical approach proposed in Equations (4.1) and

(4.2) could be modified to represent the industrial applications by considering all the entries of the weighting-matrix of the set-point error (Q_y) to be zero. In this manner, the predicted outputs will be allowed to follow any trajectory within the output zone, being penalized when the prediction transgresses the soft-constraints. Besides that, considering an optimization upper layer, the estimated target values (e.g., through RTO algorithm, or other optimization problem) will be sent to the controller as optimal reference values.

4.2.2 Real-time Optimization

According to Trierweiler (2013), the traditional static RTO implementation is based on two steps: (a) Steady-state detection/data reconciliation and (b) static optimization. The initial step (a) is responsible for detecting if the process is at steady-state and, after that,

the estimation of the model parameters according to measurements. It occurs through material and energy balances as a way to correct gross errors and the influence of disturbances. After that, with a model that represents the plant faithfully at the current operating point, an objective function, and process constraints, the optimum targets/set-points are calculated using optimization method (b). Figure 4.1 shows a typical RTO implementation with an MPC controller.

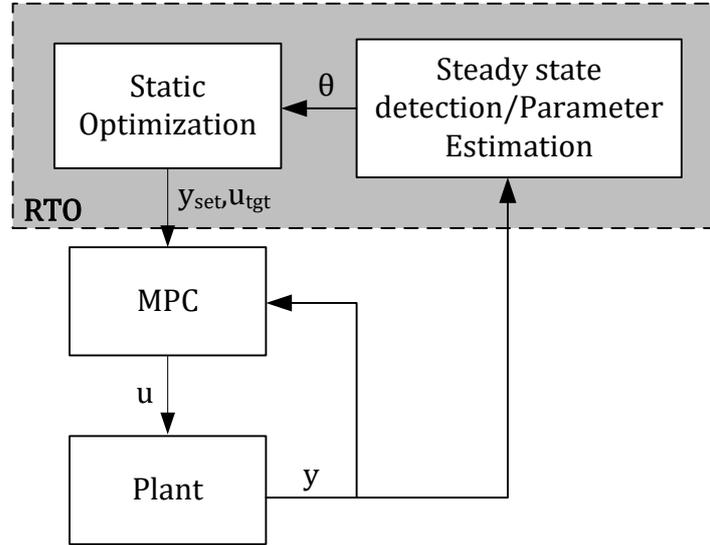


Figure 4.1: Real-time optimization (RTO) + model predictive controller (MPC) implementation.

Krishnamoorthy *et al.* (2018) describe the RTO mathematical modelling considering a nonlinear discrete-time process described as follows:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{f}_{\theta}(\mathbf{x}_k, \mathbf{u}_k; \boldsymbol{\theta}_k) \quad (4.3)$$

$$\mathbf{y}_k = \mathbf{h}(\mathbf{x}_k, \mathbf{u}_k) \quad (4.4)$$

and a static part is described by the following:

$$\mathbf{y} = \mathbf{f}_{ss}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}) \quad (4.5)$$

Where $\mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^{n_x}$, $\mathbf{u}_k \in \mathbb{R}^{n_u}$, $\mathbf{y}_k \in \mathbb{R}^{n_y}$ and $\boldsymbol{\theta}_k \in \mathbb{R}^{n_{\theta}}$ the states, the inputs, the outputs and the set of parameters/disturbances, respectively. Equation (4.5) represents $\mathbf{f}_{ss}: \mathbb{R}^{n_u} \times \mathbb{R}^{n_{\theta}} \rightarrow \mathbb{R}^{n_y}$, the steady-state input-output mapping.

The data reconciliation (a) that occurs after the steady-state detection is presented in Equation (4.6), and the nonlinear programming problem (NLP) that represents step (b) is presented in Equation (4.7) and its constraints in Equation (4.8):

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_k = \min_{\boldsymbol{\theta}} \|\mathbf{y}_{meas} - \mathbf{f}_{ss}(\mathbf{u}_k, \boldsymbol{\theta})\|_2^2 \quad (4.6)$$

$$\mathbf{u}_{tgt,k+1} = \min_{\mathbf{u}} J_{eco}(\mathbf{y}, \mathbf{u}) \quad (4.7)$$

subject to the following:

$$\begin{aligned} \mathbf{y} &= \mathbf{f}_{ss}(\mathbf{u}, \hat{\boldsymbol{\theta}}_k) \\ \mathbf{g}(\mathbf{y}, \mathbf{u}) &\leq 0 \end{aligned} \quad (4.8)$$

where \mathbf{y}_{meas} are the measurements from the plant; J_{eco} denotes the economic objective function based on an economic model, raw materials, products and operating costs; and \mathbf{g} describes the vector of nonlinear constraints (process/operating constraints and bounds).

After that, the profitability of implementing the optimal solution is evaluated, and if noise is the dominant cause of changes, applying these changes could lower the profit (TRIERWEILER, 2013).

4.2.3 Discrete-time extended Kalman filter

The Kalman filter uses observed measures (with noise and other discrepancies) to estimate unknown variables. This filter represents an approximation for nonlinear systems, based on first order linearization of the state equations combined with linear estimation theory of the Kalman filter (LJUNG, 1979).

The discrete-time EKF considers discrete-time dynamics and discrete-time measurements. The nonlinear system equations are given as follows (SIMON, 2006):

$$\mathbf{x}_k = \mathbf{f}_{k-1}(\mathbf{x}_{k-1}, \mathbf{u}_{k-1}, \boldsymbol{\omega}_{k-1}) \quad (4.9)$$

$$\mathbf{y}_k = \mathbf{h}_k(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k) \quad (4.10)$$

Linearizing the system results in the following:

$$\mathbf{F}_{k-1} = \left(\frac{\partial \mathbf{f}_{k-1}}{\partial \mathbf{x}} \right)_{\hat{\mathbf{x}}_{k|k-1}} \quad (4.11)$$

$$\mathbf{H}_k = \left(\frac{\partial \mathbf{h}_k}{\partial \mathbf{x}} \right)_{\hat{\mathbf{x}}_{k|k-1}} \quad (4.12)$$

The states covariance is given by Equation (4.13):

$$\mathbf{P}_{k|k-1} = \mathbf{F}_{k-1} \mathbf{P}_{k-1|k-1} \mathbf{F}_{k-1}^T + \mathbf{Q}_{k-1} \quad (4.13)$$

And the correction step is given by Equation (4.14):

$$\mathbf{K}_k = \mathbf{P}_{k-1|k-1} \mathbf{H}_k^T [\mathbf{H}_k \mathbf{P}_{k-1|k-1} \mathbf{H}_k^T + \mathbf{R}_k]^{-1} \quad (4.14)$$

The states are actualized as follows:

$$\hat{\mathbf{x}}_{k|k} = \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} + \mathbf{K}_k [\mathbf{y}_k - \mathbf{h}(\hat{\mathbf{x}}_{k|k-1}, \mathbf{t}_k)] \quad (4.15)$$

And the updated state covariance matrix is as follows:

$$P_{k|k} = [I_n - K_k H_k] P_{k|k-1} \quad (4.16)$$

where k is the discrete-time step, x is the state vector, f is the model function, ω is the process noise vector, y is the output vector, h is the function that relates the states and the outputs, v is the measurement noise vector, F is the Jacobian of f , H is the Jacobian of h , P is the states covariance matrix, Q is the process noise covariance matrix, K is the Kalman gain, R is the measurement noise covariance matrix, and I is the identity matrix.

DEKF for parameter estimation uses an augmented state vector $x' = [x^T, \theta^T]$ where θ are the unmeasured parameters to be estimated by the filter.

4.3 An Unified Structure for Control and Optimization

A linearized, discrete-time, state-space model of the plant is considered as follows:

$$x(k+1) = Ax(k) + Bu(k) \quad (4.17)$$

$$y(k) = Cx(k) + Du(k) \quad (4.18)$$

where $x(k) \in \mathbb{R}^n$, $u(k) \in \mathbb{R}^m$ and $y(k) \in \mathbb{R}^p$ denote the states, control inputs, and measured outputs, respectively. These measured outputs are assumed to be controlled either to set-points, or to satisfying some constraints. Assuming the economic objective that must be optimized is $J_{eco}: \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}$, a function of the inputs and outputs that represents the maximal production or minimal cost of the operation. The usual economic function (to be minimized) considered in the process industries is shown in Equation (4.19):

$$J_{eco} = -\left(\sum_{i=1}^{products} \$_{P,i} \cdot P_i - \sum_{i=1}^{feeds} \$_{F,i} \cdot F_i - \sum_{i=1}^{utilities} \$_{U,i} \cdot U_i\right) \quad (4.19)$$

where $\$_{P,i}$, $\$_{F,i}$, and $\$_{U,i}$ are the prices of the products per kg, of the feedstock per kg, and of the utilities per kWh. The variables P_i , F_i and U_i are the product flow rate, feed flow rate, and utility consumption, respectively. The economic function defined in Equation (4.19) should be minimized to estimate the optimum values of input/output targets subject to rigorous steady-state model, lower and upper bounds on the controlled outputs and input targets. In classical RTO implementations, these estimated values are sent to the controller as reference values to be reached and the true value of the optimization problem, J_{eco} , which corresponds to the achieved optimal cost obtained in the current step time, is neglected.

Here, the value of the economic cost function (J_{eco}) at step k will be considered as the desired reference to be achieved by the MPC. To accomplish it, we propose setting the economic cost function as an output of the process model, that is, J_{eco} will be linearized and established as a part of the state-space model (Equation (4.18)) precisely as an output. The other outputs will be controlled by range being their portion omitted in the MPC cost function. As the optimization function (Equation (4.19)) will be treated as a controlled variable, there is no need to control the manipulated variables in their respective targets. The obtained function for the MPC, which includes economic aspects is presented by the following:

$$\min_{\mathbf{u}, \boldsymbol{\varepsilon}_k} J_{ext} = \min_{\mathbf{u}, \boldsymbol{\varepsilon}_k} \left[\sum_{j=0}^P \|\hat{J}_{eco}(k+j|k) - J_{eco,set}(k+j|k)\|_{\varphi}^2 + \sum_{j=0}^M \|\Delta \hat{\mathbf{u}}(k+j|k)\|_W^2 + \|\boldsymbol{\varepsilon}_k\|_{\rho_{\varepsilon}}^2 \right] \quad (4.20)$$

subject to the following (Equations (4.17) and (4.18)):

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{min} &\leq \hat{\mathbf{u}}(k+j|k) \leq \mathbf{u}_{max} \\ \Delta \mathbf{u}_{min} &\leq \hat{\mathbf{u}}(k+j|k) - \hat{\mathbf{u}}(k+j-1|k) \leq \Delta \mathbf{u}_{max} \\ J_{eco,min} - \varepsilon_k &\leq \hat{J}_{eco}(k+j|k) \leq J_{eco,max} + \varepsilon_k \\ \mathbf{y}_{min}^{soft} - \varepsilon_k &\leq \hat{\mathbf{y}}(k+j|k) \leq \mathbf{y}_{max}^{soft} + \varepsilon_k \end{aligned} \quad (4.21)$$

where $\hat{J}_{eco}(k+j|k)$ represents the predicted trajectory for the cost function (output); $J_{eco,set}(k+j|k)$ is the current cost function set-point; $J_{eco,min}$ and $J_{eco,max}$ are the minimum and maximum bounds, respectively, for the economic cost function; and $\varphi \in \mathbb{R}$ is the weight-tuning of economic tracking. The other variables are the same as used in standard MPC implementation.

By treating the economic cost function and the process in this form, it is ensured that the optimization strategy and the process will handle the same piece of information in a single (extended) layer. Besides that, it is possible to set lower and upper bounds as soft-constraints for the economic cost.

The upper layer, which corresponds to an optimization layer in the traditional approach, will be used for the calculation of $J_{eco,set}$, the true value of the optimal economic cost, that will be actualized at each sample time. The calculation of this set-point will occur through static nonlinear programming supported by a state estimator, here a DEKF, that will be responsible to estimate the unmeasured states and the parameters of the process model (KRISHNAMOORTHY; FOSS; SKOGESTAD, 2018).

A summarized structure of the proposed approach is presented in Figure 4.2.

This procedure is capable of tracking the value of the optimal cost operation of the plant, since at time step k the DEKF will provide the current values of the unmeasured outputs and parameters of the model used in the optimization layer. This is a fundamental step for the cost function evaluation. After this update, the MPC controller will seek the optimal steady-state cost. Furthermore, considering the economic objective in the regulatory layer, it is possible to use an adequate tuning procedure, since \hat{J}_{eco} is a controlled variable and the other outputs are controlled by range.

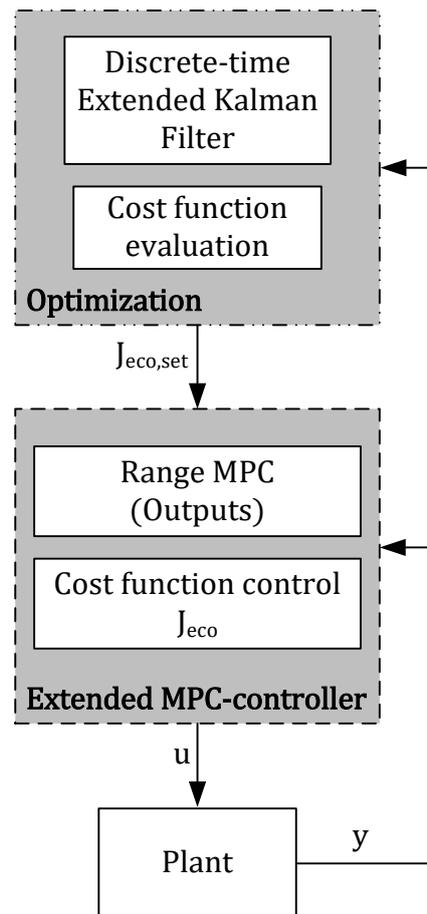


Figure 4.2: Extended model predictive controller (MPC) capable of handling economic aspects.

Applying the unified structure for control and optimization approach in MIMO problems, relaxation in the controller's calculation will be guaranteed since control actions based on an economic cost error will be considered instead of target error and set-point error. The time for computing the current control actions will not be affected because the controller will handle linearized functions, and the setpoint calculation will handle static nonlinear programming. The upper layer will be responsible for capturing the real value of the minimum cost that must be reached by the MPC controller, being the value updated through DEKF. Lastly, both layers will consider the same piece of information since no waiting time will be required for the calculation of the new set-points.

In practice, the approach will be closed-loop stable as long as a very large horizon is chosen, like any finite horizon MPC controller without terminal ingredients. The controller's tuning should be properly computed to provide, as a priority, an optimal range control and afterward an economic profit, which is not an easy task since soft-constraints must be satisfied for the entire region to provide robust control actions (SANTOS; TRIERWEILER; FARENZENA, 2017).

4.4 Illustrative Example

In this section, we apply the proposed methodology using a simulation of a CSTR. The case study was adapted from the one proposed by Engell and Klatt (1993) and fully described by Trierweiler (1997), and relates the performance of a chemical reaction described by Van de Vusse kinetics, where cyclopentenol (B) is produced from

cyclopentadiene (A) and the byproducts cyclopentanediol (C) and dicyclopentadiene (D) are produced in consecutive reactions as follows:



The schematics that represent the CSTR are presented in Figure 4.3.

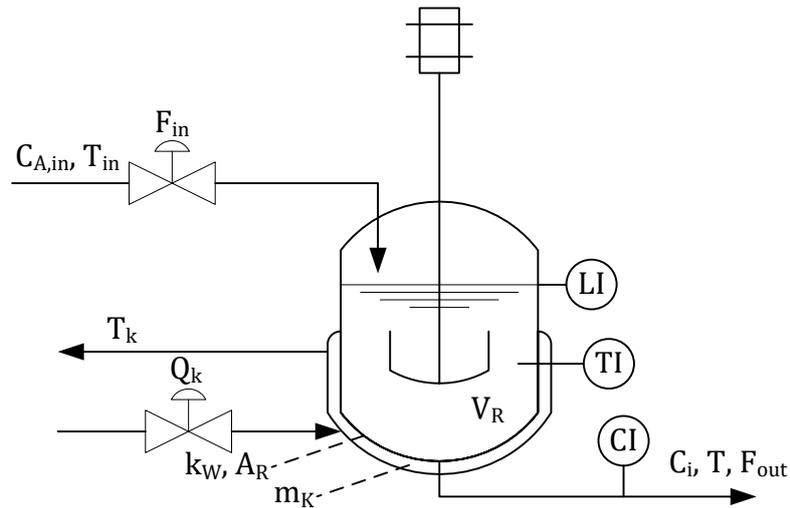


Figure 4.3: Schematic representation of continuous stirred-tank reactor (CSTR).

It is assumed that the reaction will occur with constant density (ρ) and specific heat (C_p). The material and energy balances that describe the nonlinear model of the process are as follows:

$$A_t \frac{d(h)}{dt} = F_{in} - k\sqrt{h} \quad (4.24)$$

$$A_t \frac{d(h \cdot C_A)}{dt} = F_{in} C_{A,in} - k\sqrt{h} C_A - A_t \cdot h (k_1 C_A + k_3 C_A^2) \quad (4.25)$$

$$A_t \frac{d(h \cdot C_B)}{dt} = -k\sqrt{h} C_B + A_t \cdot h (k_1 C_A - k_2 C_B) \quad (4.26)$$

$$C_c = \frac{k_2 C_B A_t h}{F_{in}} \quad (4.27)$$

$$C_D = \frac{k_3 C_A^2 A_t h}{2 F_{in}} \quad (4.28)$$

$$A_t \frac{d(h \cdot T)}{dt} = F_{in} T_{in} - k\sqrt{h}T + \frac{k_W A_R}{\rho C_p} (T_K - T) - \frac{A_t \cdot h}{\rho C_p} (k_1 C_A \Delta H_1 + k_2 C_B \Delta H_2 + k_3 C_A^2 \Delta H_3) \quad (4.29)$$

$$\frac{dT_K}{dt} = \frac{1}{m_K C_{pK}} (Q_K + k_W A_R (T - T_K)) \quad (4.30)$$

where F_{in} is the feed flow rate, $F_{out} = k\sqrt{h}$ is the output flow rate, h is the level of the tank, A_t is the cross-sectional area of the tank, $C_{A,in}$ is the feed concentration of the reactant, C_A is the concentration of A at the output, C_B is the concentration of B at output, C_C is the concentration of C at the output, C_D is the concentration of D at the output, T_{in} is the feed temperature, T is the output temperature, T_K is the temperature of the cooling jacket, k_W is the heat transfer coefficient, A_R is the area of transfer heat, C_p is the specific heat of the mixture, m_K is the mass of the coolant, C_{pK} is the specific heat of the coolant and Q_K is the heat removal rate. The reaction enthalpies are $\Delta H_1, \Delta H_2, \Delta H_3$. The specific reaction rates are dependent on temperature via Arrhenius equations:

$$k_1 = k_2 = 1.287 \times 10^{12} \exp\left(-\frac{9758.3}{T[K]}\right) \quad (4.31)$$

$$k_3 = 9.043 \times 10^9 \exp\left(-\frac{8560}{T[K]}\right) \quad (4.32)$$

Controlled variables are considered to be the level of the reactor (h), the concentration of product B (C_B), and temperature of the output flow (T); manipulated variables are the input volume flow (F_{in}) and heat removal rate (Q_K). The nominal values and the acceptable range of the variables are presented in Table 4.11.

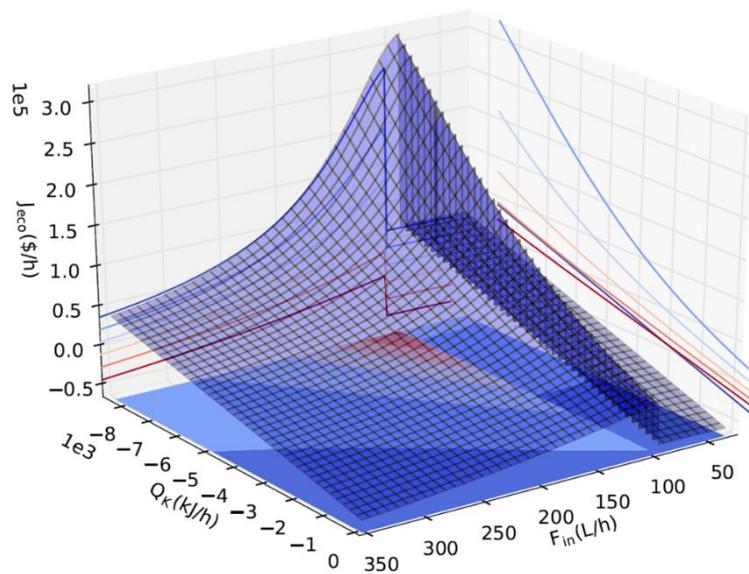
The cost function to be minimized is proposed as follows:

$$J_{eco} = -(4 \cdot (F_{out} C_B)^2 + 1.1 \cdot F_{out} C_C + (-0.5) \cdot F_{out} C_D + (-1.55) \cdot (F_{out} C_A)^2 - 1.05 \cdot F_{in} C_{A,in} - 15 \cdot (-Q_K)) \quad (4.33)$$

The manipulated variables are used to achieve the controlled (by range) outputs and consequently obtain the best value for the function J_{eco} (Equation (4.33)). The true values of the outputs are evaluated in this cost function as well, being the concentrations of the components C and D obtained by stoichiometric relations since they are not measured and, the inclusion of the material balances for these components might degrade the observability of the states and the state/parameter estimation. In Figure 4.4 the behaviour of the economic cost function related to the inputs F_{in} and Q_K is presented, and in Figure 4.5 the behaviour of the economic cost function related to disturbances, $C_{A,in}$ and T_{in} is presented. The other parameters are kept at nominal values in both plots.

Table 4.1: Nominal Operating Point.

	Description	Value	Unit	Range
$C_{A,in}$	inlet <i>A</i> concentration	5.1	mol/L	$4.5 \leq C_{A,in} \leq 5.7$
T_{in}	input temperature	403.15	K	$400 \leq T_{in} \leq 410$
F_{in}	feed flow rate	188.3	L/h	$30 \leq F_{in} \leq 350$
Q_K	heat removal rate	-4496.0	kJ/h	$-8500 \leq Q_K \leq 0$
h	level of the tank	0.238	m	$0.15 \leq h \leq 0.30$
C_B	concentration of <i>B</i>	0.900	mol/L	$0.7 \leq C_B \leq 0.95$
T	reaction temperature	407.29	K	$400 \leq T \leq 410$
C_A	concentration of <i>A</i>	1.235	mol/L	
T_K	coolant temperature	402.1	K	
k_W	heat transfer coefficient	4032.0	kJ/m²hK	
k	valve flow coefficient	385.97	m^{2.5}/h	
A_t	cross-sectional tank area	0.042	m²	
A_R	surface of cooling jacket	0.215	m²	
ρ	density	0.9342	kg/L	
C_p	heat capacity	3.01	kJ/kgK	
$C_{p,K}$	coolant heat capacity	2.0	kJ/kgK	
m_K	coolant mass	5.0	kg	
ΔH_1	Reaction enthalpy 1	4.2	kJ/mol	
ΔH_2	Reaction enthalpy 2	-11	kJ/mol	
ΔH_3	Reaction enthalpy 3	-41.85	kJ/mol	

**Figure 4.4:** Economic cost function behavior varying F_{in} and Q_K .

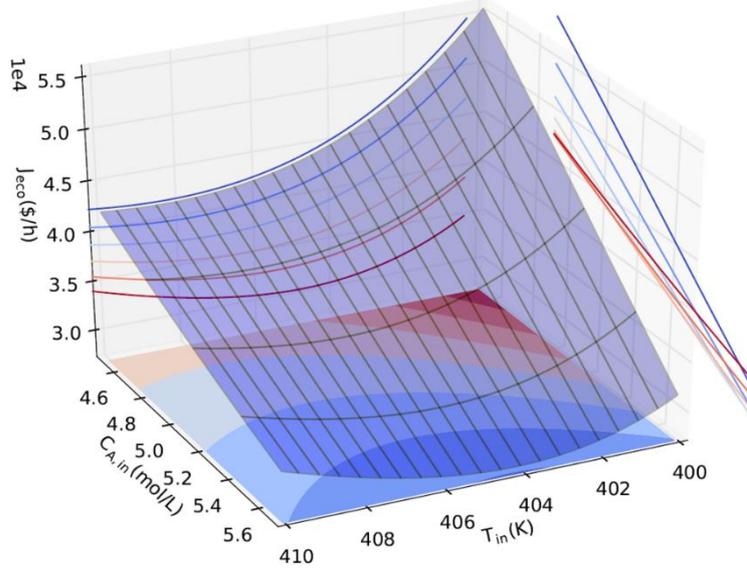


Figure 4.5: Economic cost function behavior related to disturbances.

It is important to observe that in the proposed problem the only measured variables are the outputs h , C_B , and T , and manipulated variables are F_{in} and Q_K . However, the cost function, Equation (4.33), presents some terms that correspond directly to the state C_A and the unmeasured disturbance $C_{A,in}$, as well as indirectly to T_{in} . According to Figure 4.5, the influence of the disturbances (even T_{in} , which is not directly computed in the expression) strongly affects the optimal operation cost of the problem.

To compute the influences of these disturbances and the unmeasured states, a DEKF is employed here that will estimate these values and then compute an operating cost that will be sent to the controller as set-point.

The state-space representation for the nonlinear model (Equations (4.24)-(4.30)) and the cost J_{eco} (Equation (4.33)), used in the controller design, were obtained through the linearization matrices (Equation (4.34)):

$$\begin{aligned}
 A &= \left. \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\substack{\mathbf{x}=\tilde{\mathbf{x}} \\ \mathbf{u}=\tilde{\mathbf{u}}}} \\
 B &= \left. \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{u}} \right|_{\substack{\mathbf{x}=\tilde{\mathbf{x}} \\ \mathbf{u}=\tilde{\mathbf{u}}}} \\
 C &= \left. \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\substack{\mathbf{x}=\tilde{\mathbf{x}} \\ \mathbf{u}=\tilde{\mathbf{u}}}} \\
 D &= \left. \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{u}} \right|_{\substack{\mathbf{x}=\tilde{\mathbf{x}} \\ \mathbf{u}=\tilde{\mathbf{u}}}}
 \end{aligned} \tag{4.34}$$

where \mathbf{f} represents the nonlinear state equations, \mathbf{g} represents the nonlinear output equations, $\mathbf{x} = [h, C_A, C_B, T, T_K]'$ represents the states, $\mathbf{u} = [F_{in}, Q_K]'$ represents the inputs, and the notation $\tilde{\mathbf{z}}$ means the nominal value of \mathbf{z} . It is important to mention that J_{eco} is considered an output, and its representation is only evaluated in the matrices C and D .

The model was developed and solved in Python 2.7 using the Spyder programming environment with the aid of JModelica (ÅKESSON *et al.*, 2010). The solver employed for the

minimization problems was sequential least-squares programming (SLSQP), allowing any combination of bounds, equality and inequality constraints with sampling time $ts = 0.01 h$, Prediction horizon $P = 40$, control horizon $M = 10$, and the tuning matrices $\varphi = [0.1]$, $W = \text{diag}[1.0,1.0]$, and $\rho_\varepsilon = \text{diag}[50,50,50]$. All simulations were carried out in an IntelCore i7-4770S CPU@3.10GHz (12.0 GB RAM). The average time for each iteration was 0.025 seconds. The controller was designed to keep all controlled outputs in their nominal ranges by setting them as soft-constraints. The same was proposed for the inputs and input variations. The soft-constraints in the cost function J_{eco} were established as $J_{eco,min} = 0.0 \text{ \$/h}$ and $J_{eco,max} = 50\,000.0 \text{ \$/h}$. In all simulations, the parameters $C_{A,in}$ and T_{in} vary as shown in Figure 4.6.

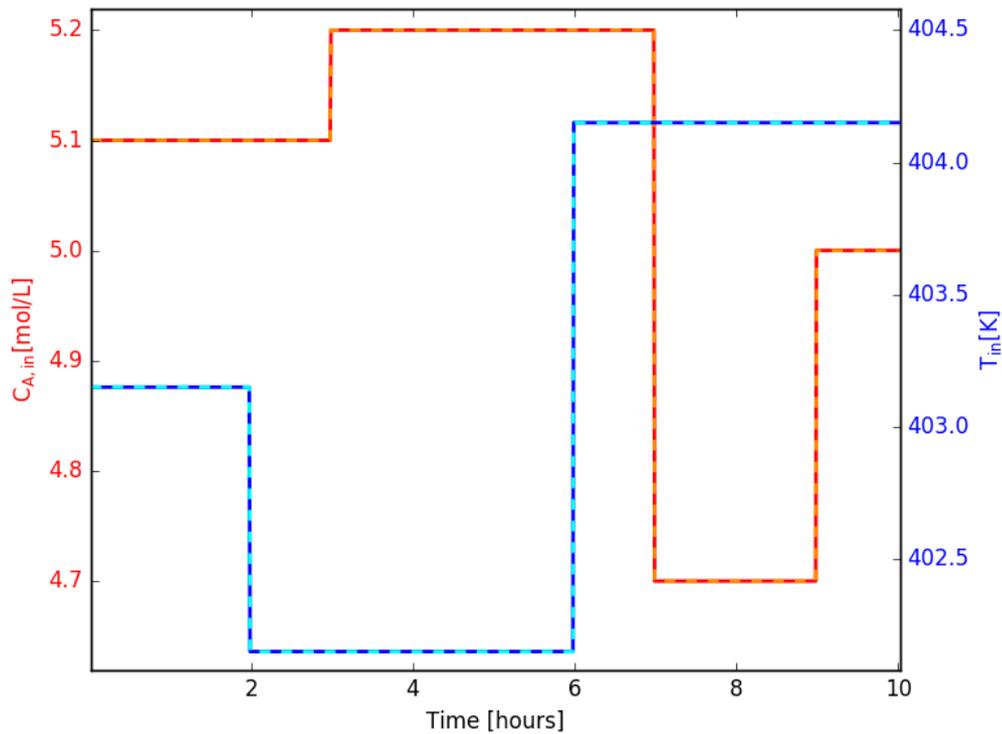


Figure 4.6: Disturbance variations.

In Figure 4.6, the real values of the disturbances $C_{A,in}$ and T_{in} (solid lines) and the values estimated by DEKF (dashed lines) are observed. This estimation was crucial for the development of the proposed strategy since it does not take excessive computation time for estimating the real values of the disturbances and does not require waiting for plant stabilization, as is required in other RTO strategies.

The simulations of the proposed approach are carried, and Figure 4.7 shows the controlled (by range) outputs. In Figure 4.8, the set-point tracking of the cost function, handled as an output of the process, is presented. The manipulated control actions are presented in Figure 4.9.

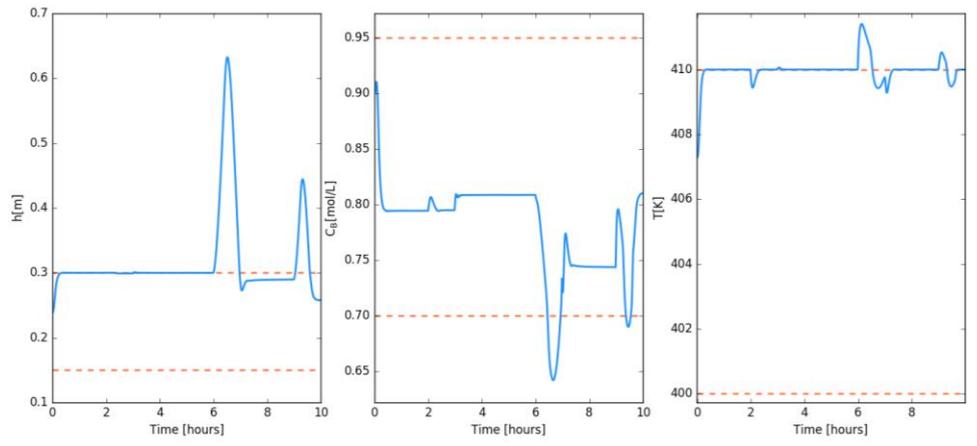


Figure 4.7: Controlled (by range) outputs of the proposed approach; dashed lines represent the soft-constraints and solid lines the outputs.

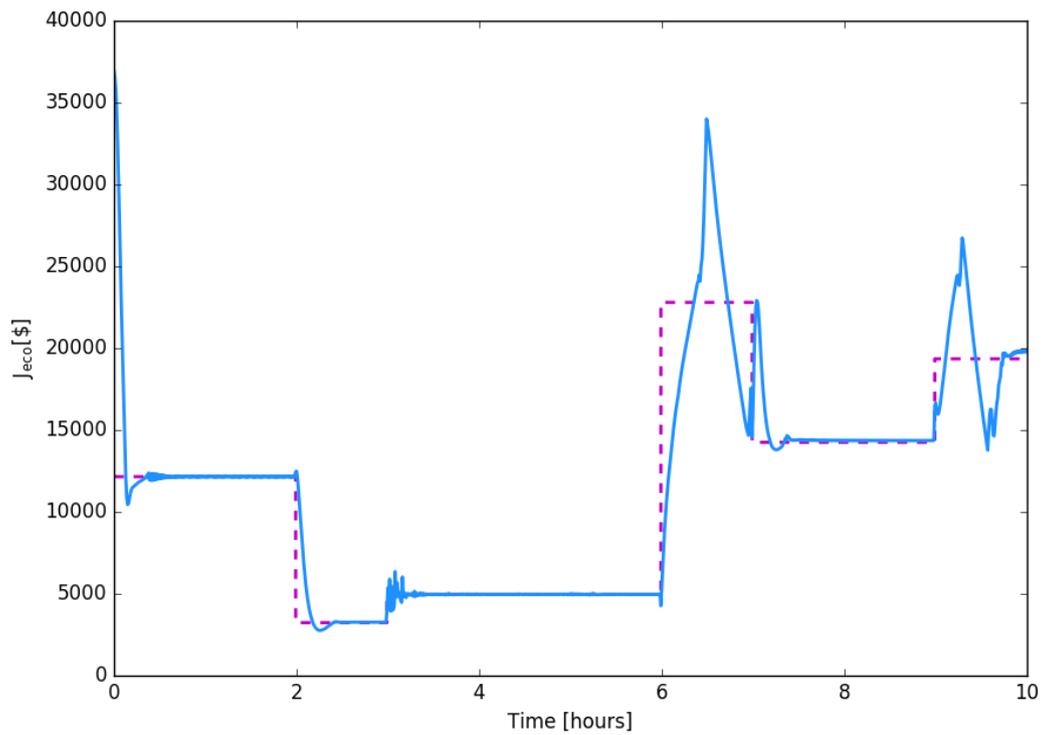


Figure 4.8: Set-point (dashed line) and controlled cost function (solid line) of the proposed methodology.

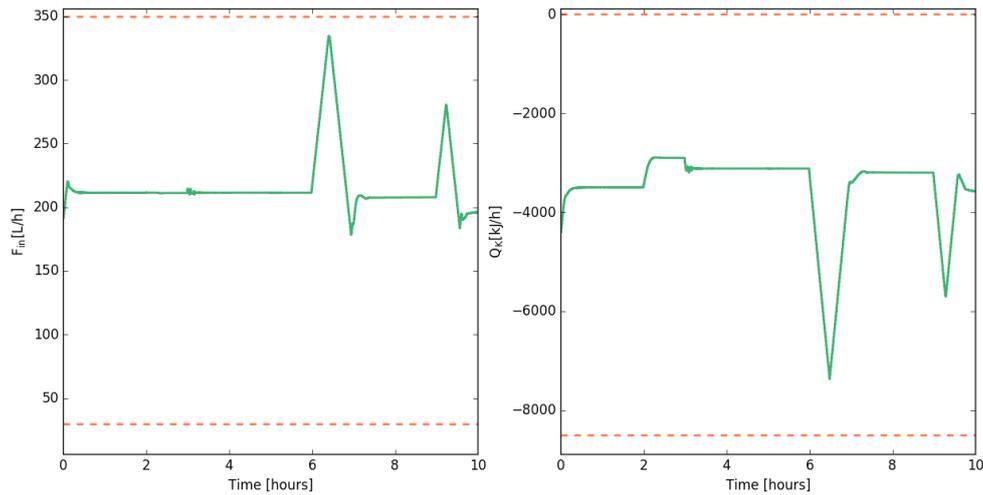


Figure 4.9: Manipulated inputs of the proposed approach; dashed lines represent the hard constraints and solid lines the inputs.

It is observed through the simulations that the MPC controller provides control actions to keep the operation cost as close as possible to the set-point that represents the true minimum cost. It is also shown that the controlled variables are led to their zone region. The violations of the soft-constraints occur due to disturbances, and the controller provides robust control actions to bring these outputs to the acceptable zone.

To compare the proposed strategy, a traditional approach was implemented for the same case study, where instead of the cost function tracking, the values of the manipulated targets were sent to the controller as reference values. The same disturbance pattern was applied, and the same constraints were used for the simulation. Figure 4.10 shows the controlled (by range) outputs and Figure 4.11, the manipulated control actions.

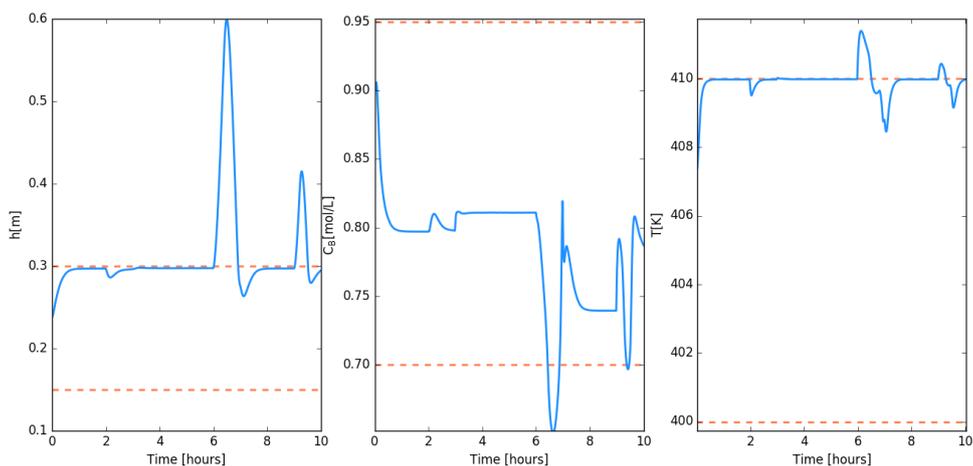


Figure 4.10: Controlled (by range) outputs for the traditional real-time optimization (RTO) implementation; dashed lines represent the soft-constraints and solid lines the outputs.

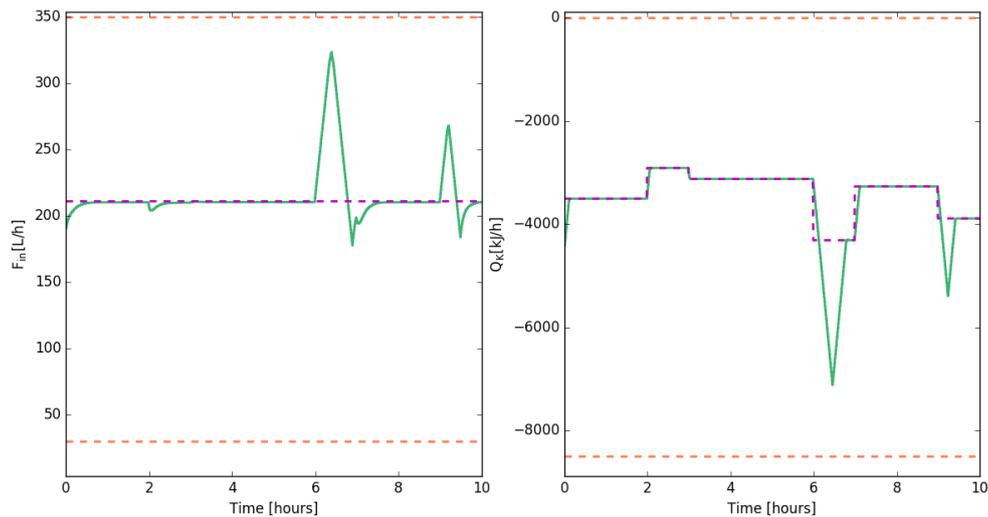


Figure 4.11: Manipulated inputs of the traditional implementation: magenta dashed lines represent the target values, solid lines the inputs and coral dashed lines the hard constraints

According to Figure 4.10 and Figure 4.11, a similar behaviour to the proposed approach was observed; even the soft-constraint violations were not suppressed by the traditional implementation. A comparison between both strategies is presented in Figure 4.12, the achieved costs of the proposed approach and the traditional implementation. In Figure 13 the integral of the obtained cost of both strategies ($J_{eco,int}$) is presented.

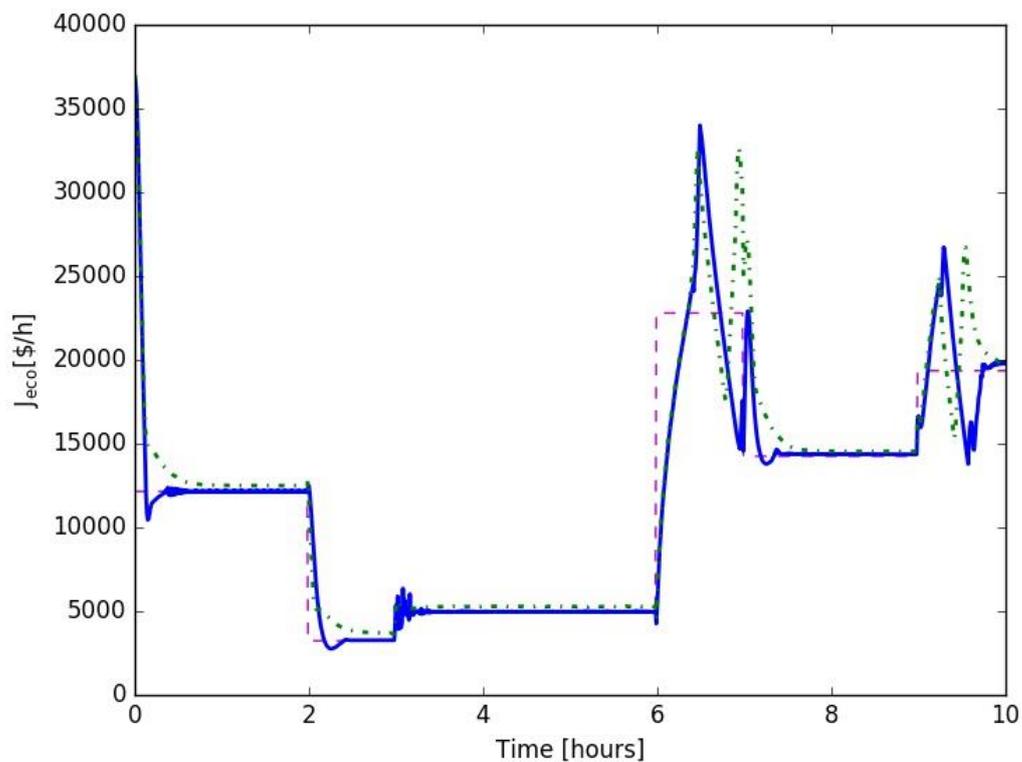


Figure 4.12: Achieved cost operation in the proposed approach (solid blue) and in the traditional implementation (dash-dot green); the optimal static set-point (magenta).

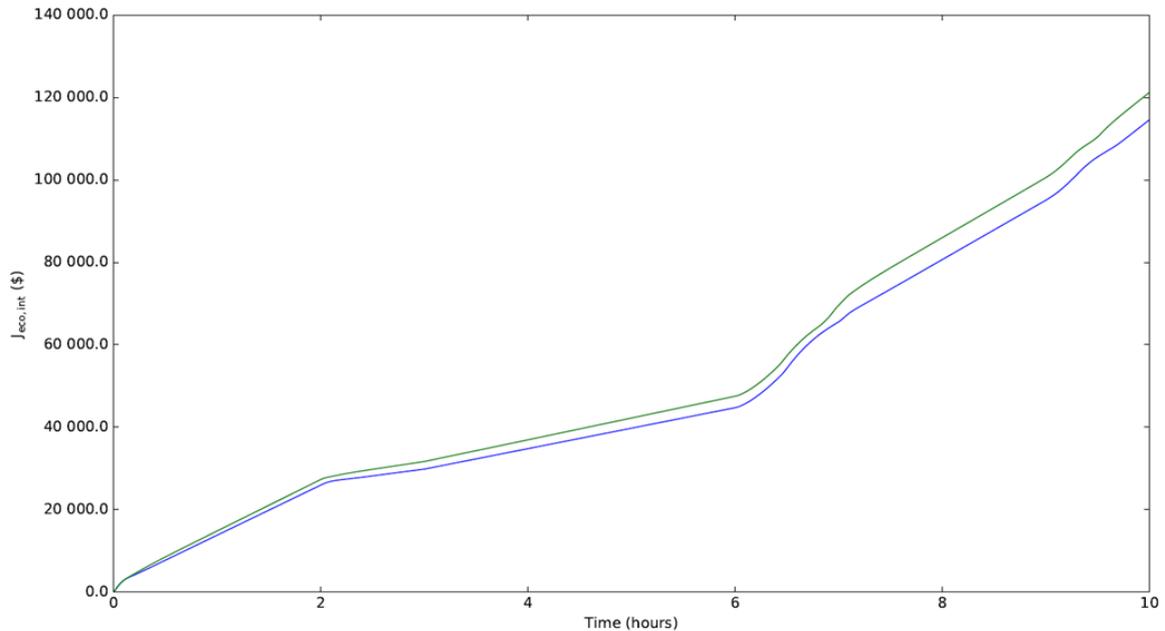


Figure 4.13: Integral of the achieved cost operation in the proposed approach (solid blue) and in the traditional implementation (solid green).

It is observed, in Figure 4.12, that both approaches tend to drive the system to optimal cost. In the traditional implementation (dash-dot green line) an offset is presented in the optimal cost operation (set-point) in the steady-state. It shows that the controller is running on a suboptimal point. This behaviour does not occur for the presented approach since the controller is capable of tracking the set-point. In the transient, both strategies present oscillatory behaviour to bring the system to an optimum and not to violate the constraints. A way to attenuate these oscillations is through a proper tuning that was not evaluated in this paper. In Figure 4.13, it can be seen through the comparison of both approaches that the proposed approach presents a better performance in terms of the total operating cost with 5.7% of the difference in the integral of the achieved cost after 10 hours.

4.5 Conclusions

In the presented work, a new approach to integrate economic aspects into industrial MPCs was proposed. The main objective is to minimize the inconsistencies between the information and the waiting time, regarding steady-state detection, presented in the traditional approaches. The new approach considered an extended MPC range controller, where the outputs were controlled through soft-constraints, and the economic cost function error was tracked as a controlled output. The set-point was provided by a static nonlinear optimization problem supported by a discrete-time EKF, responsible for calculating the true value of the operation cost.

The simulation study has considered a Van de Vusse reaction occurring in a CSTR and corroborates the proposed strategy, since the optimal cost of the process (set-point) was robustly achieved. As a comparison, the traditional implementation was performed (considering targets for manipulated variables); the proposed strategy presented better behaviour in tracking the optimal cost without offset. Better results could be reached with

proper tuning. The proposed strategy shows an alternative to include economic aspects into an MPC controller capable of improving the overall profit of the process.

Capítulo 5 – Model update based on transient measurements for Model Predictive Control and Hybrid Real-time Optimization

O presente capítulo é reprodução do manuscrito que foi publicado na revista *Industrial & Engineering Chemistry Research*.

Abstract: The process model has the most relevant role in model predictive control (MPC) design since it is responsible for capturing system dynamics and behavior for control action calculation. Besides that, in real-time optimization (RTO), an accurate model allows the estimation of the optimum values that will lead the plant to optimal operation. Related to linear models, the linearization point sometimes is not capable of tracking the process trajectory in different regions, jeopardizing the entire representation. Regarding these issues, it is proposed in this paper to employ an augmented unscented Kalman filter to update the linear process model used in the MPC and the steady-state nonlinear model used in the hybrid RTO, at each sampling time, to capture the true process behavior and the updated economic cost. The cost function, solved in the RTO layer, is handled in the MPC layer as a process output, a new variable combined by the measurements, that must be driven to the provided optimum value, respecting constraints. The extended MPC approach is capable of handle zone tracking and set-point/target tracking. The Williams-Otto reactor scheme was employed to corroborate the proposed approach since it presents structural and parametric discrepancies between the model and the plant. The presented results showed that the approach was able to track the true value of the optimal cost operation, respecting the soft-constraints (or range) for the process outputs without exceeding manipulating efforts.

5.1 Introduction

Model predictive control (MPC) technology is presented as a standard approach for industrial multivariable systems due to its ability to handle constraints, range control, and plants with complex behavior. Its implementation is based on a solution of an open-loop finite-horizon control problem considering a representative process model (LORENZEN; CANNON; ALLGÖWER, 2019). In each sample instant, the MPC controller estimates a sequence of control actions, leading the process toward its optimal path. The model of the process, as aforementioned, has an important role in the control actions calculation since it is responsible for predicting the behavior of the system, allowing the operation as close as possible to optimal conditions (BOTELHO *et al.*, 2015).

According to Botelho *et al.* (2016), poor model quality is one of the most frequent and impactful sources of degradation in MPC implementation, being responsible for closed-loop system deterioration and suboptimal calculation. It causes nonrobust tracking and difficulties in optimization due to the necessity of rigorous data reconciliation for prediction. As a way to compensate plant-model mismatch and ensure feasibility (BAYER; MÜLLER; ALLGÖWER, 2018), Stochastic MPC and Robust MPC have emerged as advanced control methodologies that take the uncertainty, or external disturbances explicitly (or bounded), into account in the design process (KOEHLER *et al.*, 2020; LORENZEN; MÜLLER; ALLGÖWER, 2017).

Controller performance monitoring is responsible for examining and providing information about the representability of the model and if necessary, execute maintenance to restore the controller's ability to meet its design specifications (HEIRUNG; FOSS; YDSTIE, 2015). Lorenzen *et al.* (2019) divide the existing literature into two categories: (i) system identification and online learning applied in MPC and (ii) MPC algorithm focused on the convergence of the state, constraint satisfaction, and (recursive) feasibility of the online optimization. Both categories employ robust MPC methods, given (a priori) an uncertainty set not updated online.

Regarding real-time optimization (RTO), the quality of the model is also responsible for its success. According to Gao *et al.* (2016), it is desirable to combine the use of models and data to obtain a good RTO scheme, and it could be possible through parameter adaptation (or modifier adaptation), bias update with constraints, extremum seeking control, NCO-tracking, and so forth. Some schemes are capable of handling plant-model mismatch, by applying empirical bias and gradient corrections to the objective and constraint functions, in an iterative optimization procedure but present certain drawbacks and limitations related to model size and structural model discrepancy (MARCHETTI, A.; CHACHUAT; BONVIN, 2009).

All systems are affected by time-varying disturbances that influence their own performance and economic profit. Moreover, changes in the parameters such as variation in feed compositions, deactivation of catalysts, and so forth are also responsible for shifting the optimal operation point (OP) (VALLURU; PATWARDHAN, 2019). Based on a model that presents structural and parametric discrepancies, all control action calculations will not correspond to real process dynamics. The set points provided by the RTO scheme can be

unachievable and can cause oscillations, instability, unreachability according to constraints, and, consequently, unnecessary control efforts, jeopardizing the safety of the industrial plant.

In this paper, we are interested in analyzing the optimal process behavior from an economic viewpoint. The core idea is to overcome issues related to RTO implementation such as long waiting time and plant-model mismatch, the complex dynamic optimization problems presented in dynamic RTO and economic (nonlinear) MPC, and the inconsistency between models used in the controller and used in the optimization layer, employing a linear MPC controller that tracks the optimal cost (treated in our approach as a process output). To do that, measured data will be used to update the model and the economic cost function to compensate disturbances and update parameters that affect the process and economic profit through proper control action calculations. It will be achieved by employing the state estimator unscented Kalman filter (UKF) responsible for adapting parameters and process data to the given model. The advantages of this methodology are related to the capture of a reliable model that will be capable of drive the entire system to its optimal operation robustly and coherently. The main differences between our approach and the one proposed by Valluru and Patwardhan (2019) are related to consider a linear updated controller model and tracking the cost function value, instead of targets for control and manipulated variables.

The paper is structured as follows: Section 5.2, a background is presented, discussing MPC and RTO approaches and the UKF used for parameter estimation and model adaptation. Section 5.3 presents the problem formulation and the model update based on transient measurements. Section 5.4 presents a representative case study, and in Section 5.5, the conclusions are drawn.

5.2 Background

5.2.1 MPC and RTO approaches

According to Darby *et al.* (2011), the layered cascade structure of RTO and MPC has become a standard approach for implementing steady-state optimization due to its ability to move the plant to constraints, keeping the operation as close as possible to optimum. The improvement related to computer processing capability also contributed to this integration.

A linear MPC has an internal model that is used to predict the behavior of the plant over a prediction horizon P . The controller is responsible for calculating the input trajectory, such as to bring the plant output at the end of the prediction horizon, to the required value of the set point (y_{set}) (MACIEJOWSKI, 2002). The problem solved at each sampling instant is represented by

$$\min_{\mathbf{u}, \varepsilon_k} J = \min_{\mathbf{u}, \varepsilon_k} \left[\sum_{j=0}^P \|\hat{\mathbf{y}}(k+j|k) - \mathbf{y}_{set}(k+j|k)\|_{Q_y}^2 + \sum_{j=0}^M \|\mathbf{u}(k+j|k) - \mathbf{u}_{tgt}(k+j|k)\|_{Q_u}^2 + \sum_{j=0}^M \|\Delta \mathbf{u}(k+j|k)\|_W^2 + \|\varepsilon_k\|_{\rho \varepsilon}^2 \right] \quad (5.1)$$

s.t.

$$\begin{aligned}
 \mathbf{u}_{min} &\leq \mathbf{u}(k+j|k) \leq \mathbf{u}_{max} \\
 \Delta \mathbf{u}_{min} &\leq \mathbf{u}(k+j|k) - \mathbf{u}(k+j-1|k) \leq \Delta \mathbf{u}_{max} \\
 \underbrace{\mathbf{y}_{min}^{soft} - \boldsymbol{\varepsilon}_k}_{\mathbf{y}_{min}^{hard}} &\leq \hat{\mathbf{y}}(k+j|k) \leq \underbrace{\mathbf{y}_{max}^{soft} + \boldsymbol{\varepsilon}_k}_{\mathbf{y}_{max}^{hard}}
 \end{aligned} \tag{5.2}$$

In Equation (5.1), the first term corresponds to a minimization of the error between the predicted outputs and the reference values, the second term corresponds to the minimization of the error between the calculated control actions and the respective target values, the third term corresponds to a minimization of the control action amplitude, and the fourth term aims at minimizing the soft-constraint violation. In Equation (5.2), the constraints in the inputs, input amplitude, and outputs are presented, respectively. The tuning parameters are the sampling time (t_s), prediction horizon (P), control horizon (M), and weighting matrices Q_y , Q_u , W and ρ_ε . These parameters are responsible for discretizing the model and predict it until P , using manipulated moves until M . The weighting matrices penalize the errors, and the control moves and ρ_ε penalizes the soft-constraint violation.

The widely accepted control hierarchical implementation (SKOGESTAD, S; POSTLETHWAITE, 2005) is employed in a way that the upper layer provides set points/targets to the layer below. The layer above MPC is the RTO, where the decision variables are provided through an optimization problem based on a process and an economic model along with the process constraints (KRISHNAMOORTHY; FOSS; SKOGESTAD, 2018).

The traditional RTO implementation consists of a steady-state detection, followed by data reconciliation, responsible for adjusting the model to current data, and a static optimization, where the optimum set points are estimated based on an objective function, process constraints, and in the previous updated model. The approach could be briefly represented by

$$\hat{\mathbf{d}}_k, \hat{\boldsymbol{\theta}}_k = \arg \min_{\mathbf{d}, \boldsymbol{\theta}} \|\mathbf{y}_{meas} - f_{ss}(\mathbf{u}_k, \mathbf{d}, \boldsymbol{\theta})\|_2^2 \tag{5.3}$$

$$\mathbf{y}_{k+1}^*, \mathbf{u}_{k+1}^* = \arg \min_{\mathbf{y}, \mathbf{u}} J_{eco}(\mathbf{y}, \mathbf{u}) \tag{5.4}$$

s.t.

$$\begin{aligned}
 \mathbf{y} &= f_{ss}(\mathbf{u}, \hat{\mathbf{d}}_k, \hat{\boldsymbol{\theta}}_k) \\
 g(\mathbf{y}, \mathbf{u}) &\leq 0
 \end{aligned} \tag{5.5}$$

In Equation (5.3), the error between the current (stationary) data and the steady-state model is minimized, $\hat{\mathbf{d}}_k$ and $\hat{\boldsymbol{\theta}}_k$ being the set of time-varying disturbances and parameters, respectively. Equation (5.4) computes the set points/targets through the minimization of

the objective function J_{eco} subject to the updated process constraints and operating constraints (bounds in inputs and outputs), as seen in Equation (5.5).

Figure 5.1 shows a scheme that summarizes the MPC + RTO implementation.

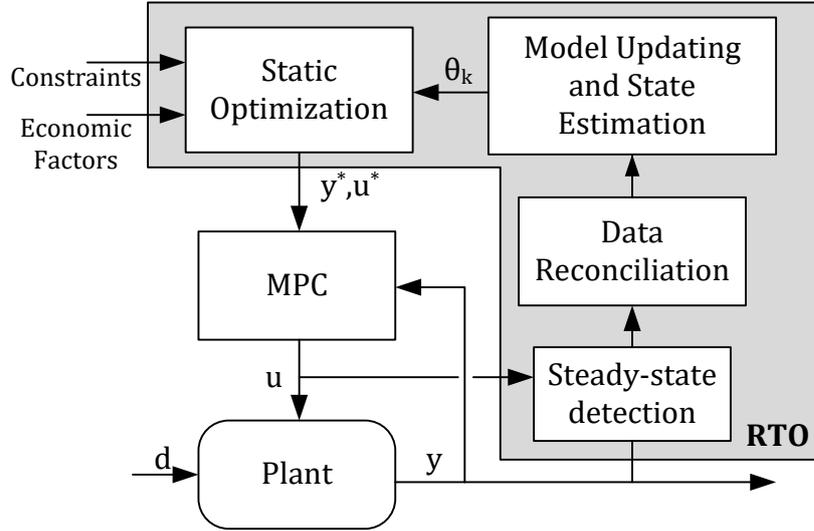


Figure 5.1: Classical MPC+RTO scheme.

5.2.2 Unscented Kalman Filter

The UKF is an extension of the Kalman filter for nonlinear systems where, instead of linearizing it in a specific OP (as presented in the extended Kalman filter approach), it uses a set of carefully chosen sample points to capture the mean and the covariance of the Gaussian random variables that after applying to the true nonlinear system capture the posterior mean and covariance accurately for any nonlinearity (WAN, E A; MERWE, 2000).

The UKF implementation is based on the unscented transformation, considering the process and measurement noise purely additive. The initialization of the UKF is presented in Equations (5.6) and (5.7). The sigma points for $k \in \{1, \dots, \infty\}$ are calculated in Equation (5.8).

$$\hat{\mathbf{x}}_0 = \mathbb{E}[\mathbf{x}_0] \quad (5.6)$$

$$\mathbf{P}_0 = \mathbb{E}[(\mathbf{x}_0 - \hat{\mathbf{x}}_0)(\mathbf{x}_0 - \hat{\mathbf{x}}_0)^T] \quad (5.7)$$

$$\boldsymbol{\chi}_{k-1} = [\hat{\mathbf{x}}_{k-1} \quad \hat{\mathbf{x}}_{k-1} + \gamma\sqrt{\mathbf{P}_{k-1}} \quad \hat{\mathbf{x}}_{k-1} - \gamma\sqrt{\mathbf{P}_{k-1}}] \quad (5.8)$$

The time-update equations are

$$\boldsymbol{\chi}_{k|k-1}^* = \mathbf{F}(\boldsymbol{\chi}_{k-1}, \mathbf{u}_{k-1}) \quad (5.9)$$

$$\hat{\mathbf{x}}_k^- = \sum_{i=0}^{2L} W_i^{(m)} \boldsymbol{\chi}_{i,k|k-1}^* \quad (5.10)$$

$$\mathbf{P}_k^- = \sum_{i=0}^{2L} W_i^{(c)} (\boldsymbol{\chi}_{i,k|k-1}^* - \hat{\mathbf{x}}_k^-)(\boldsymbol{\chi}_{i,k|k-1}^* - \hat{\mathbf{x}}_k^-)^T + \mathbf{R}^v \quad (5.11)$$

$$\boldsymbol{\chi}_{k|k-1} = [\boldsymbol{\chi}_{k|k-1}^* \quad \boldsymbol{\chi}_{k|k-1}^* + \gamma\sqrt{\mathbf{R}^v} \quad \boldsymbol{\chi}_{k|k-1}^* - \gamma\sqrt{\mathbf{R}^v}] \quad (5.12)$$

$$\mathbf{Y}_{k|k-1} = \mathbf{H}(\boldsymbol{\chi}_{k|k-1}) \quad (5.13)$$

$$\hat{\mathbf{y}}_k^- = \sum_{i=0}^{2L} W_i^{(m)} \Upsilon_{i,k|k-1} \quad (5.14)$$

and the measurement-update equations are

$$\mathbf{P}_{\tilde{\mathbf{y}}_k \tilde{\mathbf{y}}_k} = \sum_{i=0}^{2L} W_i^{(c)} (\Upsilon_{i,k|k-1} - \hat{\mathbf{y}}_k^-) (\Upsilon_{i,k|k-1} - \hat{\mathbf{y}}_k^-)^T + \mathbf{R}^n \quad (5.15)$$

$$\mathbf{P}_{\mathbf{x}_k \mathbf{y}_k} = \sum_{i=0}^{2L} W_i^{(c)} (\chi_{i,k|k-1} - \hat{\mathbf{x}}_k^-) (\Upsilon_{i,k|k-1} - \hat{\mathbf{y}}_k^-)^T \quad (5.16)$$

$$\mathbf{K}_k = \mathbf{P}_{\mathbf{x}_k \mathbf{y}_k} \mathbf{P}_{\tilde{\mathbf{y}}_k \tilde{\mathbf{y}}_k}^{-1} \quad (5.17)$$

$$\hat{\mathbf{x}}_k = \hat{\mathbf{x}}_k^- + \mathbf{K}_k (\mathbf{y}_k - \hat{\mathbf{y}}_k^-) \quad (5.18)$$

$$\mathbf{P}_k = \mathbf{P}_k^- - \mathbf{K}_k \mathbf{P}_{\tilde{\mathbf{y}}_k \tilde{\mathbf{y}}_k} \mathbf{K}_k^T \quad (5.19)$$

where $\gamma = \sqrt{L + \lambda}$, L is the dimension of the state, λ is the scaling parameter, \mathbf{R}^v is the process-noise covariance, \mathbf{R}^n is the measurement-noise covariance, $W_i^{(m)}$ and $W_i^{(c)}$ are the mean- and covariance-weights and χ and Υ are the sigma points of the states and measurements respectively.

A detailed implementation could be found in Wan and Van der Merwe (2001).

5.3 Problem Formulation

We consider a process described by a continuous-time nonlinear model

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{d}(t); \theta) \quad (5.20)$$

$$\mathbf{y}(t) = \mathbf{h}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{d}(t); \theta) \quad (5.21)$$

where $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{n_x}$, $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^{n_u}$, $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^{n_y}$, $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^{n_d}$, and $\theta \in \mathbb{R}^{n_p}$ are the states, inputs, outputs, disturbances, and model parameters, respectively. $\mathbf{f}: \mathbb{R}^{n_x} \times \mathbb{R}^{n_u} \times \mathbb{R}^{n_d} \rightarrow \mathbb{R}^{n_x}$ represents the differential equations, used for the estimator (Equation (5.9)) as \mathbf{F} , and the measurement model is $\mathbf{h}: \mathbb{R}^{n_x} \times \mathbb{R}^{n_u} \times \mathbb{R}^{n_d} \rightarrow \mathbb{R}^{n_y}$. The cost function that must be minimized is

$$J_{eco}(t) = \mathbf{g}(\mathbf{y}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{d}(t); \theta) \quad (5.22)$$

where $J: \mathbb{R}^{n_y} \times \mathbb{R}^{n_u} \times \mathbb{R}^{n_d} \rightarrow \mathbb{R}$.

Considering the cost function, Eq. (5.22), as a measured output of the process, the Equation (5.21) is then augmented as

$$\mathbf{y}^\ddagger(t) = \mathbf{h}^\ddagger(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{d}(t); \theta) \quad (5.23)$$

where $\mathbf{y}^\ddagger(t) = [\mathbf{y}(t) \ J_{eco}(t)]^T \in \mathbb{R}^{n_{y^\ddagger}}$ and $\mathbf{h}^\ddagger: \mathbb{R}^{n_x} \times \mathbb{R}^{n_u} \times \mathbb{R}^{n_d} \rightarrow \mathbb{R}^{n_{y^\ddagger}}$.

The linearized dynamic model, in terms of deviations, is then given by

$$\Delta \dot{\mathbf{x}}(t) = A\Delta \mathbf{x}(t) + B_u\Delta \mathbf{u}(t) + B_d\Delta \mathbf{d}(t) \quad (5.24)$$

$$\Delta \mathbf{y}^\ddagger(t) = C\Delta \mathbf{x}(t) + D_u\Delta \mathbf{u}(t) + D_d\Delta \mathbf{d}(t) \quad (5.25)$$

where $\Delta \mathbf{x} = \mathbf{x}(t) - \hat{\mathbf{x}}(t)$, $\Delta \mathbf{u}(t) = \mathbf{u}(t) - \hat{\mathbf{u}}(t)$ and $\Delta \mathbf{d}(t) = \mathbf{d}(t) - \hat{\mathbf{d}}(t)$. Coupling the inputs and the disturbances in $\mathbf{u}^\ddagger(t) = [\mathbf{u}(t) \ \mathbf{d}(t)]^T$, and the matrices as $B = [B_u \ B_d]$ and $D = [D_u \ D_d]$ are obtained, and then the linearizing matrices evaluated around the current estimation points $\hat{\mathbf{x}}$ and $\hat{\mathbf{u}}^\ddagger$:

$$A = \left. \frac{\partial f(\mathbf{x}, \mathbf{u}^\ddagger; \theta)}{\partial \mathbf{x}} \right]_{\mathbf{x}=\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{u}^\ddagger=\hat{\mathbf{u}}^\ddagger} \quad (5.26)$$

$$B = \left. \frac{\partial f(\mathbf{x}, \mathbf{u}^\ddagger; \theta)}{\partial \mathbf{u}^\ddagger} \right]_{\mathbf{x}=\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{u}^\ddagger=\hat{\mathbf{u}}^\ddagger} \quad (5.27)$$

$$C = \left. \frac{\partial h^\ddagger(\mathbf{x}, \mathbf{u}^\ddagger; \theta)}{\partial \mathbf{x}} \right]_{\mathbf{x}=\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{u}^\ddagger=\hat{\mathbf{u}}^\ddagger} \quad (5.28)$$

$$D = \left. \frac{\partial h^\ddagger(\mathbf{x}, \mathbf{u}^\ddagger; \theta)}{\partial \mathbf{u}^\ddagger} \right]_{\mathbf{x}=\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{u}^\ddagger=\hat{\mathbf{u}}^\ddagger} \quad (5.29)$$

where $A \in \mathbb{R}^{n_x \times n_x}$, $B \in \mathbb{R}^{n_x \times n_{u^\ddagger}}$, $C \in \mathbb{R}^{n_{y^\ddagger} \times n_x}$ and $D \in \mathbb{R}^{n_{y^\ddagger} \times n_{u^\ddagger}}$.

The obtained representation, when evaluated in the current value of the states, disturbances, and parameters, provides a linearized system in terms of the deviations for the outputs and cost function, related to inputs and disturbance values. This is possible by assuming full-state and disturbance measurements and the knowledge of the parameters' values.

Considering that the value of all states and disturbances are not always measured and the parameters can change during the process operation, for example, deactivation of catalysts or increase of the heat transfer coefficient, it is necessary to employ a scheme capable of estimating these values and then calculate the linearizing matrices A , B , C , and D . Here, an augmented UKF using a dynamic nonlinear process model and plant measurements $(\mathbf{y}_{meas}, \mathbf{u}_{meas})$ is employed to estimate the states and disturbances/parameters (MARAFIOTI *et al.*, 2009; SIMON, 2006)s. The augmented state vector is defined as

$$\hat{\mathbf{z}}_k = [\hat{\mathbf{x}}_k^T \ \hat{\mathbf{d}}_k^T \ \hat{\boldsymbol{\theta}}_k^T]^T \quad (5.30)$$

where $\hat{\mathbf{x}}_k$ represents the states, $\hat{\mathbf{d}}_k$ represents the disturbance values, and $\hat{\boldsymbol{\theta}}_k$ represents the parameter values to be estimated. The covariance matrices are also extended to adequate the filter for parameter/disturbance estimation.

If the states, disturbances, and parameters were observable, according to the Hautus criterion (REISSIG; HARTUNG; SVARICEK, 2014), they could be estimated and then employed to update the linearized model according to the measurements. This is the core idea of the proposed methodology. Using a model predictive controller, whose linear model is updated at each sampling instant, through the augmented UKF, the calculated control actions will be sensible to the influence of disturbance and parameters that affects the truthful process behavior. Besides that, due to the functionality of MPC implementation, the disturbance values estimated, $\hat{\mathbf{d}}$, are sent do the controller as target

values that must be reached. This procedure ensures the influence of an unmeasured disturbance in the linearized model, compensating its values in the control action calculations.

This approach is stated to cover most industrial applications, allowing the model outputs to be controlled in ranges, or zones and controlling nonsquare systems with a negative degree of freedom, that is, systems that present more outputs than inputs, that are typical in the chemical process industry.

Besides that, this methodology includes the value of the cost function (J_{eco}) as an output of the process. It is employed as an alternative to the standard approach where an upper layer is responsible for sending optimal targets that must be achieved by the plant inputs and outputs. The benefits of the proposed implementation are that it is possible to set upper and lower bounds in the cost function and give more flexibility for the inputs to achieve the real value of this function. However, for both approaches, it is necessary to implement the upper layer that simultaneously solves the nonlinear optimization problem subject to updated process constraints and inequality constraints (operational constraints). Figure 5.2 illustrates the proposed methodology.

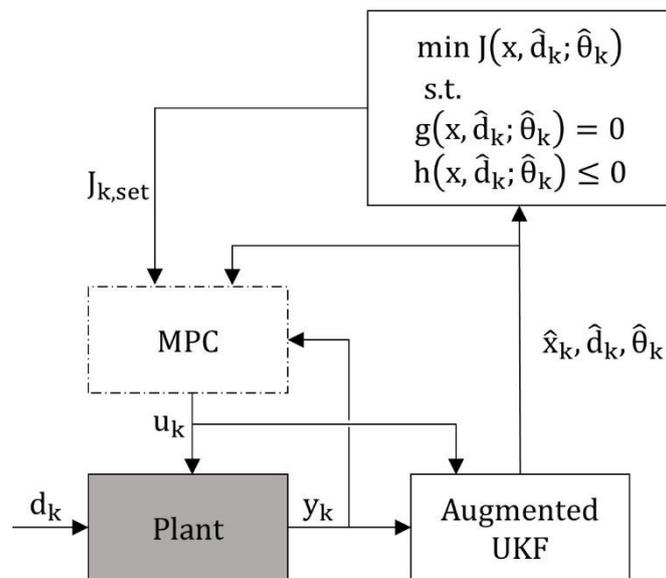


Figure 5.2: Model update based on transient measurements for MPC and RTO.

According to Figure 5.2, the output and input data are used to estimate the unmeasured states, parameters, and disturbances through augmented UKF, which will update the cost function and constraints (nonlinear) and the MPC internal model (linear).

The optimization problem, responsible for calculating the optimal target value $J_{k,set}$, consists of a static optimization, where at every time step k , the augmented UKF provides an estimation of the uncertain disturbances \hat{d}_k and parameters $\hat{\theta}_k$. This hybrid approach where dynamic reconciliation is done based on transient measurements followed by a static optimization was originally proposed by Krishnamoorthy *et al.* (2018), providing a

good convergence performance and lower computational time. A static optimization problem is solved with the updated model, as presented in Equation (5.31).

$$J_{k,set} = \min_u J_{eco}(y, u, \hat{d}_k; \hat{\theta}_k) \quad (5.31)$$

s.t.

$$y = f_{ss}(u, \hat{d}_k; \hat{\theta}_k) \quad (5.32)$$

$$h(y, u, \hat{d}_k; \hat{\theta}_k) \leq 0 \quad (5.33)$$

where J_{eco} is the cost function that has to be optimized, f_{ss} represents the steady-state process constraints, and h is the operational constraints.

The truthful value of the cost function is then sent to the plant as a target value that must be reached by the controller. The values obtained by the augmented UKF are also employed to update the controller's model and calculate the consequent control actions. The MPC cost function is presented in Equation (5.34).

$$\min_{\Delta \tilde{u}, \tilde{\epsilon}} \tilde{J}_U = \min_{\Delta \tilde{u}, \tilde{\epsilon}} \left[\sum_{j=0}^P \|\tilde{J}(k+j|k) - J_{k,set}(k+j|k)\|_{Q_y}^2 + \sum_{j=0}^M \|\tilde{d}(k+j|k) - \hat{d}_k(k+j|k)\|_{Q_u}^2 + \sum_{j=0}^M \|\Delta \tilde{u}(k+j|k)\|_W^2 + \|\tilde{\epsilon}\|_{\rho_\epsilon}^2 \right] \quad (5.34)$$

s.t.

$$\mathbf{u}_{min} \leq \tilde{\mathbf{u}}(k+j|k) \leq \mathbf{u}_{max}$$

$$\Delta \mathbf{u}_{min} \leq \tilde{\mathbf{u}}(k+j|k) - \tilde{\mathbf{u}}(k+j-1|k) \leq \Delta \mathbf{u}_{max}$$

$$\underbrace{\mathbf{y}_{min}^{soft} - \boldsymbol{\epsilon}_k}_{\mathbf{y}_{min}^{hard}} \leq \tilde{\mathbf{y}}(k+j|k) \leq \underbrace{\mathbf{y}_{max}^{soft} + \boldsymbol{\epsilon}_k}_{\mathbf{y}_{max}^{hard}}$$

(5.35)

where the superscript $\{\tilde{\cdot}\}$ means that its calculation is based in the updated model, $\tilde{J}(k+j|k)$ is the linearized economic cost function, $J_{k,set}(k+j|k)$ is the set point provided by the optimization layer, $\tilde{d}(k+j|k)$ is the updated disturbance model, and $\hat{d}_k(k+j|k)$ is the disturbance estimated by UKF, and the other portions in this optimization problem are the same as presented in Equations (5.1) and (5.2).

At each sample instant, the augmented UKF will filter the measured states and estimate the unknown parameters and disturbances if they were observable. The unknown parameters and the unmeasured states will be used to update the model and the cost function used in the RTO calculation and the model used in the MPC design. This procedure will be responsible for estimating control actions based on a representative process model, properly compensating the unmeasured disturbances. As the outputs are tracked in ranges

(or zones), the main controller objective is to drive the system to the optimal value $J_{k,set}$, respecting the constraints and the move suppression.

This approach can handle model plant mismatch of structural and parametric type, the state (parameter/disturbance) estimator being responsible for adapting the model to real data. Regarding convergence, stability, and feasibility properties, the proposed approach lies in the fact that a large horizon is chosen which, practically, stabilizes the closed-loop operation.

5.4 Case Study

As a case study, the Williams-Otto reactor will be considered (WILLIAMS; OTTO, 1960). The real plant is composed of three irreversible reactions in a continuous stirred tank reactor (CSTR), as shown in Figure 5.3.

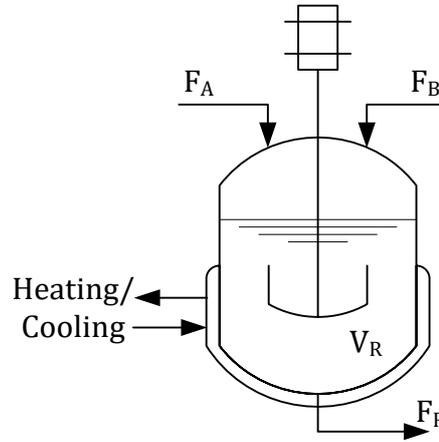
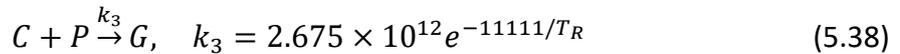
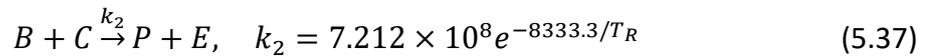
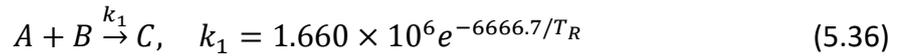


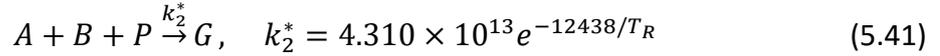
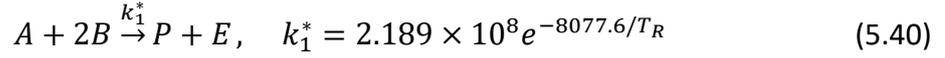
Figure 5.3: Williams-Otto Reactor.



The manipulated variables are the feed flow rate of B (F_B) and the reactor temperature (T_R). The feed flow rate of A (F_A) and the volume (V_R) are constant, and $F_R = F_A + F_B$. This case study has been used in many papers and presents as optimization objective to minimize the function (GAO; WENZEL; ENGELL, 2016; MARCHETTI; CHACHUAT; BONVIN, 2009):

$$J = -(1143.38F_R X_P + 25.92F_R X_E - 76.23F_A - 114.34F_B) \quad (5.39)$$

The aforementioned reaction scheme corresponds to the real plant while the following reactions are used in reactor model:



The material balance equations for the plant and the approximate model are presented in Table 5.1.

Table 5.1: Material balances for plant and approximate model.

Plant Model	Approximate Model
$\frac{dX_A}{dt} = F_A - F_R X_A - k_1 V_R X_A X_B$	$\frac{dX_A}{dt} = F_A - F_R X_A - k_1^* V_R X_A X_B^2 - k_2^* V_R X_A X_B X_P$
$\frac{dX_B}{dt} = F_B - F_R X_B - k_1 V_R X_A X_B - k_2 V_R X_B X_C$	$\frac{dX_B}{dt} = F_B - F_R X_B - 2k_1^* V_R X_A X_B^2 - k_2^* V_R X_A X_B X_P$
$\frac{dX_C}{dt} = 2k_1 V_R X_A X_B - F_R X_C - 2k_2 V_R X_B X_C - k_3 V_R X_C X_P$	$\frac{dX_E}{dt} = 2k_1^* V_R X_A X_B^2 - F_R X_E$
$\frac{dX_E}{dt} = 2k_2 V_R X_B X_C - F_R X_E$	$\frac{dX_G}{dt} = 3k_2^* V_R X_A X_B X_P - F_R X_G$
$\frac{dX_G}{dt} = 1.5k_3 V_R X_C X_P - F_R X_G$	$\frac{dX_P}{dt} = k_1^* V_R X_A X_B^2 - F_R X_P - k_2^* V_R X_A X_B X_P$
$\frac{dX_P}{dt} = k_2 V_R X_B X_C - F_R X_P - 0.5k_3 V_R X_C X_P$	

The flow rate of the reactant A is constant at $F_A = 1.8275$ kg/s, but its variation is considered as unmeasured load disturbance in the process. The bounds for the manipulated variables are $0.0 \leq F_B [\text{kg/s}] \leq 6.0$ and $70.0 \leq T_R [^\circ\text{C}] \leq 100$. The model outputs X_A, X_B, X_E, X_G and X_P were measured and kept in ranges. As the model presents a structural discrepancy to a real plant, the estimation of F_A will be responsible to adjust the current data (provided by the real plant) with the model.

A previous analysis in the plant and the model was made to evaluate the relevance of the model approximation and the quality of the estimation by the augmented UKF. The simulation was made offline, sending a sequence of steps in the input variables (F_B and T_R) and in the unmeasured load disturbance (F_A). The augmented UKF was employed to estimate F_A and the (measured) states according to current data using a moving window of 10 points (discrete-time samples). The measurements in $[k - 10, k - 9, \dots, k - 1]$ will be used to estimate the states and disturbances/parameters at instant k . In Figure 5.4 the plant data and the estimated (approximate) model are presented. In Figure 5.5 the disturbance (real and estimated) and the manipulated pattern used for this simulation are presented. The tuning matrices for augmented UKF, that is, the initial estimation for state and measurement noise covariances, were based on the magnitude of the data, according to Apio *et al.* (2019) The reader is encouraged to read and understand the procedure.

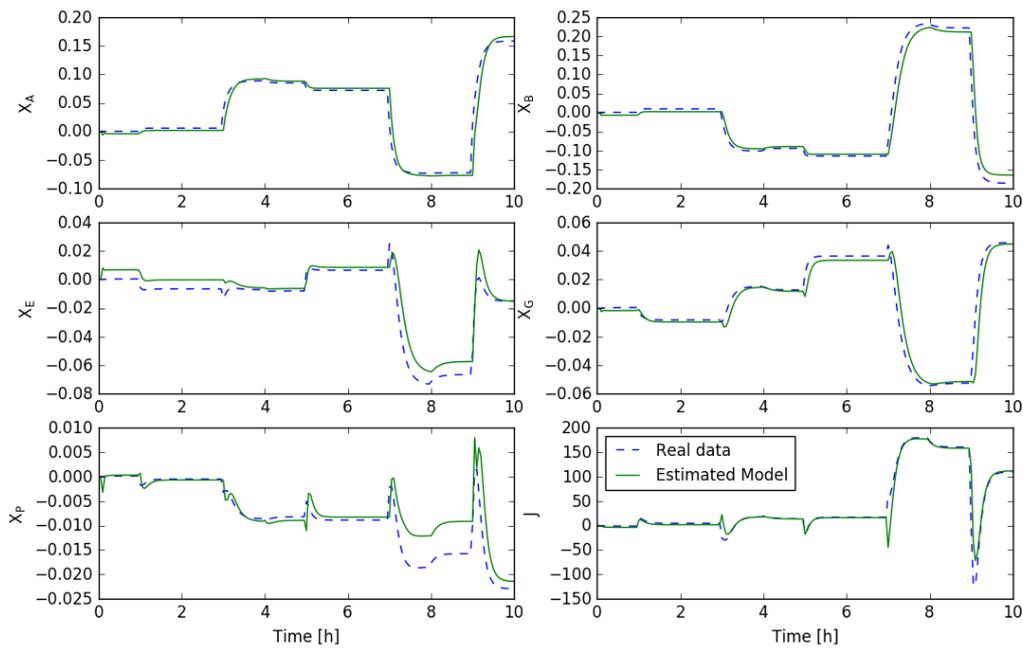


Figure 5.4: Real data and estimated model by augmented UKF for Williams-Otto reactor.

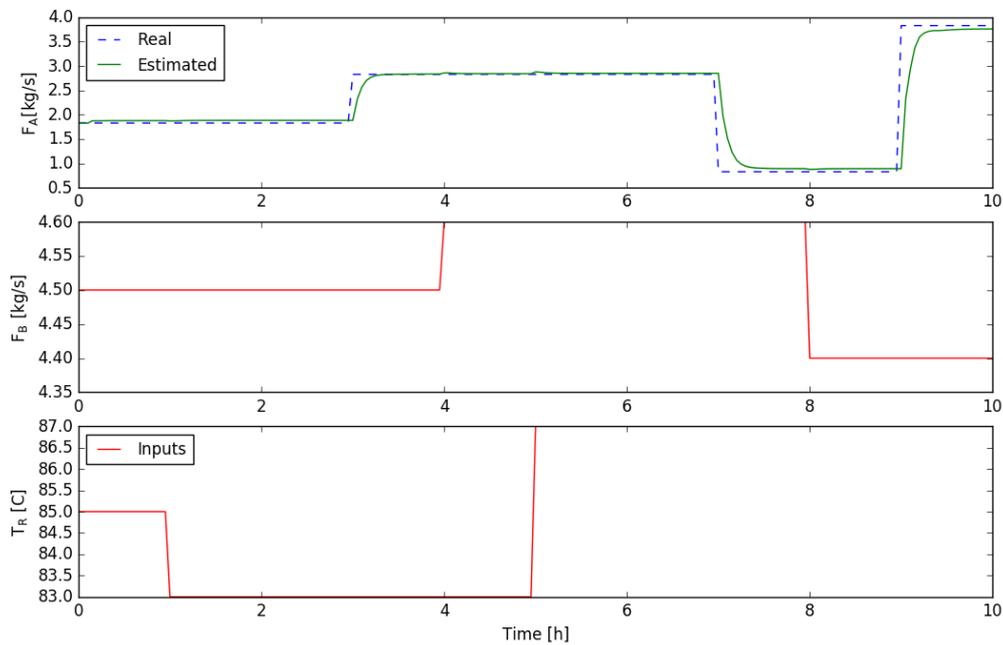


Figure 5.5: Unmeasured disturbance (and estimated values) and manipulated inputs for Williams-Otto reactor.

According to Figure 5.4, it is observed that the estimated model, even structurally discrepant, is capable of capturing the dynamics of the real plant in a representative way, presenting a bias in the stationary values. This estimation has an important role in the

proposed methodology since it was responsible for estimating the value of the unmeasured disturbance F_A , which is not available in the process, and using this value for updating the model to current data.

After this analysis, the linearized (approximate) model is employed in the linear MPC. The measurements and the estimations will be responsible for updating the controller's model (linear) and the optimization's model (nonlinear) at each sample instant. The question that arises is why only one linearized (approximate) model is not used at its respective OP for operation. The answer is presented in Figure 5.6 where for the same inputs and disturbance pattern, as presented in Figure 5.5, two linearized models at their OPs and the updated linearized model are presented.

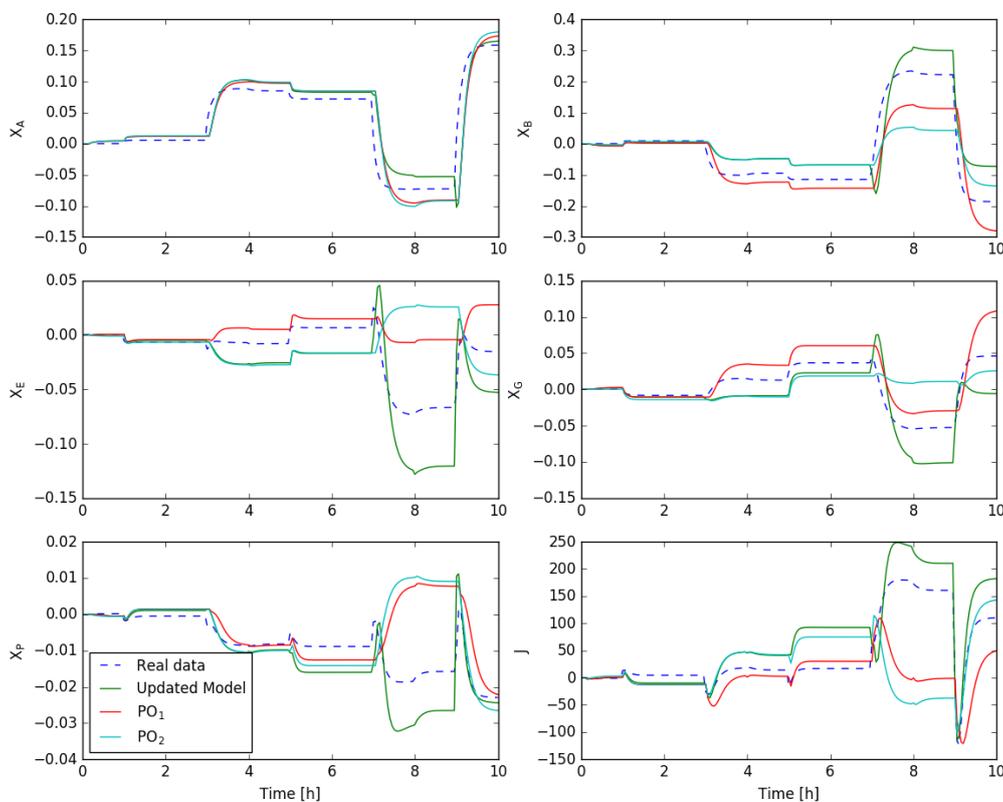


Figure 5.6: Real data, Updated Linear Model, and PO_1 and PO_2 models for Williams-Otto reactor.

It is observed in Figure 5.6 that the updated linearization presents a good approximation for the plant, respecting the process dynamics. However, the PO_1 and PO_2 models present inversions in some regions in the signal gain, representing a wrong behavior in the outputs. If PO_1 or PO_2 models were used in the controller design, the resulting controller will be not able to track the ranges or the set points stably.

The controller was then designed to keep X_A , X_B , X_E , X_G and X_P in a specific range. The estimated value of the unmeasured disturbance was sent to the plant as a target value that must be reached by the respective control action since this variable is an input in the linearized model. The upper layer was responsible for sending an optimal set-point value for the cost function, which is handled as a model output.

The simulation was performed using an Intel(R)Core i7-4770S CPU@3.10 GHz (12.0 GB RAM). The controller tuning parameters were sampling time $t_s = 0.05 h$, prediction horizon $P = 80$, and control horizon $M = 20$. These parameters were tuned based on Trierweiler and Farina (2003). The weighting matrices were $Q_y = [100]$, $Q_u = \text{diag}[10]$, $W = \text{diag}[1,1,1]$, and $\rho_\epsilon = \text{diag}[50,50,50,50,50]$. These values were chosen to keep all monitored outputs in their respective range and follow the respective target for the cost function, penalizing the excessive control moves. In this paper, the influence of each MPC tuning parameter was not evaluated, and better results could be obtained with appropriate tuning. The average time for each iteration was 1.8568 s. In Figure 5.7 the outputs of the process and the cost function tracking are presented. In Figure 5.8 the manipulated variables and the (estimated) disturbance value sent as a target for the controller are shown.

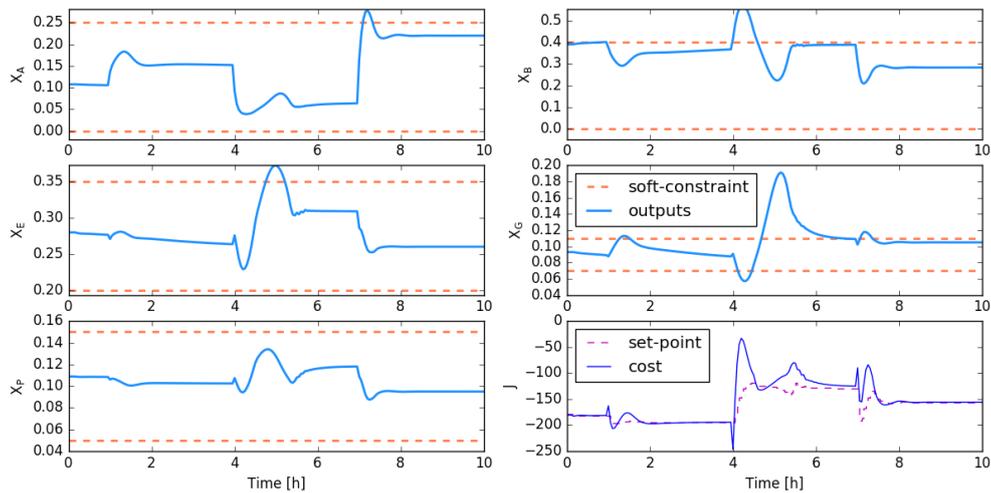


Figure 5.7: Controlled outputs (by range) and cost function tracking for the William-Otto reactor applying the proposed approach.

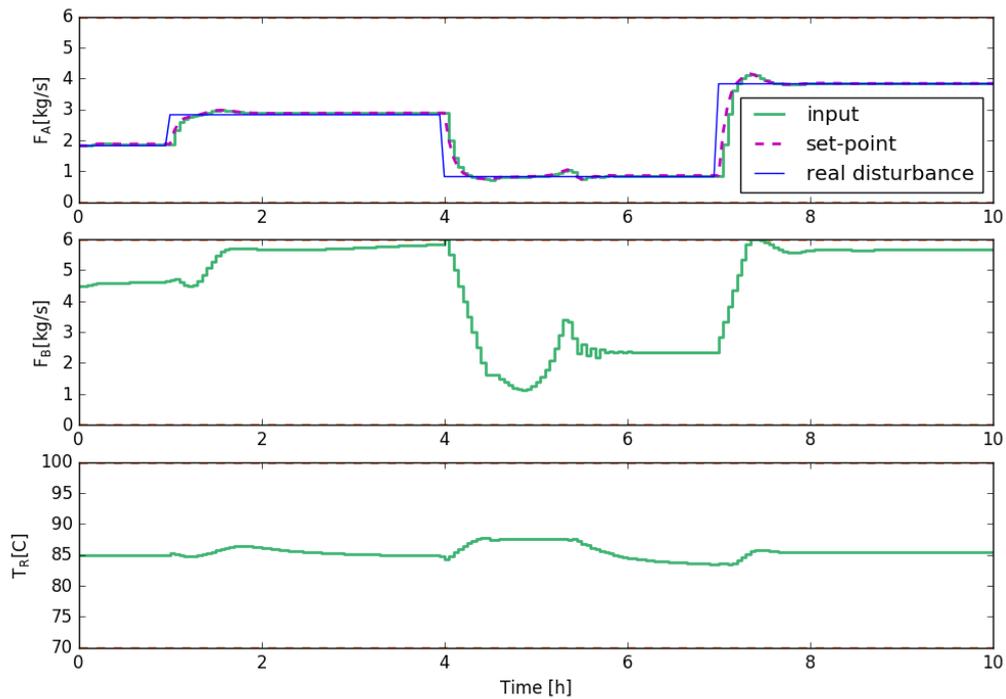


Figure 5.8: Manipulated inputs and disturbance compensation for the William-Otto reactor applying the proposed approach.

It is observed that the outputs tracked by the range were kept in the specifications during the operation, violating the soft-constraints only at the moment in which the disturbance occurs. The control actions calculations were capable of leading the plant robustly to its optimized target, which represents the optimal value, respecting the constraints.

As a comparison, for the same disturbance pattern, a controller maintaining its model at PO_1 was simulated (see Figure 5.6). The simulated outputs are presented in Figure 5.9. The manipulated control inputs are presented in Figure 5.10.

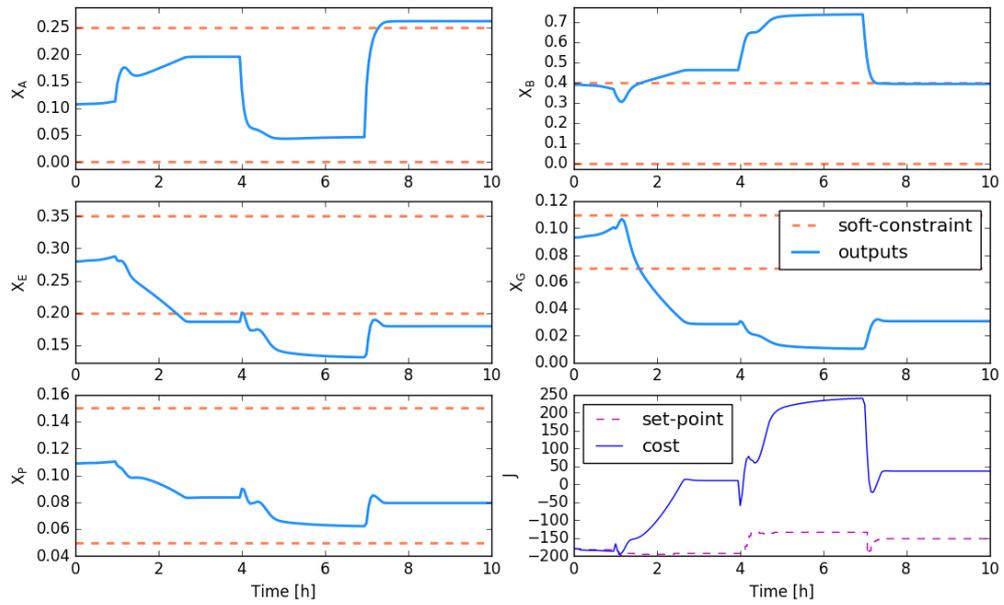


Figure 5.9: Controlled outputs (by range) and cost function tracking for the Williams-Otto reactor considering a fixed controller model.

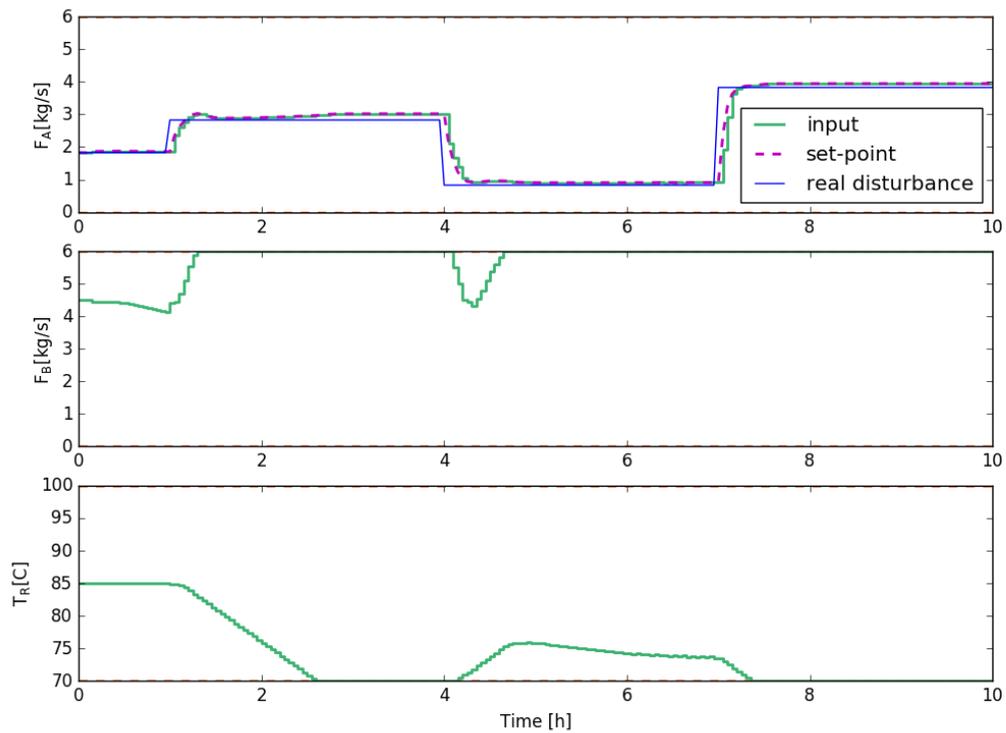


Figure 5.10: Manipulated inputs and disturbance for the Williams-Otto reactor considering a fixed controller model.

According to Figure 5.9 and Figure 5.10, using only one (fixed) model for the operation, the controller was not capable of tracking the optimal cost function value and keeping the outputs at their specifications. Besides that, the calculated control actions were kept saturated in their upper and lower limits, jeopardizing the entire operation. If no limits were settled for the inputs, an unstable operation would occur. This was expected since the controller model was not capable of representing the outputs properly.

5.5 Conclusions

In the present work, an approach that updates the model used in the controller design and the RTO was proposed. The main objective was to adjust the model with the measured data, aided by the augmented UKF, and then, minimize the inconsistencies between the information and the available model. The approach also considered an extended MPC range controller, keeping the outputs in range and the economic cost function error controlled as an output. The set point was provided by a static nonlinear optimization based on the updated model.

The simulations were employed in a CSTR reactor with a Williams–Otto scheme, presenting structural and parametric discrepancies between the model and the plant. The augmented UKF was capable of estimating the parameters for the approximate model coherently. The model update was important because it instantly captures the behavior of the system at each sample used for calculating robust control actions. Better results could be reached if a nonlinear controller is employed. The proposed strategy presented an alternative to include economic aspects into an MPC controller, updating the model and improving the overall profit of the process.

Capítulo 6 – Robust Economic Range Model Predictive Control

O presente capítulo foi omitido no texto parcial da tese, uma vez que está sendo preparado para submissão em revista científica.

Capítulo 7 – Considerações Finais

Este capítulo apresenta as principais conclusões do trabalho e sugere futuras pesquisas em Otimização em tempo real orientada à KPIs.

7.1 Conclusões

Estratégias de otimização em tempo real orientado a KPIs foi o objetivo principal desse trabalho que propôs técnicas capazes de incluir o indicador-chave como parte do controlador preditivo, auxiliado por estimadores de estados para estimação de parâmetros e distúrbios presentes no processo. Análises da influência do modelo e de fatores de robustez também foram abordados.

Otimização em tempo real, por ser uma estratégia bastante difundida na indústria de processos e, devido aos ganhos econômicos oriundos de sua implementação e a necessidade de economia de recursos, foi abordada no Capítulo 2 apresentando suas alternativas. De modo a elencar essas estratégias, foi apresentada uma revisão das principais técnicas, juntamente com suas definições e principais características. Essa etapa serviu de fundamentação teórica evidenciando as necessidades e peculiaridades sendo assim fundamental para o desenvolvimento de uma estratégia capaz de englobar controladores industriais.

Como forma de superar a influência de distúrbios e a discrepância dos tempos de amostragem entre as camadas de otimização e controle, no Capítulo 3 foi proposto um controlador MPC estendido, o qual aborda uma função custo representando o KPI, dentro da função custo do controlador MPC (em uma única camada), visando controlar o valor do custo ótimo ao invés de *targets*.

Pelo fato de controladores preditivos baseados em modelo (MPCs) serem abordados no meio acadêmico através de sua estratégia convencional (mesmo número de variáveis controladas e manipuladas e controle através de *setpoint*) diferente de alguns padrões empregados industrialmente (sistemas não-quadrados e faixas de operação), foi proposta uma metodologia no Capítulo 4, capaz de incluir aspectos econômicos em MPCs industriais, através da ponderação do erro de uma função custo. Auxiliada por um estimador de

estados, a fim de atualizar os parâmetros do modelo do KPI operacional a ser otimizado, a estratégia proposta foi testada para um estudo de caso simulado apresentando resultados superiores às técnicas convencionais em relação à otimização econômica.

Além disso, tanto os controladores preditivos baseados em modelo como as estratégias abordadas para otimização em tempo real, necessitam de um modelo representativo, que seja capaz de capturar o comportamento das saídas de forma adequada com o comportamento operacional da planta. Com base nesse modelo, ações de controle factíveis e robustas são calculadas pelo controlador MPC. Com isso, é proposto no Capítulo 5, após a análise de observabilidade dos estados e parâmetros através do Critério de Hautus, utilizar as medidas das variáveis de saída através de um filtro de Kalman aumentado (*Augmented Uncented Kalman Filter*) para determinação dos parâmetros desconhecidos capazes de adaptar e atualizar um modelo com discrepância estrutural e paramétrica. Essa atualização serviu como base para o controlador preditivo linear e para a camada superior de otimização (não-linear), calculando dessa maneira valores ótimos para os *set-points* e ações de controle robustas em uma estratégia de controle e otimização em uma camada.

Por fim, no Capítulo 6, a influência da magnitude dos distúrbios foi analisada ao calcular um conjunto robusto positivo invariante para o erro entre o modelo “real”, com distúrbio, e o modelo nominal, sem distúrbio. Essa influência foi incluída na restrição para os estados e entradas do problema de otimização do controlador MPC econômico, cuja função objetivo trata-se de uma métrica operacional (KPI). Os resultados apresentaram uma estratégia robusta, capaz de rejeitar os distúrbios e manter as variáveis controladas nas faixas de operação.

A Figura 7.1 sumariza parte da estratégia apresentada nesse trabalho.

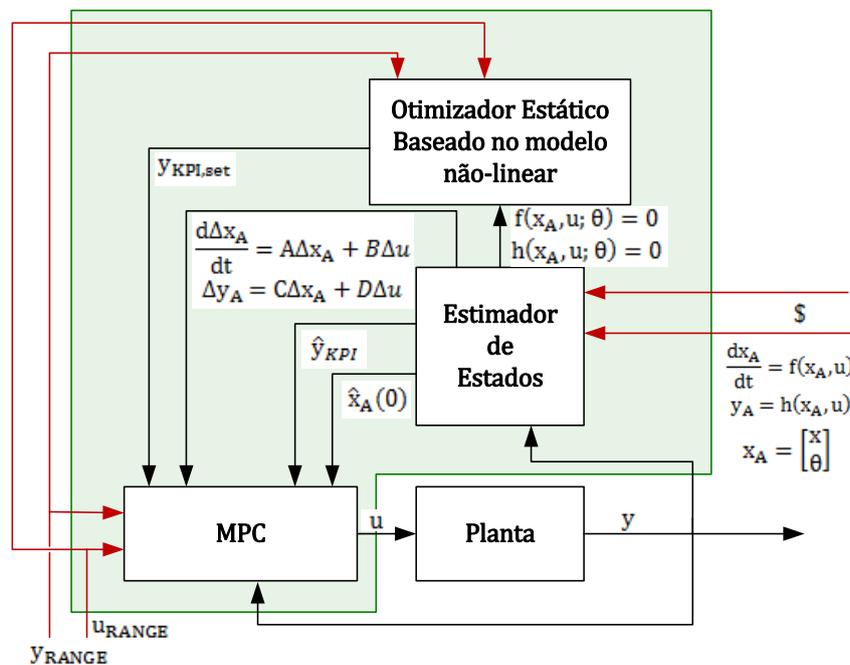


Figura 7.1: Estratégia KPI oriented approach for Real-time Optimization

De acordo com a Figura 7.1, são fornecidos para a metodologia os valores das faixas, ou range, das variáveis de entrada e saída do modelo, um modelo dinâmico a ser atualizado e uma função econômica que relaciona o KPI (função custo). O estimador de estados atualiza o modelo não-linear a ser empregado no otimizador estático e o modelo linearizado a ser empregado no controlador MPC. Essa estratégia foi capaz de relacionar em um controlador preditivo estendido parcelas referentes ao controle (em faixas) das variáveis de saída e à otimização econômica da unidade.

As peças-chave da metodologia são:

1. Modelo dinâmico não-linear: modelo que possui parâmetros e distúrbios atualizados em tempo real através de técnica de estimadores de estado;
2. Função Objetivo: função que reflete o sucesso econômico do processo. Essa função é utilizada na camada de otimização estática para determinar as condições ótimas, o *Key-Performance Indicator*. No controlador MPC essa função é tratada como uma saída controlada por *set-point*.
3. Controlador MPC não quadrado: Controlador linear operando por faixas tendo apenas 1 *setpoint*, o KPI, representando a condição ótima de operação. O controlador utiliza como modelo uma versão linearizada do modelo dinâmico dado pelo estimador.
4. Restrições Robustas: ao considerar o erro entre o modelo real e nominal, e a magnitude dos distúrbios que alteram o processo, um conjunto robusto positivo invariante é estimado de forma a modificar as restrições do problema de otimização rejeitando a influência do distúrbio desconhecido.

7.2 Sugestões para trabalhos futuros

Por tratar-se de um assunto recorrente e de extrema importância para o sucesso econômico e operacional de processos, o desenvolvimento de novas estratégias e análises é esperado. Dentre as sugestões destacam-se:

- **Aplicação Industrial das estratégias propostas** – Como forma de corroborar as metodologias desenvolvidas é necessário fazer um estudo comparativo das técnicas realizadas. Analisar a inclusão dos aspectos econômicos em MPCs industriais e a influência da atualização do modelo na otimização em tempo real.
- **Influência de Estimadores de Estado** – Pelo fato da estratégia proposta ser dependente de um estimador para atualizar o modelo através da estimação de parâmetros e distúrbios, a análise frente aos diferentes estimadores é necessária.
- **Estratégia que atualiza o modelo e KPI com restrições robustas** – O estimador de estados é empregado para atualizar o modelo do controlador linear e o modelo dinâmico a ser otimizado o valor do KPI. Sugere-se modificar as restrições de forma robusta, ao considerar um conjunto robusto positivo invariante para o erro entre o modelo nominal e real.
- **Estratégia de EMPC Robusto com atualização de modelo** – A abordagem apresentada no Capítulo 6, pode ser estendida ao considerar os estimadores de

estado para atualizar o modelo do MPC econômico (linear) em cada instante de amostragem.

Referências

ADETOLA, V.; GUAY, M. Integration of real-time optimization and model predictive control. **Journal of Process Control**, [s. l.], v. 20, n. 2, p. 125–133, 2010. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jprocont.2009.09.001>

ÅKESSON, J *et al.* Modeling and optimization with Optimica and JModelica.org— Languages and tools for solving large-scale dynamic optimization problems. **Computers & Chemical Engineering**, [s. l.], v. 34, n. 11, p. 1737–1749, 2010. Disponível em: <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2009.11.011>

ALSTAD, Vidar; SKOGESTAD, Sigurd. Null Space Method for Selecting Optimal Measurement Combinations as Controlled Variables. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, [s. l.], v. 46, n. 3, p. 846–853, 2007. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/ie060285+>

ALVAREZ, Luz A.; ODLOAK, Darci. Reduction of the QP-MPC cascade structure to a single layer MPC. **Journal of Process Control**, [s. l.], v. 24, n. 10, p. 1627–1638, 2014. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jprocont.2014.08.008>

ANGELI, David; MÜLLER, Matthias A. Economic Model Predictive Control: Some Design Tools and Analysis Techniques. *In*: RAKOVIĆ, Saša V; LEVINE, William S (org.). **Handbook of Model Predictive Control**. Cham: Springer International Publishing, 2019. p. 145–167. Disponível em: https://doi.org/10.1007/978-3-319-77489-3_7

APIO, Andressa *et al.* PDG Pressure Estimation in Offshore Oil Well: Extended Kalman Filter vs. Artificial Neural Networks. **IFAC-PapersOnLine**, [s. l.], v. 52, n. 1, p. 508–513, 2019. Disponível em: <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.ifacol.2019.06.113>

BAYER, Florian A.; MÜLLER, Matthias A.; ALLGÖWER, Frank. On optimal system operation in robust economic MPC. **Automatica**, [s. l.], v. 88, p. 98–106, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.automatica.2017.11.007>

BOTELHO, Viviane *et al.* Methodology for Detecting Model – Plant Mismatches Affecting

Model Predictive Control Performance. [s. l.], 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.5b01967>

BOTELHO, Viviane; TRIERWEILER, Jorge Otávio; FARENZENA, Marcelo. Diagnosis of Poor Performance in Model Predictive Controllers: Unmeasured Disturbance versus Model–Plant Mismatch. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, [s. l.], v. 55, n. 44, p. 11566–11582, 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.6b00907>

CAIRANO, S Di; KOLMANOVSKY, I V. Real-time optimization and model predictive control for aerospace and automotive applications. *In: , 2018. 2018 Annual American Control Conference (ACC)*. [S. l.: s. n.], 2018. p. 2392–2409. Disponível em: <https://doi.org/10.23919/ACC.2018.8431585>

CÂMARA, M Maurício; QUELHAS, D André; PINTO, C José. **Performance Evaluation of Real Industrial RTO Systems**. [S. l.: s. n.], 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.3390/pr4040044>

D’JORGE, Agustina; FERRAMOSCA, Antonio; GONZÁLEZ, Alejandro H. A robust gradient-based MPC for integrating real time optimizer (RTO) with control. **Journal of Process Control**, [s. l.], v. 54, p. 65–80, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jprocont.2017.02.015>

DARBY, Mark L *et al.* RTO : An overview and assessment of current practice. **Journal of Process Control**, [s. l.], v. 21, n. 6, p. 874–884, 2011. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jprocont.2011.03.009>

DE GOUVÊA, Míriam Tvrzská; ODLOAK, Darci. One-layer real time optimization of LPG production in the FCC unit: procedure, advantages and disadvantages. **Computers & Chemical Engineering**, [s. l.], v. 22, n. 1997, p. S191–S198, 1998. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/S0098-1354\(98\)00054-4](https://doi.org/10.1016/S0098-1354(98)00054-4)

DE SOUZA, Glauce; ODLOAK, Darci; ZANIN, Antônio C. Real time optimization (RTO) with model predictive control (MPC). **Computers and Chemical Engineering**, [s. l.], v. 34, n. 12, p. 1999–2006, 2010. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2010.07.001>

ELLIS, Matthew; DURAND, Helen; CHRISTOFIDES, Panagiotis D. A tutorial review of economic model predictive control methods. **Journal of Process Control**, [s. l.], v. 24, n. 8, p. 1156–1178, 2014. Disponível em: <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jprocont.2014.03.010>

ENGELL, S; KLATT, K -. Nonlinear Control of a Non-Minimum-Phase CSTR. *In: , 1993. 1993 American Control Conference*. [S. l.: s. n.], 1993. p. 2941–2945. Disponível em: <https://doi.org/10.23919/ACC.1993.4793439>

FERRAMOSCA, A; LIMON, D; CAMACHO, E F. Economic MPC for a Changing Economic Criterion for Linear Systems. **IEEE Transactions on Automatic Control**, [s. l.], v. 59, n. 10, p. 2657–2667, 2014. Disponível em: <https://doi.org/10.1109/TAC.2014.2326013>

FERREIRA, Tafarel de Avila *et al.* Use of Transient Measurements for Static Real-Time Optimization. **IFAC-PapersOnLine**, [s. l.], v. 50, n. 1, p. 5737–5742, 2017. Disponível em: <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.ifacol.2017.08.1130>

FRANÇOIS, G; SRINIVASAN, B; BONVIN, D. Use of measurements for enforcing the necessary conditions of optimality in the presence of constraints and uncertainty. **Journal of Process Control**, [s. l.], v. 15, n. 6, p. 701–712, 2005. Disponível em: <https://doi.org/http://doi.org/10.1016/j.jprocont.2004.11.006>

GAO, Weihua; WENZEL, Simon; ENGELL, Sebastian. A reliable modifier-adaptation strategy for real-time optimization. **Computers & Chemical Engineering**, [s. l.], v. 91, p. 318–328, 2016. Disponível em: <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2016.03.019>

GRACIANO, José Eduardo A *et al.* Integrating self-optimizing control and real-time optimization using zone control MPC. **Journal of Process Control**, [s. l.], v. 34, p. 35–48, 2015. Disponível em: <https://doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/j.jprocont.2015.07.003>

HEIRUNG, Tor Aksel N; FOSS, Bjarne; YDSTIE, B Erik. MPC-based dual control with online experiment design. **Journal of Process Control**, [s. l.], v. 32, p. 64–76, 2015. Disponível em: <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jprocont.2015.04.012>

HINOJOSA, Aldo Ignacio *et al.* One-layer gradient-based MPC + RTO of a propylene/propane splitter. **Computers and Chemical Engineering**, [s. l.], v. 106, p. 160–170, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2017.06.006>

JAMALUDIN, Mohammad Zamry; SWARTZ, Christopher L E. Approximation of closed-loop prediction for dynamic real-time optimization calculations. **Computers & Chemical Engineering**, [s. l.], v. 103, p. 23–38, 2017. Disponível em: <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2017.02.037>

JÄSCHKE, Johannes; CAO, Yi; KARIWALA, Vinay. **Self-optimizing control – A survey**. [S. l.: s. n.], 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.arcontrol.2017.03.001>

JÄSCHKE, Johannes; SKOGESTAD, Sigurd. NCO tracking and self-optimizing control in the context of real-time optimization. **Journal of Process Control**, [s. l.], v. 21, n. 10, p. 1407–1416, 2011a. Disponível em: <https://doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/j.jprocont.2011.07.001>

JÄSCHKE, Johannes; SKOGESTAD, Sigurd. NCO tracking and self-optimizing control in the context of real-time optimization. [s. l.], v. 21, p. 1407–1416, 2011b. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jprocont.2011.07.001>

KOEHLER, J *et al.* A computationally efficient robust model predictive control framework for uncertain nonlinear systems. **IEEE Transactions on Automatic Control**, [s. l.], p. 1, 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1109/TAC.2020.2982585>

KRISHNAMOORTHY, Dinesh; FOSS, Bjarne; SKOGESTAD, Sigurd. Steady-state real-time optimization using transient measurements R. **Computers and Chemical Engineering**, [s. l.], v. 115, p. 34–45, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2018.03.021>

- KRISHNAMOORTHY, Dinesh; JAHANSHAH, Esmail; SKOGESTAD, Sigurd. Feedback Real-Time Optimization Strategy Using a Novel Steady-state Gradient Estimate and Transient Measurements. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, [s. l.], v. 58, n. 1, p. 207–216, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.8b03137>
- KRSTIĆ, Miroslav; WANG, Hsin-Hsiung. Stability of extremum seeking feedback for general nonlinear dynamic systems. **Automatica**, [s. l.], v. 36, n. 4, p. 595–601, 2000. Disponível em: [https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0005-1098\(99\)00183-1](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0005-1098(99)00183-1)
- LI, Hao; SWARTZ, Christopher L E. Approximation techniques for dynamic real-time optimization (DRTO) of distributed MPC systems. **Computers & Chemical Engineering**, [s. l.], v. 118, p. 195–209, 2018. Disponível em: <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2018.08.002>
- LI, Xiangli *et al.* Recursive least squares parameter estimation algorithm for dual-rate sampled-data nonlinear systems. **Nonlinear Dynamics**, [s. l.], v. 76, n. 2, p. 1327–1334, 2014. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s11071-013-1212-1>
- LJUNG, L. Asymptotic behavior of the extended Kalman filter as a parameter estimator for linear systems. **IEEE Transactions on Automatic Control**, [s. l.], v. 24, n. 1, p. 36–50, 1979. Disponível em: <https://doi.org/10.1109/TAC.1979.1101943>
- LORENZEN, Matthias; CANNON, Mark; ALLGÖWER, Frank. Robust MPC with recursive model update. **Automatica**, [s. l.], v. 103, p. 461–471, 2019. Disponível em: <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.automatica.2019.02.023>
- LORENZEN, Matthias; MÜLLER, Matthias A.; ALLGÖWER, Frank. Stochastic model predictive control without terminal constraints. **International Journal of Robust and Nonlinear Control**, [s. l.], n. July, p. 1–15, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/rnc.3912>
- MACIEJOWSKI, J. M. **Predictive Control with Constraints**. Harlow: Prentice Hall, 2002.
- MARAFIOTI, Giancarlo *et al.* Unscented Kalman Filter state and parameter estimation in a photobioreactor for microalgae production* *The authors wish to acknowledge support from the French-Norwegian research cooperation project AURORA. **IFAC Proceedings Volumes**, [s. l.], v. 42, n. 11, p. 804–809, 2009. Disponível em: <https://doi.org/https://doi.org/10.3182/20090712-4-TR-2008.00131>
- MARCHETTI, A; CHACHUAT, B; BONVIN, D. Modifier-Adaptation Methodology for Real-Time Optimization. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, [s. l.], v. 48, n. 13, p. 6022–6033, 2009. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/ie801352x>
- MARCHETTI, G Alejandro *et al.* **Modifier Adaptation for Real-Time Optimization—Methods and Applications**. [S. l.: s. n.], 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.3390/pr4040055>
- MATIAS, José; JÄSCHKE, Johannes. Using a neural network for estimating plant gradients in real-time optimization with modifier adaptation. **IFAC-PapersOnLine**, [s. l.], v. 52, n. 1,

p. 808–813, 2019. Disponível em:

<https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.ifacol.2019.06.161>

MAYNE, David Q. Model predictive control: Recent developments and future promise.

Automatica, [s. l.], v. 50, n. 12, p. 2967–2986, 2014. Disponível em:

<https://doi.org/10.1016/J.AUTOMATICA.2014.10.128>. Acesso em: 24 jan. 2020.

MULLER, Matthias A.; ALLGOWER, Frank. Economic and Distributed Model Predictive Control : Recent Developments in Optimization-Based Control. **SICE Journal of Control, Measurement, and System Integration**, [s. l.], v. 10, n. 2, p. 39–52, 2017. Disponível em:

<https://doi.org/10.9746/jcmsi.10.39>

NAGRATH, Deepak; PRASAD, Vinay; BEQUETTE, Wayne B. Model predictive control of open-loop unstable cascade systems. *In: , 2000. Proceedings of the American Control Conference*. [S. l.: s. n.], 2000. p. 3747–3752.

NIKANDROV, Alexei; SWARTZ, Christopher L.E. Sensitivity analysis of LP-MPC cascade control systems. **Journal of Process Control**, [s. l.], v. 19, n. 1, p. 16–24, 2009. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jprocont.2008.02.005>

PETROBRAS. Relatório de Sustentabilidade. [s. l.], 2017.

QIN, S J; BADGWELL, T A. A survey of industrial model predictive control technology.

Control Engineering Practice, [s. l.], v. 11, n. 7, p. 733–764, 2003a. Disponível em:

[https://doi.org/10.1016/S0967-0661\(02\)00186-7](https://doi.org/10.1016/S0967-0661(02)00186-7)

QIN, S Joe; BADGWELL, Thomas A. A survey of industrial model predictive control technology. **Control Engineering Practice**, [s. l.], v. 11, n. 7, p. 733–764, 2003b. Disponível em: [https://doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/S0967-0661\(02\)00186-7](https://doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/S0967-0661(02)00186-7)

QIN, S Joe; BADGWELL, Thomas A. A survey of industrial model predictive control technology. **Control Engineering Practice**, [s. l.], v. 11, n. 7, p. 733–764, 2003c.

RAWLINGS, J B; ANGELI, D; BATES, C N. Fundamentals of economic model predictive control. *In: , 2012. 2012 IEEE 51st IEEE Conference on Decision and Control (CDC)*. [S. l.: s. n.], 2012. p. 3851–3861. Disponível em: <https://doi.org/10.1109/CDC.2012.6425822>

REISSIG, G; HARTUNG, C; SVARICEK, F. Strong Structural Controllability and Observability of Linear Time-Varying Systems. **IEEE Transactions on Automatic Control**, [s. l.], v. 59, n. 11, p. 3087–3092, 2014. Disponível em: <https://doi.org/10.1109/TAC.2014.2320297>

RODRIGUES, Viviane *et al.* Control Engineering Practice Model assessment of MPCs with control ranges : An industrial application in a delayed coking unit. **Control Engineering Practice**, [s. l.], v. 84, n. December 2017, p. 261–273, 2019. Disponível em:

<https://doi.org/10.1016/j.conengprac.2018.11.003>

SANTOS, José Eduardo W; TRIERWEILER, Jorge Otávio; FARENZENA, Marcelo. Model Predictive Control Tuning Strategy for Non-Square Systems and Range Controlled Variables Based on Multi-Scenarios Approach. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, [s. l.], v. 56, n. 40, p. 11496–11506, 2017. Disponível em:

<https://doi.org/10.1021/acs.iecr.7b01531>

SANTOS, José Eduardo W.; TRIERWEILER, Jorge Otávio; FARENZENA, Marcelo. Robust Tuning for Classical MPC through the Multi-scenarios Approach. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, [s. l.], v. 58, n. 8, p. 3146–3158, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.8b05485>

SCHULTZ, Eduardo S; TRIERWEILER, Jorge O; FARENZENA, Marcelo. The Importance of Nominal Operating Point Selection in Self-Optimizing Control. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, [s. l.], 2016a. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.5b02044>

SCHULTZ, Eduardo S; TRIERWEILER, Jorge O; FARENZENA, Marcelo. The Importance of Nominal Operating Point Selection in Self-Optimizing Control. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, [s. l.], v. 55, n. 27, p. 7381–7393, 2016b. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.5b02044>

SIMON, Dan. **Optimal State Estimation: Kalman, H Infinity, and Nonlinear Approaches**. New York, NY, USA: Wiley-Interscience, 2006.

SKOGESTAD, S; POSTLETHWAITE, I. **Multivariable Feedback Control: analysis and design**. 2. ed. Chichester: John Wiley & Sons Ltd, 2005.

SKOGESTAD, Sigurd. Plantwide control : the search for the self-optimizing control structure. [s. l.], v. 10, 2000a.

SKOGESTAD, Sigurd. Plantwide control: the search for the self-optimizing control structure. **Journal of Process Control**, [s. l.], v. 10, n. 5, p. 487–507, 2000b. Disponível em: [https://doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/S0959-1524\(00\)00023-8](https://doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/S0959-1524(00)00023-8)

SRINIVASAN, B; BIEGLER, L T; BONVIN, D. Tracking the necessary conditions of optimality with changing set of active constraints using a barrier-penalty function. **Computers and Chemical Engineering**, [s. l.], v. 32, n. 3, p. 572–579, 2008. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2007.04.004>

SRINIVASAN, B; BONVIN, D. Use of measurements for enforcing the necessary conditions of optimality in the presence of constraints and uncertainty. [s. l.], v. 15, p. 701–712, 2005. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jprocont.2004.11.006>

STRAUS, Julian; KRISHNAMOORTHY, Dinesh; SKOGESTAD, Sigurd. On combining self-optimizing control and extremum-seeking control – Applied to an ammonia reactor case study. **Journal of Process Control**, [s. l.], v. 78, p. 78–87, 2019. Disponível em: <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jprocont.2019.01.012>

TOSUKHOWONG, Thidarat *et al.* An introduction to a dynamic plant-wide optimization strategy for an integrated plant. **Computers & Chemical Engineering**, [s. l.], v. 29, n. 1, p. 199–208, 2004. Disponível em: <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2004.07.028>

TRAN, Tri; LINGA, K-V.; MACIEJOWSKI, Jan M. Economic Model Predictive Control - A Review. **Proceedings of the 31st International Symposium on Automation and Robotics**

in **Construction and Mining (ISARC)**, [s. l.], n. Isarc, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.22260/isarc2014/0006>

TRIERWEILER, J O. **A Systematic Approach to Control Structure Design**. 179 f. 1997. - Universität Dortmund, [s. l.], 1997.

TRIERWEILER, J O; FARINA, L A. RPN tuning strategy for model predictive control. **Journal of Process Control**, [s. l.], v. 13, p. 591–598, 2003. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/S0959-1524\(02\)00093-8](https://doi.org/10.1016/S0959-1524(02)00093-8)

TRIERWEILER, Jorge Otávio. Real-Time Optimization of Industrial Processes. In: BAILLIEUL, John; SAMAD, Tariq (org.). **Encyclopedia of Systems and Control**. London: Springer London, 2013. p. 1–11. Disponível em: https://doi.org/10.1007/978-1-4471-5102-9_243-1

VALLURU, Jayaram; PATWARDHAN, Sachin C. An Integrated Frequent RTO and Adaptive Nonlinear MPC Scheme Based on Simultaneous Bayesian State and Parameter Estimation. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, [s. l.], v. 58, n. 18, p. 7561–7578, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.8b05327>

WAN, E A; MERWE, R Van Der. The unscented Kalman filter for nonlinear estimation. In: , 2000. **Proceedings of the IEEE 2000 Adaptive Systems for Signal Processing, Communications, and Control Symposium (Cat. No.00EX373)**. [S. l.: s. n.], 2000. p. 153–158. Disponível em: <https://doi.org/10.1109/ASSPCC.2000.882463>

WAN, Eric A; VAN DER MERWE, Rudolph. **The Unscented Kalman Filter**. [S. l.: s. n.], 2001. Disponível em: <https://doi.org/doi:10.1002/0471221546.ch7>

WENZEL, Michael J. *et al.* Large Scale Optimization Problems for Central Energy Facilities with Distributed Energy Storage. **International High Performance Buildings Conference**, [s. l.], 2018. Disponível em: <https://docs.lib.purdue.edu/ihpbc/305>. Acesso em: 17 jan. 2020.

WILLIAMS, T J; OTTO, R E. A generalized chemical processing model for the investigation of computer control. **Transactions of the American Institute of Electrical Engineers, Part I: Communication and Electronics**, [s. l.], v. 79, n. 5, p. 458–473, 1960. Disponível em: <https://doi.org/10.1109/TCE.1960.6367296>

WÜRTH, Lynn; HANNEMANN, Ralf; MARQUARDT, Wolfgang. Neighboring-extremal updates for nonlinear model-predictive control and dynamic real-time optimization. **Journal of Process Control**, [s. l.], v. 19, n. 8, p. 1277–1288, 2009. Disponível em: <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jprocont.2009.02.001>

YE, Lingjian *et al.* Approximating Necessary Conditions of Optimality as Controlled Variables. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, [s. l.], v. 52, n. 2, p. 798–808, 2013. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/ie300654d>

YING, Chao-ming; JOSEPH, Babu. Performance and Stability Analysis of LP-MPC and QP-MPC Cascade Control Systems. **AIChE Journal**, [s. l.], v. 45, n. 7, 1999.

ZANIN, A.C.; TVRZSKA DE GOUVEA, M.; ODLOAK, D. Integrating real-time optimization into the model predictive controller of the FCC system. **Control Engineering Practice**, [s. l.], v. 10, p. 819–831, 2002. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/S0967->

0661(02)00033-3