



## PARAMETRIZAÇÃO AUTOMATIZADA DAS VARIÁVEIS DE CONTROLE EM PROBLEMAS DE OTIMIZAÇÃO DINÂMICA

**Sebastian Julio de Souza, Argimiro Resende Secchi**

Grupo de Integração, Modelagem, Simulação, Controle e Otimização de Processos (GIMSCOP)  
Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS)  
R. Eng. Luis Englert, s/n. Campus Central. CEP: 90040-040 - Porto Alegre - RS - BRASIL,  
E-MAIL: {seba, arge}@enq.ufrgs.br

**Palavras Chaves:** Otimização Dinâmica, Malha adaptável, Aproximação Sequencial.

**Resumo:** Neste trabalho é apresentado um comparativo entre as estratégias de discretização das variáveis de controle, que focam na parametrização por uma malha fixa uniforme e não uniforme e na discretização por malha adaptável. Os softwares gPROMS e DyOs foram utilizados para fazer esse estudo. Os resultados mostram a importância da adaptação da malha de discretização na qualidade da solução do problema de otimização dinâmica em detrimento ao esforço computacional, quando comparado a malhas grosseiras, e um ganho computacional quando comparado a malhas fixas muito refinadas.

### 1 INTRODUÇÃO

A utilização da simulação dinâmica nas indústrias de processo tem crescido significativamente, e isso se deve a grande competitividade do mercado que leva as indústrias a operarem com faixas estreitas de especificações e assim a trabalharem no limite dos seus processos. O desenvolvimento de ferramentas de modelagem para simulação dinâmica, como ASPEN, gPROMS, DyOS e EMSO, proporcionou esta inserção da simulação dinâmica na indústria. A otimização dinâmica é a extensão natural destas ferramentas, porque ela automatiza algumas das decisões necessárias para as tarefas da engenharia.

As aplicações da simulação dinâmica podem ser classificadas em tarefas off-line e on-line. Nas tarefas off-line incluem:

- Projetos para evitar transientes indesejados para processos químicos durante as partidas ou paradas, manipulação das perturbações e de resultados de distúrbios diversos e da transição para diferentes pontos de operação;

- Projetos de alocação de unidades de operação como reatores, cromatógrafos e separação por adsorção; Sistematizar estratégias para lidar com interações de processos e projetos de equipamentos e para a síntese e melhoria de controladores;

- Projetar e operar dinâmicas de processo em batelada, junto com interações resultantes da programação destes processos;

- Estudos de segurança de processos e a avaliação de esquemas de controle sob operações anormais.

Nas tarefas on-line incluem-se:

- Solucionar problemas de otimização dinâmica, por intermédio de modelo de processo dinâmico não-linear, em controladores preditivos de modelo não-linear (NMPC) e outras estratégias de DRTO (otimização dinâmica em tempo real);

- Identificar estados e entradas não mensuráveis do processo, dadas as entradas e saídas medidas; Executar tarefas de estimação relacionadas à detecção de erros grosseiros, reconciliação de dados e estimação de parâmetros de modelo.

Os processos químicos são geralmente descritos por modelos compostos de equações algébrico-diferenciais (DAEs), onde as equações



diferenciais descrevem o comportamento dinâmico do sistema, como balanços de massa e energia, e as equações algébricas asseguram as condições físicas e termodinâmicas. As DAEs do problema de otimização podem ser resolvidas usando cálculo variacional ou através de estratégias que aplicam programação não-linear (NLP).

As técnicas indiretas ou variacionais são baseadas na solução das condições necessárias de primeira ordem para otimalidade obtida pelo princípio do máximo de Pontryagin onde um problema de duplo valor de contorno (TPBVP) é solucionado.

Métodos que aplicam NLP são geralmente separados em dois grupos: os de estratégia seqüencial e os de estratégia simultânea. No método seqüencial ou *single-shooting*, somente as variáveis de controle são discretizadas. Dada as condições iniciais e um conjunto de parâmetros, o modelo do processo é integrado em cada iteração, produzindo valores para a função objetivo e restrições (nos pontos fixados), que são utilizados na programação não-linear para determinar os valores ótimos das variáveis de controle parametrizadas. As formas usuais de representar as variáveis de controle são: constante por partes; linear por partes (contínua ou não); polinomial; e splines. Os gradientes da função objetivo com respeito aos coeficientes de controle e aos parâmetros são calculados a partir das equações de sensibilidade do sistema DAE ou também pela integração das equações adjuntas. Este é um método de caminho viável, onde em cada iteração o sistema DAE é resolvido. Contudo, este procedimento é robusto somente quando o sistema for estável. Caso contrário pode ser difícil determinar uma solução possível para um dado conjunto de parâmetros de controle.

O *multiple-shooting* serve como transição entre a aproximação seqüencial e a simultânea, esta última é baseada na discretização completa das variáveis de controle e de estado. No *multiple-shooting* o domínio do tempo é dividido em pequenos elementos de tempo e o modelo DAE é integrado separadamente em cada elemento. As variáveis de controle são tratadas como na aproximação seqüencial. Além disso, para obter a informação do gradiente, as equações de sensibilidade são obtidas para as variáveis de controle e para as condições iniciais dos estados em cada elemento. Finalmente, restrições de igualdade são adicionadas ao NLP para realizar a junção dos elementos e assegurar que os estados são contínuos no decorrer dos elementos. Com esta aproximação, restrições de desigualdade para o controle e estado podem ser impostas diretamente aos pontos discretos. (Biegler, Cervante e Wächter, 2002)

Geralmente, problemas de grande dimensão e com não-linearidade acentuada, como também com restrições de caminho e de ponto final, demandam grande esforço computacional para serem resolvidos. Nos últimos anos tem-se buscado desenvolver algoritmos que explorem a estrutura do problema para a resolução dos mesmos, e muitos destes trabalhos estão focados na parametrização fixa das variáveis de controle.

O perfil da variável de controle pode apresentar um comportamento de não-uniformidade durante o horizonte de otimização, logo a qualidade da solução do problema de otimização é dependente da escolha correta da resolução da malha de parametrização, e o esforço computacional para a resolução do problema cresce demasiadamente com o aumento do número de variáveis de decisão. Em uma parametrização “grosseira” numa malha fixa, ou em uma resolução pouco precisa numa malha variável, pode-se obter uma baixa precisão na solução. Em contrapartida, uma parametrização muito refinada leva a um grande esforço computacional e a um perfil de controle oscilatório, comprometendo a robustez. Assim, se a parametrização não refletir corretamente a estrutura da variável de controle, a solução do problema será comprometida. Entretanto, essa estrutura não é conhecida antes do problema ser resolvido.

Estes problemas podem ser resolvidos utilizando-se algum método que adapte a malha de discretização, aumentando a precisão da solução associado à diminuição do esforço computacional, e ao mesmo tempo aumentando a robustez do algoritmo. (Marquardt et. al., 2005)

Neste trabalho é apresentado um comparativo entre o gPROMS, que possui uma malha de parametrização fixa uniforme e não uniforme para os métodos *single-shooting* e *multiple-shooting*, com o DyOs que utiliza uma malha de discretização adaptável aplicado ao método *single-shooting*. O reator de Van der Vusse foi utilizado para realizar um estudo comparativo dos resultados obtidos. Neste exemplo, a conversão e a seletividade são maximizadas, sujeitas às restrições do processo e a distúrbios na alimentação. Os resultados mostram a importância da adaptação da malha de discretização na qualidade da solução do problema de otimização dinâmica em detrimento ao esforço computacional, quando comparado a malhas grosseiras, e um ganho computacional quando comparado a malhas fixas muito refinadas.

## 2 PROBLEMA DE OTIMIZAÇÃO

Um problema de otimização dinâmica pode ser formulado da seguinte forma:



22,23 E 24 DE OUTUBRO DE 2007

$$\min_{u,p,t_f} \Phi(x(t_f), t_f) \quad (1)$$

Sujeito a

$$M(x, t) \dot{x} = f(x, u, p, t), t \in [t_0, t_f], \quad (2)$$

$$0 = x(t_0) - x_0, \quad (3)$$

$$x^L \leq x(t) \leq x^U, t \in [t_0, t_f], \quad (4)$$

$$u^L \leq u(t) \leq u^U, t \in [t_0, t_f], \quad (5)$$

$$p^L \leq p \leq p^U, \quad (6)$$

$$0 \geq e(x(t_f)) \quad (7)$$

Nesta formulação,  $x(t) \in \mathfrak{R}^{n_x}$  denota o vetor das variáveis de estado que podem ser diferenciadas como também algébrica,  $x_0$  são as condições iniciais. As variáveis de controle dependente do tempo,  $u(t) \in \mathfrak{R}^{n_u}$ , e os parâmetros independentes do tempo,  $p \in \mathfrak{R}^{n_p}$ , são as variáveis de decisão do problema de otimização. O tempo final  $t_f$  pode ser utilizado também como um parâmetro de decisão. O modelo algébrico-diferencial (DAE) é dado pelo sistema de equação (2) na forma linear implícita, considerando somente sistemas DAE de índice diferencial menor do que dois.

A função objetivo  $\Phi$  é formulada como um critério de custo. Muitas formulações apresentam um termo de custo integral, estes podem ser facilmente convertidos na formulação acima através da introdução de uma variável de estado adicional.

Além disso, restrições de caminho podem ser formuladas para as variáveis de estado (4), de controle (5) e para os parâmetros (6), através dos intervalos limitados superiormente e inferiormente. Finalmente, restrições de ponto final (7) nas variáveis de estado podem ser empregadas. (Marquardt et. al., 2005)

### 3 PARAMETRIZAÇÃO DO VETOR DE CONTROLE

Na aproximação seqüencial somente as variáveis de controle  $u(t)$  são discretizadas explicitamente. Os parâmetros de discretização são as variáveis de decisão para a otimização. As variáveis de estado  $x(t)$  são obtidas pela integração numérica do sistema DAE (2) para uma dada entrada, explicando o termo *single-shooting* dado a esta aproximação. Como dito anteriormente, o perfil de controle para a discretização é aproximado por funções que podem ser: constante por partes; linear

por partes (contínua ou não); polinomial; e B-splines (uma classe de splines, de Boor, 1978).

Para manter uma flexibilidade na discretização, pode-se escolher um conjunto separado  $\Delta_i = \{t_0, \dots, t_i\}$  de pontos de discretização para cada variável de controle  $u_i$ . Então expandindo o perfil de controle discretizado por uma combinação linear de B-splines,

$$u_i(t) = \sum_{j=1}^{n_i} \hat{u}_{i,j} \varphi_j^{(m)}(t) \quad (8)$$

com  $n_i$  denotando o número de funções parametrizadas para a variável de controle  $u_i$ , dependendo da escolha da ordem ( $m$ ) da função  $\varphi^{(m)}$  têm-se diferentes aproximações. Para  $m = 1$  temos uma parametrização constante por partes, com  $m = 2$  uma linear por partes.

### 4 FORMULAÇÃO DO NLP

Após a discretização do perfil de controle, o problema de otimização (1)-(7) é reformulado como um problema de programação não-linear (NLP):

$$\min_{\hat{u}, p, t_f} \Phi = \Phi(x, t_f) \quad (9)$$

Sujeito a

$$x = \chi(\hat{u}, p, t), t \in [t_0, t_f], \quad (10)$$

$$x^L \leq x(t_j) \leq x^U, \forall t_j \in \Delta_x, \quad (11)$$

$$\hat{u}^L \leq \hat{u} \leq \hat{u}^U, \quad (12)$$

$$p^L \leq p \leq p^U, \quad (13)$$

$$0 \geq e(x(t_f)) \quad (14)$$

onde  $\chi(\hat{u}, p, t)$  é a solução do sistema de DAEs. O

vetor  $\hat{u} = [\hat{u}_1^T, \dots, \hat{u}_{n_u}^T]^T$  contém a discretização de todos os parâmetros das variáveis de controle. As restrições de caminho (11) são calculadas pontualmente em todo o tempo  $t_j$  contido no conjunto  $\Delta_x = \bigcup_{i=1}^{n_u} \Delta_i$ .

O método sequencial de programação quadrática (SQP) é geralmente utilizado para resolver o problema NLP (9)-(14) encontrado nos métodos diretos de otimização dinâmica (Schlegel e Marquardt, 2006).



## 5 ADAPTAÇÃO DA MALHA DE CONTROLE

Em geral, deseja-se obter uma solução do NLP (9)-(14) que seja próximo da solução do problema de controle ótimo (1)-(7). Sendo assim, a discretização com uma malha muito fina, para cada variável de controle, parece ser uma ótima escolha para se obter uma solução precisa do problema. Contudo, em termos práticos esta não é uma opção viável, principalmente devido à precisão numérica e à eficiência computacional.

Quanto à precisão numérica, se um perfil de controle é representado por uma discretização muito fina o algoritmo de solução do NLP tem de ser capaz de suportar um grande número de variáveis de decisão. Contudo, um perfil de controle pode exibir regiões onde não há diferenças significativas entre os valores de sua vizinhança, por exemplo, as partes onde perfil de controle é sujeito a uma restrição ativa de caminho do controle. Nestas regiões uma discretização muito fina não deve ser utilizada para refletir a solução real. Também há regiões onde as restrições não estão ativas, chamada de arcos singulares, nelas uma parametrização fina pode ser problemática. Como a sensibilidade do problema em relação ao controle é tipicamente pequena nos arcos singulares, isto leva a dificuldades numéricas, como mau condicionamento na otimização do problema discreto, devido ao solver NLP não ser capaz de distinguir a influência destes parâmetros sob alguma tolerância.

Quanto à eficiência computacional, o esforço para determinar a solução do problema dinâmico pelo método seqüencial é altamente correlacionado com o esforço dispendido para a integração das equações de sensibilidade. Existem algoritmos eficientes que exploram as propriedades espaciais do sistema de sensibilidade (exemplo, Feehery, Tolsma, & Barton, 1997), mas grande parte do esforço computacional ainda é gasto na análise da sensibilidade. Uma vez que a influência de uma

variável de decisão  $\hat{u}_{i,j}$  sob os estados  $x$  é limitada à região de tempo  $t \geq t_j$ , para a determinação de

$s_i = \partial x / \partial \hat{u}_{i,j}$  bastaria resolver cada equação de sensibilidade do sistema no intervalo de tempo  $[t_j, t_f]$ . Não obstante, o esforço computacional cresce com o número de variáveis de decisão. Esta é a principal restrição da aproximação seqüencial.

Schlegel, Marquardt, Ehrig, e Nowak (2004) apresentaram um método de integração das equações de sensibilidade que pode ser vantajoso para a solução de problemas de otimização dinâmica com perfil de controle altamente refinado, mas também há

um esforço computacional proporcional ao número de parâmetros de controle.

Por essas razões, é desejável ter-se o menor número de variáveis de decisão possível. Em contra partida a solução obtida resolvendo o NLP (9)-(14) deve ser próximo à solução do problema contínuo (1)-(7). Isto aumenta a necessidade de uma ótima seleção da malha de discretização que equilibre o gasto computacional devido ao número de funções parametrizadas com a qualidade de aproximação desejada.

Um dos métodos para a solução destes problemas é a variação dos pontos na malha de discretização. Onde, para o método direto simultâneo, a distância ou a posição espacial dos pontos de colocação são determinados através da otimização destes como variáveis de decisão adicionais. Aqui o número de intervalos de parametrização é fixado de antemão, mas o tamanho destes intervalos passa a ser variáveis de decisão adicionais. A desvantagem deste método é que o problema torna-se mais complexo e difícil de ser resolvido. Exemplo, um problema de controle ótimo linear resulta num problema de programação não-linear após a discretização. Além disso, a precisão global pode ser limitada, uma vez que o número de intervalos é fixado antecipadamente. Este método é observado no gPROMS, onde o número de intervalos é fixado pelo usuário e o tamanho destes podem ser fixos ou adaptável. Tanartkit e Biegler (1996) desenvolveram um algoritmo no qual o problema de otimização é solucionado em um loop interno, enquanto a posição e o tamanho dos intervalos estão localizados em um loop externo.

Uma segunda estratégia está focada na inserção de malhas. Por exemplo, Waldraff, King e Gilles (1997) aplicaram um procedimento de geração de malha que se baseia na informação do perfil da solução ótima obtida através do método seqüencial. Huffman et al. (2000) propuseram uma estratégia de refinamento da malha baseado na análise do erro local das equações diferenciais, que são discretizadas em uma estrutura de solução simultânea. Ambas as variáveis de controle e de estado são aproximadas por uma discretização trapezoidal. Iniciando com uma malha grosseira, uma nova malha de pontos é inserida se o erro local, para um controle fixo, é maior do que uma tolerância.

Em Marquardt et al. (2005) é realizada uma aplicação similar ao de Huffman. Para gerar o problema de malha adaptável para a variável de controle, otimizar e, subseqüentemente, proceder ao refinamento da malha, é realizado um procedimento repetitivo, iniciando a partir do perfil de controle discretizado inicialmente de forma grosseira  $u_i^0(\Delta_i^0)$ . Em cada etapa  $\ell$  de refinamento da malha a



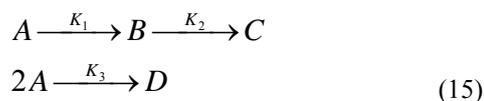
solução prévia  $u_i^{\ell-1}$  é inspecionada por uma análise posterior. Baseado nesta análise uma nova discretização para a próxima otimização é gerada. Para a análise das funções é empregada a técnica de wavelets (Marquardt et al., 2001). O NLP (9)-(14) é resolvido na malha de discretização melhorada  $\Delta_i^\ell$  onde a interpolação da solução antiga  $u_i^{\ell-1}$  é usada como estimativa inicial. O NLP é resolvido repetidamente em diferentes malhas com um aumento no número de variáveis parametrizada. Este método está implementado no DyOS, onde o usuário informa uma malha inicial e o mesmo adapta o tamanho e a quantidade de intervalos que a malha deve ter para se obter uma solução para o problema (9)-(14) próximo ao valor do problema (1)-(7).

## 6 ESTUDO DE CASO

O CSTR foi escolhido por apresentar uma alta não linearidade dinâmica, especialmente quando ocorrem reações consecutivas e paralelas. Podendo também apresentar bifurcações de múltiplos estados estacionários ou ciclos limites. (Engell e Klatt, 1997)

### 6.1 Descrição e Modelagem do reator

Uma reação de Van de Vusse (1964) onde o ciclopentenodiol (B) é produzido a partir do ciclopentadieno (A) e os subprodutos ciclopentanodiol (C) e dicitlopentadieno (D) são produzidos devido a uma reação consecutiva e a uma reação secundária indesejada respectivamente, que são realizadas no CSTR. O esquema da reação é a seguinte:



Este problema foi proposto como um benchmark para algoritmos de controle de processos não-lineares por Engell e Klatt (1997), onde o modelo é descrito detalhadamente. Neste trabalho acrescentou-se um controlador PI para o controle do volume do reator ( $V_R$ ) e um PID para o controle da temperatura do reator ( $T$ ), conforme o esquema da Figura 1.

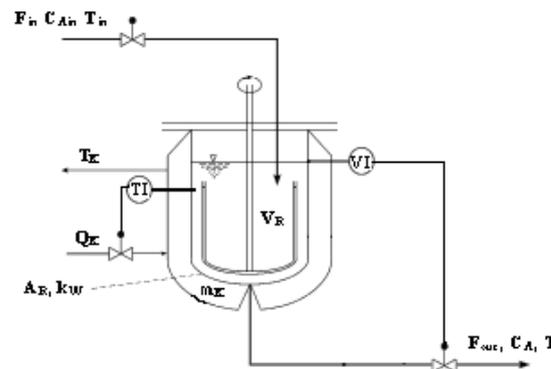


Figura 1: Representação esquemática do CSTR.

É considerado um modelo contínuo de mistura perfeita, onde a massa específica ( $\rho$ ) e o coeficiente de troca térmica ( $C_p$ ) da mistura são constantes e a entalpia da reação não varia com temperatura. O sistema pode ser descrito pelas seguintes equações diferenciais não-lineares que é composta pelos balanços de massa e energia no reator e pelo balanço de energia na camisa de resfriamento:

$$\frac{dV_R}{dt} = F_{in} - F_{out} \quad (16)$$

$$\frac{d(V_R C_A)}{dt} = F_{in} C_{Ain} - F_{out} C_A - V_R [k_1(T) C_A + k_3(T) C_A^2] \quad (17)$$

$$\frac{d(V_R C_B)}{dt} = -F_{out} C_B + V_R [k_1(T) C_A - k_2(T) C_B] \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \frac{d(V_R T)}{dt} = & F_{in} T_{in} - F_{out} T + \frac{k_W A_R}{\rho C_p} (T_K - T) \\ & - \frac{V_R}{\rho C_p} [k_1(T) C_A \Delta H_1 + k_2(T) C_B \Delta H_2 + k_3(T) C_A^2 \Delta H_3] \end{aligned} \quad (19)$$

$$\frac{dT_K}{dt} = \frac{1}{m_K C_{pK}} [Q_K + k_W A_R (T - T_K)] \quad (20)$$

Onde

$F_{in}$  - Vazão volumétrica de entrada;

$F_{out}$  - Vazão volumétrica de saída;

$C_A$  - Concentração do reagente A na saída;

$C_{Ain}$  - Concentração do reagente A na entrada;

$C_B$  - Concentração do produto B na saída;

$T_{in}$  - Temperatura do reagente A na entrada;

$T_K$  - Temperatura do refrigerante na saída;

$k_W$  - Coeficiente de transferência de calor da camisa;

$A_R$  - Área de troca térmica da camisa;

$Q_K$  - Taxa de remoção de calor;

$m_K$  - massa do refrigerante;



$C_{pK}$  - Coeficiente de troca térmica do refrigerante;  
 $\Delta H_i$  - Entalpia da Reação  $i=1,2,3$ .

$\tau_{Ii}$  - Constante de tempo da ação integral  $i=1,2$ ;  
 $\tau_D$  - Constante de tempo da ação derivativa;

No estado estacionário, as concentrações dos componentes C e D são dadas por:

$$C_C = \frac{V_R F_2}{F_{out}} \quad \text{e} \quad C_D = \frac{V_R F_3}{2F_{out}} \quad (21)$$

As taxas específicas da reação são dependentes da temperatura via a equação de Arrhenius:

$$k_i(T) = k_{i0} \exp\left(\frac{E_i}{T[^\circ\text{C}] + 273.15}\right), \quad i=1,2, \text{ and } 3 \quad (22)$$

Para o sistema em questão tem-se  $k_1 = k_2$ . Os valores dos parâmetros físicos e químicos do modelo para as equações dadas estão nas Tabelas A.1 e A.2 no apêndice A e os valores no estado estacionário do principal ponto de operação estão na Tabela 1 (Engell e Klatt, 1997).

Tabela 1: Principal ponto de operação.

Ponto de operação principal	
$C_{ain}=5.1 \text{ mol/L}$	$CA=1.235 \text{ mol/L}$
$F_{in}=188.3 \text{ L/h}$	$CB=0.9 \text{ mol/L}$
$T_{in}=130 \text{ }^\circ\text{C}$	$T=134.14 \text{ }^\circ\text{C}$
$Q_k=4495.7 \text{ kJ/h}$	$T_k=128.95 \text{ }^\circ\text{C}$
$VR=10 \text{ L}$	$F_{out}=F_{in}$

As equações para os controladores são:

$$F_{out} = F^b - K_{C1} \varepsilon_{p1} - \frac{K_{C1}}{\tau_{I1}} \int \varepsilon_{I1} dt \quad (23)$$

$$Q_K = Q^b + K_{C2} \varepsilon_{p2} + \frac{K_{C2}}{\tau_{I2}} \int \varepsilon_{I2} dt + K_{C2} \tau_D \frac{d\varepsilon_D}{dt} \quad (24)$$

Onde

$$\varepsilon_{p1} = \varepsilon_{I1} = (V_R^{sp} - V_R) \quad (25)$$

$$\varepsilon_{p2} = \varepsilon_{I2} = \varepsilon_D = (T^{sp} - T) \quad (26)$$

E

$F^b$  - Bias do controlador PI;

$Q^b$  - Bias do controlador PID;

$K_{Ci}$  - Ganho do controlador  $i=1,2$ ;

Os valores dos parâmetros dos controladores estão na Tabela 2.

Tabela 2: Parâmetros do Controlador.

Parâmetros do Controlador	
$K_{C1}=2000 \text{ 1/h}$	$\tau_D=0.02 \text{ h}$
$K_{C2}=0.8 \text{ kJ/}^\circ\text{C}^*\text{h}$	$Q_b = -4500 \text{ kJ/h}$
$\tau_{I1}=0.05 \text{ h}$	$F_b = 200 \text{ L/h}$
$\tau_{I2}=0.09 \text{ h}$	

## 6.2 Problema de Otimização

A porposta é encontrar um perfil para os setpoints da temperatura do reator ( $T^{sp}$ ) e do volume de mistura ( $V_R^{sp}$ ) que maximize a seletividade e a conversão do produto B durante um horizonte de tempo de um dia de operação. Durante este período, o sistema sofre seguidas perturbações do tipo degrau, devido a mudanças na vazão, temperatura e concentração de entrada, em determinados intervalos de tempo. A formulação do problema é a seguinte:

$$\max_{T^{sp}, V_R^{sp}} \left( \frac{C_B}{C_{Ain} - C_A} + \frac{C_B}{C_{Ain}} \right) \quad (27)$$

Sujeita às seguintes restrições de desigualdade adicionais:

$$50 \frac{L}{h} \leq F_{out} \leq 350 \frac{L}{h}$$

$$-8500 \frac{kJ}{h} \leq Q_K \leq 0$$

Com o objetivo de evitar erros devido à utilização da forma explícita das integrais e a possibilidade de não interpretar corretamente a ação derivativa do erro fez-se necessário adicionar filtros para essas ações (Osório, 2005), que são os seguintes:

$$\frac{d\phi_1}{dt} = \varepsilon_{I1} = V_R^{sp} - V_R \quad (28)$$

$$\frac{d\phi_2}{dt} = \varepsilon_{I2} = T^{sp} - T \quad (29)$$

$$\frac{d\phi_3}{dt} = \frac{\varepsilon_D - \phi_3}{\alpha K_{C2} \tau_D} = \frac{T^{sp} - T - \phi_3}{\alpha K_{C2} \tau_D} \quad (30)$$

Portanto  $\phi_1$ ,  $\phi_2$  e  $\phi_3$  são as variáveis dos filtros do erro integral do PI, do erro integral do PID e do erro derivativo do PID, respectivamente;  $\alpha$  é a constante do filtro da ação derivativa. Substituindo esses filtros nas equações (23) e (24) temos,



$$F_{out} = F^b - K_{C1} \varepsilon_{p1} - \frac{K_{C1}}{\tau_{I1}} \phi_2 \quad (31)$$

$$Q_K = Q^b + K_{C2} \varepsilon_{p2} + \frac{K_{C2}}{\tau_{I2}} \phi_2 + \frac{T^{sp} - T - \phi_3}{\alpha K_{C2} \tau_D} \quad (32)$$

O gPROMS tem disponível dois solvers como padrão para resolver problemas de otimização dinâmica. Um com a implementação do algoritmo de parametrização de controle de variáveis via *single-shooting* e o outro via *multi-shooting*. Já o DyOS utiliza somente o método *single-shooting* para a discretização da variável de controle. No presente trabalho se utilizou dos dois métodos de parametrização a fim de realizar um comparativo entre os seus desempenhos, frente à estratégia de tratamento da resolução da malha de discretização.

## 7 RESULTADOS E DISCUSSÕES

As perturbações foram realizadas com os pontos de operação utilizados por Trierweiler (1997), e estão demonstrados juntamente com a sua distribuição na Tabela 3.

Tabela 3: Distribuição das perturbações com o tempo

Distúrbio	Cain (mol/L)	Tin (°C)	Fin (L)	t (h)
1	5.1	104.38	141.9	3
2	5.1	123.52	300	7
3	5.1	99.27	300	10
4	5.1	111.37	300	13
5	5.1	101.69	200	16
6	4.5	99.40	255	20

Para ambos os métodos de otimização, *single-shooting* e *multi-shooting*, foi adotado o perfil constante por partes para representar as variáveis de controle. As restrições das variáveis de controle estão na Tabela 4.

Tabela 4: Limites das variáveis de decisão

Variável	Lower bound	upper bound
$T^{sp}$	120 °C	140 °C
$V_R^{sp}$	0	10 L

Como mencionado anteriormente, o gPROMS utiliza o método de malha fixa, onde o tamanho dos intervalos são adaptados. No caso específico deste trabalho, foi selecionada uma malha com 12 intervalos para a otimização no gPROMS. Já o DyOs, que utiliza o método de malha adaptável, onde o número de intervalos e seus tamanhos são automatizados, selecionou-se uma malha inicial de 1 intervalo. Os resultados obtido pela otimização, em ambos os softwares, foram simulados no gPROMS, podendo ser observados nas Figuras 2, 3 e 4.

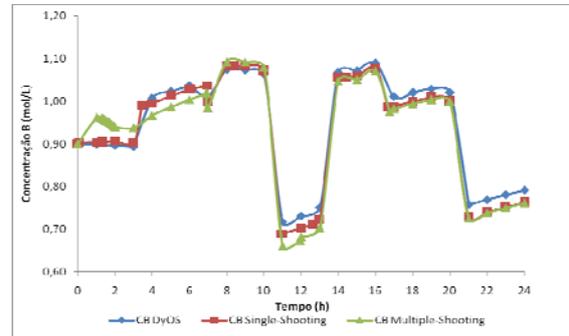


Figura 2: Variação da Concentração de B ( $C_B$ ) com o tempo para as variáveis de controle otimizadas.

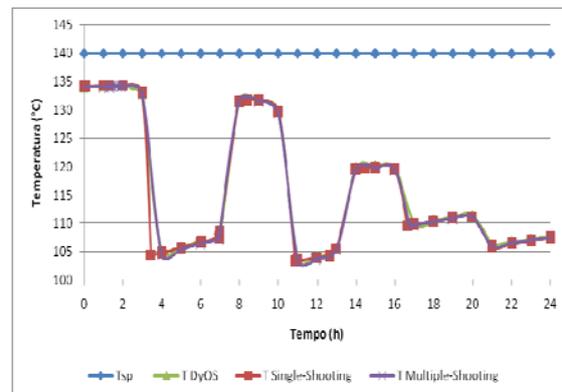


Figura 3: Variação da temperatura do reator ( $T$ ) para as variáveis de controle otimizadas e *setpoint* de temperatura.

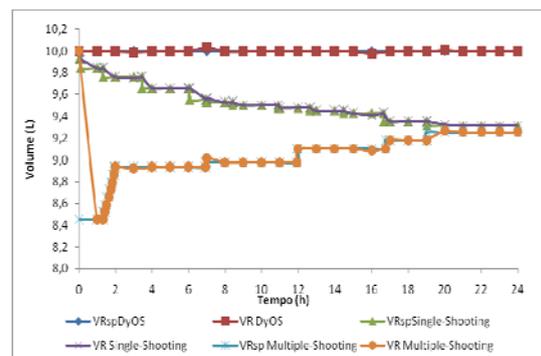


Figura 4: Variação do Volume do reator ( $V_R$ ) para as variáveis de controle otimizadas e seu respectivo *setpoint*.

Observa-se na Figura 3 que para ambos os algoritmos de otimização, *single-shooting* e *multiple-shooting*, como para o gPROMS e DyOS obteve-se o mesmo valor para  $T^{sp}$  de 140 °C, e variação semelhantes da temperatura do reator  $T$ . Já para a variável de decisão  $V_R^{sp}$  obteve-se uma variação diferenciada para os métodos *single-shooting* e *multiple-shooting*, e em ambos o volume do reator



$V_R$  acompanha a variação do *setpoint* dado pela otimização, como observado na Figura 4.

Em realação a adaptação da malha de discretização, o DyOS obteve 8 intervalos de mesmo tamanho como resultado do refinamento da malha. Na Tabela 5 tem-se o resultado da adaptação do gPROMS.

Tabela 5: Malha adaptada pelo gPROMS.

Intervalo	Valor <sub>single-shooting</sub>	Valor <sub>multiple-shooting</sub>
1	0,10	1,32
2	1,21	0,10
3	2,14	0,10
4	2,61	0,12
5	0,90	0,10
6	1,45	0,10
7	2,50	0,10
8	1,74	5,00
9	1,81	5,00
10	2,19	4,80
11	2,35	2,26
12	5,00	5,00

Os desempenhos dos algoritmos estão apresentados na Tabela 6 abaixo.

Tabela 6: Desempenhos dos algoritmos de otimização.

Método	Função Objetivo	Tempo de CPU* (s)	NI* NLP
<i>single-shooting</i>	0.66967	5,56	3
<i>multiple-shooting</i>	0.66972	246,33	92
<i>DyOS single-shooting</i>	0.66927	1,00	2

\*tempo de CPU para otimização. Pentium (R) 4 - 3GHz/512Mb RAM

\* Número de iterações NLP.

Os valores obtidos da função objetivo referem-se ao final do horizonte de tempo.

## 8 CONCLUSÕES

Apresentamos neste artigo uma comparação entre dois métodos de adaptação da malha de discretização em problemas de otimização dinâmica. Para resolver o problema utilizou-se o gPROMS, que utiliza-se da abordagem de malha fixa adaptando-se o tamanho dos intervalos, e o DyOS, que realiza sucessivos refinamentos baseando-se na análise da solução ótima em cada etapa da otimização, desta forma gerando automaticamente a malha adaptada.

Os resultados mostram a importância da adaptação da malha de discretização na qualidade da solução do problema de otimização dinâmica, apesar do valor obtido para a função objetivo não apresentar a mesma precisão que o método de malha fixa, este resultou em uma maior produção do produto desejado, como observado na Figura 2; e no ganho

computacional. Essas características tornam o método de adaptação atrativo para aplicações *on-line* como controle em horizontes móveis, onde o tempo computacional para a solução ótima é um fator limitante.

## 9 AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem CAPES, órgão de fomento a pesquisa, e a RWTH Aachen University por disponibilizar o DyOS.

## REFERÊNCIAS

- Biegler, L. T. and Cervantes, A. M. and Andreas Wächter. Advances in simultaneous strategies for dynamic process optimization. *Chemical Engineering Science*, v. 57, p. 575–593, 2002.
- de Boor, C. A practical guide to spline. *New York: Springer-Verlag*, 1978.
- DyOS. DyOS user manual, release 2.1. *Aachen: Lehrstuhl für Prozesstechnik, RWTH Aachen University*, 2006.
- Engell, S. and Klatt, K. U. Gain-scheduling trajectory control of a continuous stirred tank reactor. *Computers Chem. Eng.*, v.22 n° 4/5, p 491-502, 1997.
- gPROMS. gPROMS user's guide, release 3.0. *London, UK: Process System Enterprise Ltd.* 2006
- Huffman, W. P. et. al. Compensating for order variation in mesh refinement for direct transcription methods. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 125, p. 147-158, 2000.
- Marquardt, W. et al. Dynamic optimization using adaptive control vector parameterization. *Computers and Chem. Eng.*, 19, p. 1731-1751, 2005.
- Marquardt, W. and Schlegel, M. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 45, p. 8083-8094, 2006.
- Osório, T. da Silva. Biblioteca de Controladores-Relatório parcial 02. Projeto Alsoc - Simulador e Otimizador de Processos Químicos e Petroquímicos, 2005.
- Tanartkit, P. and Biegler, L.T. A nested, simultaneous approach for dynamic optimization problems I. *Computers and Chem. Eng.*, 20 (6/7), p. 735-741, 1996.
- Trierweiler, J. O. A Systematic approach to control structure design. *Als Ms gedr.*, p. 83 – 114, 1999.
- Van de Vusse, J. G. Plug-flow type reactor versus tank reactor. *Chem. Eng. Science*, 19, p. 994-997, 1964.
- Waldruff, W., King, R. and Gilles, E. D. Optimal feeding strategies by adaptive mesh selection for fed-batch bioprocess. *Bioprocess Eng.*, 17, p. 221-227, 1997



APÊNDICE A

Tabela A.1: Parâmetros Cinéticos para a equação de Arrhenius.(Trierweiler, 1999).

Reação	Fator de colisão $k_{i0}$	Unidade de $k_{i0}$	Energia de ativação $E_i$ [K]	Entalpia de reaç $\Delta H_i$ [kJ/mol]
$A \xrightarrow{k_1} B \therefore r_1 = k_1(T)c_A$	$(1.287 \pm 0.04) \times 10^{12}$	$\text{h}^{-1}$	-9758.3	$4.2 \pm 2.36$
$B \xrightarrow{k_2} C \therefore r_2 = k_2(T)c_B$	$(1.287 \pm 0.04) \times 10^{12}$	$\text{h}^{-1}$	-9758.3	$-(11.0 \pm 1.92)$
$2A \xrightarrow{k_3} D \therefore r_3 = k_3(T)c_A^2$	$(9.043 \pm 0.27) \times 10^9$	$\frac{\text{liter}}{\text{mol h}}$	-8560	$-(41.85 \pm 1.41)$

Tabela A.2: Parâmetros físico-químicos e dimensões do reator.(Trierweiler, 1999).

Nome do Parâmetro	Símbolo	Valor	Unidade
Densidade da mistura	$\rho$	$0.9342 \pm 0.0004$	$\left[ \frac{\text{kg}}{\text{l}} \right]$
Capacidade térmica da mistura	$C_p$	$3.01 \pm 0.04$	$\left[ \frac{\text{kJ}}{\text{kg K}} \right]$
Coeficiente de transferência de calor	$k_w$	$4032 \pm 120$	$\left[ \frac{\text{kJ}}{\text{m}^2 \text{ h K}} \right]$
Área de troca térmica	$A_R$	0.215	$[\text{m}^2]$
Volume nominal do reator	$V_R$	10	[l]
Diâmetro do reator	$D_R$	$0.2312 \text{ or } 0.3678^{\S}$	[m]
Massa de refrigerante	$m_K$	5.0	[kg]
Capacidade térmica do refrigerante	$C_{pK}$	$2.0 \pm 0.05$	$\left[ \frac{\text{kJ}}{\text{kg K}} \right]$

<sup>§</sup>O valor apresentado aqui é solução positiva da equação  $A_R = (\pi D_R^2)/4 + (4 V_R)/D_R$  para  $A_R$  e  $V_R$  apresentados nesta tabela.