

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

**A importância do ponto de operação nas
técnicas de *Self-optimizing Control***

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Eduardo dos Santos Schultz

Porto Alegre

2015

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

A importância do ponto de operação nas técnicas de *Self-optimizing Control*

Eduardo dos Santos Schultz

Dissertação de Mestrado apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia

Área de concentração: Controle e Otimização de Processos.

Linha de Pesquisa: Engenharia de Sistemas – Projeto, Simulação, Modelagem, Controle e Otimização de Processos.

Orientador:

Prof. Dr. Marcelo Farenzena

Porto Alegre

2015

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 Dissertação *A importância do ponto de operação nas técnicas de Self-optimizing Control*, elaborada por Eduardo dos Santos Schultz, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Engenharia.

Comissão Examinadora:

Prof. Dr. Argimiro Resende Secchi

Dr. Luis Gustavo Soares Longhi

Prof. Dr. Pedro Rafael Bolognese Fernandes

Agradecimentos

À minha família, pelo apoio incondicional em todos os momentos.

Ao professor Marcelo Farenzena, por sua orientação durante essa trajetória e, principalmente, pelo seu tempo, paciência e disponibilidade no decorrer do trabalho.

Aos demais professores do GIMSCOP, que em algum momento contribuíram com o trabalho desenvolvido e com suas filosofias de vida.

Resumo

A otimização de processos vem se tornando uma ferramenta fundamental para o aumento da lucratividade das plantas químicas. Diversos métodos de otimização foram propostos ao longo dos anos, sendo que a otimização em tempo real (RTO) é a solução mais consolidada industrialmente, enquanto que o *self-optimizing control* (SOC) surge como uma alternativa simplificada, com um menor custo de implantação em relação a esse. Neste trabalho são estudados diversos aspectos da metodologia de SOC, iniciando pela análise do impacto do ponto de operação para o desenvolvimento de estruturas de controle auto-otimizáveis. São propostas modificações na formulação do problema de otimização de SOC de modo que as variáveis controladas sejam determinadas no mesmo problema de otimização em que é escolhido o ponto de operação, permitindo a redução da perda do processo. De forma a analisar a influência da dinâmica nos resultados obtidos, é realizado um estudo comparativo da perda gerada no processo ao longo da operação para as estruturas de otimização baseadas em RTO e em SOC. Com base nos resultados obtidos para uma unidade didática, mostra-se que o comportamento dinâmico do distúrbio possui grande influência na escolha da técnica de otimização, quebrando a ideia de que o RTO é um limite superior do SOC. A aplicação industrial das técnicas clássicas de SOC é validada em uma unidade de separação de propeno, baseada em uma unidade real em operação. A partir da modelagem do processo em simulador comercial, foram geradas as variáveis controladas que permitam uma perda aceitável para a unidade, comprovando a viabilidade de implantação da metodologia em unidades reais.

Palavras-chave: otimização de processos, *self-optimizing control*, otimização em tempo real, seleção de variáveis controladas.

Abstract

Process optimization has become a fundamental tool for increasing chemical plants profit. Several optimization methods have been proposed over the years, and real-time optimization (RTO) is the most consolidated solution industrially while self-optimizing control (SOC) appears as a simplified alternative with a lower implementation cost. In this work several aspects of SOC methodology are studied, starting from the analysis of the impact of operating point in the development of self-optimizing control structures. Improvements are proposed in SOC optimization problem formulation where controlled variables are determined in the same optimization problem that operating point, thus reducing significantly process loss. In order to analyze the influence of dynamics on the results, a comparative study is accomplished comparing the loss generated in the process throughout the operation for optimization structures based on RTO and SOC. With the results generated for a toy unit, it is shown that the disturbance dynamic behavior has a great influence on choosing the optimization technique, breaking the idea that RTO is an upper limit of SOC. The industrial application of classical SOC techniques is tested on a propylene separation unit, really operating nowadays. The process was modelled in a commercial simulator and with this model it was generated the best set of controlled variables, based on SOC, that achieve an acceptable loss for the unit, showing that the methodology can be applied in real units.

Keywords: process optimization, *self-optimizing control*, real-time optimization, controlled variable selection.

Sumário

Capítulo 1 - Introdução.....	1
1.1 Objetivos	2
1.2 Estrutura da Dissertação.....	3
Capítulo 2 - A Otimização de Processos e a metodologia de <i>Self-Optimizing Control</i>.....	5
2.1 <i>Real-time Optimization</i> (RTO)	8
2.1.1 <i>Dynamic Real-time Optimization</i> (DRTO)	10
2.2 <i>Self-optimizing Control</i> (SOC)	12
2.2.1 Busca Exaustiva (Skogestad, 2000a)	17
2.2.2 Método Exato Local (Halvorsen <i>et al.</i> , 2003)	18
2.2.3 Método do Espaço Nulo (Alstad e Skogestad, 2007)	26
2.2.4 Principais desafios das técnicas de SOC	28
2.2.5 Aplicações industriais	30
Capítulo 3 - <i>Self-optimizing control</i> – Estudo da influência do ponto de operação nominal	32
3.1 <i>BOPSOC – Best Operating Point for Self-Optimizing Control</i>	35
3.2 Soluções Subótimas.....	38
3.3 Estudo de Caso 1: Reator CSTR com reação reversível	41
3.4 Estudo de Caso 2: Reator CSTR e coluna com reciclo.....	49
3.4.1 Resultados.....	52
Capítulo 4 - Estudo da influência das dinâmicas do distúrbio e da planta nas respostas do SOC e do RTO	59
4.1 Metodologia.....	60
4.2 Estudo de Caso.....	62
4.3 Resultados	64
4.3.1 Estudo do Erro de Modelagem	68

Capítulo 5 - Aplicação Industrial – Unidade de Separação de Propano/Propano	71
5.1 Modelagem da Unidade	75
5.2 Modelo Caixa Preta.....	80
5.3 Otimização e Curvas de Operação	82
5.4 Aplicação das técnicas de SOC	89
5.4.1 Método Exato Local	90
5.4.2 Método do Espaço Nulo.....	92
5.4.3 BOPSOC	94
5.4.4 Comparação dos resultados	99
Capítulo 6 - Conclusões e Trabalhos Futuros	101
Referências Bibliográficas	105

Lista de figuras

Figura 2.1: Arquitetura típica de automação industrial (baseado em Darby <i>et al.</i> , 2011).	7
Figura 2.2: Arquitetura de funcionamento de um RTO, onde C1, ..., Cn representam os controladores da camada regulatória. (extraído de Engell, 2007)	8
Figura 2.3: Gráfico ilustrativo da perda devido a um distúrbio no processo. (Adaptado de Skogestad, 2000a; b).....	14
Figura 3.1: Comportamento do lucro para CV com <i>setpoints</i> diferentes.....	34
Figura 3.2: Perda imposta por diferentes <i>setpoints</i> (SP) utilizando SOC.....	34
Figura 3.3: Diagrama de blocos dos algoritmos de (A) SOC e (B) BOPSOC. ...	35
Figura 3.4: Algoritmos propostos de melhoria do SOC baseado na otimização do ponto operação ao longo da região do distúrbio antes (A) e depois (B) da escolha das variáveis controladas.	41
Figura 3.5: Desenho esquemático do reator (Alstad, 2005; Kariwala, 2007).	42
Figura 3.6: Desenho esquemático do processo.....	50
Figura 3.7: Perda ao longo da região de distúrbio para as diferentes variáveis controladas obtidas para a perda máxima.	56
Figura 3.8: Comportamento do lucro ao longo da região de distúrbio para as diferentes variáveis controladas obtidas para a perda máxima e o valor ótimo.....	56
Figura 3.9: Comportamento da perda para diferentes variáveis controladas obtidas pelo BOPSOC para a perda máxima.....	58
Figura 4.1: Modelo de onda quadra utilizado na entrada.....	61
Figura 4.2: Variação do lucro operacional para diferentes passos de tempo do distúrbio, onde R1, R2 e R3 delimitam as diferentes regiões de aplicação do RTO. (SEM: Processo sem sistema de otimização; SOC: processo com as técnicas se self-optimizing control; RTO: processo com uma camada RTO realizando a otimização).	64

Figura 4.3: Comportamento do lucro ao longo da operação para um passo de tempo de 70 horas.	66
Figura 4.4: Avaliação das técnicas de otimização para o processo $\tau = 2,25$ h.	66
Figura 4.5: Avaliação das técnicas de otimização para o processo $\tau = 4$ h.	67
Figura 4.6: Avaliação das técnicas de otimização para o processo $\tau = 13,4$ h.	67
Figura 4.7: Avaliação das técnicas de otimização para erro no modelo ($k1^* = 1,544 \cdot 10^{12} \text{ h}^{-1}$).	69
Figura 4.8: Avaliação das técnicas de otimização para erro no modelo ($k1^* = 1,000 \cdot 10^{12} \text{ h}^{-1}$).	69
Figura 5.1: Fluxograma da unidade de separação de propeno.	73
Figura 5.2: Modelo da unidade criado no Aspen Plus.	76
Figura 5.3: Modelo de entradas e saídas do processo.	78
Figura 5.4: Comportamento do lucro ótimo do processo ao longo da região de distúrbio.	89
Figura 5.5: Comportamento da perda para o conjunto de variáveis obtidas utilizando o método exato local.	92
Figura 5.6: Comportamento da perda para o conjunto de variáveis obtidas utilizando o método do espaço nulo.	94
Figura 5.7: Comportamento da perda para o conjunto de variáveis obtidas utilizando o método BOPSOC para a perda máxima.	97
Figura 5.8: Comportamento da perda para o conjunto de variáveis obtidas utilizando o método BOPSOC para a perda média.	97
Figura 5.9: Comportamento da perda para o conjunto ótimo para a perda máxima no modelo não linear.	99

Lista de tabelas

Tabela 3.1: Ponto ótimo para o distúrbio nominal ($C_{ai} = 1,0$ mol/L e $C_{bi} = 0$ mol/L).	44
Tabela 3.2: <i>Setpoints</i> ótimos para minimizar a perda média.	47
Tabela 3.3: <i>Setpoints</i> ótimos para minimizar a perda máxima.	47
Tabela 3.4: Perdas calculadas para cada variável controlada.	48
Tabela 3.5: Variáveis do modelo do processo.	52
Tabela 3.6: Limites máximos e mínimos para os graus de liberdade do processo.	52
Tabela 3.7: Ponto ótimo para o valor de distúrbio nominal ($d^* = T = 110$ °C). ...	53
Tabela 3.8: Comparação das CVs utilizando os diferentes métodos.	54
Tabela 3.9: Lista de variáveis controladas obtidas pelo procedimento BOPSOC para a perda máxima.	57
Tabela 4.1: Variáveis controladas e seus <i>setpoints</i> a partir da análise de BOPSOC.	63
Tabela 4.2: Matriz RGA obtida para análise do emparelhamento das variáveis.	64
Tabela 4.3: Lucro médio (\$) de cada técnica nos estudos realizados.	70
Tabela 5.1: Terminologia utilizada na representação da unidade.	72
Tabela 5.2: Lista de equipamentos da unidade.	74
Tabela 5.3: Especificação da corrente de alimentação, composta por GLP.	75
Tabela 5.4: Principais correntes da unidade.	80
Tabela 5.5: Região utilizada para treinar a rede neural da coluna T-01.	81
Tabela 5.6: Região utilizada para treinar a rede neural da coluna T-02.	82
Tabela 5.7: Região utilizada para treinar a rede neural da coluna T-03.	82
Tabela 5.8: Limites dos graus de liberdade.	84
Tabela 5.9: Valores nominais dos distúrbios.	86
Tabela 5.10: Condição ótima nominal dos graus de liberdade.	86
Tabela 5.11: Condição ótima nominal da coluna T-01.	86
Tabela 5.12: Condição ótima nominal da coluna T-02.	87
Tabela 5.13: Condição ótima nominal da coluna T-03.	87

Tabela 5.14: Lucro ótimo ao longo da região de distúrbio..... 88

Tabela 5.15: Comparação das perdas obtidas com cada método. 99

Abreviações

<i>BOPSOC</i>	<i>Best operating point for self-optimizing control</i>
<i>CVs</i>	Variáveis controladas
<i>DRTO</i>	<i>Dynamic Real-time Optimization</i> (Otimização dinâmica em tempo real)
<i>ERP</i>	<i>Enterprise Resource Planing</i>
<i>GLP</i>	Gás Liquefeito de Petróleo
<i>HDA</i>	Hidrodealquilação de tolueno
<i>MES</i>	Manufacturing Execution System
<i>MINLP</i>	Mixed integer nonlinear programming (Programação não-linear inteira mista)
<i>MPC</i>	<i>Model Predictive Control</i>
<i>MVs</i>	<i>Variáveis manipuladas</i>
<i>NCO</i>	<i>Necessary conditions of optimality</i>
<i>NLP</i>	<i>Nonlinear programming</i> (programação não-linear)
<i>RTO</i>	<i>Real-time Optimization</i> (Otimização em tempo real)
<i>SDCD</i>	Sistema digital de controle distribuído
<i>SOC</i>	<i>Self-optimizing Control</i> (Controle auto-otimizável)
<i>SP</i>	<i>Setpoint</i>

Notação e Simbologia

B/F_2	razão mássica entre a corrente de fundo da coluna T-02 e a vazão de alimentação da T-02, da unidade de produção de propeno;
c	valor das variáveis controladas;
c^*	valor ótimo da variável controlada no ponto de operação nominal;
C_2	Etano;
C_3-	Propeno;
C_3+	Propano;
c_{opt}	valor ótimo da variável controlada para um determinado distúrbio d ;
c_s	<i>setpoint</i> da variável controlada;
d	valor do distúrbio;
D	região de valores admitidos para o distúrbio;
d'	distúrbio normalizado;
d^*	valor nominal do distúrbio;
D/F_1	razão mássica entre a corrente de destilado da coluna T-01 e a vazão de alimentação, da unidade de produção de propeno;
E	gasto energético da unidade de produção de propeno;
e_c	soma dos erros de implementação e de <i>setpoint</i> ;
f	restrições de igualdade do problema de otimização;
F	matriz de sensibilidade do ponto ótimo em relação aos distúrbios;
f'	região de distúrbio e de erro de implementação normalizados;
FA_3	fração da corrente que sai do compressor que é utilizada como fluido de aquecimento do refeedor, da unidade de produção de propeno;

f_c	função que calcula o valor das variáveis controladas a partir do valor das manipuladas e dos distúrbios;
FR_3	fração da corrente que sai do refeedor (corrente 14) que retorna para a coluna como refluxo, da unidade de produção de propeno;
Fw_x	vazão mássica da corrente de número “x” na unidade de produção de propeno;
F_x	vazão molar da corrente de número “x” na unidade de produção de propeno;
f_y	modelo do processo com a eliminação dos estados;
g	restrições de desigualdade do problema de otimização;
G	modelo linearizado do processo em relação a u , no ponto de operação nominal;
Gd	modelo linearizado do processo em relação a d , no ponto de operação nominal;
h	função que define as variáveis controladas a partir de uma combinação linear das variáveis medidas;
J	custo de operação para um determinado valor de u , x e d ;
J^*	custo de operação no ponto ótimo nominal;
J^*_d	derivada da função custo em relação a d , no ponto ótimo nominal;
J^*_{dd}	derivada segunda da função custo em relação a d , no ponto ótimo nominal;
J^*_{du}	derivada da função custo em relação a d e u , no ponto ótimo nominal;
J^*_u	derivada da função custo em relação a u , no ponto ótimo nominal;
J^*_{uu}	derivada segunda da função custo em relação a u , no ponto ótimo nominal;

J_c	custo de operação utilizando uma estratégia de otimização, para um determinado valor de distúrbio e erro de implementação;
J_{opt}	custo de operação ótimo para um determinado valor de distúrbio;
k	número de variáveis medidas disponível para serem controladas;
L	perda;
L_{avg}	perda média ao longo da região de d e n ;
$L_{máx}$	perda máxima ao longo da região de d e n ;
L_{SE}	lucro da unidade de produção de propeno, sem os gastos com energia.
M	matriz representativa do processo para cálculo da perda máxima;
m	número de graus de liberdade disponíveis para otimização;
Md	matriz que compões a matriz M que representa a influência do distúrbio na perda máxima;
Mn	matriz que compões a matriz M que representa a influência do erro de implementação na perda máxima;
n	valor do erro de implementação;
N	região de valores permitidos para o erro de implementação;
n_d	número de distúrbios do processo;
n_y	número de variáveis medidas do processo;
n_y'	erro de implementação normalizado;
u	valor das variáveis manipuladas;
U	conjunto de graus de liberdade disponíveis para otimização;
u^*	valor ótimo da variável manipulada no ponto de operação nominal;
u_{opt}	valor ótimo das variáveis manipuladas para um determinado distúrbio d ;
W_d	matriz de magnitude de cada distúrbio;

W_n	matriz de magnitude do erro de implementação;
x	valor dos estados do modelo;
Y	conjunto de variáveis medidas;
y	valor das variáveis medidas;
y_{b_k}	variável binária que indica se a variável Y_k está sendo controlada;
y_k	valor atual da variável Y_k ;
y_{opt}	valor ótimo das variáveis medidas para um determinado distúrbio d ;
$y_{set,k}$	<i>setpoint</i> da variável Y_k ;
Z_x^y	fração molar do componente “x” na corrente “y” na unidade de produção de propeno;
v	erro devido a diferença entre o valor da variável controlada no ponto de operação nominal e o seu valor ótimo para um determinado distúrbio d ;
$\bar{\sigma}$	máximo valor singular;
$\ \cdot\ _F$	norma de Frobenius;
ϕ^3	termos de ordem superior da expansão em séries de Taylor.

Capítulo 1 - Introdução

O cenário econômico mundial e o atual patamar de preços do petróleo pressiona as empresas do ramo petroquímico a otimizar cada vez mais suas unidades. Nesse cenário de estagnação econômica e redução de investimentos do setor, a operação ótima deixou de ser considerada uma melhoria no processo, mas sim uma necessidade para manter as unidades viáveis economicamente. Isso está levando as unidades industriais aos seus limites operacionais, considerando a necessidade crescente de aumento de produção, de modo a suprir a demanda de mercado, alinhado a margens de lucro cada vez menores. Deste modo, os processos industriais têm que ser cada vez mais eficientes, reduzindo, assim, as perdas durante a operação.

Este aumento de produção aliado à eficiência só é possível com a correta aplicação das técnicas de controle e otimização de processos. Por meio delas, é possível operar a planta mais próxima dos limites operacionais dos equipamentos, sem que haja um aumento nos riscos operacionais, atendendo as especificações dos produtos e mantendo as emissões ao meio ambiente dentro dos limites legais. Na literatura, estão disponíveis diversas metodologias relacionadas ao tema, que permitem projetar o sistema de automação de modo a maximizar o lucro do processo. Dentre as principais técnicas de otimização, pode-se citar as técnicas de otimização em tempo real (RTO), *NCO Tracking*, *Self-optimizing control* (SOC), entre outras. A metodologia de SOC é o principal alvo de estudo deste trabalho devido ao

seu alinhamento à conjuntura econômica atual de otimização de processos com baixo índice de investimentos.

Essa metodologia se concentra na utilização de controladores do tipo *feedback*, aplicados nos sistemas de controle existentes com objetivo de otimização econômica da unidade. Atualmente, a maioria das unidades industriais possui um sistema de controle automatizado que é configurado para manter as principais variáveis do processo em seus devidos *setpoints*. Um projeto adequado desse sistema de controle pode tornar a operação mais suave, rejeitando distúrbios que apareçam no processo; assim como pode fazer com que mudanças operacionais sejam realizadas de forma mais rápida que quando operadas manualmente. A ideia principal do SOC é utilizar essa mesma infraestrutura, já disponível na unidade, para reduzir sua perda, reduzindo o custo do projeto de implantação do sistema de otimização, e com resultados semelhantes, ou mesmo melhores, que as demais técnicas, as quais necessitam, normalmente, de aquisição de hardware e software para sua utilização (e.g. RTO).

1.1 Objetivos

O primeiro ponto a ser analisado neste trabalho diz respeito à aplicação do conceito original de SOC para uma unidade didática, de modo a ser possível analisar as principais potencialidades e dificuldades na aplicação da metodologia. Nesse contexto, é avaliado o impacto da escolha do ponto de operação para o desenvolvimento de variáveis controladas auto-otimizáveis. A metodologia clássica utiliza dois processos de otimização distintos para determinar o ponto de operação e o conjunto de variáveis controladas (CVs), sendo que é proposta uma modificação nessa formulação de modo utilizar um problema de otimização único. Assim, é possível reduzir a perda do processo e reduzir a influência das restrições ativas na determinação das CVs. Alternativamente, são propostas duas formulações simplificadas de modificação do ponto de operação que fornecem resultados intermediários; porém, com um problema de otimização menos oneroso computacionalmente.

A validação das CVs obtidas pela nova metodologia é testada com a utilização de um modelo dinâmico da unidade. É proposta a utilização da frequência de mudança do valor do distúrbio, a partir de uma senóide quadrada, como parâmetro de avaliação das técnicas de otimização. Neste contexto, é realizado o estudo comparativo do lucro obtido na unidade quando é utilizada a estrutura obtida pelo SOC, com aquelas obtidas por meio de um sistema RTO e por um sistema sem otimização. Assim, busca-se mostrar a importância que o comportamento do distúrbio possui na escolha da técnica de otimização a ser aplicada na planta; assim como evidenciar os ganhos que o SOC possui perante o RTO.

Um dos principais objetivos de qualquer metodologia de otimização é se provar viável de ser aplicada em uma unidade real. Desta forma, foi utilizada uma unidade de separação de propeno a partir de uma corrente de GLP, para validar o método de SOC. A unidade é baseada em uma unidade real, em operação, cujo modelo estático foi gerado no simulador de processos Aspen Plus. A partir dos dados gerados pela simulação do processo, foram testadas duas técnicas de SOC de modo a se obter um conjunto de CVs que minimize a perda da unidade com a utilização de *setpoints* constantes. Por meio dos resultados obtidos, buscou-se evidenciar o potencial dos métodos de serem utilizadas em unidades industriais e propor dois conjuntos de variáveis controladas que possam otimizar a unidade estudada.

1.2 Estrutura da Dissertação

A presente dissertação está organizada em seis capítulos, conforme descritos a seguir.

O Capítulo 2 é dedicado a apresentar os diferentes trabalhos de referência em relação aos diversos assuntos abordados no trabalho. Inicia-se com uma visão geral da automação industrial e onde está inserida a otimização de processos, seguindo por uma análise das técnicas de RTO. Na sequência são introduzidos os conceitos básicos de SOC, com a definição das principais variáveis e com a apresentação de três métodos de escolha das variáveis. Por fim são apresentados os principais pontos de estudo atuais e alguns relatos de aplicações industriais.

No Capítulo 3 é proposta uma modificação do problema de otimização original de escolha das variáveis controladas de forma que o ponto de operação seja definido no mesmo procedimento. Além disso, são propostas duas soluções simplificadas, as quais visam fornecer uma perda intermediária entre o procedimento proposto e o método clássico; porém, com a utilização de menos recursos computacionais para resolver o problema de otimização. Os métodos propostos são avaliados em duas unidades didáticas, sendo a primeira composta por um reator do tipo CSTR com uma reação reversível; e a segunda composta por um reator e coluna com reciclo, onde ocorre uma reação do tipo de van de Vusse.

No Capítulo 4 é utilizado o modelo dinâmico do segundo processo apresentado no capítulo anterior para comparar a estrutura de controle obtida por meio do SOC com a utilização de um RTO. Deste modo, é proposta a utilização de uma perturbação no distúrbio da unidade, sob a forma de uma senóide quadrada, para avaliar a melhor técnica de otimização baseado na frequência de alteração do valor do distúrbio. Analisa-se também a influência da constante de tempo do processo e de erros de modelagem na escolha do melhor método de otimização.

O Capítulo 5 é responsável por apresentar a unidade de processamento de propeno, utilizada para testar as técnicas de SOC em uma unidade real. São apresentadas as principais características de unidade estudada e todas as considerações e métodos utilizados durante sua modelagem. Na sequência é realizada a otimização da unidade e são aplicadas duas técnicas de SOC, onde são obtidas CVs baseadas em variáveis individuais e em combinação linear das variáveis medidas.

Por fim, são apresentadas as conclusões do trabalho e sugestões de trabalhos futuros no Capítulo 6.

Capítulo 2 - A Otimização de Processos e a metodologia de Self-Optimizing Control

A busca por processos mais lucrativos incentivou o desenvolvimento de metodologias de otimização para a indústria química e petroquímica, de modo a tornar a operação mais eficiente e com menor custo. Neste contexto, surgiram novas estratégias de controle e novas arquiteturas para controle de processos, que visam, não somente o controle operacional da unidade, mas também a otimização econômica da mesma (Morari *et al.*, 1980; Mizoguchi *et al.*, 1995; Marlin e Hrymak, 1997a; Skogestad, 2000a; b; Francois *et al.*, 2005).

A otimização econômica consiste em operar o processo em seu ponto de operação de maior lucro, ou menor custo. Desta forma, busca-se utilizar os valores ótimos das variáveis de processo que minimizem o custo operacional, obedecendo normalmente, restrições de igualdade, relativas aos balanços de massa, energia e quantidade de movimento do processo, e de desigualdade, relativas aos limites operacionais dos equipamentos, padrões de qualidade, parâmetros ambientais, etc. (Morari *et al.*, 1980). Assim, o problema de otimização pode ser descrito pela seguinte formulação (Skogestad, 2000a):

$$\begin{cases} \min_u J(u, x, d) \\ f(u, x, d) = 0 \\ g(u, x, d) \leq 0 \end{cases} \quad (2.1)$$

Onde:

J = custo de operação;

u = variáveis manipuladas do modelo;

x = estados do modelo;

d = distúrbios do processo;

f = representa as restrições de igualdade do problema de otimização, sendo constituído normalmente pelas equações do modelo do processo;

g = representa as restrições de desigualdade do problema de otimização, normalmente contemplando as restrições físicas dos equipamentos, os limites de especificação dos produtos, entre outras.

O desenho típico da estrutura de automação de uma unidade é composto por uma pirâmide com diversas camadas, onde as camadas inferiores trabalham com dados de nível operacional e à medida que se sobe os dados operacionais se transformam em informações gerenciais. Um desenho típico dessa arquitetura é mostrado na Figura 2.1, onde os dados das variáveis de processo se concentram no nível 1 e, à medida que é realizada a transferência de informações ao longo dos demais níveis, esses dados se transformam em informações importantes para o planejamento estratégico da empresa (Darby *et al.*, 2011).

A otimização de processos se concentra, principalmente, nos níveis 2 e 3, sendo que há métodos característicos do nível 3, como o *Real-time Optimization (RTO)*; assim como, métodos que trabalham apenas no nível 2, como o *Self-optimizing Control (SOC)*. O nível em que é aplicada a técnica ajuda a definir o conjunto de informações utilizadas e, também, a forma como o método irá realizar a otimização, já que cada camada possui um tempo característico de atualização das informações. Quanto mais distante do “chão de fábrica”, mais lenta será a atuação do módulo de otimização da unidade, abrindo espaço para perdas devido à dinâmica do processo.

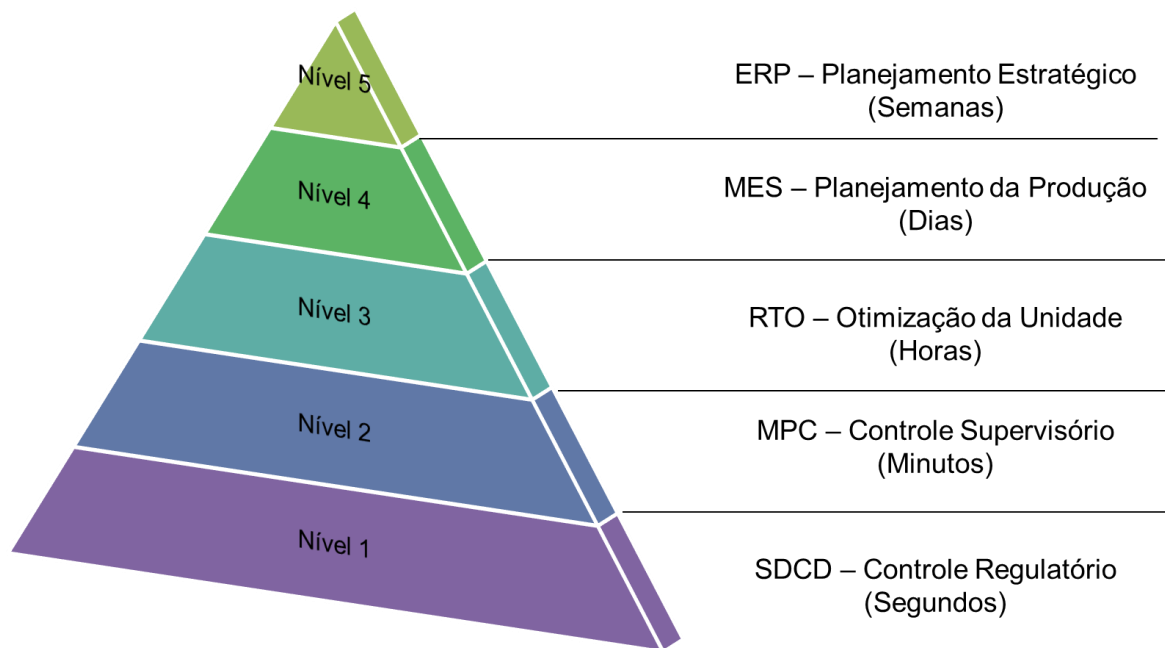


Figura 2.1: Arquitetura típica de automação industrial (baseado em (Darby *et al.*, 2011)).

Outra importante característica do método a ser utilizado está relacionada ao modelo do processo. É possível classificar as metodologias existentes em três classes básicas de acordo com a utilização do modelo durante sua implementação (Jaschke e Skogestad, 2011):

- Técnicas que utilizam o modelo *online*, tal como o RTO (Mizoguchi *et al.*, 1995; Marlin e Hrymak, 1997b).
- Técnicas que utilizam o modelo *off-line*, tal como o SOC (Skogestad, 2000b).
- Técnicas que não utilizam um modelo do processo, tal como o *NCO Tracking* (Francois *et al.*, 2005).

Embora a origem dos métodos anteriores seja restrita em relação à utilização do modelo, novas metodologias vêm sendo propostas a partir da combinação de elementos de cada técnica, como pode ser visto em Chachuat *et al.* (2008), Jaschke e Skogestad (2011) e Ye *et al.* (2013).

2.1 Real-time Optimization (RTO)

A otimização em tempo real é uma das técnicas que vêm ganhando grande aplicação em plantas químicas. Sua ideia básica está em atualizar os *setpoints* das variáveis controladas, ou diretamente as variáveis manipuladas do processo, a cada distúrbio que ocorra na planta, de modo a unidade sempre operar no seu ponto ótimo. Para isso, a aplicação deve ser realizada entre as camadas de planejamento e de controle, de modo ao sistema de otimização possuir comunicação com as informações do “chão de fábrica” e de planejamento de produção.

Uma arquitetura básica de um sistema RTO poder ser representada pela Figura 2.2.

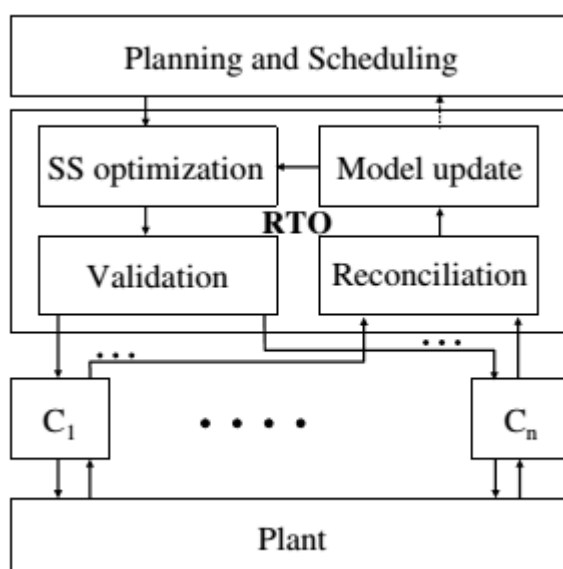


Figura 2.2: Arquitetura de funcionamento de um RTO, onde C_1, \dots, C_n representam os controladores da camada regulatória. (extraído de Engell, (2007))

Como pode ser visto na Figura 2.2, o sistema RTO deve possuir ligação com a camada de planejamento, de onde são obtidos os dados relativos à qualidade de produtos e matérias primas, custos das correntes e restrições relativas às especificações e demandas de produção. Por outro lado, na camada inferior, o sistema deve possuir comunicação com o sistema de controle industrial para obter os valores das principais variáveis do processo, e também, para poder repassar os *setpoints* das variáveis controladas que otimizam o custo da operação (Engell, 2007).

O funcionamento do sistema de RTO pode ser resumido em seis etapas básicas (Sequeira *et al.*, 2002; Engell, 2007):

1. Identificação do estado estacionário: esta etapa identifica se o processo está em regime permanente ou durante um período de transição. A próxima etapa só será realizada quando o processo estiver em estado estacionário.

2. Reconciliação de dados: com o processo em estado estacionário é realizada a reconciliação dos dados das variáveis do processo a partir dos balanços de massa e energia da unidade. Deste modo podem ser compensados os erros de medição dos sensores.

3. Atualização do modelo: a partir da reconciliação de dados, são calculados os novos parâmetros do modelo que será utilizado no algoritmo de otimização.

4. Cálculo do ponto ótimo: com o modelo do processo atualizado, é utilizado um algoritmo de otimização para calcular o ponto ótimo. Nesta etapa, informações relativas aos custos atuais das matérias primas e produtos, assim como, as restrições de qualidade, de produção e limites dos equipamentos são buscadas na camada de planejamento industrial.

5. Validação: os novos *setpoints* calculados são validados pelo sistema supervisório (normalmente com a participação da equipe de operação) de modo a impedir movimentos bruscos no processo e pontos de operação inviáveis.

6. Aplicação: é realizada uma nova verificação do processo, de modo a verificar se, durante o cálculo, houve mudança no estado estacionário. Caso nenhuma mudança significativa tenha ocorrido, é realizada atualização dos valores dos *setpoints* das variáveis controladas.

A partir da forma de implementação descrita, pode-se identificar alguns pontos negativos desta técnica, tais como (Engell, 2007):

- É necessário um modelo estacionário do processo, com precisão suficiente para realizar a otimização (Yip e Marlin, 2004). Caso o modelo não possua

uma boa qualidade, o resultado da otimização pode não ser o ponto ótimo do processo, levando a uma perda devido ao erro de modelagem.

- Durante os períodos de transição entre dois pontos de operação estacionários, o sistema de otimização não atua, fazendo com que haja uma perda enquanto o processo não atinge o novo ponto de operação e seja realizada novamente a otimização.
- Os erros de medição randômicos podem ser propagados para os *setpoints* calculados, fornecendo um ponto de operação não ótimo (Miletic e Marlin, 1998; Zhang *et al.*, 2001).

Por outro lado, para um processo que opere por longos períodos de tempo em estado estacionário, que possua um modelo matemático preciso e onde a instrumentação de campo possua uma precisão razoável, a metodologia RTO fornece ótimos resultados. Neste caso, a unidade irá operar na maior parte do tempo em seu ponto ótimo, maximizando o lucro operacional.

2.1.1 Dynamic Real-time Optimization (DRTO)

Um dos principais problemas do RTO está no fato de a otimização ser realizada apenas durante o estado estacionário, fazendo com que o sistema de otimização não atue durante os períodos transientes de operação da planta. Para contornar esse problema, novos métodos e arquiteturas de otimização de processos foram propostos de modo a obter as melhores curvas de operação da unidade a partir da otimização dinâmica da mesma. Dentre as arquiteturas adotadas, há aquelas compostas por apenas uma camada, onde há uma fusão das camadas de controle avançado e de otimização, e as de duas camadas, que possui as mesmas características do RTO.

Os métodos de uma camada incorporam à função objetivo típica do MPC um termo com objetivos econômicos, denominados atualmente de MPC econômico (Diehl *et al.*, 2011). Desta forma, o problema torna-se mais complexo, visto a necessidade de solução de um problema NLP, o qual deve convergir em um curto espaço de tempo e apresentar uma solução que seja viável para o processo. Outro fator que aumenta a complexidade desse tipo de implementação é o aumento do

número de parâmetros de sintonia do controlador MPC, devido à adição do novo parâmetro. O ajuste do controlador pode requerer um elevado número de simulações visando garantir a estabilidade no processo (Tvrzská de Gouvêa e Odloak, 1998). Mesmo com todas as dificuldades de implementação, já há relatos de aplicação prática deste tipo de formulação (Zanin *et al.*, 2002).

Outra formulação que utiliza apenas uma camada envolve a utilização de controladores preditivos não-lineares. Neste caso, é utilizado o sistema de equações algébrico-diferenciais que representam o processo para realizar a otimização das ações de controle ao longo do tempo, de modo a maximizar o lucro (Diehl *et al.*, 2002). A principal diferença em relação ao método anterior está na formulação do MPC, onde o primeiro mantém a utilização dos modelos lineares para a previsão das ações de controle, e no segundo estas são geradas a partir do modelo não-linear. Este tipo de estratégia requer um modelo dinâmico preciso da unidade além de um algoritmo robusto para resolver o problema de otimização. Logo, sua implementação em unidades reais se torna difícil, dada a capacidade de processamento atual.

O principal problema dos métodos de uma camada é a solução do problema de otimização de forma a gerar uma resposta confiável do controlador em um curto espaço de tempo. Para contornar essa limitação, há novas metodologias que dividem a otimização dinâmica em duas camadas com escalas de tempo diferentes. Desta forma a otimização do modelo dinâmico é realizada em uma camada superior com uma frequência baixa, enquanto um controlador preditivo opera em frequência mais alta gerando as ações de controle. A principal diferença em relação ao RTO está no fato de que a camada superior realiza a otimização da trajetória das variáveis, enviando um conjunto de ações de controle ao longo do tempo para o controlador preditivo (Würth *et al.*, 2011).

Mesmo com todos os avanços nas técnicas de DRTO, sua aplicação em plantas reais ainda é muito limitada. Um dos principais motivos disso se encontra na necessidade de modelos dinâmicos precisos da unidade e na dificuldade de solução dos problemas de otimização gerados, chegando-se em muitos casos em soluções inviáveis. Para contornar esse tipo de problema é necessário o desenvolvimento de métodos que aumentem a robustez do DRTO, tal como o método proposto por

Almeida e Sechi (2012), que visa contornar as soluções inviáveis do problema de otimização do DRTO.

2.2 Self-optimizing Control (SOC)

A metodologia do SOC foi proposta inicialmente por Skogestad, no ano de 2000, com a seguinte definição:

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

Em tradução livre:

“Controle auto-otimizável é quando podemos alcançar uma perda aceitável com valores constantes para as variáveis controladas (sem precisar re-otimizar quando um distúrbio ocorre).”

A ideia principal é operar a unidade sem realizar a alteração do ponto operacional; aceitando, com isso, uma possível perda. Assim, devem ser escolhidas variáveis controladas que, quando mantidas com um *setpoint* constante, minimizem a perda do processo na ocorrência de um determinado distúrbio. Dessa forma, o primeiro critério para a escolha das variáveis é qualitativo, de onde podem ser derivados quatro requisitos básicos a partir da ideia geral do método (Skogestad, 2000a; b):

- Requisito 1: o valor ótimo da variável não deve ser sensível aos distúrbios do processo; assim, a perda, devido a diferença entre o valor atual e o valor ótimo, é minimizada.
- Requisito 2: a variável deve ser fácil de medir e de controlar, de modo a reduzir o erro de implementação.
- Requisito 3: a variável deve ser sensível a mudanças no valor da manipulada, com um grande ganho relativo.

- Requisito 4: para o caso de duas ou mais variáveis controladas, essas não devem possuir grande correlação.

Embora as características sejam apenas qualitativas, elas podem auxiliar no processo de escolha das candidatas a controladas, de modo a não serem avaliadas todas as variáveis do processo.

A implementação da técnica consiste na utilização de um controlador simples (tal como um PI ou PID) para manter a variável escolhida sempre em seu valor ótimo. Como a grande parte das indústrias possuem sistemas de controle, não há gastos de aquisição de software ou equipamentos, tornando a implantação barata. Desta forma, a implantação do SOC pode ser vista como uma camada de controle em cascata, controlando variáveis do processo que minimizam a perda, quando há um distúrbio no processo.

Uma característica importante da técnica de SOC é que o sistema opera durante o estado estacionário e durante o período transiente. Assim, o controlador está sempre “trabalhando” para que a variável controlada esteja em seu *setpoint*, rejeitando os distúrbios do processo. Essa é uma das principais vantagens do método de SOC em relação ao RTO, pois, dependendo da dinâmica do sistema, o RTO pode passar longos períodos sem atuar, fazendo com que a unidade opere longe do ponto ótimo. Quando é utilizado um controlador *feedback* com *setpoint* constante, o sistema de controle estará atuando o tempo todo, mesmo quando o processo estiver em regime transiente, reduzindo a perda transiente.

Por outro lado, quando se utiliza um valor fixo para uma variável controlada, e ocorre um distúrbio no processo, a unidade não estará mais operando em seu ponto ótimo, visto que não é realizada uma nova otimização. Neste caso, pode-se dizer que há uma perda no processo, pois a unidade poderia estar operando de forma mais eficiente. A perda é a principal variável de decisão na metodologia de *self-optimizing control*, durante o processo de escolha das variáveis a serem controladas.

Para ilustrar o conceito da perda, é introduzida a Figura 2.3. O gráfico mostra a variação do custo de operação em relação à presença de um determinado distúrbio no processo. Normalmente, a unidade é projetada para o ponto de custo

mínimo, ou seja, o valor nominal da variável denominada de distúrbio (d^*). Logo, sempre que esta variável, que não é controlada, tem uma alteração em seu valor, o processo deixa de operar em seu ponto ótimo.

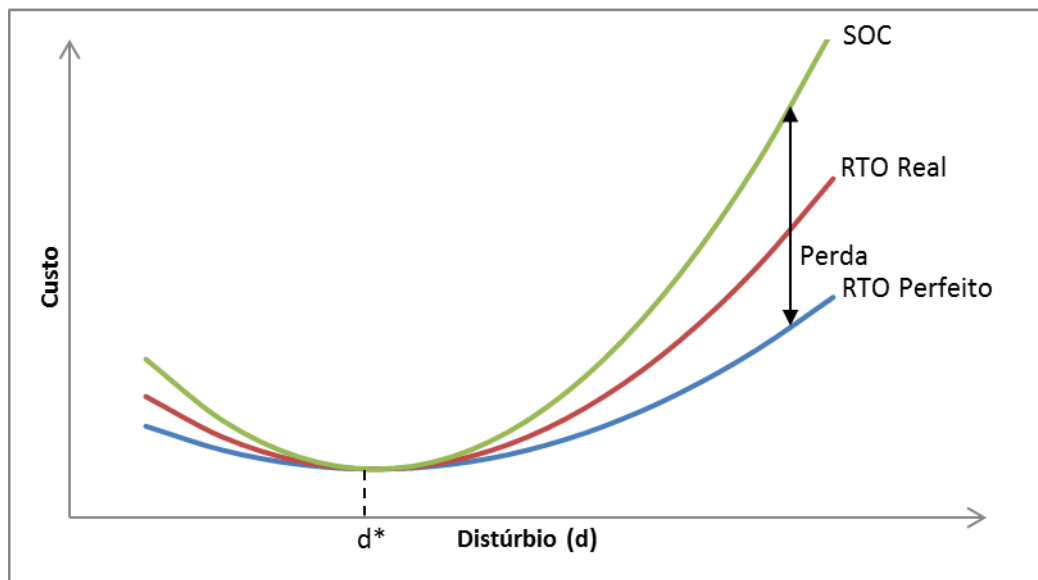


Figura 2.3: Gráfico ilustrativo da perda devido a um distúrbio no processo. (Adaptado de Skogestad, 2000a; b).

Se houvesse um RTO que, a cada variação da variável distúrbio, imediatamente realizasse uma otimização do processo, levando-o para o melhor ponto de operação, o custo operacional poderia ser representado pela curva inferior do gráfico anterior, denominada de RTO Perfeito. Como as metodologias de RTO reais também possuem perdas, somente é possível operar na parte superior da curva do RTO Perfeito; logo, uma segunda curva pode ser traçada para o RTO Real. Teoricamente, sem a re-otimização da unidade, haveria uma perda maior que a do RTO Real, representada pela curva SOC; porém, em função da escolha da variável controlada, a curva do SOC poderia estar acima ou abaixo da curva do RTO Real. Logo, para o caso estático, sem considerar os períodos transientes, o limite da otimização é sempre a curva do RTO Perfeito.

Continuando a análise da Figura 2.3, pode ser visto que o ponto de operação utilizado para o SOC é a condição nominal de operação. Assim, os valores das variáveis controladas escolhidas são mantidos na condição de projeto durante toda a região do distúrbio. Embora essa consideração esteja sendo utilizada em na maioria dos trabalhos propostos até aqui (Skogestad, 2000a; b; Halvorsen *et al.*, 2003;

Larsson *et al.*, 2003; Alstad e Skogestad, 2007; Kariwala, 2007), seria possível utilizar os *setpoints* como graus de liberdade do problema de otimização (Skogestad, 2000a). No trabalho de Govatsmark e Skogestad (2005) há a utilização de *setpoints* fora do ponto nominal, com a introdução de um *backoff* nas variáveis; porém, apenas para a segurança do processo e não para fins de otimização econômica.

Considerando que o objetivo da otimização é a redução da perda, na etapa de projeto do SOC, é importante definir como esta variável pode ser calculada. Para isso, duas formas de cálculo vêm sendo utilizadas:

- Perda máxima: que corresponde ao maior valor da perda em toda a região do distúrbio, ou seja, a máxima diferença entre a curva do RTO Perfeito e a do método de otimização utilizado. A equação (2.2) mostra como pode ser calculada a perda máxima (Kariwala *et al.*, 2008):

$$L_{max} = \max_{d \in D} \max_{n \in N} (J_{opt}(d) - J_c(d, n)) \quad (2.2)$$

Onde:

L_{max} = perda máxima;

D = região de valores admitidos para o distúrbio;

n = valor do erro de implementação;

N = região de valores permitidos para o erro de implementação;

J_{opt} = valor ótimo do custo de operação para um determinado distúrbio;

J_c = custo de operação utilizando uma estratégia de otimização, para um determinado valor de distúrbio e erro de implementação.

- Perda média: que corresponde a média da diferença entre a curva do RTO Perfeito e a curva da técnica de otimização, ao longo da região de distúrbio. Esta perda pode ser calculada pela seguinte expressão (Kariwala *et al.*, 2008):

$$L_{avg} = \frac{1}{|D||N|} \int_D \int_N (J_{opt}(d) - J_c(d, n)) dn dd \quad (2.3)$$

Onde:

L_{avg} = perda média ao longo da região de d e n ;

A partir da definição da perda, é possível resumir o problema de *self-optimizing control* como um problema de otimização inteira, onde se busca o conjunto de variáveis que minimizam a perda quando controladas. Assim, tem-se um conjunto de variáveis medidas $Y = \{Y_1, Y_2, \dots, Y_k\}$, onde k representa o número de variáveis disponíveis para serem controladas; e o conjunto de graus de liberdade $U = \{U_1, U_2, \dots, U_m\}$, onde m representa o número de graus de liberdade disponíveis para otimização. O conjunto total de variáveis candidatas a controladas consiste na união entre esses dois conjuntos $y_i = \{Y \cup U\}$, pois as variáveis manipuladas também podem ser selecionadas como controladas. Uma variável auxiliar booleana y_b ($y_b = \{0,1\}^{k+m}$) é utilizada para definir quais variáveis são mantidas com *setpoints* constantes durante o procedimento de otimização. Logo, o problema de otimização pode ser representado por meio da seguinte expressão:

$$\left\{ \begin{array}{l} \min_{y_b} \text{Loss}(y_b, u, x, d) \\ \text{s. t.} \\ f(u, x, d) = 0 \\ g(u, x, d) \leq 0 \\ y_b \in \{0,1\}^{k+m} \\ y_i = y_{i,set}, \text{ if } y_b(i) = 1; i = 1, 2, \dots, k + m \\ \sum_{i=1}^{k+m} y_b(i) = m \\ d \in \mathcal{D}^{nd} \end{array} \right. \quad (2.4)$$

Onde:

Loss = representa a perda que se deseja minimizar, ou seja, pode-se minimizar tanto a perda média quanto a perda máxima, ou alguma outra formulação;

y_b = variável binária que indica se a variável Y_k está sendo controlada;

k = número de variáveis medidas;

y_i = valores das variáveis candidatas a controladas;

$y_{i,set}$ = *setpoint* da variável controlada;

m = número de graus de liberdade disponíveis para otimização;

nd = número de distúrbios.

A equação (2.4) é uma forma de representar o problema de *self-optimizing control*, onde se busca minimizar a perda por meio da mudança nas variáveis controladas do processo. Para resolver este problema e definir quais variáveis devem ser controladas, alguns métodos foram propostos ao longo dos anos. A seguir são apresentadas as principais metodologias para a escolha das variáveis.

2.2.1 Busca Exaustiva (Skogestad, 2000a)

Este método consiste em calcular a perda para todas as possíveis combinações de variáveis controladas e escolher o conjunto que apresente a menor perda. Com isso, tem-se a garantia de que o resultado é o conjunto ótimo para o problema de otimização definido pela equação (2.4). O procedimento proposto para resolvê-lo segue as etapas a seguir:

- 1) Análise dos graus de liberdade: determinar o número de graus de liberdade disponíveis para otimização.
- 2) Determinação da função custo e das restrições: determinar a função custo que representa a operação e quais restrições o processo possui.
- 3) Identificar os distúrbios mais importantes: determinar quais são os principais distúrbios do processo, identificando as variáveis e seus valores máximos e mínimos. Nesta etapa devem ser considerados os erros de modelagem, as variáveis do processo que não podem ser controladas e os erros de implementação do sistema de controle.
- 4) Otimização: calcular o ponto ótimo econômico do processo para a condição nominal de projeto. A partir disto, determinar os valores de todas as variáveis neste ponto de operação.
- 5) Identificar as candidatas a variáveis controladas: as restrições ativas do problema de otimização da etapa anterior devem ser controladas, reduzindo o

número de graus de liberdade disponíveis. As demais variáveis devem ser selecionadas de acordo com os critérios qualitativos propostos anteriormente.

6) Cálculo da perda: para cada variável controlada definida no passo anterior (ou conjunto de variáveis), calcular a perda ao longo da região do distúrbio. Nesta etapa pode ser utilizada a perda máxima ou a perda média.

7) Análise e seleção: nesta etapa deve-se analisar os conjuntos viáveis de variáveis que apresentaram uma perda aceitável e realizar a escolha das variáveis que serão controladas, considerando não somente a perda, mas também, a facilidade de controle e a dinâmica da variável.

Este método possui como vantagem que sempre se chegará ao conjunto ótimo de CVs, pois, todas as possibilidades são analisadas. Porém, por esse mesmo motivo, pode não ser possível computacionalmente avaliar todas as possibilidades quando o processo tiver um grande número de candidatas, visto sua característica fatorial. Logo, para unidades industriais complexas, com um grande número de variáveis e de graus de liberdade, a metodologia pode requerer um grande tempo de simulação.

2.2.2 Método Exato Local (Halvorsen et al., 2003)

Assim como o método anterior, este também utiliza o valor das variáveis no seu ponto ótimo nominal do processo e considera que todas as restrições ativas são controladas. O método consiste em aproximar o cálculo da perda máxima do processo a partir da linearização do modelo do processo e a expansão da função perda em série de Taylor de segunda ordem. Para apresentar o método, deve-se inicialmente definir algumas variáveis:

$$y = f_y(u, d) \quad (2.5)$$

Onde:

y = representa o valor das variáveis medidas;

f_y = representa o modelo do processo, com a eliminação dos estados, que permite calcular o valor das variáveis medidas a partir das variáveis manipuladas e dos distúrbios.

$$c = h(y) \quad (2.6)$$

Onde:

c = representa o valor das variáveis controladas;

h = representa uma combinação linear das variáveis medidas. Quando não se utilizam combinações entre as medições, $h=y$.

Substituindo a equação (2.5) na equação (2.6), obtemos:

$$c = f_c(u, d) \quad (2.7)$$

Onde:

f_c = representa uma função que calcula o valor da variável controlada a partir do valor das manipuladas e dos distúrbios.

Considerando que f_c seja inversível, é possível derivar uma relação inversa a partir da equação (2.7), obtendo:

$$u = f_c^{-1}(c, d) \quad (2.8)$$

O erro de *setpoint* é definido por:

$$v(d) = c_s - c_{opt}(d) \quad (2.9)$$

Onde:

v = erro devido à diferença entre o valor da variável controlada no ponto nominal e o seu valor ótimo para um determinado distúrbio d . Para o ponto nominal, $v = 0$;

c_s = *setpoint* da variável controlada, sendo utilizado o ponto ótimo para a condição de projeto;

c_{opt} = valor ótimo para a variável controlada quando há um distúrbio d no processo.

O sistema de controle possui erros de medição e de controle das variáveis controladas, apresentando uma diferença entre o *setpoint* desejado e o valor real obtido pela variável controlada. Esse erro será chamado de implementação, sendo definido por:

$$n = c - c_s \quad (2.10)$$

Onde c representa o valor real que o controlador mantém a variável controlada. Considerando que o método utiliza o ponto ótimo nominal como *setpoint* das variáveis controladas, ou seja, $c_s = c^*$; a equação pode ser representada por $n = c - c^*$.

A partir das equações (2.9) e (2.10) é possível calcular o erro total:

$$e_c = v(d) + n \quad (2.11)$$

Onde:

e_c = representa a soma dos erros de implementação e de *setpoint*.

Este método utiliza um modelo linearizado do processo na região em torno do ponto ótimo nominal (será utilizado “*” para representar que a variável está sendo avaliada no ponto ótimo nominal). Assim, a linearização da equação (2.7), resulta na seguinte expressão:

$$\Delta c = G\Delta u + G_d\Delta d \quad (2.12)$$

Onde:

$\Delta c = c - c^*$, ou seja, a diferença entre o valor da variável controlada e seu valor ótimo no ponto nominal;

$\Delta u = u - u^*$, ou seja, a diferença entre o valor da variável manipulada e seu valor ótimo no ponto nominal;

$\Delta d = d - d^*$, ou seja, a diferença entre o valor do distúrbio e seu valor nominal;

$G = \left(\frac{\partial f_c}{\partial u}\right)^{*T}$, ou seja, o modelo linearizado em relação a u , no ponto nominal;

$G_d = \left(\frac{\partial f_c}{\partial d}\right)^{*T}$, ou seja, o modelo linearizado em relação a d , no ponto nominal;

Após a linearização do modelo, é necessário realizar a aproximação por séries de Taylor da função custo na região do ponto ótimo nominal, considerando pequenas variações em u e d :

$$J(u, d) = J^* + J_u^{*T}(\Delta u) + J_d^{*T}(\Delta d) + \frac{1}{2}(\Delta u)^T J_{uu}^* (\Delta u) + \frac{1}{2}(\Delta d)^T J_{dd}^* (\Delta d) + (\Delta d)^T J_{du}^* (\Delta u) + \varphi^3 \quad (2.13)$$

Onde:

J = representa o custo da operação para um determinado valor de u e d ;

$J^* = J(u^*, d^*)$, representa o custo de operação no ponto ótimo nominal;

$J_u^* = \left(\frac{\partial J}{\partial u}\right)^*$, representa a derivada da função custo em relação a u , no ponto ótimo nominal;

$J_d^* = \left(\frac{\partial J}{\partial d}\right)^*$, representa a derivada da função custo em relação a d , no ponto ótimo nominal;

$J_{uu}^* = \left(\frac{\partial^2 J}{\partial u^2}\right)^*$, representa a derivada segunda da função custo em relação a u , no ponto ótimo nominal;

$J_{dd}^* = \left(\frac{\partial^2 J}{\partial d^2}\right)^*$, representa a derivada segunda da função custo em relação a d , no ponto ótimo nominal;

$J_{du}^* = \left(\frac{\partial^2 J}{\partial d \partial u}\right)^*$, representa a derivada em relação a d e u da função custo no ponto ótimo nominal;

ϕ^3 = os termos de ordem superior da expansão da função em séries de Taylor, os quais são desconsiderados.

Foi considerado que o ponto nominal é ótimo e que as variáveis nas restrições ativas são controladas; logo, a derivada da função custo em relação a u é nula neste ponto ($J_u^* = 0$). Esta mesma ideia é aplicada para derivar uma relação entre u_{opt} e d , ou seja, uma forma de calcular diretamente o valor ótimo da variável manipulada para cada valor de distúrbio. Para isso, é necessário aproximar a derivada de J em relação a u por uma expansão de primeira ordem:

$$J_u = J_u^* + J_{uu}^*(u - u^*) + J_{ud}^*(d - d^*) \quad (2.14)$$

Quando houver uma variação do distúrbio de d^* para d , e, se o novo valor de u for ótimo para d , então J_u deve ser nulo. Considerando, também, que J_u^* é nulo, chega-se a:

$$0 = J_{uu}^*[u_{opt}(d) - u_{opt}(d^*)] + J_{ud}^*(d - d^*) \quad (2.15)$$

Onde:

u_{opt} = valor ótimo das variáveis manipuladas para um determinado valor de distúrbio d .

Rearranjando os termos da equação (2.15), obtém-se uma expressão para a variação do ponto ótimo em relação ao distúrbio:

$$\Delta u_{opt} = -J_{uu}^{*-1} J_{ud}^* (\Delta d) \quad (2.16)$$

Utilizando as equações (2.9), (2.12) e (2.16), pode-se também expressar o erro de *setpoint* em função do distúrbio:

$$v(d) = (G J_{uu}^{*-1} J_{ud}^* - G_d) \Delta d \quad (2.17)$$

A próxima etapa do método é a expansão em série de Taylor de segunda ordem da função custo em torno do ponto ótimo $u_{opt}(d)$, ou seja, a expansão é realizada ao longo da curva e, não mais, no ponto ótimo nominal. Assim, a expansão não é mais realizada em relação a d , visto que para cada valor de d , há uma expansão diferente.

$$J(u, d) = J[u_{opt}(d), d] + J_u^T [u - u_{opt}(d)] + \frac{1}{2} [u - u_{opt}(d)]^T J_{uu} [u - u_{opt}(d)] + \varphi^3 \quad (2.18)$$

Como a expansão é realizada ao longo de pontos ótimos, J_u é sempre nulo. Por outro lado, matriz hessiana J_{uu} deixa de possuir valores fixos, sendo calculada em função de d . Para simplificar o método é considerado que a variação de d é pequena, e a matriz é aproximada por J_{uu}^* .

O próximo passo é o cálculo da perda, no qual é utilizada a seguinte expressão:

$$L(u, d) = J(u, d) - J(u_{opt}(d), d) \quad (2.19)$$

Substituindo a equação (2.18) na equação (2.19), obtêm-se que:

$$L(u, d) = \frac{1}{2} [u - u_{opt}(d)]^T J_{uu} [u - u_{opt}(d)] \quad (2.20)$$

A partir da equação (2.12), para cada distúrbio d :

$$c - c_{opt}(d) = G[u - u_{opt}(d)] \quad (2.21)$$

Logo, pode-se definir uma nova variável desvio em relação a u , utilizando as equações (2.11), (2.17) e (2.21):

$$e_u = u - u_{opt}(d) = G^{-1}[v(d) + n] \quad (2.22)$$

Substituindo a equação (2.17) na equação (2.22), e, considerando que os *setpoints* são nominalmente ótimos, chega-se a:

$$e_u = (J_{uu}^{-1} J_{ud}^* - G^{-1} G_d)(d - d^*) + G^{-1} n \quad (2.23)$$

Analisando as equações (2.20) e (2.23), chega-se a conclusão de que a perda pode ser expressa apenas em termos de d e n . Desta forma pode-se calculá-la por meio da seguinte expressão:

$$L_{max} = \frac{1}{2} \|z\|_2^2 \quad (2.24)$$

Onde:

$$z = J_{uu}^{1/2} [(J_{uu}^{-1} J_{ud}^* - G^{-1} G_d)(d - d^*) + G^{-1} n] \quad (2.25)$$

Com a expressão para a perda definida, é realizada a normalização da região do distúrbio e do erro de implementação, de modo que possuam módulo menor que 1. As expressões para d e n normalizados são apresentadas a seguir:

$$d - d^* = W_d d' \quad (2.26)$$

Onde:

W_d = representa a matriz de magnitude de cada distúrbio;

d' = representa o distúrbio normalizado.

$$n = W_n n^{y'} \quad (2.27)$$

Onde:

W_n = representa a matriz de magnitude do erro de implementação relacionado a cada variável;

$n^{y'}$ = representa o erro de implementação normalizado.

Considerando que os erros de medição e os distúrbios são, normalmente, independentes e que foi realizada uma normalização para que seus valores fossem inferiores a 1, pode-se avaliar a perda máxima do processo por meio da seguinte expressão:

$$\max_{\|f'\|_2 < 1} L = \frac{\bar{\sigma}(M)^2}{2} \quad (2.28)$$

Onde:

$f' = \begin{pmatrix} d' \\ n^{y'} \end{pmatrix}$, representando a região de distúrbio e de erro de implementação normalizados;

$\bar{\sigma}$ = representa o máximo valor singular;

$M = (M_d \ M_n)$, onde $M_d = J_{uu}^{1/2} (J_{uu}^{-1} J_{ud} - G^{-1} G_d) W_d$ e $M_n = J_{uu}^{1/2} G^{-1} W_d$.

Logo, a perda máxima, para um conjunto de distúrbios e erros de medição, está relacionada ao maior valor singular da matriz M . Como o objetivo do método é obter a menor perda máxima possível, isto pode ser realizado obtendo-se o menor valor para o máximo valor singular da matriz M .

O procedimento de análise das variáveis candidatas a controladas pode ser realizado seguindo o seguinte procedimento:

- 1) Definir a função objetivo e formular o problema de otimização da unidade.
- 2) Resolver o problema de otimização, de modo a obter o ponto ótimo nominal, e calcular as matrizes J_{uu} e J_{ud} .
- 3) Para cada conjunto de variáveis candidatas a serem controladas, obter o modelo linearizado a partir da equação (2.12).
- 4) Definir as incertezas e distúrbios, e calcular as matrizes W_d e W_n .
- 5) Para cada conjunto de variáveis controladas, calcular o máximo valor singular da matriz M .
- 6) O conjunto que apresentar o menor máximo valor singular também minimiza a perda máxima do processo.

A metodologia apresentada até aqui (método exato local) foi proposta por Halvorsen *et al.* (2003) utilizando como critério de escolha das variáveis controladas a pior perda que poderia ocorrer no processo. Contudo, Kariwala *et al.* (2008) derivaram novas expressões para o cálculo da perda, mostrando que a perda média do processo pode ser calculada pela seguinte expressão:

$$L_{avg} = \frac{1}{6(ny' + d')} \|[M_d \ M_n]\|_F^2 \quad (2.29)$$

Onde:

$\|\cdot\|_F$ = representa a norma de Frobenius do argumento.

O método exato local apresenta uma forma mais eficiente de se calcular a perda; porém, só é válido para a região próxima ao ponto nominal. Logo, não pode ser aplicado em processos onde os distúrbios são grandes, ou em que os erros de implementação e de medição não estejam bem definidos.

2.2.3 Método do Espaço Nulo (Alstad e Skogestad, 2007)

Outra opção para selecionar a melhor variável controlada do processo é a utilização da combinação entre as medições do processo. Uma possibilidade é utilizar uma combinação linear das variáveis medidas (Alstad e Skogestad, 2003). O método do espaço nulo é uma forma de calcular a matriz de correlação entre as variáveis de medição de modo a se obter uma variável controlada com boas características para o *self-optimizing control* (Alstad e Skogestad, 2007).

O método consiste em definir a variável controlada da seguinte forma:

$$c = Hy \quad (2.30)$$

Depois é necessário definir uma matriz de sensibilidade F , que relaciona a variação o ponto ótimo em relação ao distúrbio:

$$F = \frac{\partial y_{opt}}{\partial d} = \begin{bmatrix} \frac{\partial y_{opt 1}}{\partial d_1} & \dots & \frac{\partial y_{opt 1}}{\partial d_{n_d}} \\ \frac{\partial y_{opt n_y}}{\partial d_1} & \dots & \frac{\partial y_{opt n_y}}{\partial d_{n_d}} \end{bmatrix} \quad (2.31)$$

Onde:

y_{opt} = valor ótimo das variáveis medidas;

n_y = número de variáveis medidas;

n_d = número de distúrbios;

Para pequenas variações do distúrbio, pode-se calcular a variação do ponto ótimo com a seguinte expressão:

$$y_{opt}(d) - y_{opt}(d^*) = F (d - d^*) \quad (2.32)$$

Como a variável controlada é uma combinação linear das variáveis medidas, substituindo a equação (2.30) na equação (2.32), obtém-se:

$$c_{opt}(d) - c_{opt}(d^*) = HF (d - d^*) \quad (2.33)$$

Considerando que a ideia principal do *self-optimizing control* é manter a variável controlada em um valor fixo, o lado esquerdo da equação (2.33) deve ser zero. Para que esta igualdade seja verdadeira, ambos os lados vem possuir valor nulo; logo, como a variação do distúrbio d não pode ser controlada, a relação HF deve ser nula. Deste modo:

$$HF = 0 \quad (2.34)$$

Assim, a matriz H deve ser o espaço nulo à esquerda da matriz de sensibilidade F , de forma que a combinação linear das variáveis medidas apresente perda zero. Para isso, o número de variáveis medidas deve ser maior ou igual à soma do número de variáveis manipuladas com número de distúrbios.

Para a determinação da matriz F , três métodos foram sugeridos:

- 1) Utilizando o modelo não-linear do processo.
- 2) Numericamente, realizando pequenas perturbações na planta.
- 3) A partir das matrizes de ganhos estáticos e da expansão em séries de Taylor de segunda ordem da função custo, obtendo-se a seguinte equação:

$$F = -(GJ_{uu}^{-1}J_{ud} - G_d) \quad (2.35)$$

O método utiliza como ponto de linearização o ponto ótimo nominal do processo, considerando apenas pequenas variações das variáveis distúrbios. Com isso, este método funciona bem localmente; porém, dependendo do grau de não-linearidade do processo, ele pode levar a resultados equivocados. Outro ponto a ser considerado é que não há a definição de quais variáveis devem ser utilizadas para realizar a combinação linear, remetendo ao problema de seleção de variáveis.

O método original (Alstad e Skogestad, 2007) considera que os erros de medição e de implementação poderiam ser negligenciados; porém, em 2009, foi

proposta uma expansão do método de modo a contemplar esses erros no cálculo da matriz H (Alstad *et al.*, 2009).

2.2.4 Principais desafios das técnicas de SOC

Mesmo com todo o desenvolvimento ocorrido nas técnicas de SOC, algumas questões ainda necessitam de estudos, tais como:

2.2.4.1 Mudança das restrições ativas

Uma das considerações utilizadas nas metodologias de SOC é que as restrições ativas do problema de otimização devem ser controladas, reduzindo os graus de liberdade do sistema. Isto se deve principalmente ao fato de que, em sua essência, o SOC tenta buscar um conjunto de variáveis que mantém o gradiente da função objetivo do processo nulo, quando seus *setpoints* são mantidos constantes. Como a restrição ativa possui gradiente não nulo, ela é mantida controlada; desta forma ela funciona como uma especificação do modelo. Porém, há processos em que as restrições ativas sofrem alterações dependendo do valor do distúrbio, visto que para cada distúrbio há um conjunto de valores ótimos. Neste caso a maioria dos métodos se torna impreciso ou inválido, considerando a quebra de uma de suas premissas básicas. Uma das propostas para contornar este problema é utilizar uma expansão do método do espaço nulo com duas matrizes H (Manum e Skogestad, 2012). O método exige a utilização de mais uma camada de controle, tornando mais complexa a implementação e divergindo da ideia inicial do SOC que é a implementação simples em sistemas de controle existentes.

2.2.4.2 Distúrbios não previstos

Um dos principais problemas dos sistemas de controle baseados em SOC é que a escolha das CVs é realizada a partir da análise apenas dos distúrbios conhecidos do processo. Desta forma, o sistema de controle não é preparado para outros distúrbios não estudados, podendo fornecer uma perda acima da prevista. De modo a se conseguir controlar a perda gerada por distúrbios não previstos, algumas metodologias foram propostas utilizando o conceito de *NCO tracking* (Francois *et al.*, 2005). Seguindo essa linha, ambos os métodos podem ser utilizados em conjunto, de forma complementar, de modo que o SOC forneça uma resposta rápida aos

distúrbios previstos do processo e a camada de *NCO tracking* compense os distúrbios não previstos (Jaschke e Skogestad, 2011). Essa aplicação recai sobre os mesmos problemas do *NCO tracking*, onde se faz necessária a atuação na planta para estimar o gradiente da função lucro.

2.2.4.3 Análise de sistemas complexos com elevado número de variáveis

Uma das maiores dificuldades no processo de seleção de variáveis é sua característica combinatória, pois ao se aumentar o número de graus de liberdade e de medições disponíveis, o tamanho do problema a ser resolvido cresce drasticamente. Esse tipo de análise pode ser visto como um problema de otimização inteira, sendo que uma das formas propostas para solucioná-lo de forma mais eficiente é a aproximação do problema não-linear por um modelo quadrático. Desta forma é possível utilizar um algoritmo para programação quadrática inteira para encontrar os melhores conjuntos de variáveis (Yelchuru e Skogestad, 2012).

2.2.4.4 Utilização de combinações não-lineares como CVs

Outra aplicação da ideia do *NCO tracking* aliada ao *SOC* é baseada na construção da variável controlada a partir de relações não-lineares entre as variáveis medidas, de modo a se criar uma nova variável que represente as condições de otimalidade do processo. Assim, o valor das condições de otimalidade do processo devem ser medidas ou calculadas para a região do distúrbio. Deve ser criada uma equação que correlacione esses valores às variáveis medidas, de modo que a variável controlada seja calculada por essa equação (Ye *et al.*, 2013). Esse método permite o controle da derivada do processo em zero, diminuindo os problemas de se controlar uma derivada, já que não é realizado um cálculo de taxa, mas sim aproximado o seu valor por meio de medições, sem a necessidade de atuar na planta. Porém, essa aproximação só é válida quando as restrições ativas do problema de otimização da unidade não se alteram durante a campanha, pois nesse caso, o método recai sobre os mesmos problemas relacionados à mudança das restrições ativas.

2.2.5 Aplicações industriais

A aplicação da metodologia de *self-optimizing control* em unidades industriais ainda é pequena, embora possa ser aplicado em qualquer planta que possua um sistema de controle que permita a configuração de malhas em cascata. Porém, alguns trabalhos já foram publicados demonstrando os ganhos da metodologia e sua viabilidade de aplicação em processos de larga escala. Larsson *et al.* (2001) aplicaram as técnicas de SOC para o processo da Tennessee Eastman, onde demonstrou a viabilidade de utilização dos métodos para determinar um conjunto ótimo de variáveis controladas. O conjunto de CVs obtido não era óbvio para as características da unidade, gerando muitas resistências em relação a viabilidade de implementação. Porém, a partir da modelagem dinâmica da unidade, foi possível provar que a estrutura proposta era viável, e mantinha a perda do processo abaixo do limite especificado.

As técnicas de SOC também foram aplicadas a uma unidade de HDA (hidrodealkilação de tolueno), onde a estrutura obtida foi comparada com a de diversos estudos da literatura (Araujo *et al.*, 2007). A unidade foi modelada no simulador Aspen Plus, onde foram geradas as possíveis estruturas de controle com base no modelo linearizado do processo. A validação das estruturas foi realizada com a utilização do modelo não-linear para um conjunto de distúrbios individuais da unidade. Posteriormente, a viabilidade de implementação das estratégias de controle foi testada utilizando o modelo dinâmico da unidade, obtendo-se uma estrutura de controle robusta e com um bom desempenho dinâmico (Araujo *et al.*, 2007).

Outro exemplo de aplicação industrial foi apresentado por Sayalero *et al.* (2012), com a otimização do sistema de controle de uma planta de hidrodessulfurização de diesel. O objetivo principal do trabalho foi de reduzir o consumo de hidrogênio da unidade, o qual foi atingido a partir de uma estrutura de controle simples e de fácil implementação. Com base nos resultados obtidos, uma das sugestões dos autores foi a de aplicação das técnicas de SOC para toda a rede de hidrogênio da unidade, onde a utilização das estruturas baseadas na metodologia de SOC se mostraram mais vantajosas que a utilização de um RTO.

Com base nas aplicações industriais apresentadas, pode-se notar a viabilidade de aplicação da metodologia para o aumento da lucratividade de plantas químicas. O método ainda é pouco explorado no ramo industrial, sendo necessário o teste em unidades em operação de modo a comparar os resultados obtidos com os gerados em simuladores de processo. Devido ao seu baixo custo de implantação, é uma questão de tempo e de confiança da indústria que as estruturas de controle obtidas por meio das técnicas de SOC passem a ser empregadas nas indústrias em funcionamento.

Capítulo 3 - *Self-optimizing control* – Estudo da influência do ponto de operação nominal

A seleção das variáveis a serem controladas em plantas químicas é uma das principais decisões durante o projeto do sistema de controle. Na maioria das vezes, essa decisão é realizada com base em critérios operacionais, de forma a possibilitar um controle eficiente e suave da unidade. O objetivo primordial das camadas inferiores dos sistemas de automação industrial é a estabilidade da planta e sua operação segura, de modo que os objetivos econômicos da unidade são normalmente desconsiderados. Porém, a estrutura de controle, desde suas camadas mais baixas, pode trazer diversos benefícios econômicos para a unidade, podendo ser uma ferramenta para a otimização do lucro do processo, conforme mostrado por Morari *et al.*(1980). Com base neste conceito, foi proposto o conceito de *self-optimizing control*, onde se deseja encontrar o melhor conjunto de variáveis controladas que, quando mantidas com *setpoints* constantes para qualquer valor de distúrbio, minimizam a perda estacionária do processo (Skogestad, 2000a; b).

A perda pode ser vista como a distância entre o lucro ótimo teórico para um determinado distúrbio e o lucro obtido quando se utiliza uma ferramenta de otimização. Para avaliar um determinado conjunto de variáveis é necessário avaliar a perda para todos os valores de distúrbios possíveis para o processo. Desta forma, como critério de projeto do sistema de controle, podem ser utilizados diversos cálculos para a perda ao longo da região de distúrbio, sendo que os mais aplicados

são: a perda média para um determinado conjunto de distúrbios, perda máxima e a perda média calculada a partir de experimentos de Monte-Carlo (Skogestad, 2000a). Algumas expressões também foram derivadas para o cálculo local dessas perdas, tais como proposto por Halvorsen *et al.* (2003) para o cálculo da perda máxima e a expressão proposta por Kariwala *et al.* (2008) para o cálculo da perda média.

Tanto nos trabalhos que definiram o self-optimizing control (SOC) quanto nos diversos métodos desenvolvidos subsequentemente, o ponto de operação sempre é escolhido antes do procedimento de determinação das variáveis controladas, utilizando-se como *setpoints* o ponto ótimo nominal. Contudo, o conceito básico do SOC consiste em manter as CVs com *setpoints* constantes ao longo de toda a região de distúrbio e não apenas no ponto nominal. Logo, utilizar como *setpoints* das variáveis controladas o ponto ótimo nominal pode não ser a melhor escolha quando se avalia a perda para todos os possíveis valores dos distúrbios.

Para ilustrar a ideia por traz da mudança do ponto de operação sob o ponto de vista do SOC, será utilizado o gráfico esquemático da Figura 3.1. O gráfico representa o comportamento do lucro ao longo da região de distúrbio quando uma determinada variável controlada é mantida constante com diferentes valores de *setpoints* (SP1, SP2, SP3). Para o ponto nominal de operação (ponto d^*), há um valor ótimo da variável controlada, a qual maximiza o lucro operacional para o ponto nominal (SP1). Porém, se esta variável for mantida constante nesse valor, e o processo sofrer uma variação no valor do distúrbio, o lucro decai rapidamente, causando uma grande perda ao processo. Por outro lado, se outro valor de *setpoint* for escolhido, como por exemplo SP2 ou SP3, é possível minimizar a perda ao longo da região, mesmo que esses pontos não sejam nominalmente ótimos.

Sob o ponto de vista da perda operacional que ocorre ao longo dos diversos valores do distúrbio, a escolha ótima do ponto de operação pode ser ilustrada como uma curva mais suave que se mantém mais próxima da curva do RTO perfeito. Para exemplificar esse conceito será utilizado o gráfico da Figura 3.2, onde constata-se que a utilização do ponto nominal como *setpoint* minimiza a perda apenas localmente, sendo que a perda aumenta rapidamente à medida que o distúrbio se distancia do seu valor nominal. Por outro lado, a escolha de uma região operacional mais suave pode acarretar uma perda menor para uma região maior do distúrbio, mesmo gerando uma perda para o ponto de operação nominal.

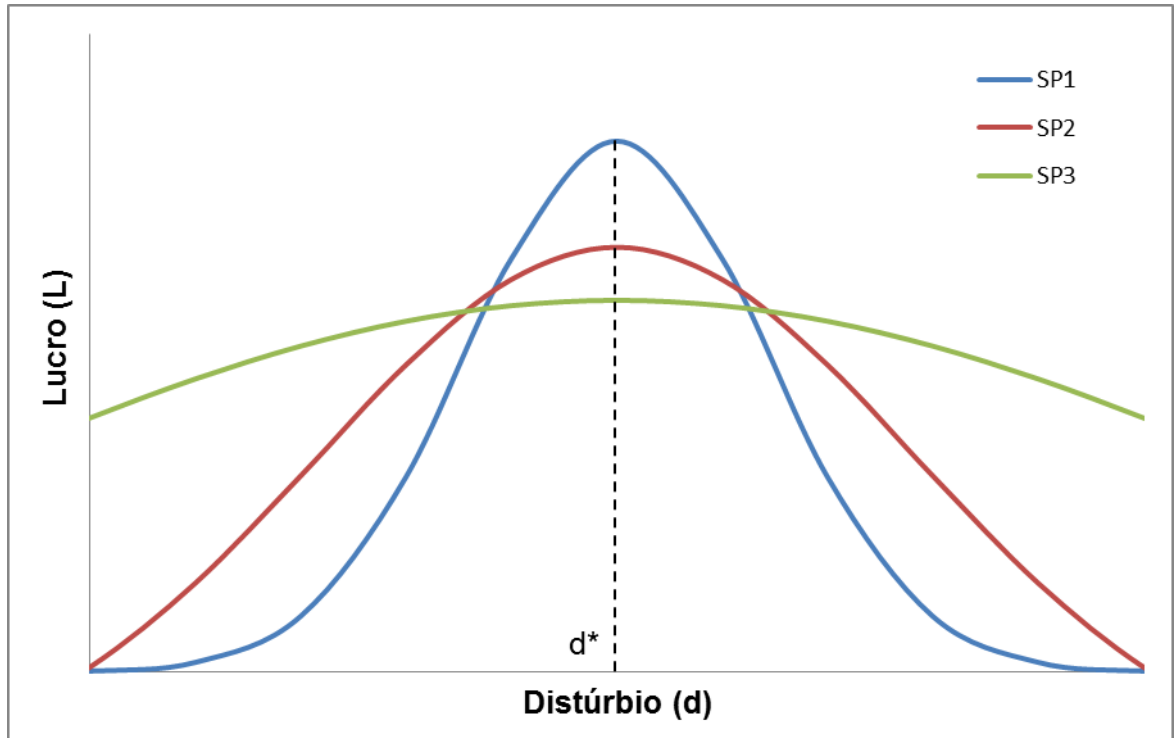


Figura 3.1: Comportamento do lucro para CV com *setpoints* diferentes.

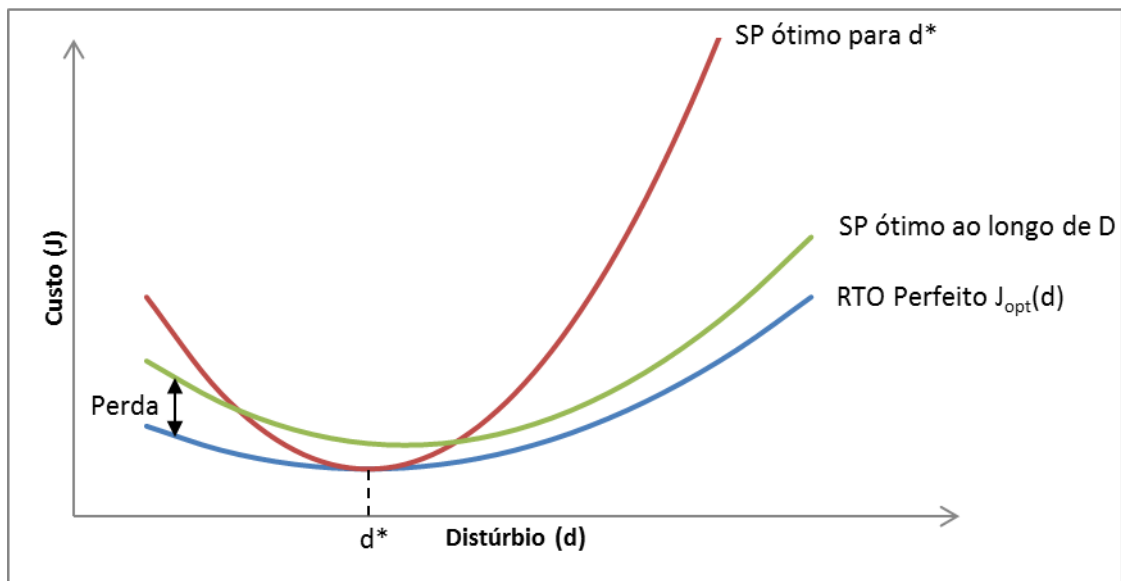


Figura 3.2: Perda imposta por diferentes *setpoints* (SP) utilizando SOC.

Com base na ideia de que o ponto ótimo nominal pode não ser o ponto ótimo para minimizar a perda ao longo de toda a região, é proposta uma modificação do método original do SOC para que o ponto de operação seja definido ao mesmo tempo em que são escolhidas as variáveis controladas. Assim, ao invés de realizar dois procedimentos de otimização separados, onde no primeiro se calcula o ponto

ótimo nominal e no segundo são definidas as variáveis controladas, é proposto um procedimento de otimização único, que será chamado de BOPSOC (*Best Operating Point for Self-Optimizing Control*). Em seu trabalho original, Skogestad (2000a) mencionou a possibilidade de utilizar o ponto de operação para uma otimização do sistema de controle; porém, a troca do ponto de operação só veio a ser discutida posteriormente para garantir que as restrições do processo fossem respeitadas para todos os distúrbios, mas sem objetivos de otimização econômica (Govatsmark e Skogestad, 2005).

3.1 BOPSOC – Best Operating Point for Self-Optimizing Control

A ideia básica do BOPSOC é definir o ponto de operação e o conjunto de variáveis controladas em um procedimento de otimização único. Para isso é proposta uma modificação na equação (2.4), de modo que as variáveis de decisão do procedimento de otimização sejam o conjunto de variáveis binárias y_b e o conjunto de *setpoints* y_{set} . Para ilustrar a mudança no procedimento são apresentados os diagramas de blocos dos dois algoritmos na Figura 3.3.

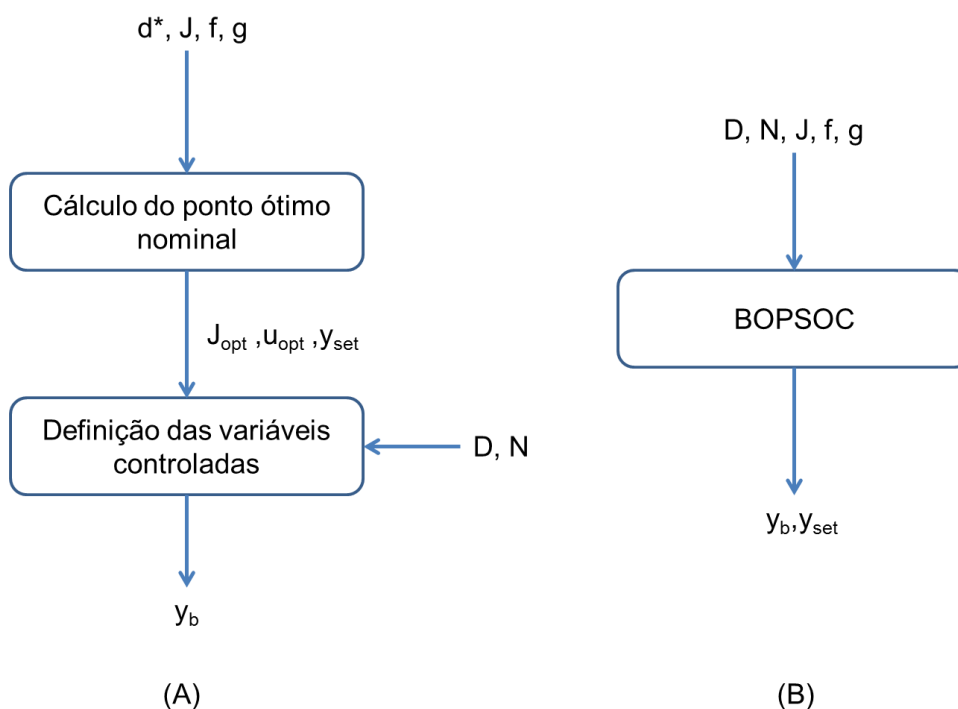


Figura 3.3: Diagrama de blocos dos algoritmos de (A) SOC e (B) BOPSOC.

Onde:

d^* = valor nominal do distúrbio;

J = função custo do problema de otimização;

f = equações de igualdade que compõe o modelo estático do processo;

g = equações de desigualdade que compõem as restrições do processo;

J_{opt} = valor da função custo no ponto ótimo nominal;

u_{opt} = valor ótimo das variáveis manipuladas no ponto ótimo nominal;

y_{set} = valor das variáveis medidas utilizadas durante a escolha das CVs;

D = valores permitidos para o distúrbio;

N = valores permitidos para os erros de implementação;

y_b = variável binária que indica se a variável está sendo controlada ($y_{bi} = 1$) ou não ($y_{bi} = 0$).

Como mostrado na Figura 3.3, o procedimento de SOC (Figura 3.3A) é executado em duas partes, onde primeiro há um problema de programação não-linear (NLP) a ser resolvido e, com os *setpoints* calculados para o valor de distúrbio nominal (d^*), é realizada a escolha das CVs. Por outro lado o BOPSOC (Figura 3.3B) analisa a região dos distúrbios, calculando simultaneamente os *setpoints* (y_{set}) e as CVs (y_b). Desta forma o novo problema de otimização pode ser representado como:

$$\left\{ \begin{array}{l} \min_{yb, y_{set}} \text{Loss}(yb, u, x, d) \\ \text{s. t.} \\ f(u, x, d) = 0 \\ g(u, x, d) \leq 0 \\ yb \in \{0,1\}^{k+m} \\ y_i = y_{i,set}, \text{ if } yb(i) = 1; i = 1, 2, \dots, k + m \\ \sum_{i=1}^{k+m} yb_i = m \\ d \in \mathcal{D}^{nd} \end{array} \right. \quad (3.1)$$

Onde:

Loss = representa a perda do processo utilizada durante o procedimento de otimização, podendo ser calculada pela equação (2.3) para a perda média ou pela equação (2.2) para a perda máxima. É importante salientar que outras formulações para o cálculo da perda também poderiam ser utilizadas.

A principal mudança em relação à formulação anterior é que, enquanto y_{set} está previamente definido na metodologia clássica (representada pela equação (2.4)), ao ser utilizada a equação (3.1), os *setpoints* (y_{set}) fazem parte das variáveis de decisão do problema de otimização proposto. Desta forma, o problema original de programação inteira se transforma em um problema de programação não-linear inteira mista (MINLP), aumentando o grau de complexidade e os recursos computacionais necessários para resolvê-lo.

Uma importante consequência desta mudança é um aumento no número de conjuntos de CVs que podem manter *setpoints* constantes ao longo da região de distúrbio. Quando é utilizado o ponto de operação nominal, algumas variáveis são excluídas durante o processo de otimização por não ser viável mantê-las naquele *setpoint* para todos os distúrbios, por causa das restrições do processo. Porém, quando os valores dos *setpoints* não são mais definidos previamente e são analisados os melhores pontos de operação para cada conjunto de CVs, novos conjuntos de CVs surgem com diferentes pontos de operação.

Outra implicação da nova metodologia está relacionada às restrições ativas, onde as técnicas clássicas partem da ideia de que todas as restrições ativas no ponto de operação nominal devem ser mantidas controladas. Essa ideia é válida apenas quando a restrição se mantém ativa para todos os valores dos distúrbios.

Quando uma restrição está ativa apenas no ponto nominal e há mudança ao longo do distúrbio, essa premissa restringe o número de possíveis estruturas de controle diminuindo o número de graus de liberdade disponíveis. Como no BOPSOC o ponto de operação não é definido previamente, não é necessário restringir os graus de liberdade e todos os conjuntos de CVs estão disponíveis durante o procedimento de otimização, aumentando o número de possibilidades para minimização da perda. A mudança nas restrições ativas não afeta o sistema, pois o procedimento de otimização cobre todos os valores de distúrbios e todas as restrições devem ser respeitadas para toda a região.

Uma forma de simplificar esse problema de otimização consiste em utilizar as expressões simplificadas para o cálculo da perda, tais como as propostas por Halvorsen *et al.*(2003) e por Kariwala *et al.* (2008). Desta forma, o cálculo da perda é reduzido a apenas uma avaliação por ponto de operação testado, reduzindo significativamente o número de cálculos realizados. Porém, como essas expressões são válidas apenas localmente, é necessário validar, com o modelo não-linear do processo, os melhores conjuntos de CVs obtidos e seus *setpoints*, de modo a verificar a viabilidade de aplicação das estruturas.

3.2 Soluções Subótimas

A solução do MINLP representado pela equação (3.1) pode ser inviável computacionalmente para o caso de processos complexos, onde o número de variáveis é grande e a natureza combinatorial do problema inviabiliza uma solução ótima global. Deste modo são propostas duas formulações alternativas para relaxar o problema, de forma a serem calculados pontos de operações ótimos ao longo da região, com melhores resultados em relação ao ponto ótimo nominal. Em ambas, o problema de seleção das variáveis controladas (P1) é resolvido isoladamente do problema de seleção do ponto de operação (P2), e a mudança consiste na forma como P2 é resolvido. Assim, a perda do processo pode ser reduzida mantendo os problemas P1 e P2 com a mesma dimensão que a formulação original, sendo muito mais simples computacionalmente que o método BOPSOC. Porém, os resultados obtidos são inferiores ao método BOPSOC, consistindo, pois, em uma solução intermediária entre a metodologia clássica e o método proposto.

A primeira solução simplificada consiste em alterar o ponto de operação antes da definição das variáveis controladas. Ao invés de usar o ponto ótimo para o distúrbio nominal do processo, calculado pela equação (2.1), é proposta a busca por uma condição operacional que minimize a perda ao longo da região do distúrbio. Isto resulta em uma modificação do problema inicial definido pela equação (2.1), utilizando a perda como nova função objetivo. Com essa modificação, é esperado um melhor resultado do conjunto de CVs devido a otimização contemplar toda a faixa de distúrbios.

Esse novo ponto de operação pode ser calculado por problema de otimização, onde as variáveis manipuladas disponíveis para otimização $U = \{U_1, U_2, \dots, U_m\}$ devem ser otimizadas de modo que possuam valores $u = \{u_1, u_2, \dots, u_m\}$ que minimizem a perda, respeitando as restrições do processo. Deste modo, esse ponto pode ser calculado pela equação (3.2) para a perda máxima e pela equação (3.3) para a perda média.

$$\begin{cases} \min_u \left[\max_{d \in D} \max_{n \in N} (J_{opt}(d) - J(u, d, n)) \right] \\ f(u, x, d) = 0 \\ g(u, x, d) \leq 0 \end{cases} \quad (3.2)$$

$$\begin{cases} \min_u \left[\frac{1}{|D||N|} \int_D \int_N (J_{opt}(d) - J(u, d, n)) dn dd \right] \\ f(u, x, d) = 0 \\ g(u, x, d) \leq 0 \end{cases} \quad (3.3)$$

Com os resultados obtidos a partir das equações (3.2) ou (3.3), obtém-se um ponto de operação ótimo ao longo da região de distúrbio, cujos *setpoints* podem fornecer um melhor conjunto de CVs quando aplicados os métodos de SOC. É importante observar que nem sempre é possível encontrar um ponto de operação que seja válido para todos os valores dos distúrbios, visto que, ao manter as variáveis manipuladas fixas, as restrições do processo podem ser desrespeitadas.

A segunda solução simplificada consiste na alteração dos *setpoints* das CVs escolhidas pelo procedimento do SOC. Assim, após todas as variáveis controladas do processo estarem definidas, é proposta a execução de uma nova otimização ao

longo da região dos distúrbios, cujas variáveis de decisão são os *setpoints* das CVs. Desta forma, com as variáveis controladas já definidas, muda-se o ponto de operação de modo a se operar de forma mais suave em relação aos distúrbios da unidade, reduzindo a perda em relação à mudança do valor dos distúrbios. Para realizar a otimização dos *setpoints* pode ser utilizada a equação (3.4), onde neste caso a variável y_b , que representa o conjunto de variáveis controladas, deve ser previamente definido e mantido constante durante o procedimento de otimização.

$$\left\{ \begin{array}{l} \min_{y_{set}} Loss(y_b, u, x, d) \\ s. t. \\ f(u, x, d) = 0 \\ g(u, x, d) \leq 0 \\ y_i = y_{i,set}, \text{ if } y_b(i) = 1; i = 1, 2, \dots, k + m \\ d \in \mathcal{D}^{nd} \end{array} \right. \quad (3.4)$$

A principal diferença em relação ao método anterior está na ordem execução do procedimento de definição das variáveis, pois a primeira solução consiste em alterar o ponto de operação antes de ser resolvido o problema P1, por outro lado a segunda solução deve ser resolvida após o problema P1. De modo a ilustrar a diferença entre as propostas para soluções subótimas e os métodos já apresentados, é apresentado o diagrama de blocos dos dois algoritmos na Figura 3.4, onde a Figura 3.4A mostra o esquema de otimização antes da definição das CVs e a Figura 3.4B mostra o procedimento com a otimização dos *setpoints* das CVs escolhidas.

O cálculo do ponto ótimo ao longo da região pode ser realizado por meio da equação (3.2) ou (3.3), dependendo da perda que se deseja minimizar. Consequentemente, a definição das variáveis controladas deve ser realizado utilizando o procedimento da metodologia clássica, por meio da equação (2.4). Finalmente, para realizar a otimização dos *setpoints* das CVs já definidas, o qual é o último cálculo do procedimento da Figura 3.4B, deve ser utilizada a equação (3.4).

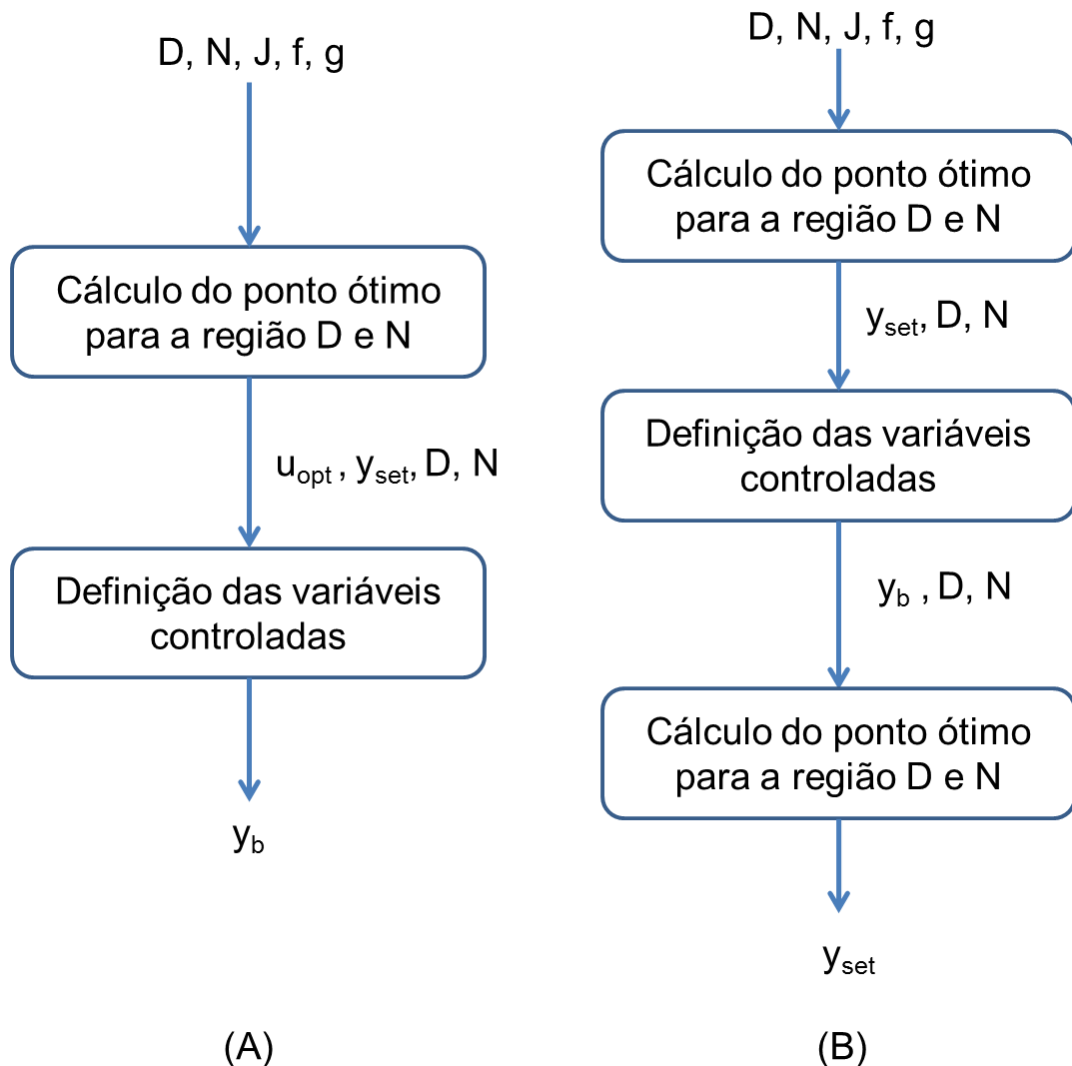
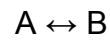


Figura 3.4: Algoritmos propostos de melhoria do SOC baseado na otimização do ponto operação ao longo da região do distúrbio antes (A) e depois (B) da escolha das variáveis controladas.

3.3 Estudo de Caso 1: Reator CSTR com reação reversível

De forma a demonstrar os ganhos da mudança do ponto de operação na escolha das variáveis controladas, será utilizado inicialmente um sistema reativo simples, composto de apenas um reator CSTR. Esse exemplo foi utilizado por Alstad (2005) para demonstrar os ganhos do método do espaço nulo, e também foi utilizado por Kariwala (2007) para validar seu método para obtenção de combinações lineares de variáveis que minimizam a perda do processo. Assim, serão utilizados os resultados obtidos nesses dois trabalhos para comparar com aqueles gerados pela mudança do ponto de operação do processo.

O processo é composto por um reator CSTR não isotérmico, cuja alimentação é composta pelos elementos A e B, ocorrendo a seguinte reação reversível:



O desenho esquemático do processo é apresentado a seguir na Figura 3.5.

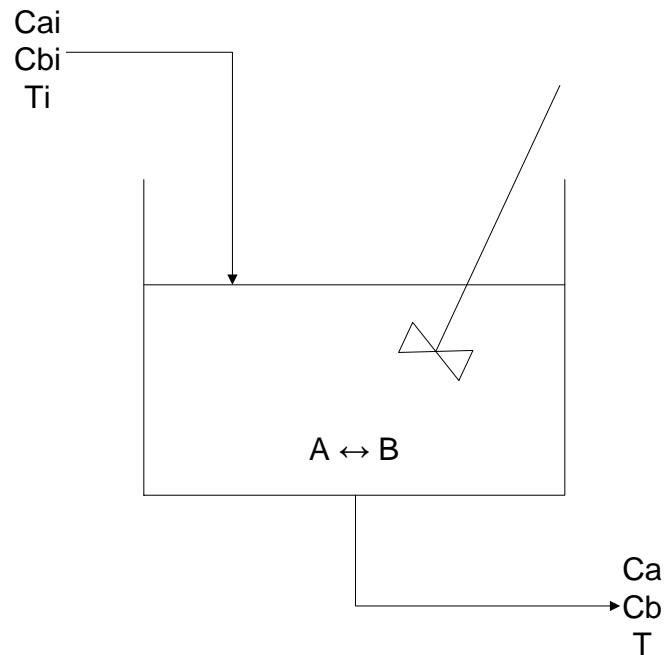


Figura 3.5: Desenho esquemático do reator (Alstad, 2005; Kariwala, 2007).

A taxa de reação e as constantes cinéticas podem ser calculadas pelas equações (3.5) a (3.7):

$$r = k_1 \cdot C_a - k_2 \cdot C_b \quad (3.5)$$

$$k_1 = 5000 \cdot \exp\left(-\frac{10000}{1,987 \cdot T}\right) \quad (3.6)$$

$$k_2 = 10^6 \cdot \exp\left(-\frac{15000}{1,987 \cdot T}\right) \quad (3.7)$$

Onde:

C_a = concentração molar do componente A (mol/L);

C_b = concentração molar do componente B (mol/L);

k_1 = constante cinética da reação na ordem direta (s^{-1});

k_2 = constante cinética da reação na ordem inversa (s^{-1});

r = taxa de reação (mol/(L.s));

T = temperatura (K).

O balanço de massa e de energia do sistema é modelado pelas equações (3.8) a (3.10):

$$\frac{dC_a}{dt} = \frac{1}{\tau} \cdot (C_{ai} - C_a) - r \quad (3.8)$$

$$\frac{dC_b}{dt} = \frac{1}{\tau} \cdot (C_{bi} - C_b) + r \quad (3.9)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{1}{\tau} \cdot (T_i - T) + 5r \quad (3.10)$$

Onde:

C_{ai} = concentração de A na entrada do reator (mol/L);

C_{bi} = concentração de B na entrada do reator (mol/L);

T_i = temperatura da corrente de entrada do reator (K);

τ = tempo de residência do reator (s);

O processo possui como grau de liberdade a temperatura de entrada (T_i) e os distúrbios são as concentrações de A e B na entrada do reator (C_{ai} e C_{bi}). A região de distúrbio é definida por $D = \{0,7 \leq C_{ai} \leq 1,3; 0 \leq C_{bi} \leq 0,3\}$, sendo que seus valores nominais são: $C_{ai} = 1.0$ mol/L e $C_{bi} = 0$ mol/L. Embora nos dois estudos realizados anteriormente com esse processo, tenham sido estudados os erros de

implementação, o impacto desse tipo de distúrbio não será analisado, sendo objeto para trabalhos futuros.

A função objetivo que se deseja minimizar é descrita pela equação (3.11).

$$J = -2,009 \cdot Cb + (0,001657 \cdot Ti)^2 \quad (3.11)$$

Onde J representa o lucro do processo na forma negativa (\$/s).

O processo foi modelado no software Matlab R2009a, e a partir da otimização da função objetivo para os valores nominais do distúrbio, foi obtido o ponto de operação ótimo nominal, apresentado a seguir na Tabela 3.1. É importante observar que o processo não possui restrições na entrada nem nas saídas.

Tabela 3.1: Ponto ótimo para o distúrbio nominal ($Ca_i = 1,0$ mol/L e $Cb_i = 0$ mol/L).

Variável	Valor ótimo nominal
Ca	0,498
Cb	0,502
T	426,8
Ti	424,3
J	-0,515

Como o processo possui apenas um grau de liberdade disponível para otimização, é possível escolher apenas uma variável controlada durante a aplicação das técnicas de SOC. Para isso foram utilizadas as três variáveis medidas e a variável de entrada como candidatas, totalizando 4 possibilidades. Para escolher a melhor variável foi realizado o cálculo da perda para cada variável utilizando 49 pontos uniformemente distribuídos ao longo da região de distúrbio, sendo que o ponto ótimo nominal foi utilizado como *setpoint* das variáveis. Assim, foi possível manter com *setpoints* fixos para todos os valores de distúrbio apenas as variáveis T , onde se obteve uma perda média de 0,0066 \$/s e uma perda máxima de 0,0328 \$/s, e Ti , onde se obteve uma perda média de 0,0060 \$/s e uma perda máxima de 0,0289 \$/s. Assim, se fossem analisadas apenas variáveis individuais e fosse utilizado o ponto ótimo nominal como *setpoint*, a variável com melhor resultado tanto

para a perda média quanto para a perda máxima seria a Ti , que é a próprio grau de liberdade do processo.

De modo a comparar os resultados obtidos com aqueles gerados pela utilização de combinações lineares de variáveis medidas, foi calculada a perda gerada no processo para as variáveis controladas obtidas por Kariwala (2007) e também pela aplicação do método do espaço nulo. As variáveis propostas por Kariwala (2007) e seus *sepoints* são apresentadas a seguir:

$$CV_{kw_2a} = 0,999475 \cdot Cb + 0,032399 \cdot Ti = 2,199446 \quad (3.12)$$

$$CV_{kw_2b} = -0,637221 \cdot T + 0,770681 \cdot Ti = 55,025686 \quad (3.13)$$

$$CV_{kw_3} = -0,761323 \cdot Ca + 0,648351 \cdot Cb + 0,00531 \cdot Ti = 2,199446 \quad (3.14)$$

$$CV_{kw_4} = -0,761515 \cdot Ca + 0,648127 \cdot Cb + 0,000113 \cdot T + 0,005187 \cdot Ti \quad (3.15) \\ = 2,195052$$

Onde:

CV_x = indica o nome da CV, em que será utilizada kw para indicar que ela foi proposta por Kariwala (2007), e o número subsequente indica a quantidade de variáveis medidas utilizadas na composição.

Como Alstad (2005) não descreveu as equações das variáveis utilizadas no seu trabalho, foi necessária a aplicação do método do espaço nulo para a obtenção das mesmas. Para isso foram utilizadas as expressões apresentadas por Kariwala (2007) para a linearização do modelo, assim como para a expansão em séries de Taylor da função custo. O modelo linearizado e as derivadas são apresentados a seguir:

$$y = \begin{bmatrix} -0,001169 \\ 0,001169 \\ 1,005843 \\ 1 \end{bmatrix} u + \begin{bmatrix} 0,494719 & 0,277996 \\ 0,505281 & 0,722004 \\ 2,526403 & -1,389978 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} d \quad (3.16)$$

$$J_{uu} = 0,000234$$

$$J_{ud} = [-0,00177 \quad 0,008734]$$

Onde:

y = representa as saídas do modelo, composto por Ca , Cb , T e Ti ;

u = representa a entrada do modelo, composto por Ti ;

d = representa os distúrbios do modelo, composto por Ca_i e Cb_i ;

J_{uu} = representa a aproximação em séries de Taylor da derivada segunda da função custo em relação a u ;

J_{ud} = representa a aproximação em séries de Taylor da derivada segunda da função custo em relação a u e d ;

Assim, a matriz de sensibilidade F foi calculada pela equação (2.35), sendo obtida a seguinte matriz F :

$$F = \begin{bmatrix} 0,4859 & 0,3216 \\ 0,5141 & 0,6784 \\ 10,1347 & -38,9329 \\ 7,5641 & -37,3248 \end{bmatrix}$$

Para a aplicação do método do espaço nulo é necessária a utilização de no mínimo três variáveis, pois uma das premissas do método é que o número de variáveis utilizadas deve ser superior ou igual a soma do número de distúrbios ao número de entradas. Como há quatro variáveis no processo, existem quatro combinações que podem ser obtidas por meio do método, onde a relação linear é calculada pelo espaço nulo da matriz F . As variáveis controladas obtidas e seu *setpoints* são apresentados a seguir:

$$CV_{en_{123}} = -0,7715 \cdot Ca + 0,6362 \cdot Cb + 0,0047 \cdot T = 1,9411 \quad (3.17)$$

$$CV_{en_{124}} = -0,7635 \cdot Ca + 0,6457 \cdot Cb + 0,0052 \cdot Ti = 2,1502 \quad (3.18)$$

$$CV_{en_{134}} = -0,9406 \cdot Ca + 0,2309 \cdot T - 0,2490 \cdot Ti = -7,5683 \quad (3.19)$$

$$CV_{en_{234}} = -0,9177 \cdot Cb + 0,2664 \cdot T - 0,2946 \cdot Ti = -11,7568 \quad (3.20)$$

Onde CV_x indica o nome da CV, em que será utilizado o sufixo *en* para indicar que ela foi obtida pelo método do espaço nulo, e a numeração subsequente indica as variáveis utilizadas na composição, sendo 1 para Ca , 2 para Cb , 3 para T e 4 para Ti .

Adicionalmente, foi realizada a otimização dos *setpoints* das variáveis controladas de modo a avaliar se seria possível reduzir a perda do processo através da modificação do ponto de operação, controlando variáveis individuais. A otimização foi realizada utilizando o cálculo da perda ao longo da região de distúrbio discretizada em 9 pontos uniformemente distribuídos, sendo que foi utilizada a perda média e a perda máxima como função objetivo. Foi utilizada a discretização em 9 pontos devido a ser o menor número de pontos pelos quais foi possível obter o comportamento da função objetivo ao longo da região de distúrbio a partir de uma análise visual do comportamento da curva. Os *setpoints* obtidos para cada variável do processo são apresentados na Tabela 3.2, para a perda média e na Tabela 3.3 para a perda máxima.

Tabela 3.2: *Setpoints* ótimos para minimizar a perda média.

CV	Setpoint	Perda Média (\$/h)
Cb	0,3565	0,3427
T	421,2	0,0043
Ti	418,8	0,0036

Tabela 3.3: *Setpoints* ótimos para minimizar a perda máxima.

CV	Setpoint	Perda Máxima (\$/h)
Cb	0,3565	0,8273
T	419,9	0,0131
Ti	417,5	0,0109

Cabe salientar que não foram apresentados resultados para a variável Ca devido a não ser possível encontrar um valor que pudesse ser mantido constante para todos os valores de distúrbio.

Para avaliar a perda gerada com todas os conjuntos de CVs apresentados foram utilizados 49 pontos uniformemente distribuídos ao longo da região do distúrbio, sendo que as perdas obtidas com cada um dos conjuntos são apresentadas na Tabela 3.4.

Tabela 3.4: Perdas calculadas para cada variável controlada.

CVs	Setpoint	Perda Máxima (\$/h)	Perda Média (\$/h)
T	426,8	0,0289	0,0060
Ti	424,3	0,0328	0,0066
CV _{kw_2a}	2,199	0,0225	0,0042
CV _{kw_2b}	55,02	0,0136	0,0039
CV _{kw_3}	2,199	0,0013	0,00019
CV _{kw_4}	2,195	0,0014	0,00019
CV _{en_123}	1,941	0,0014	0,00021
CV _{en_124}	2,150	0,0013	0,00019
CV _{en_134}	-7,568	*	*
CV _{en_234}	-11,76	0,0017	0,00021
Cb _{BOPSOC avg}	0,3565	0,8273	0,3751
Cb _{BOPSOC max}	0,3565	0,8273	0,3751
T _{BOPSOC avg}	421,2	0,0162	0,0028
T _{BOPSOC max}	419,9	0,0131	0,0030
Ti _{BOPSOC avg}	418,8	0,0137	0,0024
Ti _{BOPSOC max}	417,5	0,0109	0,0026

* Não foi possível manter a CV com setpoint constante para todos os valores de distúrbio estudados.

A partir dos resultados obtidos é possível observar que há duas consequências principais da mudança do ponto de operação: a primeira relacionada à redução da perda e a segunda relacionada ao aumento do número de variáveis que podem ser mantidas com valores constantes para toda a região do distúrbio. Analisando a redução da perda obtida pela otimização do ponto de operação, observa-se que foi possível reduzir a perda média do processo em 60% em relação à utilização das variáveis individuais com o ponto ótimo nominal (a menor perda média era de 0,0060 \$/s e foi reduzida para 0,0024 \$/s), e a perda máxima foi reduzida em 62,3% (a menor perda máxima era de 0,0289 \$/s e foi reduzida para 0,0109 \$/s). Além da redução da perda em relação às variáveis individuais, é possível verificar que os resultados obtidos com a mudança do ponto de operação

foram superiores aqueles gerados pela utilização de combinações lineares de duas variáveis, considerando as CVs propostas por Kariwala (2007).

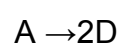
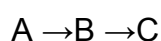
Outro resultado importante obtido pela mudança do ponto de operação foi o aumento do número de variáveis que podem ser mantidas com *setpoints* constantes. Isso é observado no exemplo pela variável C_b , a qual não pode ser mantida no seu valor ótimo nominal para todos os valores do distúrbio; porém, é possível encontrar valores que tornem isso viável. Nesse exemplo, o resultado obtido para C_b produz uma perda muito alta; porém, em outras situações a ampliação do número de conjuntos de CVs pode gerar estruturas economicamente melhores que aquelas possíveis com o ponto de operação nominal.

3.4 Estudo de Caso 2: Reator CSTR e coluna com reciclo

Para realizar o estudo comparativo das variáveis controladas obtidas pelo método clássico de SOC com as CVs obtidas utilizando os métodos propostos neste trabalho, será utilizado um segundo sistema composto por um reator CSTR e uma coluna de destilação, onde há o reciclo da corrente de topo da coluna, conforme desenho da Figura 3.6 (Trierweiler, 2012). Este processo é similar ao estudado por Govatsmark e Skogestad (2005); porém, há diferença na cinética da reação utilizada, além das variáveis disponíveis para otimização e os distúrbios considerados.

O processo possui quatro componentes (A, B, C e D), sendo que a alimentação da unidade é realizada no reator e é composta apenas pelo componente A. Em relação ao processo são realizadas as seguintes considerações:

- A reação no interior do reator (tipo CSTR) segue a cinética de Van de Vusse, utilizando modelo discutido por Trierweiler (1997):



- Toda a vazão do componente A que entra na coluna sai na corrente de topo, retornando para o reator.

- Os componentes C e D que entram na coluna saem completamente na corrente de fundo.
- É considerado que há um controle perfeito do volume do reator e da composição de A no topo da coluna, desconsiderando-se a dinâmica envolvida.
- O cálculo da energia requerida para a separação na coluna é realizado por meio de uma curva operacional empírica, conforme proposto por Müller (2012).

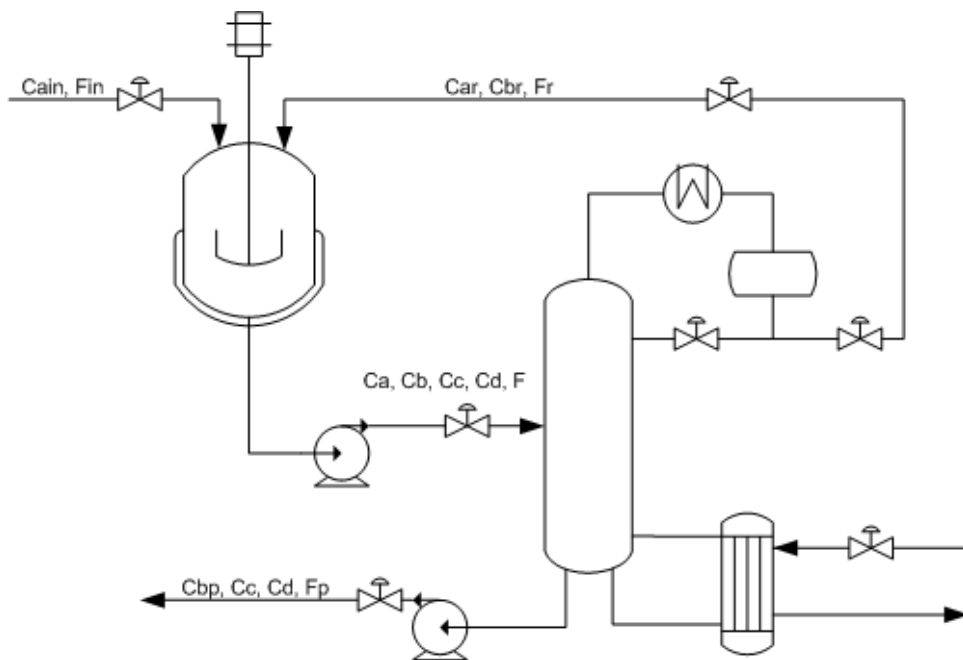


Figura 3.6: Desenho esquemático do processo.

O modelo do processo pode ser descrito pelas equações (3.21) a (3.32). De modo a simplificar o modelo dinâmico, foi considerado que a coluna segue uma dinâmica de primeira ordem, sendo modelada como um tanque agitado.

$$k1 = k2 = 1,2870 \cdot 10^{12} \cdot \exp\left(-\frac{9758,3}{T + 273,15}\right) \quad (3.21)$$

$$k3 = 4,5215 \cdot 10^9 \cdot \exp\left(-\frac{8560,0}{T + 273,15}\right) \quad (3.22)$$

$$Vr \cdot \frac{dCa}{dt} = Fin \cdot Cain + Fr \cdot Car - F \cdot Ca - Vr \cdot (k1 \cdot Ca + 2 \cdot k3 \cdot Ca^2) \quad (3.23)$$

$$Vr \cdot \frac{dCb}{dt} = Fr \cdot Cbr - F \cdot Cb - Vr \cdot (k2 \cdot Cb - k1 \cdot Ca^2) \quad (3.24)$$

$$Vr \cdot \frac{dCc}{dt} = -F \cdot Cc + Vr \cdot k2 \cdot Cb \quad (3.25)$$

$$Vr \cdot \frac{dCd}{dt} = -F \cdot Cd + Vr \cdot k3 \cdot Ca^2 \quad (3.26)$$

$$\left[\frac{0,1}{(1 - Ya)^{0,7}} \right] \cdot \frac{dCar}{dt} = \sqrt{Ya \cdot Ca \cdot (Ca + Cb + Cc + Cd)} - Car \quad (3.27)$$

$$\begin{aligned} \left[\frac{0,1}{(1 - Ya)^{0,7}} \right] \cdot \frac{dCbr}{dt} \\ = \frac{\left[(1 - Ya) \cdot \sqrt{Ya \cdot Ca \cdot (Ca + Cb + Cc + Cd)} \right]}{Ya} - Cbr \end{aligned} \quad (3.28)$$

$$(0,1) \frac{dFr}{dt} = F \cdot \frac{\sqrt{Ya \cdot Ca \cdot (Ca + Cb + Cc + Cd)}}{[Ya \cdot (Ca + Cb + Cc + Cd)]} - Fr \quad (3.29)$$

$$F = Fr + Fin \quad (3.30)$$

$$Za = Ca / (Ca + Cb + Cc + Cd) \quad (3.31)$$

$$Qr = F \cdot \left[0,141 + 0,448 \cdot Za \cdot (Ya - 1,09) + 1,679 \cdot \frac{10^{-5}}{1 - Ya} \right] \quad (3.32)$$

As variáveis do modelo, assim como suas unidades de medida, são descritas a seguir na Tabela 3.5.

O lucro do processo (L) está relacionado à produção dos componentes B e C, que são os produtos do processo. A produção do componente D é indesejada, gerando um custo adicional ao processo, e por isso, possui um valor negativo na função lucro. Os custos de produção estão relacionados à vazão de entrada, composta pelo componente A, e pela energia requerida pela coluna de destilação. Assim, o lucro do processo pode ser calculado pela equação (3.33), a qual será utilizada como função objetivo nos problemas de otimização, em sua forma negativa.

$$L = 3,53(F \cdot Cb - Fr \cdot Cbr) + 1,1 \cdot F \cdot Cc - 0,5 \cdot F \cdot Cd - 1,05 \cdot Fin - 10 \cdot Qr \quad (3.33)$$

Tabela 3.5: Variáveis do modelo do processo.

Variável	Descrição	Unidade
C_a	Concentração de A no reator	kmol/m ³
C_{ain}	Concentração de A na alimentação	kmol/m ³
C_{ar}	Concentração de A no reciclo	kmol/m ³
C_b	Concentração de B no reator	kmol/m ³
C_{bp}	Concentração de B no fundo da coluna	kmol/m ³
C_{br}	Concentração de B no reciclo	kmol/m ³
C_c	Concentração de C no reator	kmol/m ³
C_d	Concentração de D no reator	kmol/m ³
F	Vazão de saída do reator	kmol/h
F_{in}	Vazão de alimentação	kmol/h
F_p	Vazão molar de produto	kmol/h
F_r	Vazão de reciclo	kmol/h
k_1	Constante cinética da reação 1	h ⁻¹
k_2	Constante cinética da reação 2	h ⁻¹
k_3	Constante cinética da reação 3	L/kmol.h
Q_r	Calor trocado no reator	kJ/h
T	Temperatura do reator	°C
V_r	Volume do reator	m ³
Y_a	$C_{ar}/(C_{ar}+C_{br})$	-
Z_a	Fração molar de A que entra na coluna	-

Esse processo possui como principal distúrbio a temperatura do reator, cujo valor nominal é de 110 °C e pode variar de 90 °C a 130 °C. A concentração de entrada é considerada constante ($C_{ain} = 5,1$ kmol/m³) e os graus de liberdade disponíveis para otimização são: o volume do reator (V_r), a vazão de alimentação da coluna (F) e a fração molar do componente A no topo da coluna (Y_a). As restrições do processo são apresentadas na Tabela 3.6.

Tabela 3.6: Limites máximos e mínimos para os graus de liberdade do processo.

Variável	Valor mínimo	Valor máximo
V_r	0,5	5
F	3	30
Y_a	0	1

3.4.1 Resultados

A primeira etapa do procedimento de SOC é a determinação do ponto ótimo para o valor de distúrbio nominal. A partir da solução do problema de otimização

descrito pela equação (2.1), e utilizando a equação (3.33) em sua forma negativa, como função objetivo, foi obtido o ponto de operação ótimo nominal descrito na Tabela 3.7. O problema de otimização foi resolvido no software Matlab R2009a, sendo utilizada a função *fmincon*, com o algoritmo do ponto interior, para determinar o ponto ótimo.

Tabela 3.7: Ponto ótimo para o valor de distúrbio nominal ($d^* = T = 110$ °C).

Variável	Valor ótimo nominal
<i>Vr</i>	2,82
<i>F</i>	30
<i>Ya</i>	0,971
<i>Fin</i>	9,413
<i>Car</i>	1,843
<i>Cbr</i>	0,0570
<i>Fr</i>	20,59
<i>Ca</i>	1,265
<i>Cb</i>	0,668
<i>Cc</i>	0,702
<i>Cd</i>	0,135

A partir do ponto de operação nominal, verifica-se que o processo possui uma restrição ativa ($F = 30$ kmol/h), a qual deve ser mantida controlada nesse valor, de acordo com o método clássico. Logo, sobram dois graus de liberdade para realizar o procedimento de SOC. A segunda etapa do procedimento consiste em definir o conjunto de variáveis candidatas a controladas, sendo que para esse processo serão utilizadas as seguintes variáveis:

$$[Fin \ Car \ Cbr \ Fr \ Ca \ Cb \ Cc \ Cd \ Vr \ Ya]$$

Para definir o conjunto de variáveis controladas que minimize a perda, foi calculada a perda do processo, utilizando o modelo não-linear, para cinco valores discretos distribuídos uniformemente ao longo da região do distúrbio (90, 100, 110, 120 e 130 °C). Foram utilizado 5 pontos, pois foi o menor número de pontos que permitiu obter um comportamento da função objetivo do processo ao longo da região de distúrbio, a partir de uma análise visual do gráfico da função. Deste modo, foram analisadas todas as combinações possíveis das dez candidatas, combinadas duas a duas, totalizando 45 possibilidades. A partir do cálculo da perda máxima e da perda

média, foi obtido que o melhor conjunto de CVs para o processo é o próprio conjunto de graus de liberdade $\{Vr$ e $Ya\}$, considerando que a variável F também está sendo controlada, conforme discutido previamente. Esse conjunto leva aos menores valores tanto para a perda média quanto para a perda máxima, sendo que as perdas obtidas foram de:

$$L_{avg} = 3,33 \text{ \$/h e } L_{máx} = 10,9 \text{ \$/h}$$

Foi aplicado o método BOPSOC para definir o melhor conjunto de CVs e o melhor ponto de operação para minimização da perda média e da perda máxima. Também foram aplicados ao problema os procedimentos propostos na secção 3.2 para obter soluções subótimas, realizando a otimização ao longo da região de distúrbio (BOP) antes e depois da seleção das variáveis. Os melhores conjuntos de CVs obtidos com cada um dos métodos estão resumidas na Tabela 3.8, onde a primeira coluna indica o método e qual perda que foi utilizada no procedimento de otimização. As soluções subótimas estão representadas pelas siglas BOP→SOC, que indica que primeiro foi realizada a otimização ao longo da região do distúrbio para posterior definição das CVS; e SOC→BOP, que indica que os *setpoints* das CVs sofreram um novo processo de otimização.

Tabela 3.8: Comparação das CVs utilizando os diferentes métodos.

Método	CVs	Setpoints	Perda Máxima (\$/h)	Perda Média (\$/h)
SOC _{avg}	$\{F; Vr, Ya\}$	$\{30; 2,82; 0,971\}$	10,9	3,33
SOC _{max}	$\{F; Vr, Ya\}$	$\{30; 2,82; 0,971\}$	10,9	3,33
BOP→SOC _{avg}	$\{Fr, Vr, Ya\}$	$\{3,25; 0,500; 0,954\}$	5,12	1,80
BOP→SOC _{max}	$\{Fr, Vr, Ya\}$	$\{7,12; 0,500; 0,954\}$	3,34	2,02
SOC→BOP _{avg}	$\{Fr, Vr, Ya\}$	$\{4,14; 0,500; 0,957\}$	4,68	1,76
SOC→BOP _{max}	$\{Fr, Vr, Ya\}$	$\{7,20; 0,500; 0,954\}$	3,30	2,03
BOPSOC _{avg}	$\{Cbr; Fr; Ya\}$	$\{0,0536; 20,43; 0,972\}$	2,63	0,271
BOPSOC _{max}	$\{Car; Cd; F\}$	$\{1,78; 0,107; 25,3\}$	1,27	0,936

A partir dos valores da perda para os diferentes conjuntos de CVs encontrados, é possível visualizar o potencial que os métodos propostos possuem para reduzir a perda do processo. Os conjuntos obtidos a partir do procedimento BOPSOC reduziram a perda máxima de 10,9 \$/h para 1,27 \$/h (redução de 88,3%) e

a perda média de 3,33 \$/h para 0,271 \$/h (redução de 91,9%). As soluções subótimas também conseguiram melhorar a perda do processo, fornecendo uma perda intermediária entre a técnica de SOC clássica e o método BOPSOC proposto.

Outra importante decisão do processo de SOC é a definição da perda que será utilizada como critério de projeto do sistema de controle, visto que a perda máxima e a perda média podem fornecer estruturas diferentes, como exemplificado no estudo de caso. Essa decisão deve ser realizada com base na perda mais crítica para o processo, visto que essa decisão será utilizada para definir a função objetivo do procedimento de otimização. No exemplo apresentado, há um conjunto de CVs que minimiza a perda média e outro conjunto que é ótimo para a perda máxima, justificando a importância dessa decisão.

Para mostrar o comportamento da perda e do lucro do processo ao longo da região de distúrbio para as diferentes variáveis controladas, são apresentados os gráficos das Figuras 3.7 e 3.8. Na Figura 3.7 é mostrada a curva da perda para as diferentes estruturas obtidas, conforme a Tabela 3.8, utilizando como critério a perda máxima, e na Figura 3.8 é mostrado o comportamento do lucro, em sua forma negativa, para os mesmos conjuntos de CVs e com a adição da curva do RTO, que mostra o melhor valor do lucro para cada valor de distúrbio. Embora tenham sido utilizadas as estruturas obtidas para a perda máxima, as estruturas que otimizam a perda média possuem comportamento análogo.

As curvas apresentadas nas Figuras 3.7 e 3.8 corroboram a validade dos métodos propostos onde não é mais utilizado o ponto ótimo nominal durante o procedimento de SOC. O resultado é a obtenção de um conjunto de CVs que mantém o processo próximo do ponto ótimo em toda a região do distúrbio, ao invés de possuir perda nula para o distúrbio nominal. A principal razão para esse comportamento é a escolha de um ponto de operação menos sensível à variação da temperatura do reator, operando-se em um ponto ótimo mais suave.

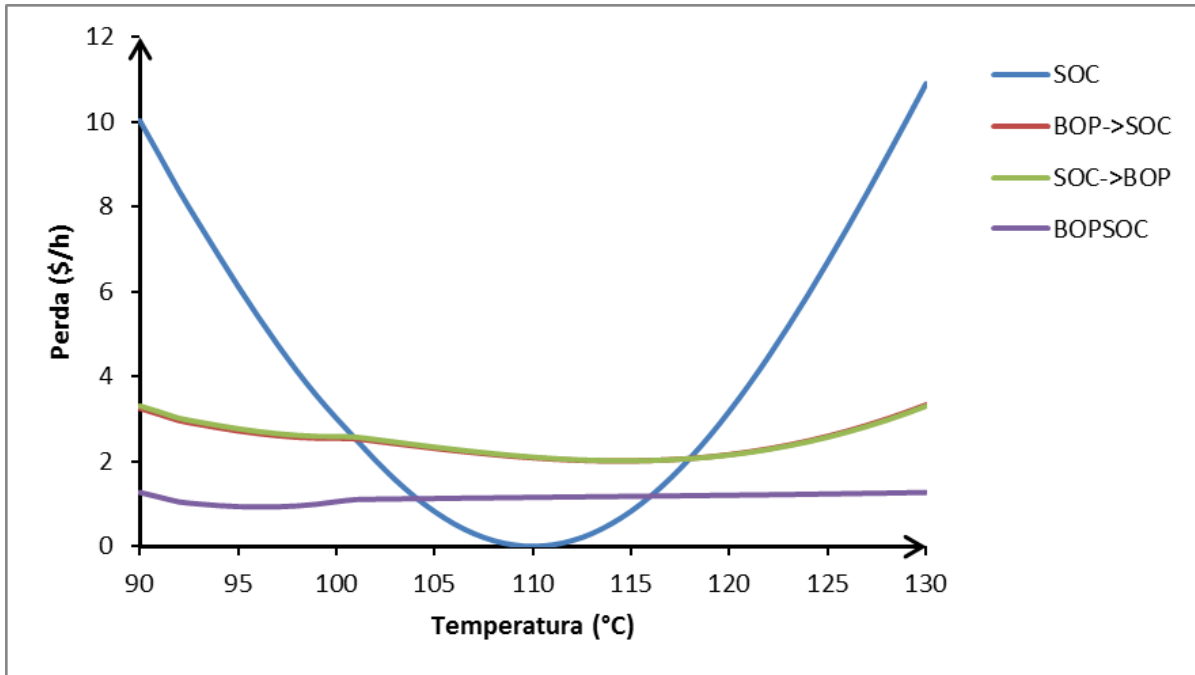


Figura 3.7: Perda ao longo da região de distúrbio para as diferentes variáveis controladas obtidas para a perda máxima.

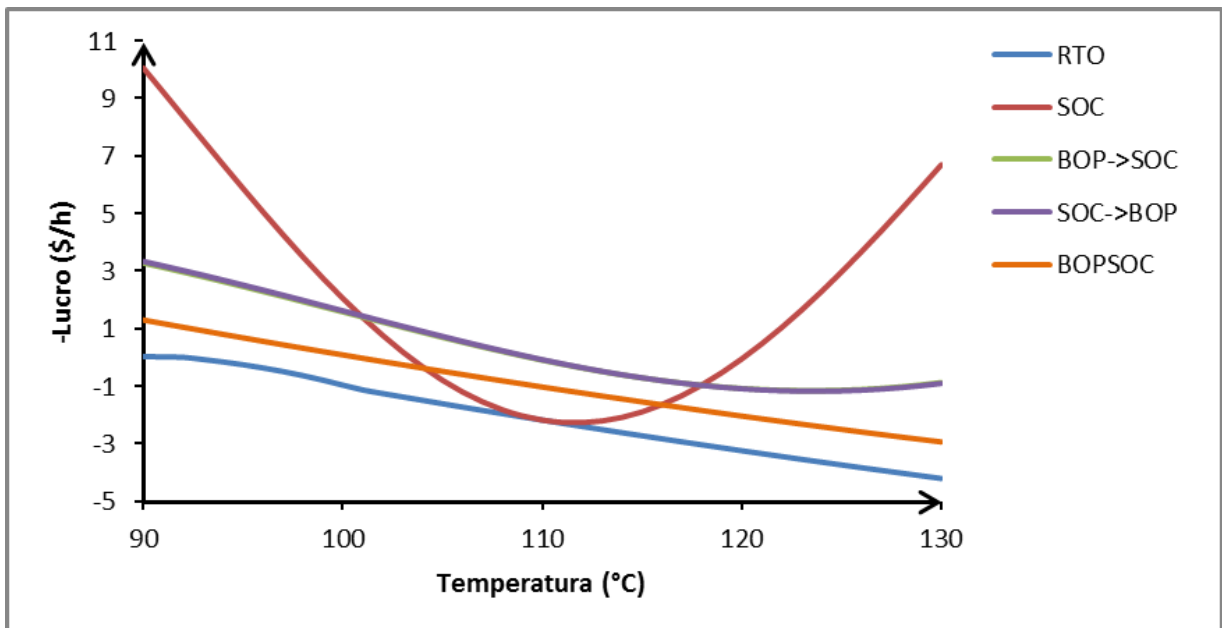


Figura 3.8: Comportamento do lucro ao longo da região de distúrbio para as diferentes variáveis controladas obtidas para a perda máxima e o valor ótimo.

Além de o método BOPSOC fornecer estruturas de controle com menores perdas, ele também se mostrou robusto frente a mudanças nas restrições ativas. Há duas mudanças nas restrições ativas ao longo da região de distúrbio, para temperaturas inferiores a 105 °C, nas variáveis F e V_r . É possível observar que

essas mudanças não geram grandes efeitos no comportamento da perda para o conjunto de CVs obtido para a perda máxima. Isso indica que a mudança do ponto de operação pode ser uma solução para os problemas das metodologias atuais de SOC ocasionadas pela mudança no conjunto de restrições ativas ao longo da região de distúrbio.

Outra consequência da mudança do ponto de operação é um aumento no número de CVs que podem ser mantidas com *setpoints* constantes para toda a região do distúrbio. Para o exemplo estudado, ao ser utilizado o ponto ótimo nominal, apenas 2 conjuntos de CVs possuíam solução viável em todos os valores do distúrbio; porém, quando foi aplicado o método BOPSOC, esse número aumentou para 32 conjuntos de CVs. Como em muitos casos o conjunto que fornece a menor perda pode ser difícil de ser utilizada devido a fatores operacionais da unidade ou dificuldades de medição, pode-se optar por conjuntos alternativos que apresentam perdas semelhantes. Para exemplificar são apresentados na Tabela 3.9 os quatro melhores conjuntos de CVs obtidos pelo BOPSOC para a perda máxima, e na Figura 3.9 é apresentado o comportamento da perda ao longo da região de distúrbio dos diferentes conjuntos de CVs. Essa comparação pode ser realizada para a perda média, com resultados similares.

Tabela 3.9: Lista de variáveis controladas obtidas pelo procedimento BOPSOC para a perda máxima.

Ordem	CVs	Setpoints	Perda Máxima (\$/h)
1	{Car; Cd; F}	{1,78; 0,107; 25,3}	1,27
2	{Fr, Ca, Cd}	{19,7; 1,39; 0,104}	1,30
3	{Cd, F, Ya}	{0,104; 28,9; 0,908}	2,42
4	{Car, Fr, Vr}	{1,74; 11,8; 0,699}	2,43

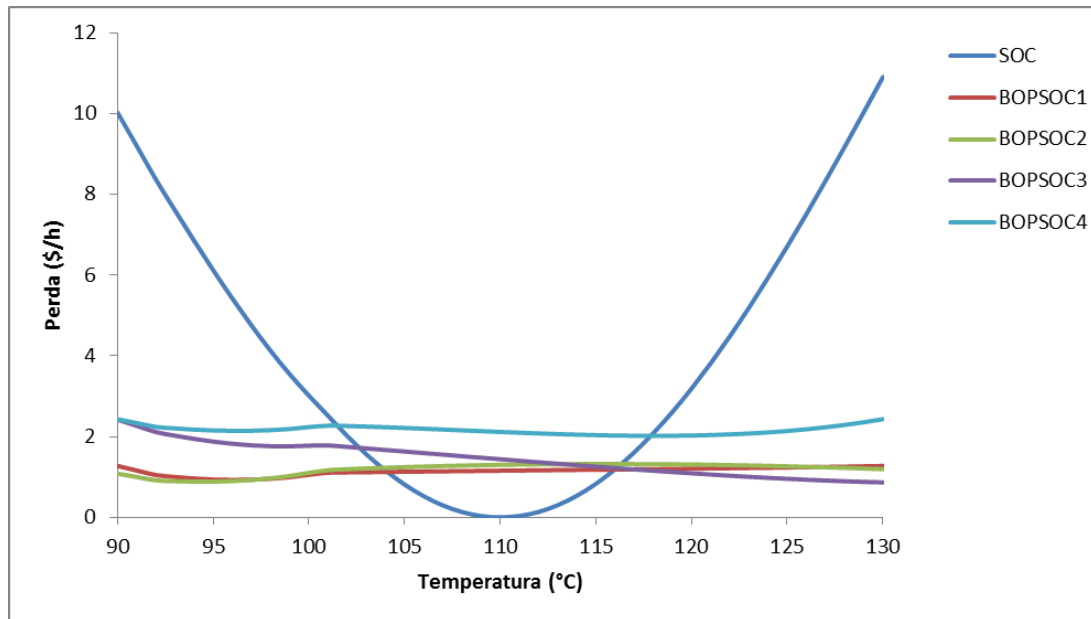


Figura 3.9: Comportamento da perda para diferentes variáveis controladas obtidas pelo BOPSOC para a perda máxima.

Como pode ser visto na Figura 3.9, mesmo quando é utilizado o terceiro ou o quarto melhor conjunto de CVs, os resultados são melhores que o método clássico. Assim, quando algumas CVs não estão mais disponíveis para serem controladas devido a problemas operacionais, o método BOPSOC fornece um grande número de possibilidades para serem utilizadas. Adicionalmente, como ocorreu no exemplo apresentado, a diferença nos valores da perda é pequeno entre as diferentes estruturas, possibilitando a escolha das CVs com perdas semelhantes baseado em critérios operacionais ao invés de econômicos.

Capítulo 4 - Estudo da influência das dinâmicas do distúrbio e da planta nas respostas do SOC e do RTO

A análise apenas do modelo estacionário do processo leva à ideia de que o máximo lucro que o SOC pode gerar é o valor ótimo para cada distúrbio, com operação com perda nula. Ou seja, o lucro máximo alcançado seria aquele obtido pelo sistema RTO. Porém, plantas reais não passam instantaneamente de um estado estacionário para outro, ocorrendo sempre um período de transição, o qual não é considerado pelo modelo estático. Como os sistemas RTO industrialmente implantados são configurados para a atuação apenas quando o processo se encontra em regime permanente (Engell, 2007), a operação no período transiente não é ótima. Tal política é determinada em função das ferramentas comerciais disponíveis e do custo associado para sua implantação e manutenção. Por outro lado, o SOC utiliza, em sua essência, um controlador *feedback*, mantendo o valor das CVs constantes, atuando tanto no estado estacionário quanto no transiente. Assim, dependendo da frequência com que ocorrem distúrbios e da dinâmica da planta envolvida, pode-se obter um maior retorno financeiro com a aplicação das técnicas de SOC.

Logo, o conceito de que a utilização de um sistema RTO é sempre vantajosa não é verdadeiro, pois sua implantação requer investimentos significativos na camada de controle, contemplando hardware, software e um modelo acurado do processo para a otimização em tempo real. Por outro lado, a implantação do SOC não requer grandes investimentos, considerando que a maioria das unidades químicas já possuem sistemas de controles do tipo *feedback*, fazendo com que o custo do projeto seja reduzido a apenas a análise e modelagem da unidade. Assim, é necessário verificar as características da unidade antes de se escolher um método de otimização, sendo que, neste trabalho, é sugerida a análise de três fatores principais para determinação da melhor metodologia: a frequência de ocorrência de distúrbios, a dinâmica de transição entre regimes permanentes e o grau de acurácia do modelo.

4.1 Metodologia

Ao ser analisada uma unidade industrial, é importante conhecer todas as variáveis de entrada que representam distúrbios que podem afetar a produção. Essas variáveis, que não podem ser controladas, têm influência no lucro obtido, sendo que para cada valor do distúrbio há um ponto ótimo de operação do sistema. Quando há uma mudança nessa variável, o processo passa por um período de transição, alterando o estado estacionário original. A frequência com que ocorrem essas mudanças depende das características do processo, assim como o tempo necessário para que um novo regime permanente seja estabelecido, assumindo um modelo estável em malha aberta.

Quando é utilizada uma ferramenta RTO típica comercial, é necessário que o processo esteja em regime permanente para que o software realize a otimização. Uma forma de verificar o comportamento do RTO é a partir de uma senóide quadrada da variável distúrbio, onde seu valor é alterado a cada passo de tempo, cujo formato utilizado neste trabalho é apresentado na Figura 4.1. A senóide é construída a partir do *range* dessa variável, cobrindo todos os possíveis valores, sendo que o passo de tempo pode ser interpretado como a frequência com que há uma mudança no distúrbio da planta. Logo, se for analisado o sistema para

diferentes frequências, pode-se estabelecer faixas em que um sistema de otimização é mais indicado e quando o mesmo não deve ser utilizado. Para exemplificar, pode-se pensar em um processo onde a variável distúrbio sofra grandes variações em um curto espaço de tempo, fazendo com que, tão logo o RTO consiga atuar, já ocorra uma mudança na planta e o processo saia novamente do ótimo. Nesta situação a análise qualitativa do problema já indica a não utilização da técnica; porém, nem sempre há uma conclusão simples.

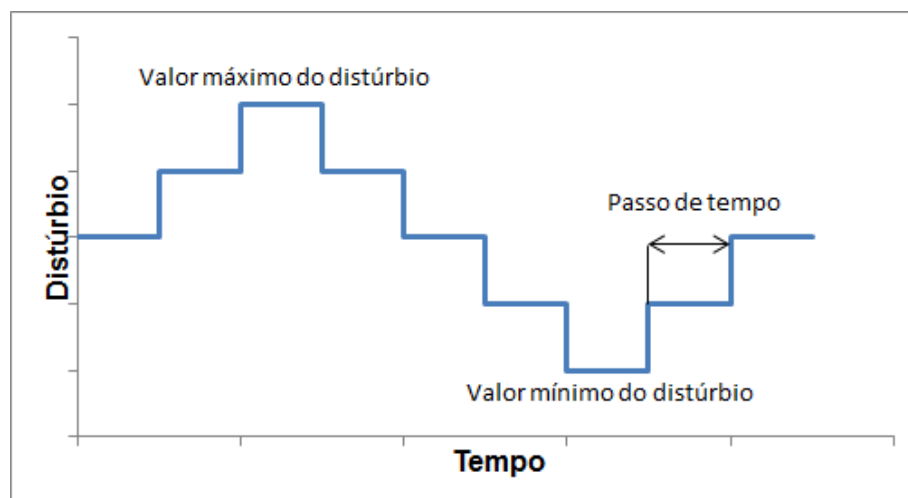


Figura 4.1: Modelo de onda quadrada utilizado na entrada.

Neste trabalho, a discretização do distúrbio em forma de senóide quadrada foi utilizada para comparar os métodos de otimização, realizando a variação do passo de tempo do distúrbio e calculando o lucro médio obtido para cada um. Para simular o comportamento dinâmico, foi utilizado o *simulink* do MatLab R2009a, utilizando três estruturas de controle diferentes: uma estrutura sem otimização onde os valores dos graus de liberdade são mantidos fixos no ponto ótimo nominal, uma em que os *setpoints* são atualizados por um RTO estático, e outra com o SOC. Com os resultados obtidos, é possível construir um gráfico da variação do lucro médio à medida que a frequência de mudança do distúrbio diminui, delimitando as zonas em que cada método fornece um maior lucro. Como esse resultado está diretamente relacionado com a constante de tempo do processo, é necessário realizar o estudo para diferentes dinâmicas, de modo a se obter uma relação entre a faixa de frequência de aplicação da técnica e a constante de tempo utilizada para representar a unidade.

Como ambas as metodologias dependem do modelo estático do processo, foi realizado o mesmo estudo em relação ao impacto do erro de modelagem no sistema de otimização. Para isso, foi alterada uma constante do modelo utilizado para simular a unidade, sendo analisado o impacto gerado nas técnicas de otimização quando essa constante possui um valor superior e inferior ao seu valor real.

4.2 Estudo de Caso

A avaliação proposta para as técnicas de otimização, com base no comportamento do distúrbio do processo, foi aplicada à planta apresentada na seção 3.4, a qual é composta por um reator CSTR e uma coluna de destilação com reciclo da corrente de topo. Para esta unidade, o distúrbio é a temperatura de do reator, a qual varia de 90°C a 130°C. Assim, foi realizada a discretização desta variável a cada 10°C, formando uma onda quadrada com valores de [110 120 130 120 110 100 90 100 110]°C.

Cada valor estacionário do distúrbio é mantido constante durante o passo de tempo. Assim, para um passo de tempo de 3 horas, o sistema permanece esse tempo na temperatura de 110°C, depois há um degrau para a temperatura de 120°C, que permanece inalterada pelas próximas 3 horas, e sucessivamente até ser finalizado o ciclo de 27 horas de operação. Essa análise foi realizada para passos de tempo de 2 a 200 horas, utilizando o sistema sem otimização, com um RTO e com SOC. Os passos utilizados foram distribuídos de forma não uniforme, sendo utilizados os seguintes valores: 2, 4, 6, 8, 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90, 100, 150 e 200 horas.

Embora um sistema RTO seja composto por várias ferramentas quando aplicado em nível industrial, neste estudo foi utilizado um sistema composto apenas por duas funções: uma que analisava o estado estacionário e a segunda calculava o ponto ótimo de operação. A análise do estado estacionário foi realizada com base no valor da função lucro, considerando que variações inferiores a 2% indicavam o fim da transição e habilitava o otimizador a realizar a atualização dos *setpoints* das variáveis. Foi utilizada essa estrutura de modo a não prejudicar a desempenho do

RTO, aproximando-o ao máximo de um RTO perfeito, que quando o sistema entra em regime permanente (variações inferiores a 2% na função lucro), logo altera o ponto de operação para o ótimo, calculado a partir do modelo estático do processo.

O sistema SOC utilizado foi aquele projetado na seção 3.4, onde foi selecionado o conjunto de CVs que minimizasse a perda média ao longo da região de distúrbio. Desta forma, o conjunto de variáveis a ser controlado é composto pela concentração de B no topo da coluna (Cbr), vazão de refluxo da coluna para o reator (Fr) e pela fração de A no topo (Ya). Como Ya é um grau de liberdade, apenas as outras duas foram controladas com os graus de liberdade disponíveis. Os *setpoints* utilizados para controlar as variáveis no ponto de menor perda média são apresentados na Tabela 4.1.

Tabela 4.1: Variáveis controladas e seus *setpoints* a partir da análise de BOPSOC.

Variável Controlada	Setpoint
Cbr	0,0536
Fr	20,43
Ya	0,972

O emparelhamento das variáveis controladas com os graus de liberdade disponíveis foi obtido a partir da matriz RGA, conforme mostrado na Tabela 4.2, resultando no controle de Cbr pelo volume do reator e de Fr pela vazão F , sendo que esta implementação foi realizada por meio de controladores do tipo PI. O ajuste dos controladores foi realizado por síntese direta (Seborg *et al.*, 1989), com velocidade em malha fechada duas vezes mais rápida que em malha aberta. Embora a velocidade do controlador seja importante para o resultado da unidade, este parâmetro não será avaliado neste trabalho. O controlador da malha F-Fr foi ajustado com ganho de 2,35 e constante de tempo de 0,115 h; e o controlador da malha Vr-Cbr foi ajustado com ganho de -940 e constante de tempo de 1,5 h.

Tabela 4.2: Matriz RGA obtida para análise do emparelhamento das variáveis.

	F	Vr
Fr	1,27	-0,27
Cbr	-0,27	1,27

4.3 Resultados

Para comparar as diferentes técnicas de otimização foi calculado o lucro médio do processo para as diferentes frequências de distúrbio da planta, considerando que o distúrbio se comporta como uma senóide quadrada, conforme mostrado na Figura 4.1. A curva comparativa para o caso de estudo é apresentada na Figura 4.2, onde é possível definir a melhor técnica para a unidade tendo em vista a frequência com que o valor do distúrbio da planta se modifica, assim como avaliar o ganho real que cada técnica poderá gerar para o processo.

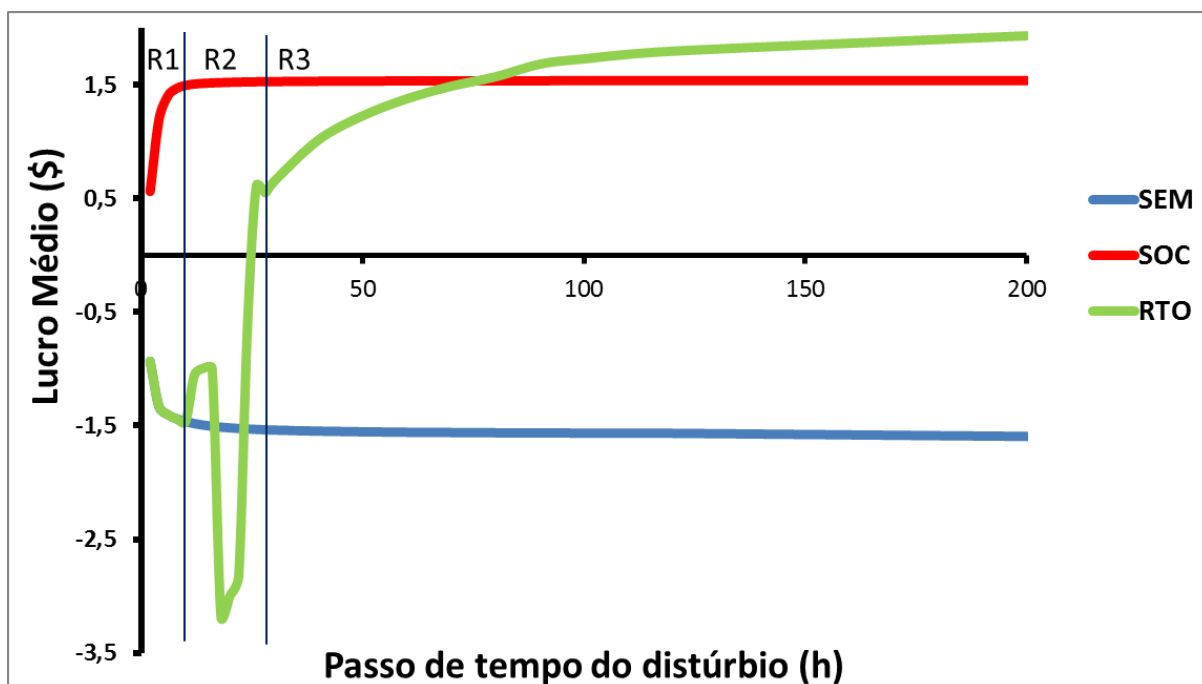


Figura 4.2: Variação do lucro operacional para diferentes passos de tempo do distúrbio, onde R1, R2 e R3 delimitam as diferentes regiões de aplicação do RTO. (SEM: Processo sem sistema de otimização; SOC: processo com as técnicas de self-optimizing control; RTO: processo com uma camada RTO realizando a otimização).

A partir da Figura 4.2 é possível identificar três regiões distintas na curva do RTO: uma parte inicial (R1), onde o distúrbio muda de valor em um curto espaço de

tempo, não permitindo a planta atingir um estado estacionário longo o suficiente para o RTO atuar; uma região intermediária (R2) em que há atuação do otimizador, mas que o impacto sobre o lucro pode ser negativa ou positiva, devido ao período em que a operação ocorre em regime transiente, determinando que, muitas vezes após o RTO realizar a otimização, o processo sofre uma nova variação do distúrbio e volta a operar longe do ótimo; e uma terceira região (R3), onde a utilização do RTO aumenta o lucro da planta, e o retorno é potencializado à medida que o período de operação em estado estacionário aumenta.

No estudo de caso analisado foi possível averiguar que o RTO começou a apresentar um bom desempenho, ou seja, lucro positivo para o processo, a partir de um passo de tempo de 20 horas, que corresponde ao tempo de assentamento do processo. Por outro lado, pode-se verificar que a utilização do SOC fornece um resultado consistente para uma região considerável, e que a vantagem do RTO em relação ao SOC somente ocorre quando o distúrbio não varia por um longo período de tempo. Neste caso, o SOC é a melhor opção de otimização para mudanças de temperaturas que ocorram a cada 75,5 horas ou menos, o que pode ser considerando uma grande região de aplicação para essa planta, a qual possui uma constante de tempo média da função lucro (τ) de 2,8 horas.

Na Figura 4.3 é apresentado o comportamento do lucro do processo ao longo de um período de operação para o passo de tempo de 70 horas, para mostrar o comportamento das técnicas durante a operação. Será apresentado para esse passo de tempo devido ao lucro médio do processo obtido pelo SOC e pelo RTO serem parecidos nessa condição.

Realizando o mesmo estudo para este processo; porém, alterando a constante de tempo média do processo, é observado que há uma mudança na região de aplicação das técnicas. As Figuras 4.4, 4.5 e 4.6 mostram como as curvas se comportam para diferentes τ , sendo que foram utilizados valores de τ de 2,25 h, 4 h e 13,4 h, de modo a verificar o comportamento para dinâmicas mais rápidas e mais lentas que o problema original, o qual possui τ de 2,8 h.

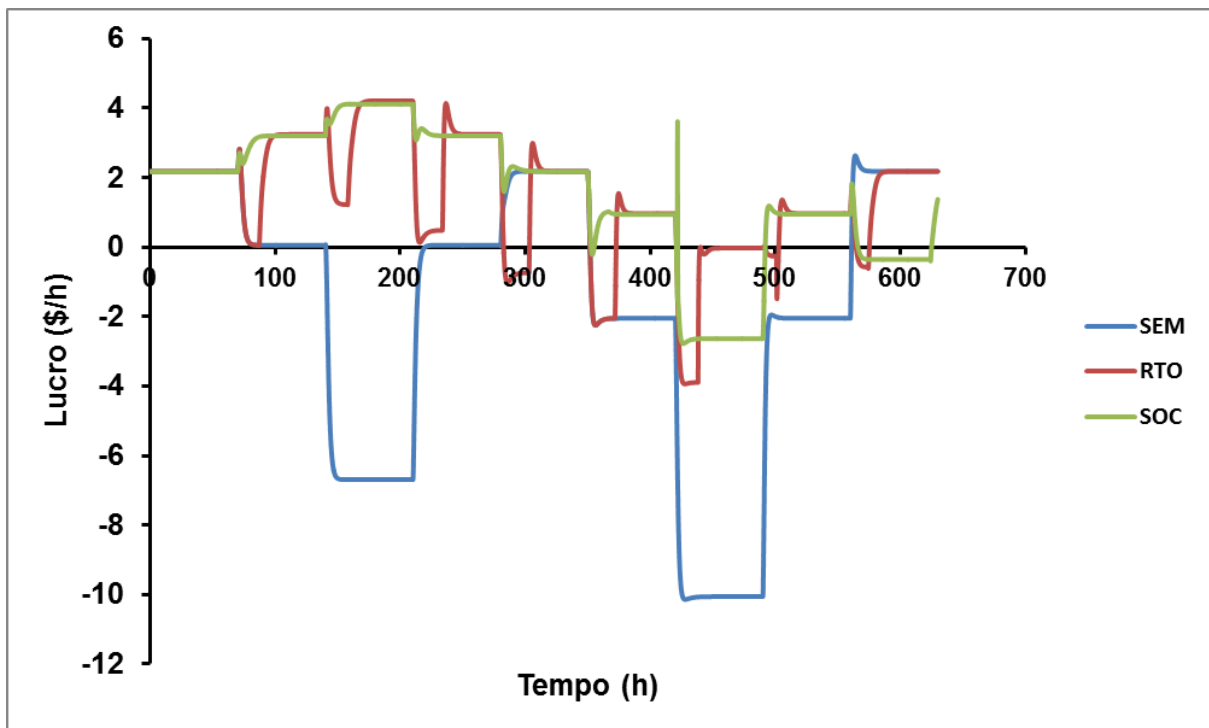


Figura 4.3: Comportamento do lucro ao longo da operação para um passo de tempo de 70 horas.

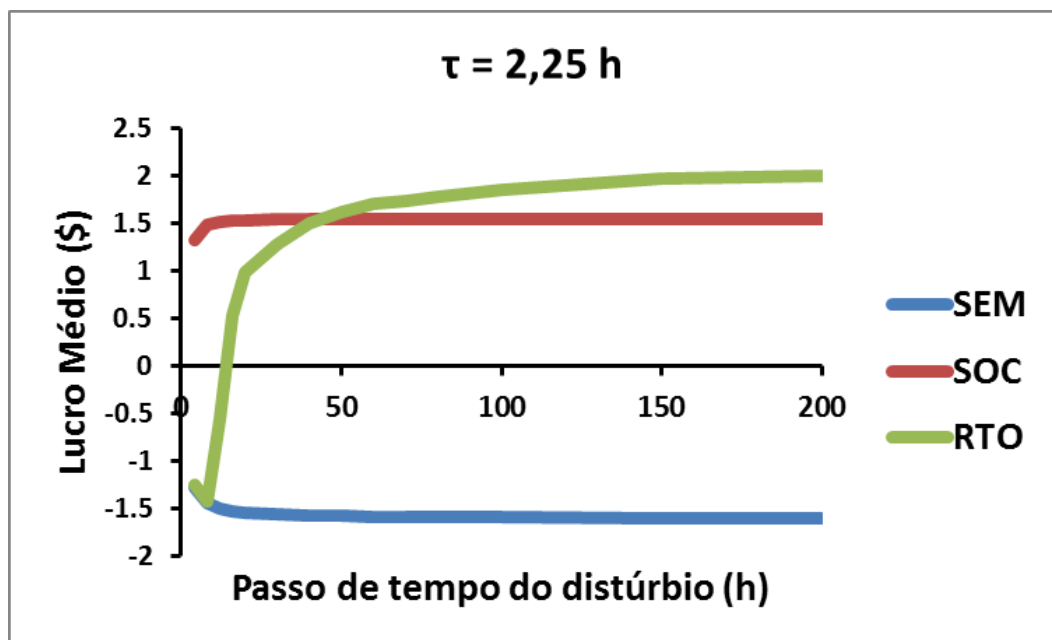


Figura 4.4: Avaliação das técnicas de otimização para o processo $\tau = 2,25 \text{ h}$.

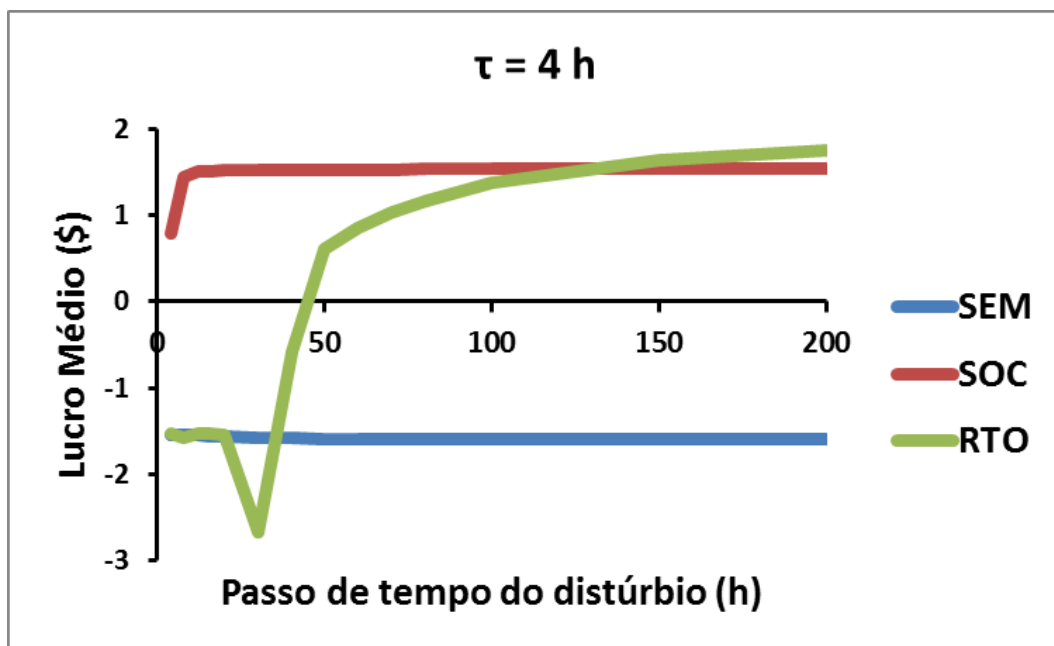


Figura 4.5: Avaliação das técnicas de otimização para o processo $\tau = 4$ h.

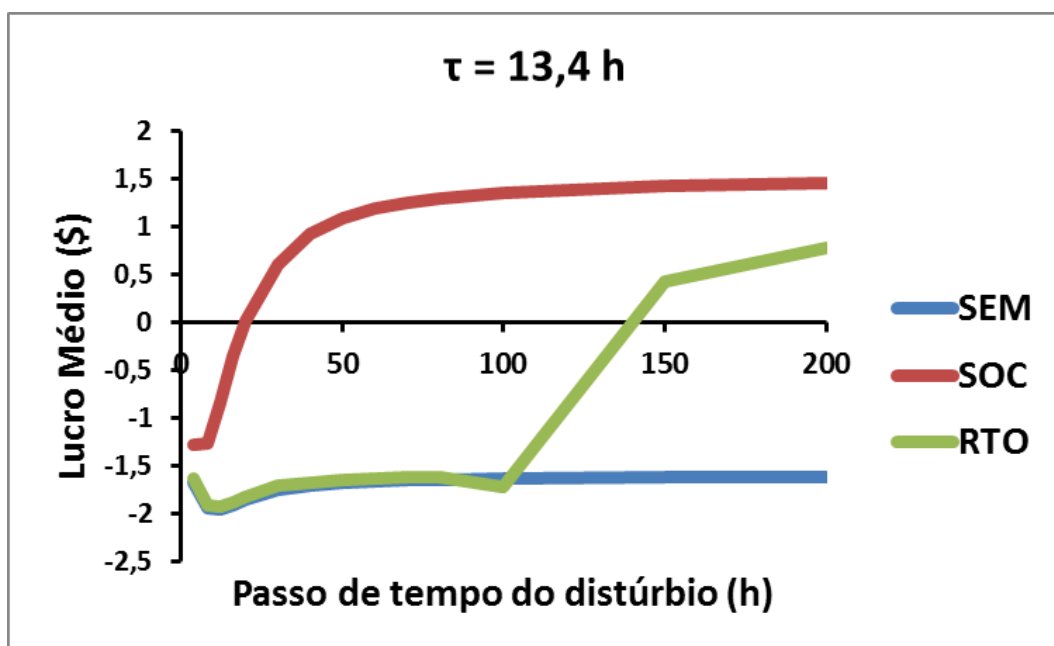


Figura 4.6: Avaliação das técnicas de otimização para o processo $\tau = 13,4$ h.

Analisando o comportamento das curvas das Figuras 4.4, 4.5 e 4.6, juntamente com o comportamento da curva da Figura 4.2, é possível constatar um deslocamento do ponto de mudança da melhor técnica à medida que é alterada a

constante de tempo do processo. Para plantas com dinâmica mais rápida, o ponto de mudança se desloca para passos de tempo menores, sendo que para dinâmicas mais lentas o ponto se desloca para frequências menores. Outro ponto a ressaltar é o comportamento das curvas do RTO, onde se nota um aumento das regiões R1 e R2, onde o RTO não contribui para o processo, na medida em que o processo se torna mais lento. Em relação à região de melhor aplicação de cada técnica, para uma constante de tempo de 2,25 horas o SOC fornece melhores resultados para mudanças de temperatura em até 43,6 horas; para τ de 4 horas, é melhor para passos de até 130 horas; e para τ de 13,4 horas, é melhor para todos os passos de 0 a 200 horas. Outro ponto importante a ser considerado é que, indiferente da frequência de alteração do valor do distúrbio ou da constante de tempo do processo, o modelo com SOC sempre apresentou um lucro médio superior ao sistema sem otimização, o que não ocorre com o RTO, o qual possui uma região em que pode contribuir negativamente para o lucro do processo.

4.3.1 Estudo do Erro de Modelagem

Após o estudo relacionado à dinâmica da unidade, foi avaliado o comportamento das técnicas em relação à precisão do modelo. Para isso foi alterado o valor da constante $k1^*$ da equação cinética do reator no modelo dinâmico, ou seja, na saída do *simulink*, e mantido o valor original nos modelos utilizados na otimização. O lucro do processo foi calculado a partir da saída do modelo dinâmico do *simulink*, onde foi realizada a mudança da constante $k1^*$. Foram utilizados dois valores diferentes para $k1^*$, sendo um valor maior que o valor original, de $1,544 \cdot 10^{12} \text{ h}^{-1}$, e um valor menor, de $1,000 \cdot 10^{12} \text{ h}^{-1}$. A partir deste estudo foram gerados os gráficos mostrados nas Figuras 4.7 e 4.8. É possível concluir que um aumento de $k1$ melhora o lucro do processo. Como o ponto de operação escolhido foi definido a partir da otimização, é possível observar que o erro do modelo pode levar a uma mudança grande no lucro obtido, de forma positiva ou negativa.

Considerando que o erro de modelagem pode ocorrer em qualquer unidade, é importante que a técnica de otimização seja robusta, aumentando o lucro do processo mesmo se o modelo não é preciso. Neste caso, em que foi considerado

que a constante cinética de uma das reações não estava correta, pôde-se notar que o SOC sofre pequena influência deste erro no seu resultado, aumentando o lucro (ou diminuindo o prejuízo) para os dois testes realizados. A região de aplicação de cada técnica também foi alterada em função do erro de modelagem, e também, houve uma redução do ganho do RTO em relação ao SOC para as regiões de baixa frequência.

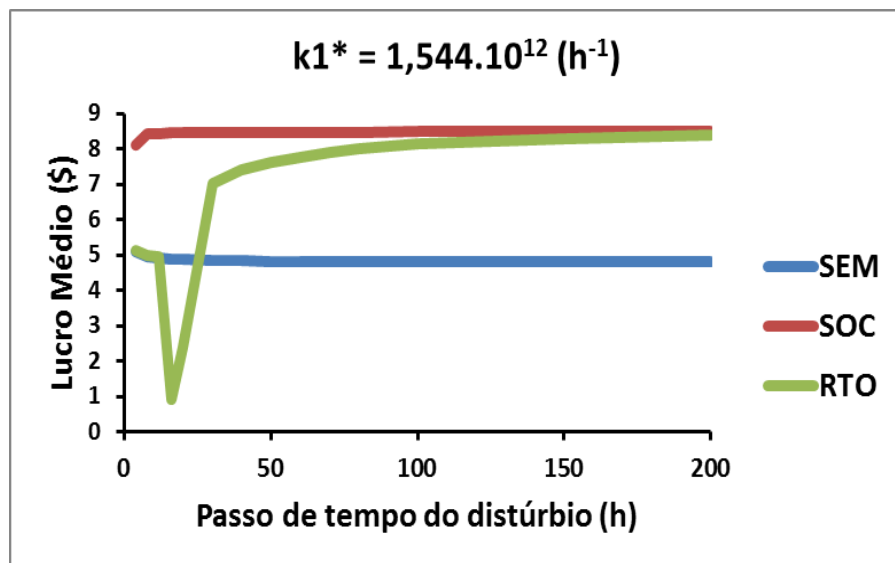


Figura 4.7: Avaliação das técnicas de otimização para erro no modelo ($k1^* = 1,544.10^{12} h^{-1}$).

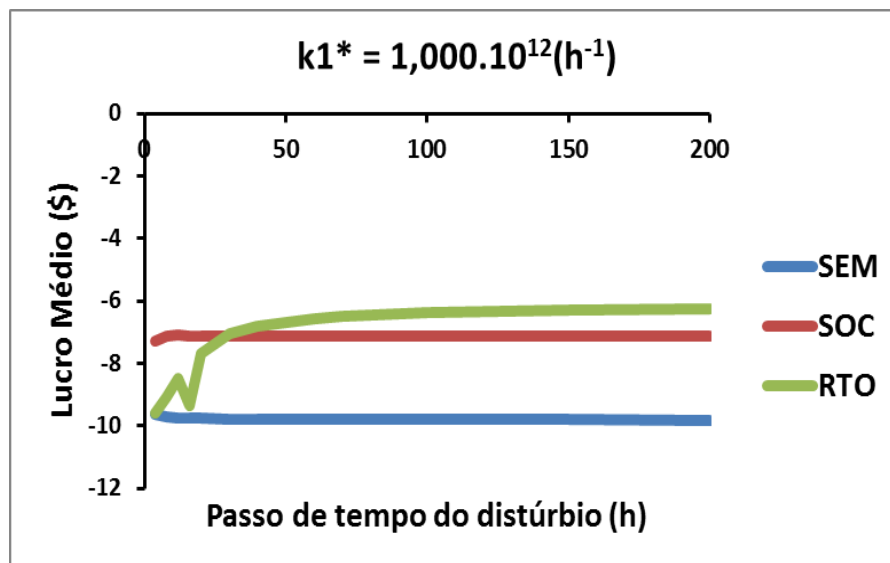


Figura 4.8: Avaliação das técnicas de otimização para erro no modelo ($k1^* = 1,000.10^{12} h^{-1}$).

Na Tabela 4.3, são apresentados os lucros médios ao longo da região de distúrbio para cada técnica e para cada um dos estudos realizados, ou seja, uma média ao longo dos passos de tempo de 2 a 200 horas.

Tabela 4.3: Lucro médio (\$) de cada técnica nos estudos realizados.

Estudo Realizado	Lucro Médio (\$)		
	SEM	RTO	SOC
Problema Inicial	-0,173	-0,020	0,171
$\tau = 2,25$ h	-0,100	0,067	0,099
$\tau = 4,00$ h	-0,102	-0,013	0,097
$\tau = 13,4$ h	-0,113	-0,096	0,034
$k1^* = 1,544 \cdot 10^{12} \text{ h}^{-1}$	0,316	0,410	0,549
$k1^* = 1,000 \cdot 10^{12} \text{ h}^{-1}$	-0,635	-0,476	-0,463

A partir dos dados apresentados, pode-se verificar que, em todos os estudos realizados para este modelo, os resultados do SOC foram superiores aos do RTO, demonstrando o potencial das técnicas de SOC. Assim, a prerrogativa de que os resultados obtidos pelo SOC são limitados pelo RTO não são verdadeiras, devido ao fato de que os sistemas reais são dinâmicos e o processo não permanece imutável ao longo do tempo. Desta forma, faz-se necessária a análise do comportamento dos principais distúrbios do processo antes de se escolher a melhor técnica de otimização a ser implantada em uma unidade industrial. Outra importante observação é que, independente da técnica de otimização utilizada, quando é analisado o resultado médio ao longo da frequência de distúrbio, ambas as técnicas (RTO e SOC) trouxeram ganhos para o lucro médio do processo, mesmo que em algumas regiões de frequência o RTO não seja recomendado. Outro ponto importante a ser salientado é que todos os estudos realizados dependem da janela de valores de distúrbios utilizados, sendo que, havendo uma mudança nesses valores, necessita-se refazer as análises aqui apresentadas.




Capítulo 5 - Aplicação Industrial – Unidade de Separação de Propeno/Propano

As técnicas de otimização de processos são facilmente aplicadas em unidades simples e didáticas, onde os modelos são facilmente obtidos e os recursos computacionais necessários para simular a unidade são baixos. As dificuldades de aplicação prática começam a aparecer quando são estudadas unidades maiores e mais complexas com um grande número de equipamentos, variáveis e graus de liberdade. Muitos métodos que possuem um ótimo desempenho em unidades simples tornam-se inviáveis de serem aplicados quando o grau de complexidade aumenta, devido principalmente à dificuldade de solução do problema de otimização formulado.

De modo a avaliar a aplicação prática das técnicas de SOC em unidades complexas, será utilizada uma unidade de separação de propeno que foi baseada em uma unidade real em operação. A unidade possui por objetivo produzir uma corrente de propeno (C3-) com elevado grau de pureza (0,996%) a partir de uma corrente de gás liquefeito de petróleo (GLP). O processamento é realizado por três colunas de destilação em série, sendo que a carga de GLP é alimentada na primeira coluna (T-01) para remoção de compostos pesados (C4+), onde a corrente rica em propeno é retirada pelo topo. A corrente de topo da T-01 alimenta uma segunda coluna (T-02), que possui como objetivo separar o etano (C2), o qual é extraído pela corrente de topo. A corrente de fundo da T-02, composta de propano (C3+) e

propeno, alimenta uma terceira coluna (T-03), onde a corrente rica em propeno é extraída pelo topo. A T-03 possui como peculiaridade a utilização de uma bomba de calor, onde a corrente de topo é utilizada como fluido de aquecimento do refeedor, após passar por uma etapa de compressão. O fluxograma simplificado do processo é apresentado na Figura 5.1, sendo que a terminologia utilizada é apresentada na Tabela 5.1.

Tabela 5.1: Terminologia utilizada na representação da unidade.

Representação	Descrição
	Limite de Bateria – Alimentação da unidade
	Limite de Bateria – Correntes de produtos
	Número para identificação da corrente
AR	Água de resfriamento
CB	Condensado de baixa pressão
DR	Sistema de drenagem
VB	Vapor de baixa pressão

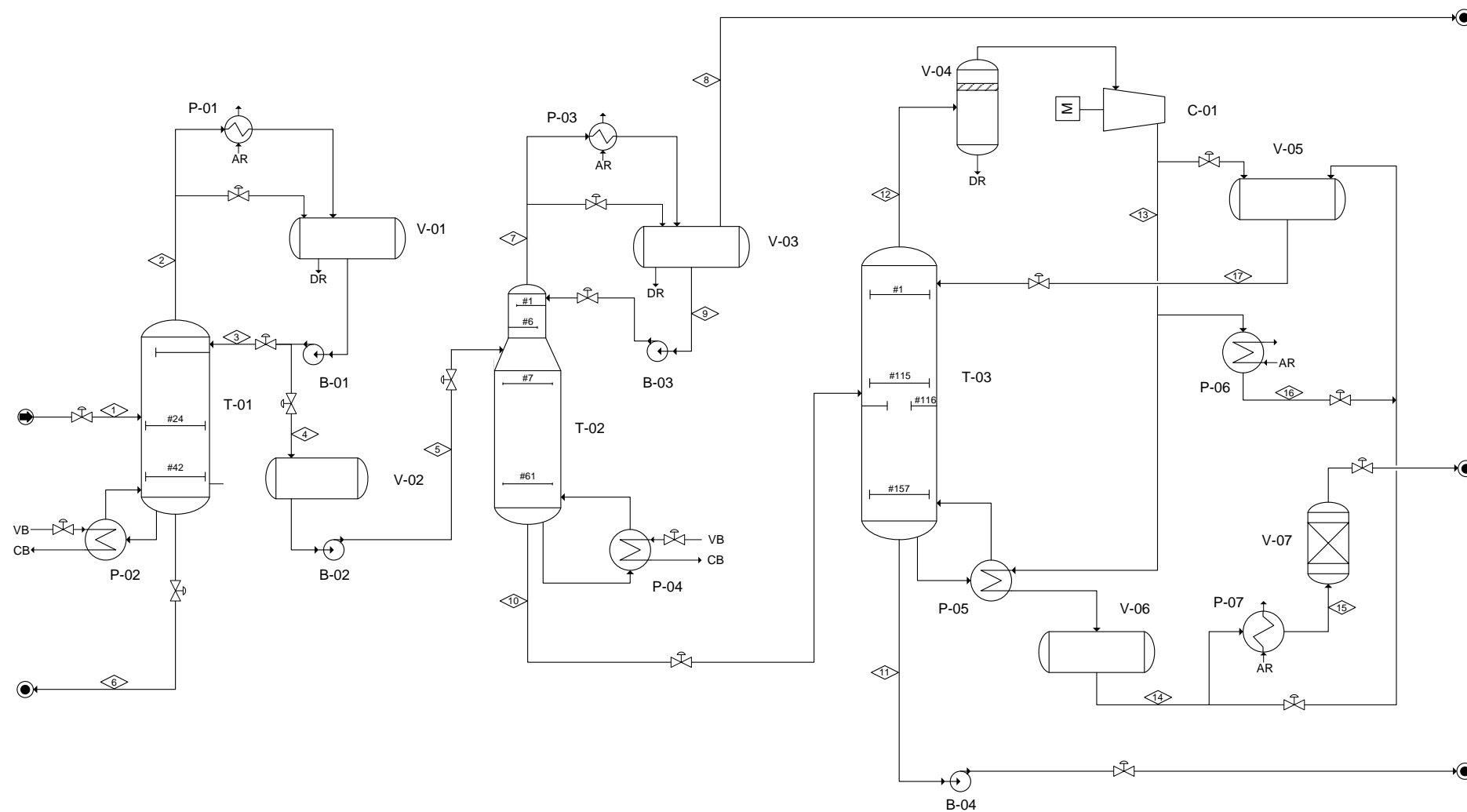


Figura 5.1: Fluxograma da unidade de separação de propeno.

A lista de equipamentos da unidade e suas descrições, conforme o desenho da Figura 5.1, são apresentados a seguir na Tabela 5.2.

Tabela 5.2: Lista de equipamentos da unidade.

Nome	Descrição
B-01	Bomba de refluxo da coluna T-01
B-02	Bomba de alimentação da coluna T-02
B-03	Bomba de refluxo da coluna T-02
B-04	Bomba de produto de fundo da coluna T-03
C-01	Compressor da corrente de topo da coluna T-03
P-01	Condensador da coluna T-01
P-02	Refrervedor da coluna T-01
P-03	Condensador da coluna T-02
P-04	Refrervedor da coluna T-02
P-05	Refrervedor da coluna T-03
P-06	Condensador da coluna T-03
P-07	Resfriador da corrente de produto especificado
T-01	Coluna de destilação para remoção de C4+
T-02	Coluna de destilação para remoção de etano
T-03	Coluna de destilação para separação propeno/propano
V-01	Vaso de acúmulo de condensado da T-01
V-02	Vaso de acúmulo de produto de topo da T-01
V-03	Vaso de acúmulo de condensado da T-02
V-04	Vaso de acúmulo de condensado da T-03

Os dados construtivos das colunas serão omitidos devido ao sigilo industrial dessas informações. A alimentação da unidade é composta por uma corrente de GLP, cuja especificação é apresentada na Tabela 5.3.

Tabela 5.3: Especificação da corrente de alimentação, composta por GLP.

Especificação	Valor
Vazão (kmol/h)	1296,84
Vazão (kg/h)	63000
Temperatura (°C)	66
Pressão (kgf/cm ² g)	17,9
Composição	Vazão molar (kmol/h)
Água	1,90
Etano	44,33
Propano	127,75
Propeno	531,20
Isobutano	119,65
Isobuteno	155,35
1-Buteno	83,72
1,3-Butadieno	3,83
Butano	40,82
trans-2-Buteno	103,90
cis-2-Buteno	77,11
Isopentano	3,44
n-Pentano	2,79
Hexano	1,05

5.1 Modelagem da Unidade

Para a aplicação das técnicas de SOC é necessário somente o modelo estático do processo, sendo que o modelo dinâmico pode ser utilizado para testar as diferentes estratégias obtidas. Desta forma, neste trabalho não foi gerado um modelo dinâmico para o processo; porém, a análise dinâmica pode ser objeto de trabalhos futuros. Para simular o comportamento estacionário da unidade foi utilizado o simulador de processos Aspen Plus versão 7.2, sendo que a configuração do modelo é mostrada na Figura 5.2.

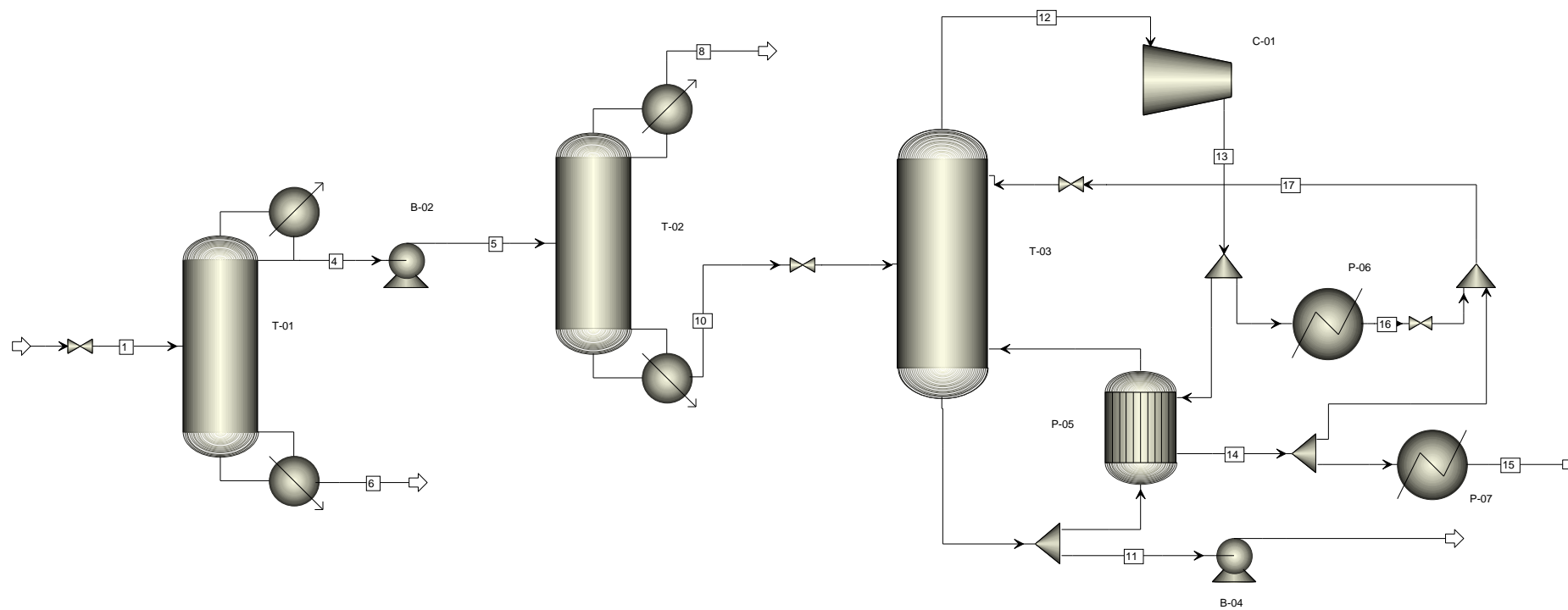


Figura 5.2: Modelo da unidade criado no Aspen Plus.

Na modelagem da unidade foram realizadas as seguintes considerações:

- Cada coluna de destilação possui dois graus de liberdade estacionários;
- O distúrbio da unidade consiste na corrente de alimentação com variação na vazão de entrada e na concentração de propeno, sendo que a pressão e a temperatura são controladas;
- A pressão de topo de cada coluna é mantida constante;
- A temperatura de entrada de cada coluna é mantida controlada;
- Os vasos do processo não foram simulados, visto que não influenciam no resultado na simulação estacionária;
- Foi utilizado o modelo termodinâmico de Peng-Robinson para calcular as propriedades físico-químicas das correntes, devido as correntes serem compostas por hidrocarbonetos;
- Foram desconsideradas as perdas de carga das tubulações do processo;
- A alimentação de cada coluna possui pressão constante, controlada por uma válvula, sendo que esta foi modelada de forma a fornecer uma pressão de saída especificada;
- Os trocadores de calor, com exceção do P-05, foram modelados apenas para o cálculo da troca térmica necessária, desconsiderando os limites mecânicos dos equipamentos;
- O trocador P-05 foi modelado como um casco e tubo com coeficiente global de transferência de calor constante no valor de $932 \text{ kcal}/(\text{h.m}^2.\text{°C})$ e área total de 2168 m^2 ;
- O compressor foi considerado isentrópico, calculando a energia requerida para manter uma pressão de descarga especificada.

Os graus de liberdade utilizados na modelagem de cada coluna são descritos a seguir:

- Coluna T-01: Razão de refluxo (RR1) e razão mássica entre a vazão de destilado (corrente 4) e a vazão de entrada (corrente 1), sendo que essa nova variável será chamada de D/F_1 .
- Coluna T-02: Razão de refluxo (RR2) e a razão mássica entre a vazão de fundo (corrente 10) e a vazão de entrada da coluna (corrente 5), sendo que essa nova variável será chamada de B/F_2 .
- Coluna T-03: fração da corrente que sai do compressor que será utilizada como fluido de aquecimento do refeedor, que será chamada de FA_3 . Além disso, será utilizada a fração da corrente que sai do refeedor (corrente 14) que retorna para a coluna como refluxo para a coluna, que será chamada de FR_3 .

As variáveis calculadas e o diagrama de entradas e saídas do modelo de cada coluna são apresentados na Figura 5.3. O modelo gerado no simulador possui muitas outras variáveis; porém, apenas as variáveis principais foram utilizadas para aplicação das técnicas de SOC.

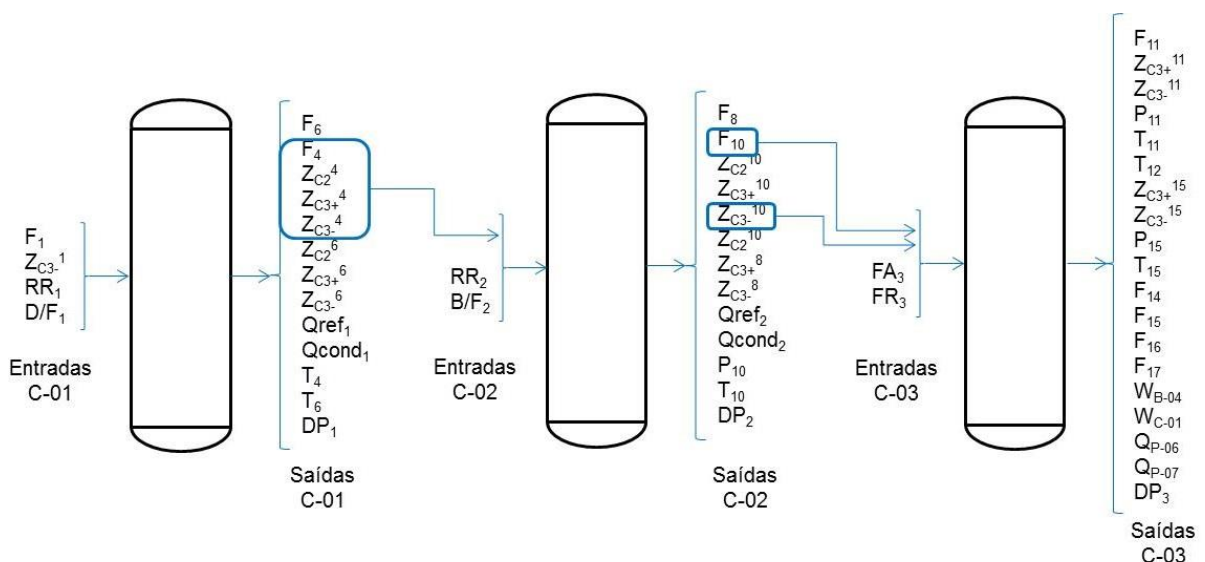


Figura 5.3: Modelo de entradas e saídas do processo.

Tendo em vista o grande número de variáveis do processo, foi criada uma notação para representá-las, conforme descrito a seguir:

DP_x : diferença de pressão entre o topo e o fundo da coluna T-0X;

F_x : vazão mássica da corrente x;

Fm_x : vazão molar da corrente x;

P_x : pressão da corrente x;

$Qcond_x$: calor trocado no condensador da coluna T-0X;

$Qref_x$: calor trocado no refeedor da coluna T-0X;

Q_x : calor trocado no trocador de calor P-0X;

RR_x : razão de refluxo da coluna T-0X;

T_x : temperatura da corrente x;

W_x : trabalho realizado no equipamento x;

Z_x^y : fração mássica do componente x na corrente y;

De modo a permitir uma melhor compreensão do processo, as principais correntes do processo são descritas na Tabela 5.4.

A simulação da unidade possui uma convergência lenta devido à coluna com bomba de calor. Verificou-se que em algumas simulações foram necessários mais de cinco minutos para a convergência, utilizando um computador comum com processador Intel® Core™ i5 e 6GB de memória RAM. Por esse motivo optou-se por utilizar um modelo caixa preta, neste caso redes neurais, para representar a unidade nos cálculos de otimização, visto o grande número de avaliações necessárias e a não-linearidade do sistema (Haykin, 2001).

Tabela 5.4: Principais correntes da unidade.

Variável	Corrente
F ₁	Vazão de alimentação da unidade
F ₄	Vazão de topo da coluna T-01
F ₆	Vazão de fundo da coluna T-01
F ₈	Vazão de topo da coluna T-02
F ₁₀	Vazão de fundo da coluna T-02
F ₁₁	Vazão de fundo da coluna T-03
F ₁₄	Vazão de saída do refeedor da coluna T-03
F ₁₅	Vazão de propeno produzido na unidade
F ₁₆	Vazão de saída do condensador da coluna T-03
F ₁₇	Vazão de refluxo coluna T-03

5.2 Modelo Caixa Preta

As redes neuronais foram geradas a partir de uma análise de sensibilidade com base nos resultados das simulações do Aspen, sendo que para isso o modelo foi dividido em três partes, cada uma representando uma coluna. Cada coluna foi simulada separadamente para um conjunto de dados de entrada, uniformemente espaçados, de forma a se obter uma rede neural com validade em toda a região de operação.

As redes neuronais utilizadas foram compostas de duas camadas, sendo que na primeira camada os neurônios utilizados foram do tipo tangente sigmoidal. Na segunda camada foi utilizada a função tangente sigmoidal apenas para as redes relacionadas ao cálculo das concentrações, sendo que para as demais foi utilizada uma função linear. Os números de neurônios utilizados em cada rede foram de: 12 para a T-01, 20 para ambas as redes da T-02 e 20 para ambas as redes da T-03.

Foram utilizados mais neurônios nas colunas T-02 e T-03 para melhorar a precisão do modelo, sendo que foram sendo adicionados neurônios até ser obtido um valor do coeficiente de correlação para os dados de validação superior a 0,98. Os dados disponíveis foram divididos de forma randômica, sendo que 75% dos pontos foram utilizados para treinamento e os demais para a validação do modelo.

Para a coluna T-01 foi realizada a variação nos distúrbios da unidade e nos graus de liberdade da coluna (RR_1 e D/F_1). Como distúrbios foram consideradas variações na vazão mássica de alimentação (F_1) e na fração mássica de propeno ($Z_{C_3-}^1$), sendo que para a alteração da fração molar do propeno foi mantida a mesma proporção da especificação nominal da corrente para os demais componentes, conforme a Tabela 5.3. Os valores nominais das variáveis, seus limites e o número de pontos utilizados para treinar a rede neural da coluna C-01 são apresentados na Tabela 5.5.

Tabela 5.5: Região utilizada para treinar a rede neural da coluna T-01.

Variável	Valor nominal	Limites	Número de Pontos
F_1	63000	59850 – 66150	5
$Z_{C_3-}^1$	0,355	0,319 – 0,390	6
RR_1	1,98	1,00 – 4,00	6
D/F_1	0,459	0,250 – 0,650	5
Total de Pontos			900

A mesma metodologia foi utilizada para a geração da rede neuronal para a coluna T-02; porém, foram utilizadas duas redes para simular o comportamento da coluna ao invés de apenas uma. Foi gerada uma rede para calcular as concentrações das correntes de saída e uma segunda rede para as demais variáveis. Foi necessário realizar essa divisão para melhorar os resultados do modelo, que apresentavam erros significativos nos cálculos das concentrações quando apenas uma rede era utilizada.

Foi utilizado o mesmo conjunto de dados para o treinamento das duas redes da coluna T-02, sendo que esses foram gerados a partir de seis variáveis de entrada do modelo: vazão mássica de entrada da coluna (F_5), fração mássica de eteno na entrada ($Z_{C_2}^5$), fração mássica de propano na entrada ($Z_{C_3+}^5$), fração mássica de propeno na entrada ($Z_{C_3-}^5$), razão de refluxo da coluna (RR_2) e razão entre a vazão de fundo e a vazão de entrada (B/F_2). Os limites de variação da composição de entrada e vazão de alimentação da T-02 foram obtidos a partir dos resultados de saída calculados para a T-01. Os valores nominais dessas variáveis, os limites utilizados e o número de pontos são apresentados na Tabela 5.6.

Tabela 5.6: Região utilizada para treinar a rede neural da coluna T-02.

Variável	Valor nominal	Limites	Número de Pontos
F_5	30064	11656 – 51630	10
Z_{C2}^5	0,0460	0,0171 – 0,109	8
Z_{C3-}^5	0,765	0,449 – 0,941	9
Z_{C3+}^5	0,188	0,0575 – 0,320	9
RR_2	12,23	8,00 – 15,00	8
B/F_2	0,896	0,600 – 0,910	8
Total de Pontos			414720

A coluna T-03 foi modelada de forma semelhante à coluna T-02, utilizando-se duas redes neuronais, sendo uma para as concentrações de saída da coluna e outra para as demais variáveis. As variáveis utilizadas como entradas do modelo foram as seguintes: vazão mássica de entrada da coluna (F_{10}), fração mássica de propeno na entrada (Z_{C3-}^{10}), e os graus de liberdade descritos anteriormente FA_3 e FR_3 , sendo que os limites de variação da composição de entrada e vazão de alimentação da coluna T-03 foram obtidos a partir dos resultados de saída calculados para a T-02. Os valores nominais, os limites e o número de pontos utilizados são apresentados na Tabela 5.7.

Tabela 5.7: Região utilizada para treinar a rede neural da coluna T-03.

Variável	Valor nominal	Limites	Número de Pontos
F_{10}	26458	15874 – 37041	7
Z_{C3-}^{10}	0,798	0,594 – 0,953	7
FA_3	0,873	0,600 – 0,890	6
FR_3	0,792	0,642 – 0,942	6
Total de Pontos			1764

5.3 Otimização e Curvas de Operação

A otimização da unidade foi realizada considerando valores fictícios para os preços dos produtos e matérias-primas; logo, não foram considerados os valores reais de mercado para precificar as correntes e os gastos energéticos. Desta forma, foi considerado que o valor da corrente de propeno dentro da especificação possui

um valor oito vezes superior à corrente de GLP, que alimenta a unidade. A corrente de fundo da primeira coluna (corrente 6) e a corrente de propano que sai da última coluna (corrente 11) são armazenadas como GLP, logo possuem o mesmo preço da corrente de alimentação. A corrente de etano, que é retirada pelo topo da segunda coluna (corrente 8), é encaminhada para outra unidade para novo processamento, não possuindo um valor comercial como produto especificado; logo, seu preço também será considerado igual ao da corrente de entrada. Desta forma o lucro da unidade está condicionado à produção de propeno.

O lucro da unidade sem contabilizar os gastos energéticos, pode ser calculado como:

$$\begin{aligned}
 L_{SE} &= F_{15} \cdot 8000 + F_{11} \cdot 1000 + F_8 \cdot 1000 + F_6 \cdot 1000 - F_1 \cdot 1000 \\
 &= F_{15} \cdot 8000 + (F_{11} + F_8 + F_6 - F_1) \cdot 1000 \\
 &= F_{15} \cdot 8000 - F_{15} \cdot 1000 = F_{15} \cdot 7000
 \end{aligned}
 \tag{5.1}$$

Onde:

L_{SE} : lucro da unidade, desconsiderando os gastos com energia (\$/h);

O cálculo do custo energético foi realizado considerando que aproximadamente 15% do gasto com matéria-prima é relativo ao gasto de energia dos diversos equipamentos da unidade, resultando em um valor de 0,132 \$/kcal.h⁻¹. Para calcular o consumo de energia foram utilizados apenas os equipamentos principais da unidade, sendo que o consumo das bombas não foi utilizado devido ao valor ser muito mais baixo que os equipamentos de troca térmica e a energia utilizada no compressor. Assim, gasto energético foi computado como:

$$E = Q_{cond_1} + Q_{ref_1} + Q_{cond_2} + Q_{ref_2} + Q_{P-06} + Q_{P-07} + W_{C-01}
 \tag{5.2}$$

Onde:

E : energia utilizada no processo (kcal/h);

De posse do valor unitário da energia, o lucro da unidade pode ser calculado através da seguinte relação:

$$L = F_{15} \cdot 7000 - E \cdot 0,132
 \tag{5.3}$$

Onde:

L : lucro operacional da unidade (\$/h);

As restrições do processo consistem nos limites das variáveis correspondentes aos graus de liberdade, nas limitações dos principais equipamentos e na especificação da corrente de propeno; sendo que os limites dos graus de liberdade utilizados são apresentados na Tabela 5.8.

Tabela 5.8: Limites dos graus de liberdade.

Variável	Valor nominal	Mínimo	Máximo
RR_1	1,98	1,00	4,00
D/F_1	0,459	0,250	0,650
RR_2	12,23	8,00	15,00
B/F_2	0,896	0,600	0,910
FA_3	0,873	0,600	0,890
FR_3	0,792	0,642	0,942

A corrente de propeno deve possuir fração mássica superior a 0,996; logo, tem-se a seguinte restrição de qualidade:

$$Z_{C3}^{15} \geq 0,996$$

Com exceção do trocador P-05, todos os demais foram modelados de forma a apenas se calcular a troca térmica necessária, sem utilizar parâmetros mecânicos de construção do equipamento. Assim, foi estabelecido uma limitação na troca térmica dos trocadores de calor P-01, P-02, P-03, P-04 e P-06 de forma que seu valor não ultrapassasse 20% do seu valor nominal, obtendo-se as seguintes restrições:

$$Q_{cond_1} \geq -7,785.10^6$$

$$Q_{ref_1} \leq 7,422.10^6$$

$$Q_{cond_2} \geq -2,435.10^6$$

$$Q_{ref_2} \leq 3,509.10^6$$

$$Q_{P-06} \geq -3,862.10^6$$

A troca térmica do trocador P-05 não foi considerada como restrição, porque esse equipamento foi modelado a partir do seu coeficiente de transferência de calor e área de troca térmica. Logo, durante o processo de geração de dados no simulador de processos, o software não converge para regiões fora dos limites operacionais do equipamento. Como só foram utilizados dados válidos para os seus limites operacionais, não há a necessidade de adicionar uma restrição relacionada a esse trocador. O trocador P-07 também não foi utilizado como restrição devido à corrente de saída ser encaminhada para armazenamento, sem que haja um controle preciso da temperatura de saída da corrente. Logo, se a vazão de produto aumentar e a área do trocador for insuficiente, a única consequência será um aumento da temperatura da corrente sem afetar o restante da unidade.

A última restrição utilizada está relacionada ao compressor C-01, o qual foi modelado de forma a manter uma pressão de saída constante. Dessa forma, é calculado o valor da energia requerida no compressor em função da vazão de vapor da coluna e das pressões de entrada e saída. Assim utilizou-se o mesmo critério dos trocadores de calor, limitando a energia fornecida em 20% do seu valor nominal, originando a seguinte restrição:

$$W_{C-01} < 3,589.10^6$$

A otimização da unidade foi realizada no software Matlab R2009a, utilizando a função *fmincon*, em conjunto com a função *ga*, que utiliza um algoritmo genético. Devido à existência de diversos pontos de mínimos locais, foi necessária a utilização de uma política estocástica para a definição do ponto inicial do algoritmo de otimização. Foram utilizados aproximadamente 100 pontos iniciais, escolhidos de forma randômica, para determinar o ponto ótimo do processo para a condição nominal do distúrbio, descrita na Tabela 5.9. O resultado da otimização é apresentado a seguir na Tabela 5.10, sendo que os resultados das variáveis de cada coluna para essa condição são apresentados nas Tabelas 5.11, 5.12 e 5.13. O lucro obtido para o ponto de operação ótimo foi de $1,390.10^8$ \$/h. Com base nos resultados da otimização também é possível identificar que há três restrições ativas no ponto de operação nominal, sendo elas: RR_1 , Z_{C3}^{15} e Q_{P-06} .

Tabela 5.9: Valores nominais dos distúrbios.

Distúrbio	Valor nominal	Unidade
F_1	63000	kg/h
Z_{C3-}^{-1}	0,3548	kg/kg

Tabela 5.10: Condição ótima nominal dos graus de liberdade.

Variável	Valor nominal	Unidade
RR_1	4,00	kg/kg
D/F_1	0,476	kg/kg
RR_2	13,17	kg/kg
B/F_2	0,892	kg/kg
FA_3	0,863	kg/kg
FR_3	0,757	kg/kg

Tabela 5.11: Condição ótima nominal da coluna T-01.

	Variável	Valor nominal	Unidade
Saídas Coluna T-01	F_4	30064	kg/h
	Z_{C2}^4	0,0433	kg/kg
	Z_{C3+}^4	0,188	kg/kg
	Z_{C3-}^4	0,749	kg/kg
	T_4	38.3	°C
	F_6	32936	kg/h
	Z_{C2}^6	0	kg/kg
	Z_{C3+}^6	0	kg/kg
	Z_{C3-}^6	0,001	kg/kg
	T_6	101,2	°C
	Q_{cond_1}	$-6,626 \cdot 10^6$	kcal/h
	Q_{ref_1}	$6,475 \cdot 10^6$	kcal/h
	DP_1	0,170	kgf/cm ²

Tabela 5.12: Condição ótima nominal da coluna T-02.

	Variável	Valor nominal	Unidade
Saídas Coluna T-02	F_8	2716	kg/h
	Z_{C2}^8	0,526	kg/kg
	Z_{C3+}^8	0,060	kg/kg
	Z_{C3-}^8	0,415	kg/kg
	F_{10}	26984	kg/h
	Z_{C2}^{10}	0	kg/kg
	Z_{C3+}^{10}	0,217	kg/kg
	Z_{C3-}^{10}	0,800	kg/kg
	T_{10}	72,19	°C
	P_{10}	31,7	kgf/cm ² g
	Q_{cond_2}	-2,291.10 ⁶	kcal/h
	Q_{ref_2}	3,253.10 ⁶	kcal/h
	DP_2	0,481	kgf/cm ²

Tabela 5.13: Condição ótima nominal da coluna T-03.

	Variável	Valor nominal	Unidade
Saídas Coluna T-03	F_{11}	6542	kg/h
	Z_{C3+}^{11}	0,850	kg/kg
	Z_{C3-}^{11}	0,150	kg/kg
	T_{11}	27,0	°C
	P_{11}	11,0	kgf/cm ² g
	F_{15}	20344	kg/h
	Z_{C3+}^{15}	0,004	kg/kg
	Z_{C3-}^{15}	0,996	kg/kg
	T_{15}	33,9	°C
	P_{15}	17,2	kgf/cm ² g
	F_{14}	299911	kg/h
	F_{16}	47644	kg/h
	F_{17}	327211	kg/h
	T_{12}	19,2	°C
	W_{B-04}	3,795.10 ³	kcal/h
	W_{C-01}	2,966.10 ⁶	kcal/h
	Q_{P-06}	-3,862.10 ⁶	kcal/h
	Q_{P-07}	-0,356.10 ⁶	kcal/h
	DP_3	0,800	kgf/cm ²

De modo a analisar o comportamento do ponto ótimo do processo para os diferentes valores de distúrbio, foi calculado o ponto ótimo para a região de distúrbio

da unidade. Neste estudo será considerado que a região de distúrbio corresponde a uma variação de 10% em cada variável, sendo elas F_1 e Z_{C3}^{-1} . De modo a gerar as curvas ótimas de operação, cada variável foi discretizada em cinco pontos, obtendo-se 25 pontos ótimos que serão utilizados posteriormente para cálculo da perda no procedimento de SOC. O valor ótimo para cada ponto é apresentado na Tabela 5.14, sendo que o gráfico apresentado na Figura 5.4 permite uma melhor visualização do comportamento do lucro ótimo para os diferentes valores de distúrbio.

Tabela 5.14: Lucro ótimo ao longo da região de distúrbio.

F_1	Z_{C3}^{-1}	Lucro
0,3193	56700	$1,148.10^8$
0,3193	59850	$1,191.10^8$
0,3193	63000	$1,268.10^8$
0,3193	66150	$1,338.10^8$
0,3193	69300	$1,404.10^8$
0,3371	56700	$1,187.10^8$
0,3371	59850	$1,247.10^8$
0,3371	63000	$1,307.10^8$
0,3371	66150	$1,378.10^8$
0,3371	69300	$1,452.10^8$
0,3548	56700	$1,249.10^8$
0,3548	59850	$1,319.10^8$
0,3548	63000	$1,390.10^8$
0,3548	66150	$1,459.10^8$
0,3548	69300	$1,495.10^8$
0,3725	56700	$1,316.10^8$
0,3725	59850	$1,389.10^8$
0,3725	63000	$1,463.10^8$
0,3725	66150	$1,527.10^8$
0,3725	69300	$1,611.10^8$
0,3903	56700	$1,385.10^8$
0,3903	59850	$1,459.10^8$
0,3903	63000	$1,542.10^8$
0,3903	66150	$1,538.10^8$
0,3903	69300	$1,692.10^8$

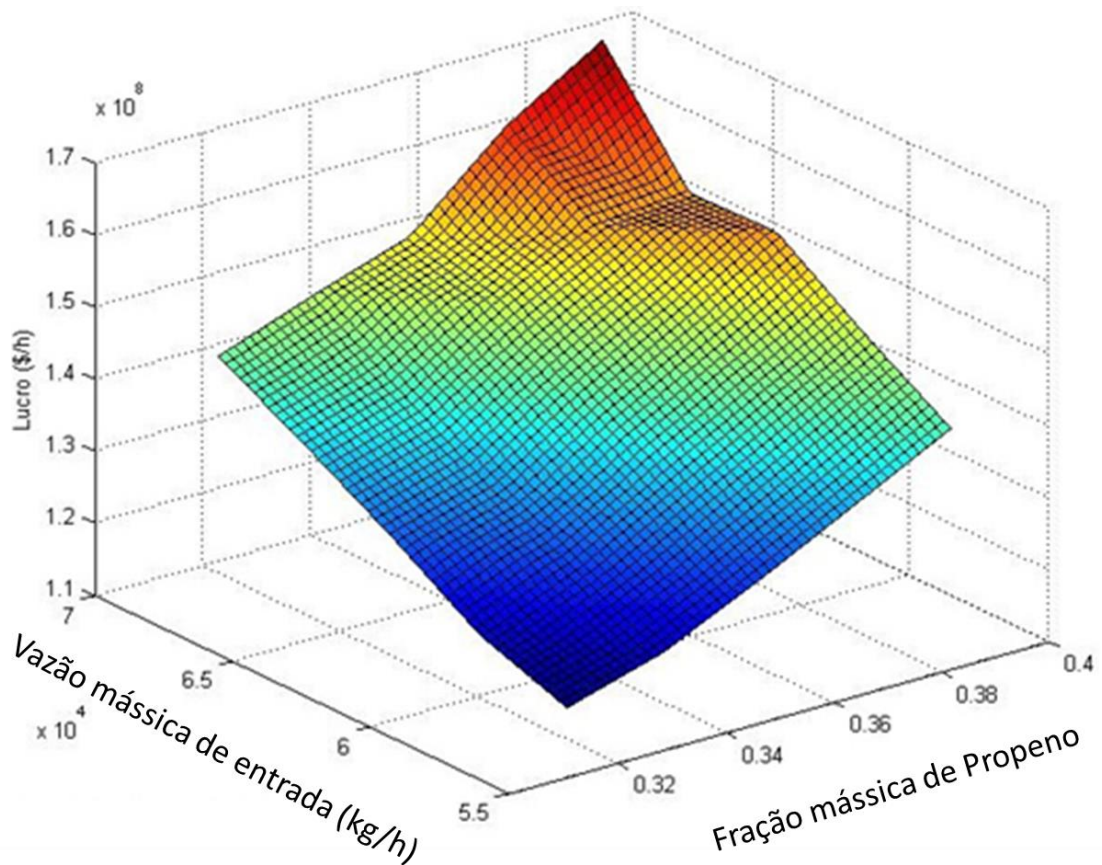


Figura 5.4: Comportamento do lucro ótimo do processo ao longo da região de distúrbio.

5.4 Aplicação das técnicas de SOC

A etapa inicial das técnicas de SOC consiste em definir o ponto de operação ótimo nominal e a região de estudo do distúrbio do processo. Esses estudos já foram apresentados. Logo, o próximo passo é definir as variáveis que serão consideradas candidatas a variáveis controladas. Para essa unidade serão utilizadas todas as variáveis de saída do modelo somadas a todos os graus de liberdade, com as seguintes exceções:

- DP_x : as diferenças de pressões não serão consideradas devido ao seu valor não ter influência no lucro da unidade, estando relacionada basicamente à hidráulica da coluna.

- Frações mássicas $Z_{C2}^6, Z_{C3+}^6, Z_{C3-}^6$ e Z_{C2}^{10} : essas frações mássicas possuem valores nulos ou próximo de zero, sendo de difícil medição e controle. Seu valor pode permitir diversos estados estacionários que mantenham seu valor nulo; porém, sem afetar o lucro da unidade.
- W_{B-04} e W_{C-01} : a energia requerida por máquinas de fluxo é uma variável difícil de ser controlada em uma unidade real; logo, não será considerada.

Com as exclusões realizadas, sobram 42 variáveis como candidatas, sendo que, com os seis graus de liberdade disponíveis, há 5.245.786 combinações possíveis. Como cada coluna possui dois graus de liberdade, será utilizado como premissa que cada coluna poderá ter apenas duas variáveis controladas, mesmo que seja possível controlar as variáveis de uma coluna manipulando um grau de liberdade de outra. A aplicação prática desse tipo de estrutura seria ineficiente, principalmente devido à dinâmica envolvida.

Outro ponto a ser considerado é que o processo possui três restrições ativas no ponto de operação ótimo nominal, logo, de acordo com as premissas da metodologia clássica, essas variáveis devem ser mantidas controladas. Assim, há apenas três graus de liberdade disponíveis para otimização, sendo um para a T-01 e dois para a T-02. Com essas considerações adicionais, o número de possibilidades é reduzido para 495, que ainda é um número elevado para ser avaliado com o modelo não-linear. De modo a reduzir a complexidade do problema, utilizou-se o método exato local para se encontrar os melhores conjuntos de candidatas a variáveis controladas, sendo que foram desconsiderados os erros de medição e controle.

5.4.1 Método Exato Local

A partir da aplicação do método exato local (Halvorsen *et al.*, 2003), cujas matrizes G , G_d , J_{uu} e J_{ud} foram obtidas de forma numérica; e considerando as restrições ativas controladas, obteve-se o seguinte conjunto de variáveis controladas:

$$CVs = [RR_1 \ T_4 \ T_{10} \ Q_{cond_2} \ Q_{P-06} \ Z_{C3-}^{15}]$$

Para esse conjunto de variáveis controladas, a perda máxima prevista pelo método, utilizando a equação (2.24) proposta por Halvorsen *et al.* (2003), é de $0,648 \cdot 10^8$ \$/h e a perda média, utilizando a equação (2.29) posposta por Kariwala *et al.* (2008), é de $0,056 \cdot 10^8$ \$/h. Utilizando os valores ótimos calculados para o lucro do processo ao longo da região de distúrbio, obtém-se um lucro médio para o processo de $1,390 \cdot 10^8$ \$/h. Utilizando o lucro médio como valor de referência, obteve-se uma perda máxima relativa de 46,6% e uma perda média relativa de 4,03%.

Para validar os resultados, foi implementado esse conjunto de CVs utilizando o modelo estacionário não-linear, avaliando a perda em todos os pontos da Tabela 5.14, com exceção dos quatro pontos extremos, onde a vazão e a concentração possuem ao mesmo tempo seus valores máximos e mínimos. Essa consideração foi utilizada de modo a evitar a utilização de pontos que possuem baixa probabilidade de ocorrência no processo.

Com a utilização do modelo não-linear, obteve-se uma perda máxima de $0,335 \cdot 10^8$ \$/h e uma perda média de $0,197 \cdot 10^8$ \$/h, o que corresponde, em percentual, a uma perda máxima de 24,1 % e uma perda média de 14,3%. Observa-se nos resultados que a não-linearidade do modelo possui grande influência no método exato local, visto que os valores calculados pelo método diferem significativamente daqueles em que é utilizado o modelo caixa preta. O comportamento da perda ao longo da região de distúrbio é mostrado na Figura 5.5.

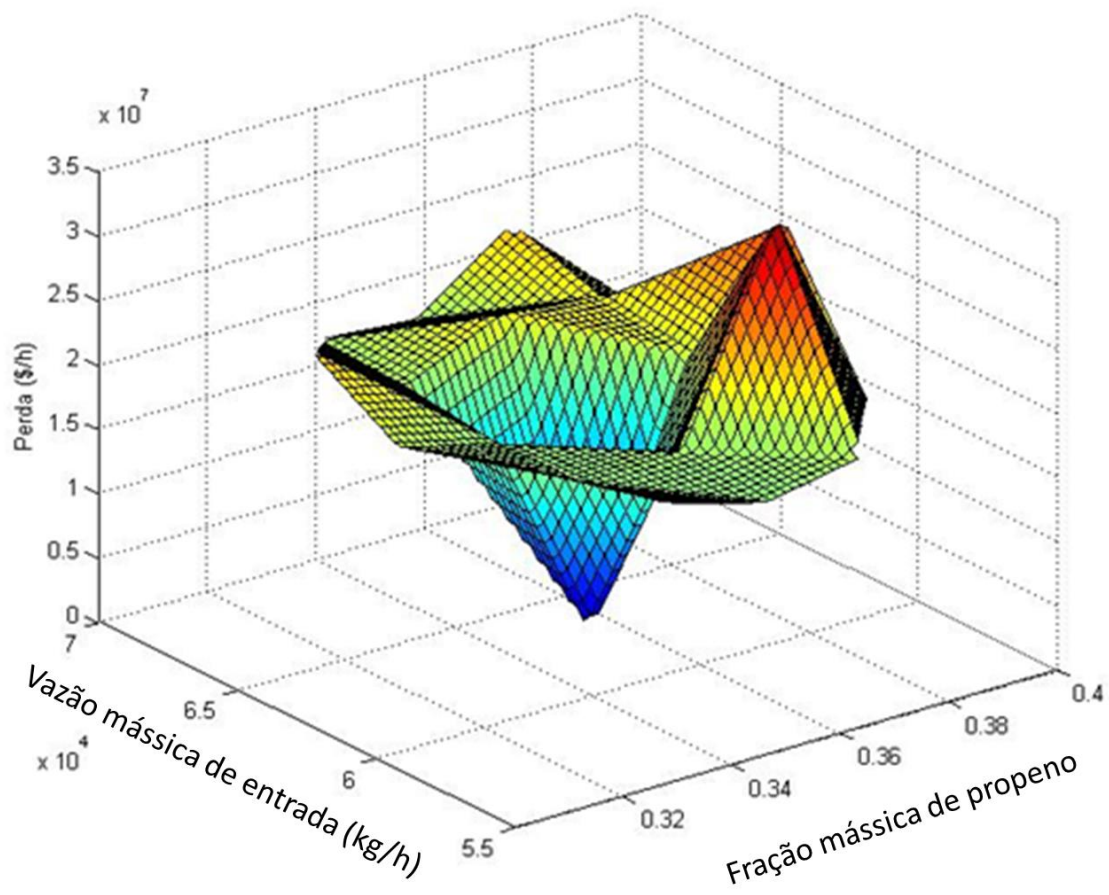


Figura 5.5: Comportamento da perda para o conjunto de variáveis obtidas utilizando o método exato local.

5.4.2 Método do Espaço Nulo

Para avaliar a utilização de combinações lineares de variáveis, foi utilizado o método do espaço nulo, proposto por Alstad e Skogestad (2007). A aplicação do método inicia com a definição do número mínimo de variáveis necessárias para compor as relações lineares. Como estão sendo estudados dois distúrbios e o processo possui três graus de liberdade disponíveis, considerando que as restrições ativas são mantidas controladas, são necessárias no mínimo cinco variáveis medidas para compor as combinações lineares. Embora se possa utilizar um número maior de variáveis, Kariwala *et al.* (2008) mostraram que a utilização de um número elevado de variáveis não aumenta significativamente o ganho da CV, logo neste trabalho será utilizado o número mínimo.

A segunda etapa do método consiste em definir quais variáveis que serão utilizadas nas combinações lineares. Para isso, utilizou-se a regra proposta por Alstad e Skogestad (2007) em que as variáveis devem ser de fácil medição e controle, sendo que o melhor conjunto é aquele que possui o máximo mínimo valor singular da matriz de ganhos do modelo linearizado. Logo, foram consideradas candidatas apenas as vazões e as temperaturas, visto que são facilmente medidas e controladas. Utilizando a regra do valor singular, obteve-se como conjunto ótimo as seguintes variáveis:

$$CVs = [F_4 \ F_8 \ F_{14} \ F_{16} \ F_{17}]$$

A partir da definição do conjunto de variáveis que será utilizado, é necessário o cálculo da matriz de sensibilidade (F), utilizando a equação (2.31). O cálculo de F consiste em obter a derivada do valor ótimo de cada variável em relação a cada distúrbio. O cálculo foi realizado de forma numérica utilizando cinco pontos no entorno do ponto de operação nominal para a definição da derivada. A partir deste cálculo obteve-se a seguinte matriz de sensibilidade:

$$F = \begin{bmatrix} -8,98 \cdot 10^{-9} & 1,91 \cdot 10^{-13} \\ -5,34 \cdot 10^{-10} & 1,13 \cdot 10^{-14} \\ -9,74 \cdot 10^{-8} & 3,05 \cdot 10^{-12} \\ 1,01 \cdot 10^{-8} & 1,15 \cdot 10^{-12} \\ 6,74 \cdot 10^{-8} & 7,15 \cdot 10^{-12} \end{bmatrix}$$

A matriz H , que estabelece a relação linear entre as variáveis, corresponde ao espaço nulo da matriz F , de acordo com o método. Assim, para a matriz F calculada, obteve-se a seguinte matriz H :

$$H = \begin{bmatrix} -0,834 & -0,521 & 0,0986 & -0,149 & -0,00494 \\ -0,0900 & -0,162 & -0,152 & 0,967 & 0,0880 \\ -0,537 & 0,838 & 0,0261 & 0,0932 & 0,0132 \end{bmatrix}$$

Desta forma, obtêm-se as seguintes variáveis controladas:

$$CVs = \begin{bmatrix} -0,834 \cdot F_4 - 0,521 \cdot F_8 + 0,0986 \cdot F_{14} - 0,149 \cdot F_{16} - 0,00494 \cdot F_{17} \\ -0,0900 \cdot F_4 - 0,162 \cdot F_8 - 0,152 \cdot F_{14} + 0,967 \cdot F_{16} + 0,0880 \cdot F_{17} \\ -0,537 \cdot F_4 + 0,838 \cdot F_8 + 0,0261 \cdot F_{14} + 0,0932 \cdot F_{16} - 0,0132 \cdot F_{17} \end{bmatrix}$$

Controlando com *setpoints* constantes, as CVs obtidas pelo método do espaço nulo juntamente com as restrições ativas, obteve-se uma perda máxima de $0,371 \cdot 10^8$ \$/h e uma perda média de $0,146 \cdot 10^8$ \$/h, utilizando os mesmos pontos do método anterior. Analisando a perda percentual, o método fornece uma perda máxima de 24,1% e uma perda média de 10,4%. O comportamento ao longo da região de distúrbio é apresentado a seguir na Figura 5.6.

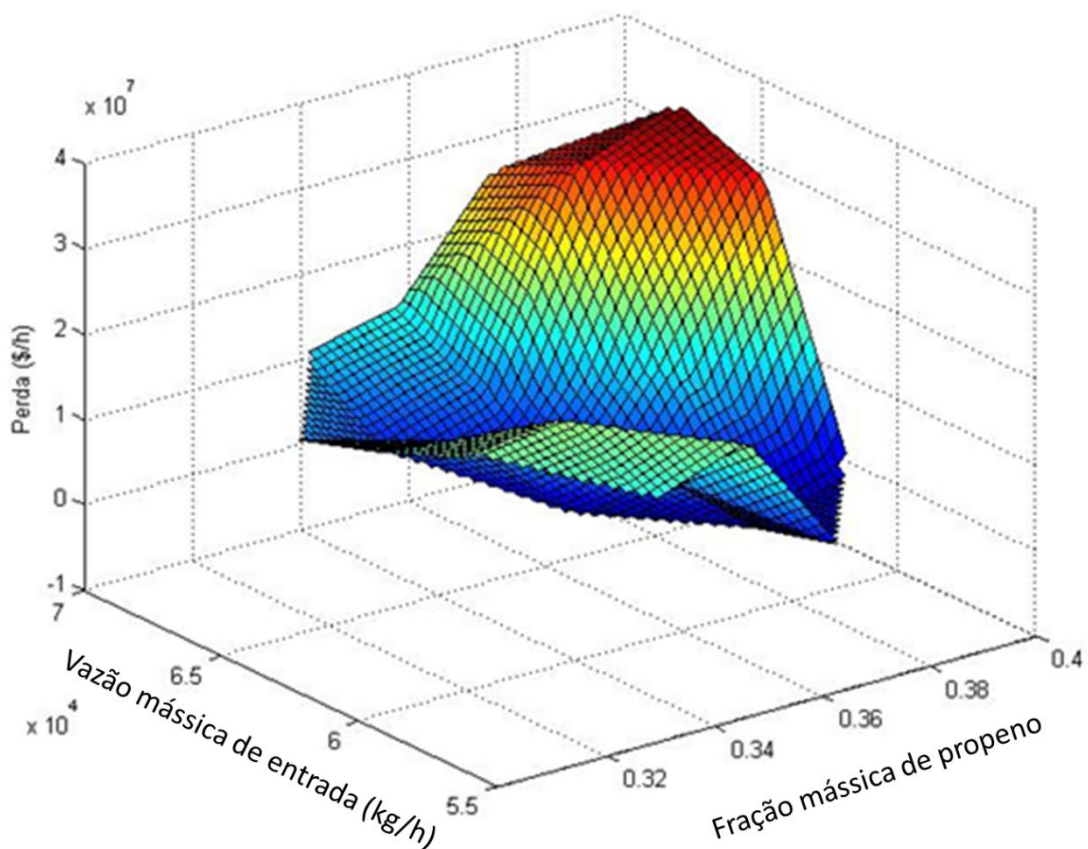


Figura 5.6: Comportamento da perda para o conjunto de variáveis obtidas utilizando o método do espaço nulo.

5.4.3 BOPSOC

O principal problema encontrado para a aplicação do método BOPSOC está no método de cálculo da perda, que é a função objetivo do problema de otimização. Por ser necessário avaliar tal função um número de vezes significativamente maior que os outros métodos durante a solução do problema, a utilização de uma região

de distúrbio discretizada, onde a perda é avaliada para diversos pontos, faz com o tempo necessário e a complexidade do cálculo torne o método inviável. Isso ocorre, pois, para cada ponto de operação, é necessário calcular o valor dos graus de liberdade que mantenham as variáveis controladas em seus *setpoints* fixos. Isso envolve solucionar outro problema de otimização para cada ponto de avaliação, o que neste estudo de caso significa calcular o valor dos seis graus de liberdade que mantém as seis CVs em seus *setpoints* constantes para cada ponto de distúrbio, sendo que os *setpoints* são atualizados a cada interação do problema de otimização do BOPSOC. Além disso, é necessário avaliar todos os conjuntos de variáveis possíveis, o que torna sua solução inviável com as tecnologias existentes.

De modo a contornar esses problemas, o método BOPSOC foi adaptado de modo a utilizar expressões aproximadas para o cálculo da perda. Foi utilizada a expressão proposta por Halvorsen *et al.* (2003) para o cálculo da perda máxima, utilizando a equação (2.24), e a equação (2.29), posposta por Kariwala *et al.* (2008), para calcular a perda média. Essas equações foram desenvolvidas a partir da linearização do modelo do processo, sendo aproximações que dependem do ponto de operação analisado; logo, para cada ponto de operação avaliado durante o procedimento de otimização, foi realizada uma nova linearização do processo e calculada a perda máxima e média obtida pelo melhor conjunto de variáveis controladas possível para o ponto.

Outro ponto a ser considerado é que, diferente da análise realizada pelo método exato local, a única restrição ativa que será considerada controlada é a concentração de propeno na corrente de produto final. Essa variável será considerada controlada devido a seu valor ótimo ser sempre o limite da especificação da corrente para toda a região do distúrbio; logo, ela faz parte da solução ótima do sistema de controle. Assim, restam cinco variáveis controladas a serem definidas; assim como os valores nas quais serão mantidas constantes. Foram utilizadas as mesmas variáveis candidatas do método exato local e a mesma consideração de não controlar variáveis de uma coluna através da manipulação de uma variável de outra coluna. Deste modo, o problema final consiste em definir duas variáveis controladas para as colunas T-01 e T-02, e uma variável controlada para a coluna T-03.

A partir do procedimento de otimização da perda máxima, foi obtido o seguinte conjunto ótimo de CVs e seus respectivos *setpoints*:

$$CVs = [T_4 \ T_6 \ B/F_2 \ T_{10} \ T_{15} \ Z_{C3}^{-15}]$$

$$SPs = [311 \ 374 \ 0,895 \ 345 \ 292 \ 0,996]$$

Para esse conjunto de CVs, a perda máxima calculada com a expressão linearizada foi de $0,00172 \cdot 10^8$ \$/h e a perda média foi $0,000196 \cdot 10^8$ \$/h. Realizando a otimização para a perda média, foi um diferente conjunto de variáveis e *setpoints*, conforme segue:

$$CVs = [RR_1 \ T_4 \ RR_2 \ B/F_2 \ T_{15} \ Z_{C3}^{-15}]$$

$$SPs = [3,94 \ 312 \ 13,2 \ 0,895 \ 292 \ 0,996]$$

Para o conjunto obtido pela otimização da perda média, foi obtido uma perda máxima de $0,00188 \cdot 10^8$ \$/h e a perda média foi $0,000152 \cdot 10^8$ \$/h, a partir das expressões linearizadas.

Após a determinação dos conjuntos de CVs ótimos com base na análise da perda por meio de expressões obtidas pelo modelo linearizado, foi realizada a validação desses conjuntos com o modelo não-linear. Deste modo, para o conjunto otimizado para a perda máxima foi obtida uma perda máxima real de $0,269 \cdot 10^8$ \$/h (18,0%) e uma perda média real de $0,149 \cdot 10^8$ \$/h (10,6%), cujo comportamento ao longo da região de distúrbio é mostrado na Figura 5.7. Para o conjunto otimizado para a perda média, foi obtida uma perda máxima real de $0,340 \cdot 10^8$ \$/h (22,0%) e uma perda média real de $0,144 \cdot 10^8$ \$/h (10,4%), sendo que o comportamento ao longo da região de distúrbio é mostrada na Figura 5.8.

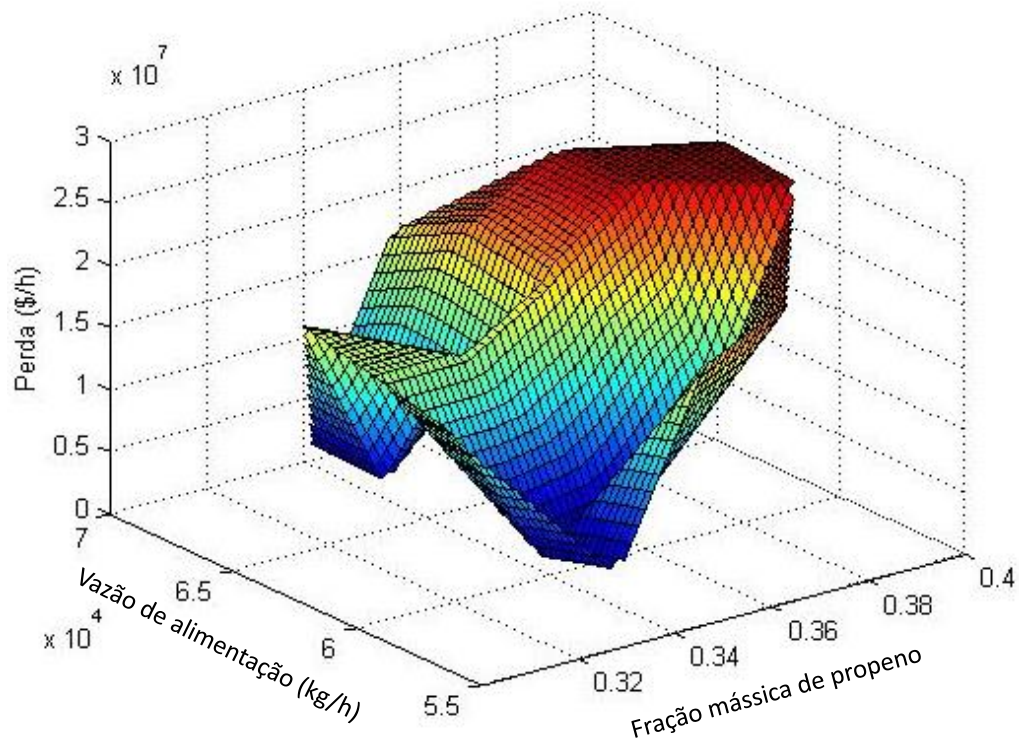


Figura 5.7: Comportamento da perda para o conjunto de variáveis obtidas utilizando o método BOPSOC para a perda máxima.

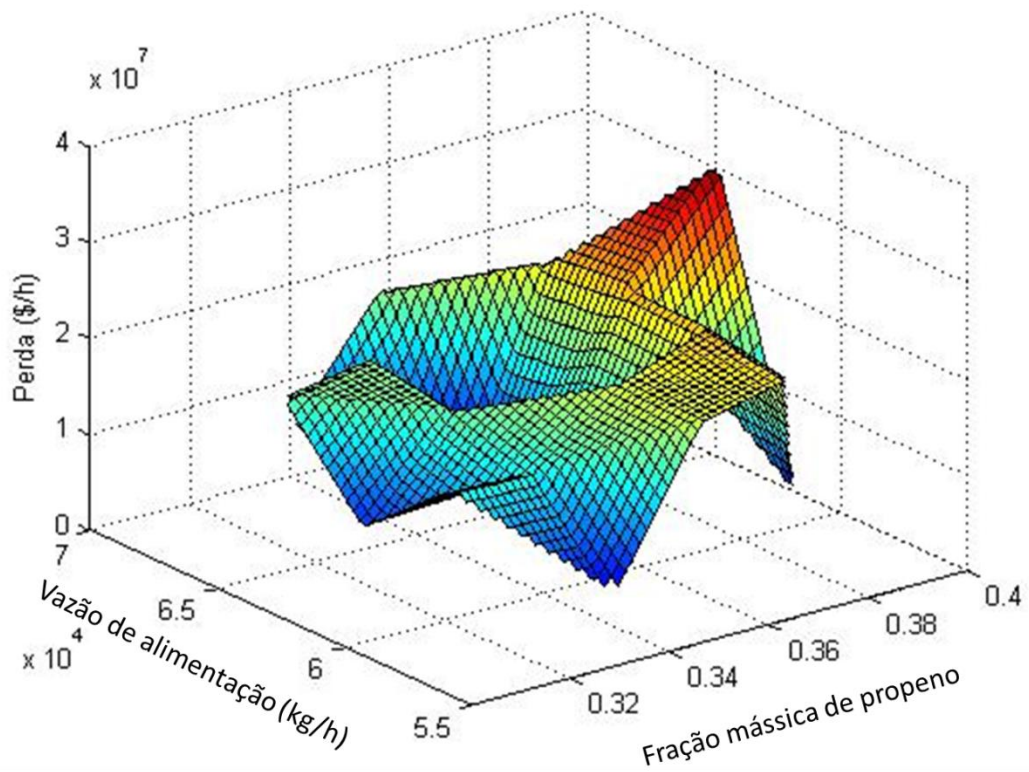


Figura 5.8: Comportamento da perda para o conjunto de variáveis obtidas utilizando o método BOPSOC para a perda média.

Um dos principais resultados obtidos está relacionado à utilização das expressões simplificadas obtidas por meio da linearização do modelo do processo e pela expansão em séries de Taylor de segunda ordem da função perda. Por meio delas foi possível otimizar o ponto de operação juntamente com a seleção das variáveis controladas; porém, como pode ser visto nos resultados apresentados, o valores calculados com as expressões diferem significativamente daqueles obtidos com o modelo não-linear. Logo, pode-se notar a partir dos gráficos apresentados que as expressões possuem validade apenas na região próxima do ponto de operação nominal, com uma grande discrepância na medida em que o distúrbio aumenta. Desta forma, não é possível garantir que não haja um conjunto de variáveis controladas ainda melhor que aqueles obtidos e como exemplo dessa possibilidade pode-se citar o seguinte conjunto de CVs e seus respectivos *setpoints*.

$$CVs = [RR_1 \ T_4 \ B/F_2 \ Q_{cond_2} \ FA_3 \ Z_{C3}^{-15}]$$

$$SPs = [3,48 \ 312 \ 0,890 \ -533294 \ 0,858 \ 0,996]$$

Esse conjunto foi o terceiro melhor conjunto obtido a partir da otimização para a perda média. A partir das expressões lineares foi obtida uma perda máxima de $0,00439 \cdot 10^8$ \$/h e a perda média foi $0,000334 \cdot 10^8$ \$/h. Porém, ao realizar a avaliação com a utilização do modelo não linear, foi calculada uma perda máxima real de $0,264 \cdot 10^8$ \$/h (16,4%) e uma perda média real de $0,182 \cdot 10^8$ \$/h (13,1%).

A partir desse resultado foi possível chegar à conclusão que esse novo conjunto é o que fornece o melhor resultado para a perda máxima, mesmo tendo sido obtida a partir da otimização da perda média. Deste modo, a utilização de expressões linearizadas podem servir para simplificar o problema de otimização; porém, não garantem a estrutura ótima global. Entretanto, mesmo não sendo um ótimo global, os resultados obtidos pelo método BOPSOC com expressões simplificadas, foram melhores ou iguais àqueles fornecidos pelos outros métodos, validando sua aplicação.

O comportamento da perda ao longo da região de distúrbio para esse novo conjunto de CVs é apresentado na Figura 5.9.

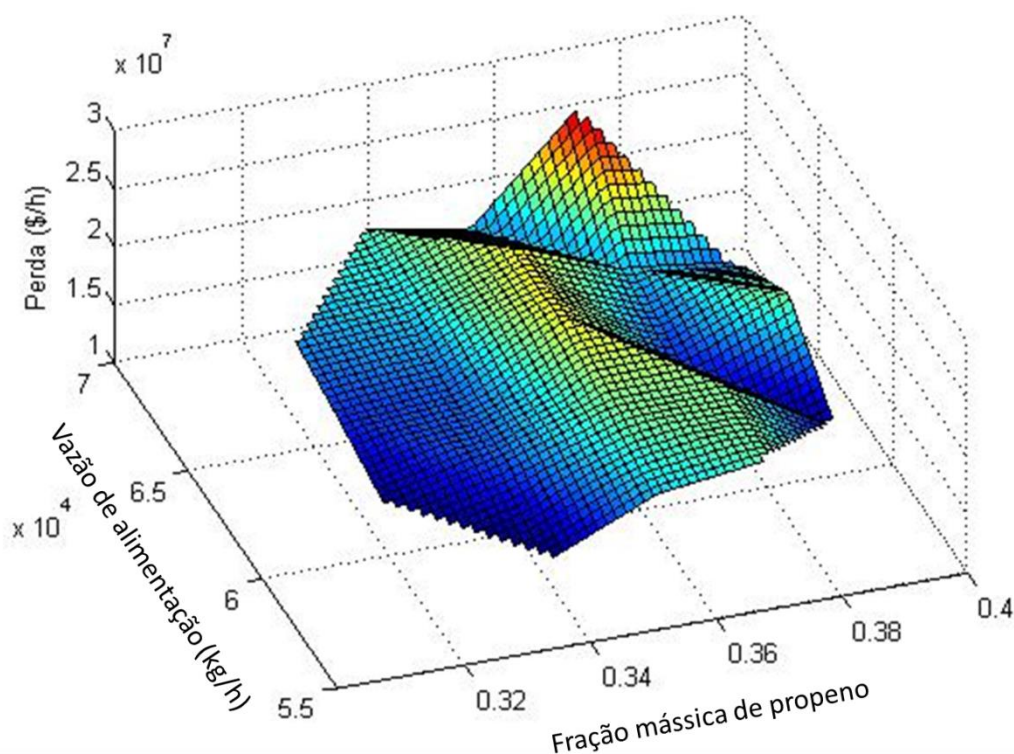


Figura 5.9: Comportamento da perda para o conjunto ótimo para a perda máxima no modelo não linear.

5.4.4 Comparação dos resultados

Os resultados obtidos com os três métodos analisados são resumidos na Tabela 5.15, onde ficam evidentes os ganhos da metodologia proposta, a qual forneceu os melhores resultados para a unidade estudada.

Tabela 5.15: Comparação das perdas obtidas com cada método.

Método	Perda Média	Perda Máxima
Exato Local	$0,197 \cdot 10^8$ $\$/h$ (14,3 %)	$0,335 \cdot 10^8$ $\$/h$ (24,1 %)
Espaço Nulo	$0,146 \cdot 10^8$ $\$/h$ (10,4 %)	$0,371 \cdot 10^8$ $\$/h$ (24,1 %)
BOPSOC	$0,144 \cdot 10^8$ $\$/h$ (10,4 %)	$0,264 \cdot 10^8$ $\$/h$ (16,4 %)

Comparando os métodos utilizados verifica-se que a combinação linear de variáveis, obtidas pelo método do espaço nulo, possui um ganho muito pequeno em relação à utilização de variáveis individuais quando se analisa a perda máxima.

Logo, sob este ponto de vista não há justificativa para a utilização de combinações lineares de variáveis para reduzir a perda máxima, visto o aumento de complexidade do sistema de controle. Por outro lado, a perda média foi reduzida em 27,3% com a sua utilização, o que pode ser visualizado na Figura 5.6, onde a região central do gráfico mostra uma redução da perda, sendo que essa aumenta repentinamente quando os valores dos distúrbios se direcionam para os seus limites. Esse comportamento difere daquele gerado pelo conjunto de variáveis individuais obtido pelo método exato local, o qual mantém um patamar de perda mais alto, sendo que apenas na região próxima ao ponto nominal ela é reduzida.

Com a modificação do ponto de operação, foi possível reduzir a perda máxima do processo de 24,1% para 16,4%, representando um ganho de 32% em relação às demais técnicas aplicadas. Por outro lado, para a perda média do processo foi possível atingir o mesmo resultado obtido pelo método do espaço nulo; porém, com a vantagem de utilizar variáveis individuais ao invés de combinações lineares. Em relação ao método exato local, a utilização do BOPSOC representou um ganho de 27,3% na perda média, reduzindo seu valor de 14,3% para 10,4%.

Conforme os resultados apresentados, foi possível visualizar a aplicação prática das técnicas de SOC, mesmo em uma unidade com um grande número de variáveis. Porém, não é possível afirmar que os resultados obtidos compõem o conjunto ótimo global da unidade, visto que foram obtidas a partir de modelos linearizados. Outro ponto a ser ressaltado está relacionado à viabilidade técnica da aplicação do método BOPSOC e os resultados obtidos através da mudança do ponto de operação da unidade, onde os resultados obtidos foram superiores ou iguais aos métodos existentes.

Adicionalmente seria necessário analisar os resultados dinâmicos da unidade de modo a testar o controle das variáveis controladas obtidas, verificando assim a viabilidade de implantação.

Capítulo 6 - Conclusões e Trabalhos Futuros

A ideia principal deste trabalho foi realizar um estudo aprofundado das técnicas de *self-optimizing control*, de modo a avaliar os métodos existentes, propor melhorias, comparar com outras técnicas de otimização e testar sua aplicação em unidades reais. Para isso, foi inicialmente utilizada uma unidade didática, composta por um reator e uma coluna de destilação com reciclo, onde havia apenas um distúrbio e três graus de liberdade. Aplicando a ideia clássica do SOC, foi possível observar que apenas dois conjuntos de variáveis controladas poderiam ser mantidos constantes para todos os valores de distúrbios permitidos no sistema, sendo que para esses conjuntos seria obtida uma perda elevada, inviabilizando a utilização de *setpoints* constantes.

Com os resultados obtidos a partir da técnica clássica, foi estudado o impacto do ponto de operação na obtenção de melhores variáveis controladas auto-otimizáveis. Desta forma, foi proposta uma mudança no algoritmo original do SOC de modo que o ponto de operação do processo seja escolhido no mesmo procedimento de otimização das variáveis controladas, sendo que o novo procedimento foi chamado de BOPSOC. A partir dessa modificação, foi possível

aumentar o número de variáveis controladas permitidas utilizando um ponto de operação não-ótimo para o distúrbio nominal, mas que minimiza a perda ao longo da região do distúrbio. Os conjuntos de CVs obtidos mostraram que tanto a perda máxima quanto a perda média do processo podem ser reduzidas significativamente quando se utiliza essa nova condição operacional. Como a nova formulação aumenta a complexidade do problema de otimização a ser resolvido, foram propostas duas formulações subótimas para modificação do ponto de operação. Os métodos simplificados fornecem resultados intermediários entre a técnica clássica e o método proposto.

Uma importante consequência do BOPSOC diz respeito às mudanças das restrições ativas do processo ao longo da região de distúrbio. Enquanto a formulação clássica diz que devem ser mantidas controladas as restrições ativas do ponto de operação nominal, o método proposto não define uma condição nominal prévia, de modo que não haja um conjunto de restrições ativas a ser controlado. Desta forma, o problema gerado pela mudança nas restrições ativas é minimizado pelo novo procedimento, considerando que a perda é minimizada tanto pela escolha das CVs quanto pelos seus *setpoints*. Ou seja, obtém-se um conjunto de CVs que, indiretamente, mantém o gradiente da função lucro próximo de zero para todos os valores de distúrbio estudados.

Para comparar o desempenho econômico obtido pelas técnicas de SOC, foi realizado um estudo comparativo em relação à principal técnica utilizada industrialmente, o RTO. Foi proposta a utilização de um sinal periódico quadrado com variação na frequência de mudança do valor do distúrbio, para comparação dos resultados obtidos com cada uma das técnicas, analisando também o sistema sem otimização. Por meio desse estudo, foi possível demonstrar que em muitas situações o SOC possui resultados melhores que o RTO, quebrando a premissa de que o RTO seria um limite superior do SOC. Foi possível identificar três regiões diferentes de aplicação do RTO em relação à frequência do distúrbio, sendo que para as regiões de alta frequência, sua utilização pode não contribuir no lucro ou, até mesmo, contribuir negativamente. Nesse sentido, foi demonstrado que a determinação da melhor técnica de otimização depende do comportamento dos distúrbios da planta, sendo necessário avaliar a frequência com que essas variáveis mudam de valor para

definir a técnica que será utilizada. Adicionalmente foi avaliado como a dinâmica da planta e o erro de modelagem afetam as diferentes técnicas de otimização, sendo que o SOC mostrou ser robusto com relação a diferentes dinâmicas e a erros de modelagem no caso estudado, de modo a sempre melhorar o resultado econômico da unidade.

No final, foi analisada a aplicação das técnicas de SOC em uma unidade de produção de propeno, a partir de uma corrente de GLP. A unidade foi modelada no simulador de processos Aspen Plus, a partir de dados de uma unidade real em operação, sendo utilizadas redes neuronais para simplificar o modelo utilizado para aplicação das técnicas de SOC. Inicialmente foi realizada a otimização da unidade para definição do ponto de operação e posterior aplicação do método exato local, para encontrar o melhor conjunto de variáveis individuais que minimizam a perda; e o método do espaço nulo para avaliar o melhor conjunto de combinações lineares. Os conjuntos de CVs obtidos foram testados utilizando o modelo não-linear da unidade, calculando a perda para pontos discretizados ao longo da região de distúrbio. A partir dessa análise foi possível mostrar que ambos os métodos fornecem conjuntos de CVs possíveis para a unidade, mesmo com os procedimentos de linearização utilizados. Logo, os métodos de SOC podem ser utilizados em unidades reais, mesmo que com um elevado número de variáveis e de graus de liberdade.

É importante observar que o método BOPSOC, proposto neste trabalho, foi aplicado na unidade industrial estudada com a utilização de expressões simplificadas para o cálculo da perda. Deste modo, foram obtidos conjuntos de CVs que reduziram a perda da unidade, apresentando melhores resultados que os outros métodos estudados. Outro ponto importante a ser ressaltado diz respeito à validade das expressões de cálculo da perda utilizadas, pois foi mostrado que elas levam a pontos de mínimo locais, não sendo possível garantir que os conjuntos de CVs obtidos sejam ótimos globalmente, devido à não-linearidade do processo. Um dos pontos a serem avaliados em trabalhos futuros é a utilização de algoritmos para solução de problemas do tipo MINLP, assim como a melhoria das formulações para o cálculo da perda, de modo a viabilizar a aplicação do BOPSOC em unidades complexas. Adicionalmente, o algoritmo pode ser adaptado de modo a ser utilizado

em conjunto com o método exato local e com o método do espaço nulo, possibilitando melhorias desses métodos, com a obtenção de perdas menores e pontos de operação mais suaves do ponto de vista econômico. Além disso, poderiam ser utilizados parâmetros adicionais na otimização que levem em conta as características dinâmicas da planta, de modo que a escolha das variáveis controladas não seja realizada baseada apenas no modelo estacionário do processo.

Outro tópico a ser estudado está relacionado à comparação das técnicas de otimização, onde se faz necessária a aplicação do método proposto, com base em uma senóide quadrada, em outras unidades. Com isso, pode-se chegar a regras simplificadas de escolha do método de otimização a ser empregado baseado na dinâmica do distúrbio e na dinâmica da unidade. O estudo pode ser expandido para comparação de outras técnicas de otimização existentes, tais como o DRTO, NCO *Tracking*, entre outras, de modo a avaliar como o comportamento do distúrbio influencia nos resultados econômicos de cada uma e quando elas devem ser aplicadas. Além disso, pode ser estudada a influência da sintonia dos controladores utilizados no SOC nos resultados comparativos em relação às demais técnicas.

Finalmente, para avaliar os conjuntos de CVs obtidos para a unidade de produção de propeno, poderia ser gerado o modelo dinâmico da unidade de modo analisar o comportamento das variáveis frente a variações nos distúrbios, durante o período transiente. O comportamento poderia ser comparado com outras técnicas de otimização, utilizando, por exemplo, a avaliação da frequência do distúrbio, expandido o método proposto para processos com mais de um distúrbio. A partir do modelo dinâmico, poderiam ser comparados também os resultados obtidos com estruturas obtidas pelo método do espaço nulo e o método exato local, de modo a verificar se surgem problemas de controle devido à utilização de combinações lineares como variáveis controladas. Adicionalmente, podem ser avaliados os parâmetros ótimos do controlador para cada estrutura, assim como a resposta de cada uma frente a distúrbios que não foram previstos durante a escolha das variáveis controladas.

Referências Bibliográficas

Almeida, E.; Secchi, A. R. Solving dynamic optimization infeasibility problems. **Computers and Chemical Engineering**, v. 36, n. 1, p. 227-246, 2012.

Alstad, V. **Studies on selection of controlled variables**. 2005. (Dr. Ing.). Department of Chemical Engineering, Norwegian University of Science and Technology.

Alstad, V.; Skogestad, S. Combination of measurements as controlled variables for self-optimizing control. **European Symposium on Computer Aided Process Engineering - 13**, v. 14, p. 353-358, 2003. ISSN 1570-7946.

Alstad, V.; Skogestad, S. Null space method for selecting optimal measurement combinations as controlled variables. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 46, n. 3, p. 846-853, Jan 2007.

Alstad, V.; Skogestad, S.; Hori, E. S. Optimal measurement combinations as controlled variables. **Journal of Process Control**, v. 19, n. 1, p. 138-148, // 2009.

Araujo, A. C. B.; Govatsmark, M.; Skogestad, S. Application of plantwide control to the HDA process. I-steady-state optimization and self-optimizing control. **Control Engineering Practice**, v. 15, n. 10, p. 1222-1237, Oct 2007.

Araujo, A. C. B.; Hori, E. S.; Skogestad, S. Application of plantwide control to the HDA process. II - Regulatory control. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 46, n. 15, p. 5159-5174, Jul 2007.

Chachuat, B.; Marchetti, A.; Bonvin, D. Process optimization via constraints adaptation. **Journal of Process Control**, v. 18, n. 3-4, p. 244-257, // 2008.

Darby, M. L. et al. RTO: An overview and assessment of current practice. **Journal of Process Control**, v. 21, n. 6, p. 874-884, 2011.

Diehl, M.; Amrit, R.; Rawlings, J. B. A Lyapunov function for economic optimizing model predictive control. **IEEE Transactions on Automatic Control**, v. 56, n. 3, p. 703-707, 2011.

Diehl, M. et al. Real-time optimization and nonlinear model predictive control of processes governed by differential-algebraic equations. **Journal of Process Control**, v. 12, n. 4, p. 577-585, 2002.

Engell, S. Feedback control for optimal process operation. **Journal of Process Control**, v. 17, n. 3, p. 203-219, Mar 2007.

Francois, 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**, v. 15, n. 6, p. 701-712, Sep 2005.

Govatsmark, M. S.; Skogestad, S. Selection of controlled variables and robust setpoints. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 44, n. 7, p. 2207-2217, Mar 2005.

Halvorsen, I. J. et al. Optimal selection of controlled variables. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 42, n. 14, p. 3273-3284, // 2003.

Haykin, S. **Redes neurais: princípios e prática**. 2.ed. bookman, 2001.

Jaschke, J.; Skogestad, S. NCO tracking and self-optimizing control in the context of real-time optimization. **Journal of Process Control**, v. 21, n. 10, p. 1407-1416, Dec 2011.

Kariwala, V. Optimal measurement combination for local self-optimizing control. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 46, n. 11, p. 3629-3634, May 2007. ISSN 0888-5885.

Kariwala, V.; Cao, Y.; Janardhanan, S. Local self-optimizing control with average loss minimization. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 47, n. 4, p. 1150-1158, // 2008.

Larsson, T. *et al.* Control structure selection for reactor, separator, and recycle processes. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 42, n. 6, p. 1225-1234, // 2003.

Larsson, T. *et al.* Self-optimizing control of a large-scale plant: The Tennessee Eastman process. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 40, n. 22, p. 4889-4901, Oct 2001.

Manum, H.; Skogestad, S. Self-optimizing control with active set changes. **Journal of Process Control**, v. 22, n. 5, p. 873-883, Jun 2012.

Marlin, T. E.; Hrymak, A. Real-time operations optimization of continuous processes. 1997a, in: Proceedings of CPC V, AIChE Symposium Series. p.156-164.

Marlin, T. E.; Hrymak, A. Real-time operations optimization of continuous processes. CPC V, 1997b, AIChE Symposium Series. p.156-164.

Miletic, I. P.; Marlin, T. E. On-line statistical results analysis in real-time operations optimization. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 37, n. 9, p. 3670-3684, Sep 1998.

Mizoguchi, A.; Marlin, T. E.; Hrymak, A. N. Operations optimization and control design for a petroleum distillation process. **Canadian Journal of Chemical Engineering**, v. 73, n. 6, p. 896-907, // 1995.

Morari, M.; Arkun, Y.; Stephanopoulos, G. STUDIES IN THE SYNTHESIS OF CONTROL STRUCTURES FOR CHEMICAL PROCESSES. **AIChE Journal**, v. 26, n. 2, p. 220-232, 1980.

Müller, G. H. **Energia Requerida para a Separação como Ferramenta de Otimização Operacional e Controle de Colunas de Destilação**. 2012. (M.Sc. Thesis). Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Sayalero, E. G. et al. **Self-optimizing control for hydrogen optimization in a diesel hydrodesulfurization plant**. 31: 1647-1651 p. 2012.

SEBORG, D. E.; EDGAR, T. F.; MELLICHAMP, D. A. **Process Dynamics and Control**. John Wiley & Sons, 1989.

Sequeira, S. E.; Graells, M.; Puigjaner, L. Real-time evolution for on-line optimization of continuous processes. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 41, n. 7, p. 1815-1825, 2002.

Skogestad, S. Plantwide control: The search for the self-optimizing control structure. **Journal of Process Control**, Beijing, China, v. 10, n. 5, p. 487-507, // 2000a.

Skogestad, S. Self-optimizing control: The missing link between steady-state optimization and control. **Computers and Chemical Engineering**, v. 24, n. 2-7, p. 569-575, // 2000b.

Trierweiler, J. O. **A Systematic Approach to Control Structure Design**. 1997. (Ph.D. Thesis). University of Dortmund, Dortmund, Germany.

Trierweiler, J. O.. **Notas de Aula - Disciplina de Otimização de Processos**. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil. 2012

Tvrzská de Gouvêa, M.; Odloak, D. One-layer real time optimization of LPG production in the FCC unit: Procedure, advantages and disadvantages. **Computers and Chemical Engineering**, v. 22, n. SUPPL.1, p. S191-S198, 1998.

Würth, L.; Hannemann, R.; Marquardt, W. A two-layer architecture for economically optimal process control and operation. **Journal of Process Control**, v. 21, n. 3, p. 311-321, 2011.

Ye, L. et al. Approximating necessary conditions of optimality as controlled variables. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 52, n. 2, p. 798-808, // 2013.

Yelchuru, R.; Skogestad, S. Convex formulations for optimal selection of controlled variables and measurements using Mixed Integer Quadratic Programming. **Journal of Process Control**, v. 22, n. 6, p. 995-1007, // 2012.

Yip, W. S.; Marlin, T. E. The effect of model fidelity on real-time optimization performance. **Computers & Chemical Engineering**, v. 28, n. 1-2, p. 267-280, Jan 2004.

Zanin, A. C.; Tvrzská de Gouvêa, M.; Odloak, D. Integrating real-time optimization into the model predictive controller of the FCC system. **Control Engineering Practice**, v. 10, n. 8, p. 819-831, 2002.

Zhang, Y.; Nadler, D.; Forbes, J. F. Results analysis for trust constrained real-time optimization. **Journal of Process Control**, v. 11, n. 3, p. 329-341, Jun 2001.