



X Oktoberforum – PPGEQ

04 a 07 de outubro de 2011

OTIMIZAÇÃO DINÂMICA DE SISTEMAS COM RESTRIÇÕES DE CAMINHO

Marco Antônio Müller¹, Rafael de Pelegrini Soares¹

¹ Grupo de Integração, Modelagem, Simulação, Controle e Otimização de Processos
Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS)
R. Eng. Luis Englert, s/n. Campus Central. CEP: 90040-040 - Porto Alegre - RS - BRASIL,
E-MAIL: {mamuller, rafael}@enq.ufrgs.br

Resumo: Este trabalho apresenta a formulação e discussão de um problema de otimização dinâmica com restrições de caminho. Este tipo de problema é complexo e diversos métodos podem ser encontrados para a sua resolução. Este trabalho enfoca no método direto-sequencial como o mais adequado para a resolução do problema de otimização e testa duas possibilidades para lidar com as restrições de caminho. Um exemplo numérico é utilizado para apresentar a abordagem da discretização das restrições de caminho como mais adequada em um contexto geral.

Palavras-chave: otimização dinâmica, restrições de caminho, controle ótimo, control vector parametrization

1. Introdução

Na engenharia química é frequente a busca por condições ótimas de operação. Muitas vezes os sistemas de interesse apresentam comportamento altamente não linear, tanto nos resultados estacionários como no comportamento dinâmico. Como condição ótima entende-se alguma medida que quantifique uma relação entre o valor dos produtos e matérias-primas, o consumo de energia, o impacto ambiental e a segurança. Metas como receita de bateladas, operação de processos instáveis próximos a restrições e a mínima produção de produtos fora de especificação em períodos transientes são típicos problemas que podem ser formulados no formato de otimização dinâmica, além de aplicações como controladores preditivos e estimação de parâmetros.

Em muitas situações, problemas de otimização estacionária não são suficientes: em processos batelada e em processos contínuos em que os graus de liberdade dinâmicos tomam parte da otimização. Nestes regimes dinâmicos, quando se visa maximizar a lucratividade, tende-se a operar a planta sobre as restrições de máxima produção e a aplicação de uma otimização estacionária pode muito bem ignorar a possibilidade de violação das restrições em regime transiente.

As aplicações de otimização dinâmica podem ser divididas em dois grupos, Otimização Dinâmica e Otimização Dinâmica em Tempo Real. A primeira é referente às aplicações *off-line*, resultando na solução de um problema único com uma solução definitiva. A segunda refere-se às aplicações *online*, geralmente executadas de forma cíclica a partir de dados obtidos do sistema supervisório do processo industrial.

A otimização dinâmica é um problema matemático

que difere de problemas de otimização estacionários usuais. A diferença reside principalmente nas variáveis de decisão e restrições que não são apenas variáveis pontuais, mas sim funções que podem variar com o tempo – as variáveis de controle do sistema e as restrições de caminho.

Para se resolver o problema de otimização dinâmica, os métodos são tradicionalmente divididos em diretos e indiretos. Este trabalho utiliza um método direto-sequencial, no qual o sistema dinâmico é integrado dentro das iterações do problema de otimização não linear, o que permite que estas etapas sejam tratadas de forma desacoplada. As variáveis de decisão da otimização são as variáveis de entrada do sistema em forma parametrizada. Neste contexto, o presente trabalho visa apresentar uma formulação para a solução de problemas de otimização dinâmica com restrições de caminho, discutindo as suas vantagens e limitações. A metodologia escolhida tem a vantagem de ser genérica e independente da estrutura do problema.

2. Formulação do problema de Otimização dinâmica

Como todo problema de otimização, a otimização dinâmica é caracterizada por uma função objetivo a ser minimizada (ou maximizada) enquanto restrições devem ser respeitadas. A diferença fundamental, matematicamente falando, é que estas são definidas a partir das variáveis de um modelo dinâmico, representado por um sistema algébrico-diferencial e condições iniciais:

$$F(y(t), \dot{y}(t), u(t), p, t) = 0 \quad (1)$$

$$y(0) = y_0 \quad (2)$$

onde $y(t) \in \mathcal{R}^n$ são os estados do sistema, $\dot{y}(t)$ são suas derivadas, $u(t) \in \mathcal{R}^m$ são as entradas do sistema, $p \in \mathcal{R}^p$

são parâmetros constantes e t é a variável independente (o tempo). A caracterização do problema de otimização se dá pela função objetivo e pelas restrições. A função objetivo, descrita a seguir, é uma medida da condição final do sistema. Ela pode ser formulada quanto ao estado final ou ainda quanto a todo o progresso dinâmico do sistema, se a própria função objetivo for uma variável diferencial. Além disso, o próprio tempo final da integração pode ser uma variável de decisão em problemas conhecidos como de *tempo mínimo*.

$$f = \psi(y, \dot{y}, u, p) \Big|_{t_f} \quad (3)$$

$$g^L(t) \leq g(y(t), u(t), p, t) \leq g^U(t) \quad (4)$$

As restrições g_i envolvidas neste problema de otimização, com i definido de 1 a γ , podem, assim como a função objetivo, ser definidas em apenas um instante como ao longo de todo o domínio do tempo. As primeiras são ditas restrições terminais ou restrições interiores, dependendo de qual o instante em que estão definidas; as outras são as restrições nas variáveis de controle e as restrições de caminho, que envolvem os estados do sistema.

Problemas de otimização dinâmica que buscam encontrar as variáveis $u(t)$ que minimizem ou maximizem a função objetivo em malha aberta são ditos problemas de controle ótimo. Existem diversos métodos disponíveis para a resolução deste problema, notavelmente o método sequencial-direto, conhecido também como *Control Vector Parametrization (CVP)* (VASSILIADIS *et al.*, 1994), que se baseia na caracterização da função de entrada do sistema $u(t)$ por n_c parâmetros, enquanto que os estados do sistema permanecem contínuos e são obtidos pela integração do mesmo. O resultado deste método é um problema de otimização cujo tamanho aumenta não só com o número de parâmetros constantes (n_p) e variáveis de controle (n_u), mas também com o número de discretizações (n_c): $n_u n_c + n_p$. Através deste raciocínio, se considerássemos o problema de otimização com as variáveis de decisão contínuas, teríamos um problema de otimização de ordem infinita.

Outras metodologias também são bastante difundidas, dentre elas a metodologia indireta e a direta-simultânea. A metodologia indireta é baseada na teoria do cálculo variacional (PONTRYAGIN *et al.*, 1964), adicionando outras variáveis e equações (sistema adjunto) e transformando o problema de valor inicial original em um problema de duas fronteiras, nas quais as condições de otimalidade estão implícitas. Este método tem diversas limitações, como por exemplo a menor generalidade na resolução e a incapacidade de lidar com restrições de caminho.

Os métodos direto-simultâneos baseiam-se na discretização de todas as variáveis do sistema, incluindo assim tanto as variáveis de controle como os estados do sistema, no mesmo nível do problema de otimização (KAMESWARAN & BIEGLER, 2006). O resultado é um problema de otimização de dimensão muito grande, porém de estrutura esparsa. O método é bastante estável e generalizável, sendo que a consideração das restrições de caminho é intrínseca à estrutura. Porém, métodos direto-simultâneos são geralmente inadequados para sistemas dinamicamente rígidos ou instáveis, além de serem muito

sensíveis aos parâmetros de sintonia do algoritmo de otimização, dado que este está fortemente comprometido com a resolução do sistema algébrico diferencial implícito (ALMEIDA & SECCHI, 2010).

Os métodos diretos em geral têm vantagem quanto à robustez da solução, enquanto que os métodos indiretos resultam em problemas matemáticos mais complexos e de aplicação limitada. Restrições de caminho são um fator complicador que descarta a opção dos métodos indiretos e que necessita de especial atenção no caso dos problemas direto-sequenciais, uma vez que a discretização utilizada não garante que as restrições contínuas sejam sempre respeitadas.

2.1 Formulação e resolução do método Direto-Sequencial

A ideia básica do método direto-sequencial é a segmentação do problema original em dois subproblemas: a otimização não linear (NLP) e a integração do sistema algébrico-diferencial. Assim é possível tratar ambos os problemas separadamente, sendo que para a integração são disponíveis diversos algoritmos eficientes como o DASSL (BRENAN *et al.*, 1996) e o IDA (HINDMARSH *et al.*, 2005), enquanto que para a otimização também existem diversas opções e metodologias, desde algoritmos estocásticos a algoritmos determinísticos aptos a lidar com problemas de grande escala, como o IPOPT (WÄCHTER & BIEGLER, 2005).

Desta forma, para cada cálculo da função objetivo é necessária uma integração do sistema, o que envolve considerável carga computacional. Isto indica que o método de otimização a ser utilizado não pode necessitar deste valor muitas vezes, o que normalmente descarta os métodos estocásticos.

Métodos determinísticos em geral resolvem o problema de otimização respeitando as condições de Karush-Kuhn-Tucker (KKT) (NOCEDALL, 1999), o que exige a obtenção dos gradientes da função objetivo e restrições em relação às variáveis de decisão. O cálculo destes é possível ao estendermos o sistema original para calcular também as variáveis de sensibilidades, definidas pela derivada das variáveis do sistema com relação às variáveis de decisão do problema de otimização.

A maneira mais usual de se parametrizar as variáveis de controle do sistema é através de uma função contínua por partes, pois, além da implementação ser simples, é a maneira mais comum de se operar processos na prática. A parametrização de uma dessas variáveis, representada por n_c elementos de mesma duração ao longo de todo intervalo de tempo considerado na otimização, é descrita da seguinte forma:

$$\begin{cases} u(t) = c_i, & t_{i-1} \leq t \leq t_i \\ t_i = \frac{t_f}{n_c} i, & i = 1, 2, \dots, n_c \end{cases} \quad (5)$$

Para que esta formulação se aproxime do comportamento realmente ótimo das variáveis de controle do sistema, é necessário termos um número de elementos discretos muito grande. Porém, isso não é interessante uma vez que as ações de controle na prática também têm geralmente o padrão constante por partes e os intervalos de tempo envolvidos geralmente são consideráveis. Isto se

dá porque a otimização dos processos se dá numa escala de tempo acima das malhas de estabilização e inventário (TRIERWEILER & FARENZENA, 2007).

2.2 Restrições de caminho

Assim como as variáveis de controle do sistema, as restrições de caminho são funções definidas em todo o domínio de tempo considerado. O método de resolução do problema de otimização dinâmica utilizado neste trabalho, o direto-sequencial, permite tratar os subproblemas da integração do sistema em um nível interno ao da otimização. Portanto, assim como as variáveis de controle, as restrições de caminho precisam ser formuladas no problema de integração e os respectivos resultados tratados no nível do problema de otimização. Mais detalhes na implementação do método são apresentados na seção 3.

A implementação mais usual do tratamento de restrições de caminho é a discretização destas junto com as variáveis de controle. Esta forma não é aconselhável, uma vez que as avaliações das restrições de caminho são feitas demasiadamente espaçadas, o que permite que as restrições sejam significativamente violadas, resultando em uma solução que não satisfaz o problema original (não discretizado).

Na literatura são encontradas diferentes alternativas a este método (VASSILIADIS, 1994; FEEHERY & BARTON, 1998), dentre estas a utilização de uma discretização mais fina para as restrições de caminho e a integração de novas variáveis junto ao sistema original, relativas às violações das restrições de caminho, transformando as restrições de caminho em restrições terminais.

A transformação das restrições de caminho em restrições terminais é feita integrando uma função $h(t)$ junto ao sistema. Esta função tem a propriedade de ser diferente de zero apenas quando as restrições de caminho são violadas. A restrição terminal obtida é portanto:

$$g_i^{t_i} = \int_0^{t_i} h(y(t), u(t), p, t) \leq 0 \quad (6)$$

A formulação $h(t) = \min(g_i(t), 0)$ (para uma restrição de caminho da forma $g_i(t) \geq 0$) é indesejável pois o seu gradiente é descontínuo, o que traz instabilidades aos algoritmos de otimização determinística. Uma alternativa para contornar este problema é a equação 7, mas outras formulações são propostas na literatura, como em TEO *et al* (1991).

$$h(t) = [\min(g_i(t), 0)]^2 \quad (7)$$

O método da discretização das restrições de caminho de forma independente às entradas transforma cada restrição de caminho contínua em n_r restrições interiores (pontuais). Apesar do aumento do problema de otimização, a carga computacional não é aumentada significativamente, uma vez que o principal fator continua sendo a integração do sistema de equações original e sensibilidades, necessária a cada avaliação da função objetivo. Métodos como este tem sido amplamente utilizados em trabalhos que tratam o problema da otimização dinâmica da forma direta-sequencial. SCHLEGEL *et. al.* (2005) afirmam que, para problemas onde a discretização das variáveis de controle é razoável, um fator de 2 para a discretização das

restrições de caminho é suficiente para a maioria das aplicações práticas.

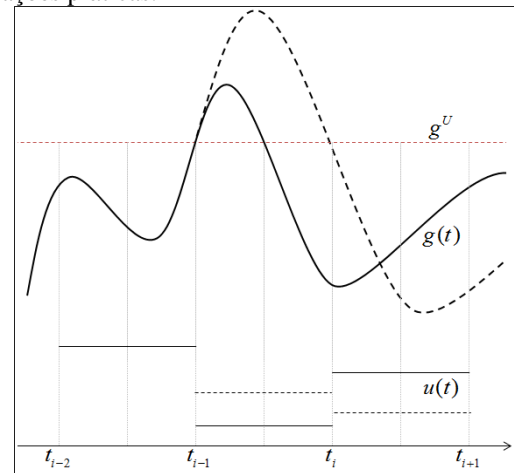


Figura 1. Discretização da restrição de caminho: tracejado $n_r = n_c$ e linha cheia $n_r = 2n_c$.

A Figura 1 traz uma representação esquemática deste método quando comparado com a abordagem tradicional. São apresentadas duas soluções sobrepostas, a primeira (linha tracejada) é a solução do problema de otimização no qual a restrição de caminho é discretizada junto às variáveis de controle, ou seja, é avaliada nos mesmos instantes de tempo que as mudanças da variável de controle. A outra solução (linha cheia) representa a solução do mesmo problema quando a restrição de caminho é discretizada em intervalos da metade do tamanho dos intervalos utilizados para as entradas.

A curva superior corresponde a uma variável $g(t)$ sujeita à restrição superior g^U em todo o domínio do tempo, enquanto a variável de controle $u(t)$ é representada por uma função constante por partes. Note que o algoritmo de otimização tende a manter as restrições ativas, o que acarreta na violação da restrição no intervalo aberto entre t_{i-1} e a próxima avaliação da restrição.

3. Implementação dos métodos discutidos

Foi implementada uma ferramenta protótipo para a resolução de problemas genéricos de otimização dinâmica utilizando a metodologia direto-sequencial. As alternativas de tratamento de restrições de caminho apresentadas neste trabalho foram implementadas e testadas desta forma.

Esta implementação foi feita em linguagem Java, interfaceando com os algoritmos especialistas para lidar com a integração do sistema dinâmico e a otimização não linear (NLP). A interface foi feita utilizando os recursos da *Java Native Interface (JNI)*, que permite a utilização de código em linguagem C.

Para a integração, foi utilizado o IDAS (HINDMARSH *et al.*, 2005) e para a otimização foi utilizado o IPOPT (WÄCHTER & BIEGLER, 2005), dada a sua notável capacidade de lidar com problemas de grande escala. Ambos os algoritmos são de código aberto e disponíveis em linguagem C.

A ferramenta desenvolvida trata de um ambiente genérico onde sistemas dinâmicos são descritos em classes que implementam recursos de derivação automática (GRIEWANK, 2000). Desta forma, tendo detalhado as equações que descrevem este sistema, as grandezas necessárias para a otimização dinâmica (função resíduo, jacobianas,...) são obtidas automaticamente.

De posse de um sistema dinâmico, é possível criar um problema de otimização definindo a função objetivo, as restrições (diferenciando entre pontuais ou contínuas), o nível de discretização das variáveis de controle e os limites das variáveis de decisão e do domínio do tempo. A discretização das entradas e o cálculo dos gradientes da função objetivo e restrições também pode ser feito automaticamente, utilizando de derivação automática.

A relação entre a integração do sistema e a otimização é dada pelas variáveis de sensibilidade $s(t)$, utilizadas nos cálculos dos gradientes da função objetivo e jacobiana das restrições. Estas variáveis são obtidas pela extensão do sistema original através da aplicação da regra da cadeia às variáveis do sistema original:

$$F_y s + F_{\dot{y}} \dot{s} + F_u = 0, \quad s(t=0) = 0 \quad (8)$$

Para obter estas equações, são necessárias as jacobianas do sistema original em relação às variáveis (y) e às ações de controle parametrizadas (u). Esta extensão do sistema original é feita automaticamente na ferramenta protótipo, o que ilustra a vantagem do método direto-sequencial em generalidade de aplicação.

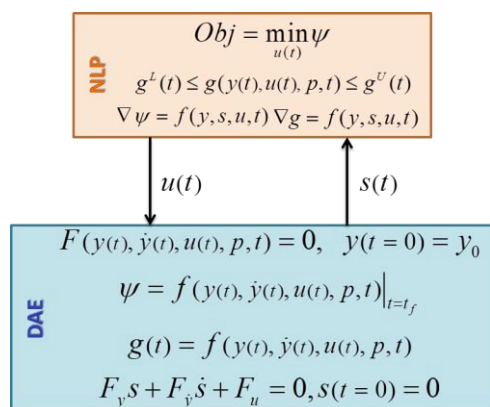


Figura 2. Visão geral da implementação

Assim, a resolução do problema de otimização dinâmica segue a partir de um chute inicial para $u(t)$. A ferramenta executa a integração do sistema estendido e calcula a função objetivo, as restrições pontuais e os gradientes. A integração é feita de tal forma que as variáveis de controle são atualizadas de acordo com a discretização utilizada, nos respectivos instantes de tempo. Durante a integração, na medida em que mais ações de controle são tomadas, mais variáveis de sensibilidade são diferentes de zero e participam na tomada de decisão do algoritmo NLP.

De posse dos valores calculados, o algoritmo NLP calcula um novo $u(t)$ e o processo se repete iterativamente até que as condições de otimalidade sejam satisfeitas.

Como as restrições são tratadas no âmbito discreto da otimização, as restrições de caminho precisam ser transformadas em restrições pontuais e os gradientes destas restrições precisam ser avaliados. Para isto, a implementação dos dois métodos propostos é apresentada a seguir.

3.1 Restrições de caminho por discretizações

Neste método a restrição de caminho contínua é discretizada em n_r discretizações pontuais. Cada uma destas tem também um valor de gradiente diferente de zero

para todas as ações de controle tomadas até o instante de tempo referente a ela.

Foi adicionado à classe do problema de otimização um fator referente à relação entre a discretização das variáveis de controle e as restrições de caminho, n_r/n_c . Se este fator for maior que 1, a integração do sistema é verificada a cada instante de tempo múltiplo de t/n_r e os valores da referente restrição pontual e do gradiente em relação a todas as ações de controle já tomadas são salvos na memória e são manipulados adequadamente pelo algoritmo de otimização.

3.2 Restrições de caminho pela transformação em restrições terminais

Restrições de caminho são transformadas em restrições terminais através da integração de uma função que quantifique as violações delas ao longo do domínio do tempo. Para isso, foi utilizada a equação 7, que não depende de nenhum parâmetro de sintonia e tem o seu gradiente contínuo.

A integração da função $h(t)$ é feita junto ao sistema, porém como variável de quadratura (não é considerada nos testes de convergência da integração), portanto não é necessária a intervenção na classe do sistema dinâmico utilizado.

4. Experimento numérico

Reatores exotérmicos são um bom exemplo para problemas de restrições de caminho em otimização dinâmica, uma vez que uma maior conversão de reagentes tende a aumentar a temperatura, o que geralmente vai contra as restrições de segurança do processo.

Este trabalho traz como exemplo o reator exotérmico semi-batelada apresentado por SRINIVASAN (2003), onde ocorrem reações em série $A + B \rightarrow C \rightarrow D$, tendo este duas variáveis de controle, a vazão de B e a temperatura do reator. O objetivo da otimização é a maximização da produção do produto intermediário C . As equações do modelo e as definições do problema de otimização são dados a seguir.

$$\frac{dy_1}{dt} = -k_1 y_1 y_2 - \frac{u_1}{V} y_1, \quad y_1(0) = 10 \text{ mol/l} \quad (7)$$

$$\frac{dy_2}{dt} = -k_1 y_1 y_2 - \frac{u_1}{V} (20 \text{ mol/l} - y_2), \quad (8)$$

$$y_2(0) = 1,1685 \text{ mol/l}$$

$$\frac{dy_3}{dt} = k_1 y_1 y_2 - k_2 y_3 - \frac{u_1}{V} y_3, \quad y_3(0) = 0 \quad (9)$$

$$\frac{dy_4}{dt} = u_1, \quad u_1(0) = 11 \quad (10)$$

$$k_1 = 4e^{-6 \times 10^3 \text{ K}/8,314 u_2} \text{ l/mol h} \quad (11)$$

$$k_2 = 800e^{-20 \times 10^3 \text{ K}/8,314 u_2} \text{ l/h} \quad (12)$$

$$f = \max_{u(t)} y_3(t_f) y_4(t_f) \quad (13)$$

$$0 \leq u_1 \leq 1 \quad (14)$$

$$293 \text{ K} \leq u_2 \leq 323 \text{ K} \quad (15)$$

$$y_4 \leq 1,11 \quad (16)$$

$$(1,2 \times 10^4 \text{ J/mol}^2 \text{ h}) y_1 y_2 y_4 + \quad (17)$$

$$+(8 \times 10^5 \text{ J/mol h}) y_3 y_4 \leq 1,5 \times 10^5$$

As variáveis y_1 , y_2 , y_3 e y_4 correspondem às

concentrações de A, B e C e ao volume do reator, respectivamente. As variáveis de controle u_1 e u_2 são a vazão de B e a temperatura da reação. A otimização é calculada para um horizonte de tempo de 0,5 h, sendo as entradas parametrizadas como funções constantes por partes, divididas em 20 pontos igualmente espaçados. O sistema tem restrições nas variáveis de controle, no volume total e no calor máximo que o sistema de resfriamento é capaz de lidar – equações 14 a 17.

4.1 Resultados da otimização dinâmica

Para resolver este problema de otimização dinâmica, foram testados os dois métodos de restrições de caminho apresentados na seção 2.2.

Utilizando o método da discretização das restrições de caminho, obteve-se um problema de otimização com 40 variáveis de decisão, todas com restrições conforme as equações 14 e 15. A restrição referente à remoção de calor do reator, equação 17, foi discretizada em n_r pontos, enquanto que a restrição de volume foi tratada apenas como restrição final, uma vez que se trata de uma variável do tipo integrador.

A Figura 3 mostra o resultado do calor removido no reator para $n_r = 20, 40$ e 60 e 200 . Percebe-se que a solução é caracterizada por três etapas – a primeira, com tempo menor que 0,05 h, na qual o sistema evolui da condição inicial em direção às máximas conversões de reagentes permitidas – ativando a restrição da remoção de calor. O sistema permanece sobre esta restrição até que o produto desejado C passar a ser consumido, e, a partir de 0,30 h, a alimentação de reagente é cessada e a temperatura do reator é diminuída evitando a formação do produto indesejado.

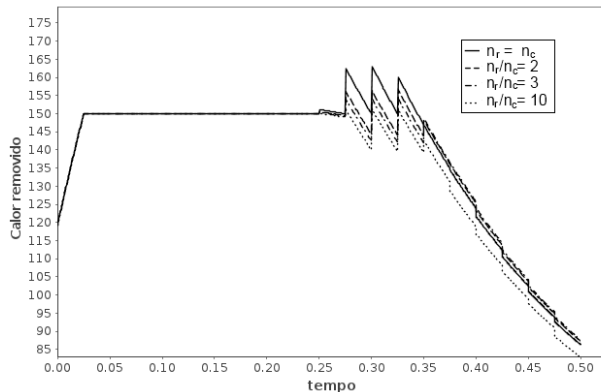


Figura 3. Restrição de calor removido do reator exotérmico.

Percebe-se que ao final da alimentação de reagentes (2ª etapa) há a violação da restrição de geração de calor, principalmente quando as restrições de caminho são discretizadas no mesmo nível que as variáveis de controle do sistema. A Figura 4 mostra essa região em mais detalhes.

Na Figura 4 percebe-se que quando temos $n_r = n_c$ as restrições de caminho são respeitadas apenas justamente nos pontos de mudança das variáveis de controle (que neste exemplo resultam em um comportamento de serra da variável calculada). Nos intervalos compreendidos entre esses pontos, a restrição é violada, visto que a violação dessa restrição resulta em um aumento da produção de C e, por conseguinte, da função objetivo. Na medida em que discretizamos a restrição de caminho em intervalos

menores, a restrição original é cada vez menos violada, porém ainda assim mantendo um padrão de serra que certamente não corresponde a uma solução ótima viável do problema original (não discretizado).

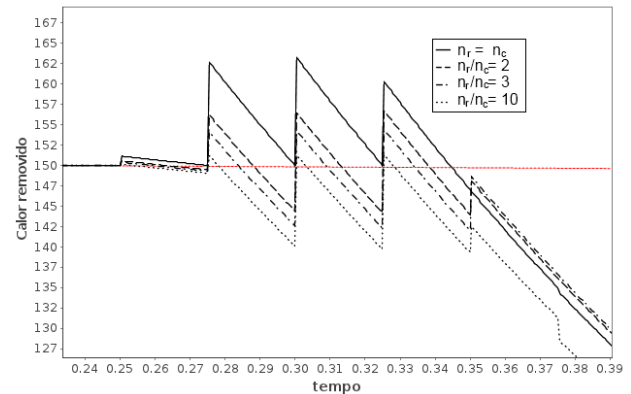


Figura 4. Desativação da restrição de caminho.

A Tabela 1 apresenta alguns valores que comparam o desempenho do algoritmo de otimização em cada situação: o número total de restrições de desigualdade pontuais, o número de iterações do algoritmo NLP, o número de chamadas da função objetivo, a fração do tempo computacional utilizado pelo algoritmo de otimização (NLP) e o valor alcançado para a função objetivo.

Tabela 1. Comparação entre as discretizações da restrição de caminho

	$n_r/n_c = 2$	$n_r/n_c = 3$	$n_r/n_c = 10$
restrições	41	61	201
iterações NLP	55	49	46
chamadas de f	56	51	49
% cpu NLP	2,88	2,66	3,41
função objetivo	2,145	2,048	2,050

Como análise mais importante destes resultados, tem-se que o aumento na discretização das restrições de caminho não impõe dificuldades à resolução deste problema, mas inclusive torna o algoritmo mais eficiente, o que pode ser visto pela diminuição do seu número de iterações. Isto pode ser justificado pela diminuição da inviabilidade da solução encontrada, que requer uma procura mais rigorosa das variáveis de decisão que ativam as restrições sobre os pontos avaliados. Desta forma, também são necessárias menos avaliações da função objetivo, o que significa um ganho de eficiência pois são menos integrações do sistema. Além desses pontos, o tempo necessário para o algoritmo lidar com as restrições de desigualdade extras ainda é muito menor que o tempo tomado nas avaliações da função objetivo, mesmo com um fator de 10 na discretização da restrição em relação às variáveis de controle.

O mesmo caso foi testado com a técnica de transformação da restrição de caminho em uma restrição terminal através da integração de uma função penalidade que quantifique a violação da restrição de caminho ao longo do domínio do tempo. Este método foi incapaz de encontrar uma solução, tendo parado após exaustivas tentativas do algoritmo IPOPT, atingindo o máximo de

iterações (500) e requerindo 697 avaliações da função objetivo.

Ao tratarmos deste problema apenas com restrições terminais, perdemos a capacidade de lidar com as violações da restrição de caminho nas proximidades da sua ocorrência. Isto torna a solução do problema muito difícil, uma vez que não se identifica os instantes da ativação e desativação da restrição de caminho, o que resulta em uma formulação de grande inviabilidade.

5. Conclusão e discussão

O presente trabalho apresentou algumas alternativas para a solução de problemas de otimização dinâmica com restrições de caminho. Estes problemas são complexos pois mesclam os conceitos de otimização e de integração de sistemas algébrico-diferenciais. O foco foi no método direto-sequencial, que trata destes dois problemas de forma modular, com a formulação do problema de otimização a partir dos resultados da integração do sistema.

O problema proposto como exemplo é simples mas tem como característica central de sua solução a repetida ativação de uma restrição de caminho. Somado a isto, a restrição de caminho compete com a função objetivo trazendo complicadores adicionais para a obtenção de uma solução que respeite as restrições contínuas do problema original. Desta forma, o problema mostrou-se de solução desafiante, sendo que um dos métodos apresentados não foi capaz de resolvê-lo e o outro, quando usando das heurísticas da literatura, não teve bons resultados.

Parte desta dificuldade de solução também é devida a forma como o modelo do problema foi construído, considerando a temperatura do reator como variável manipulada. Modelos mais realistas consideram a troca térmica através da camisa do reator, sendo manipulada a temperatura e/ou a vazão da corrente externa e havendo assim uma dinâmica na temperatura do reator, o que evita o comportamento não diferenciável (padrão serra) que dificulta a resolução do problema.

O método da transformação das restrições de caminho em restrições terminais não teve sucesso nesse problema em particular. A função de violação da restrição $h(t)$ é constante em toda a região viável do problema e a formulação utilizada na equação 7 tende a diminuir a importância de violações pequenas. Essas características, associadas às particularidades do problema estudado, mostraram que o método é menos robusto que o da discretização das restrições de caminho.

O método da discretização das restrições de caminho em um nível mais fino que as variáveis de controle do sistema mostrou-se muito adequado. O aumento da discretização das restrições de caminho não comprometeu a resolução da otimização, pelo contrário, aumentou a eficiência do algoritmo uma vez que a integração do sistema é mantida próxima à restrição ativa. Os maiores custos do algoritmo de otimização com relação às restrições extras não foi considerável frente aos custos da avaliação da função objetivo (integração do sistema).

A desvantagem desse método é que ele não garante nenhum limite para a violação das restrições nos intervalos entre as discretizações. Uma possibilidade de contornar esta dificuldade é a fusão de ambos os métodos estudados neste trabalho. Esta abordagem não nos livra das dificuldades de convergência do método das restrições

terminais, mas a inclusão das restrições intermediárias pode guiar o algoritmo a encontrar uma solução viável. Uma alternativa ainda seria contemplar na função objetivo uma penalidade para as violações da restrição de caminho, compensando assim ganhos que as violações nos intervalos não considerados pelo método trazem para a mesma.

Os métodos apresentados aqui foram avaliados quanto à aplicabilidade em situações gerais, mas salienta-se que os diferentes métodos podem ser mais indicados para casos específicos. Por exemplo, o método da restrição final pode ser mais interessante em outros problemas, uma vez que ela garante a viabilidade da solução segundo o problema de otimização original. O método deve funcionar melhor em casos em que a violação da restrição de caminho é bastante sensível às entradas de controle e quando as restrições de caminho não tendam a ser ativadas continuamente.

6. Referências

ALMEIDA NT, E.; SECCHI, A. R. Dynamic optimization of a FCC converter unit: numerical analysis. *Brazilian Journal of Chemical Engineering* v. 28, n.1, p. 117-136, 2011.

BRENAN, K.E.; CAMPBELL, S.L.; PETZOLD, L.R. *Numerical Solution of Initial Value Problems in Differential- Algebraic Equations*. Philadelphia: SIAM, 1996.

FEEHERY, W. F.; BARTON, P. I. Dynamic optimization with state variable path constraints. *Computers and Chemical Engineering*, v. 22, n. 9, p.1241-1256, 1998.

GRIEWANK, A. *On Automatic Differentiation*. Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2000.

HINDMARSH, A. C. et al. SUNDIALS: Suite of nonlinear and differential/algebraic equation solvers. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, v. 31, n. 3, p. 363–396, 2005.

KAMESWARAN, S.; BIEGLER, L. Simultaneous dynamic optimization strategies: Recent advances and challenges. *Computers & Chemical Engineering*, v. 30, n. 10-12, p. 1560-1575, 2006.

NOCEDAL, J. *Numerical optimization*. New York: Springer, 1999.

PONTRYAGIN, L. S.; BOLTYANSKII, V. G.; GAMKRELIDZE, R. V.; MISHCHENKO, E. F. *The Mathematical Theory of Optimal Processes*. New York: Wiley, 1962.

SRINIVASAN, B. Dynamic optimization of batch processes I. Characterization of the nominal solution. *Computers & Chemical Engineering*, v. 27, n. 1, p. 1-26, 2003.

TEO, K. L.; GOH, C. J.; WONG, K. H. *A Unified Computational Approach to Optimal Control Problems*. New York: John Wiley and Sons, 1991.

TRIERWEILER, J. O.; FARENZENA, M. Uma Visão Geral das Tecnologias Atualmente Empregadas em Controle Avançado de Processos Industriais. *Revista Controle & Instrumentação*, n. 113, p. 1-13, 2007.

VASSILIADIS, V. S.; SARGENT, R. W. H.; PANTELIDES, C. C. Solution of a class of multistage dynamic optimization problems. 2. Problems with path constraints. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 33: 2123–2133, 1994.

WÄCHTER, A.; BIEGLER, L. T. On the implementation of an interior-point filter line-search algorithm for large-scale nonlinear programming. *Mathematical Programming*, v. 106, n. 1, p. 25-57, 2005.