



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
UNIDADE ACADÊMICA DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA
QUÍMICA**

WALTER YANKO DE ARAGÃO BRANDÃO

**USO DE OBSERVADORES DE ESTADO APLICADOS NO CONTROLE
INFERENCIAL PREDITIVO DE PROCESSOS NÃO LINEARES**

CAMPINA GRANDE – PB

2020

WALTER YANKO DE ARAGÃO BRANDÃO

**USO DE OBSERVADORES DE ESTADO APLICADOS NO CONTROLE
INFERENCIAL PREDITIVO DE PROCESSOS NÃO LINEARES**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Campina Grande, como parte dos requisitos para obtenção do título de mestre em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. Heleno Bispo da Silva Júnior

CAMPINA GRANDE – PB

2020

B814u Brandão, Walter Yanko de Aragão.
Uso de observadores de estado aplicados no controle inferencial preditivo de processos não lineares / Walter Yanko de Aragão Brandão. - Campina Grande, 2019.
82 f. : il.

Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia, 2020.
"Orientação: Prof. Dr. Heleno Bispo da Silva Júnior.
Referências.

1. Controle de Modelo Preditivo. 2. Observadores de Estado. 3. Sensores Virtuais. 4. Filtro de Kalman. 5. Controle Inferencial. I. Silva Júnior, Heleno Bispo da. II. Título.

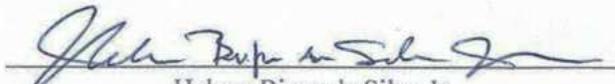
CDU 66.01(043)

**USO DE OBSERVADORES DE ESTADOS APLICADOS NO CONTROLE
INFERENCIAL PREDITIVO DE PROCESSOS NÃO LINEARES**

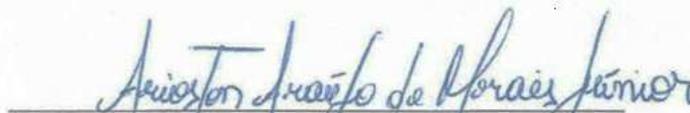
WALTER YANKO DE ARAGÃO BRANDÃO

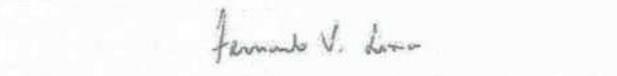
Dissertação apresentada em 23 / 09 / 2019

Banca Examinadora:


Heleno Bispo da Silva Jr.


Antonio Tavernard Pereira Neto


Arioston Araújo de Moraes Jr.


Fernando V. Lima

“Arrogância e medo impedem que você aprenda a mais simples e significativa lição de todas: não é sobre você.”

A Anciã.

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus pais Walter (Byaya) e Wilma (Mima), meu irmão Walter (Waltinho) e minha companheira Nicole (minha Liqinha), por sempre me apoiarem e darem forças nos momentos mais difíceis e, principalmente, pelo amor incondicional que recebo deles todos os dias.

Agradeço aos companheiros do LABMC e, em especial, ao prof. Dr. Arioston Morais Jr., da UFPB, pela grande amizade e pelo auxílio, sem os quais não seria possível concluir este trabalho.

Agradeço às instituições de ensino, UFCG e CAPES, e ao prof. Dr. Heleno Bispo pela orientação, acolhimento e paciência.

Agradeço a minha família, meus amigos, professores e todos aquelas que contribuíram para a formação do meu caráter, com felicidade, alegrias e os mais diversos momentos da vida.

Agradeço a mim mesmo por não ter desistido.

RESUMO

Para atender a padrões de qualidade, segurança, economia e sustentabilidade cada vez mais rigorosos, técnicas modernas de controle de processos como controle de modelo preditivo (MPC) podem ser utilizadas em sistemas complexos e altamente não lineares, nos quais a efetiva implementação de estratégias clássicas de controle (como o algoritmo PID convencional) torna-se difícil. Na presença de variáveis de processo cujas medições em tempo real e com baixa taxa de amostragem não estão disponíveis ou são de alto custo de manutenção e implementação, observadores de estado podem ser utilizados como estimadores no papel de sensores virtuais. Neste trabalho, um controle inferencial preditivo de modelo não linear (NMPC) com restrições foi implementado em um reator CSTR não isotérmico, produtor de propilenoglicol a partir da hidrólise de óxido de propileno e cujas entradas estão contaminadas com ruídos. Os estados da planta foram estimados por observadores de estado do tipo filtro de Kalman estendido (EKF) e *unscented* (UKF), sintonizados por três abordagens distintas. Além disso, foi utilizada uma abordagem heurística a fim de sintonizar os principais parâmetros do NMPC: tempo de amostragem, horizonte de controle e horizonte de predição. O desempenho dos observadores de estados pouco diferiu entre EKF e UKF, uma vez que a correta sintonia da matriz Q de covariância do processo mostrou-se determinante para a eficácia da estimativa. Enquanto no controle inferencial clássico (PID-UKF e Cascata-UKF) houve dificuldades de controlar o processo em regiões de instabilidade (devido também aos ruídos da planta), o controle avançado inferencial (NMPC-UKF) foi capaz de minimizar as oscilações da planta enquanto oferecia resposta de controle mais rápida, com menor *overshoot*, mais estável e respeitando a restrição de temperatura imposta no processo frente a perturbações nas entradas (controle regulatório), no *setpoint* (controle servo), e na partida do reator.

Palavras-chave: controle de modelo preditivo, observadores de estado, sensores virtuais, filtro de Kalman, controle inferencial.

ABSTRACT

To meet increasingly stringent quality, safety, economy and sustainability standards, modern process control techniques such as predictive model control (MPC) can be used in complex and highly nonlinear systems where the effective implementation of classic control (like the conventional PID algorithm) becomes difficult. In the presence of process variables whose real-time, low-sampling measurements are unavailable or costly to maintain and implement, state observers can be used as estimators in the role of virtual sensors. In this work, a constrained nonlinear predictive inferential control (NMPC) was implemented in a non-isothermal CSTR reactor, propylene glycol producer from propylene oxide hydrolysis and whose inputs are contaminated with noise. Plant states were estimated by extended (EKF) and unscented (UKF) Kalman filter-type state observers, tuned by three distinct approaches. Also, a heuristic approach was used in order to tune the main parameters of the NMPC: sampling time, control horizon and prediction horizon. The performance of the state observers differed little between EKF and UKF, since the correct tuning of the process covariance matrix Q was determinant for the estimation effectiveness. While in classical inferential control (PID-UKF and Cascade-UKF) there were difficulties in controlling the process in unstable regions (also due to plant noise), advanced inferential control (NMPC-UKF) was able to minimize plant oscillations while providing faster control response, with lower overshoot, more stable and meeting the temperature restriction imposed in the process against disturbances at the inputs (regulatory control), at the setpoint (servo control), and at the reactor startup.

Keywords: model predictive control, state observers, soft sensors, Kalman filter, inferential control.

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO.....	1
2 OBJETIVOS	4
2.1 OBJETIVO GERAL.....	4
2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS	4
3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	5
3.1 SENSORES VIRTUAIS.....	5
3.2 OBSERVADORES DE ESTADO	7
3.2.1 Filtro de Kalman.....	8
3.2.1.1 Filtro de Kalman estendido.....	9
3.2.2.2 Filtro de Kalman <i>unscented</i>	12
3.3 CONTROLE DE PROCESSOS NÃO LINEARES	14
3.3.1 Controle convencional: controlador proporcional-integrativo-derivativo (PID).....	15
3.3.2 Controle avançado: controle preditivo de modelo não linear (NMPC).....	17
3.3.2.1 Funcionamento geral do MPC.....	19
3.3.2.2 Otimização não linear - programação sequencial quadrática (SQP).....	21
4 METODOLOGIA.....	24
4.1 ESTUDO DE CASO – REATOR PRODUTIVO DE PROPILENOGLICOL	24
4.1.1 Modelagem do processo	24
4.1.1.1 Cinética de reação.....	25
4.1.1.2 Balanços materiais.....	26
4.1.1.3 Balanços energéticos	27
4.1.1.4 Modelo de espaço de estados	31
4.1.1.5 Ponto de operação do reator e parâmetros utilizados	31

4.1.2 Sensibilidade e não linearidade do processo: curvas de remoção e geração de calor ..	32
4.2 CONSTRUÇÃO DOS OBSERVADORES DE ESTADO	33
4.2.1 Implementação do filtro de Kalman estendido (EKF)	34
4.2.2 Implementação do filtro de Kalman <i>unscented</i> (UKF)	35
4.2.3 Sintonia dos parâmetros Q e R.....	37
4.3 IMPLEMENTAÇÃO DE ESTRATÉGIAS DE CONTROLE INFERENCIAL.....	39
4.3.1 Estratégias convencionais de controle: <i>feedback</i> e <i>cascata</i>	39
4.3.1.1 Sintonia dos controladores PID	40
4.3.2 Estratégia avançada de controle: NMPC	41
4.3.2.1 Função custo de otimização.....	42
4.3.2.2 Sintonia do NMPC	43
4.3.2.3 Restrições do processo	43
5 RESULTADOS	45
5.1 RESULTADOS DA ANÁLISE DA DINÂMICA DO PROCESSO	45
5.1.1 Curvas de remoção e geração de calor: não linearidade do processo	45
5.1.2 Resposta do sistema a perturbações.....	51
5.2 RESULTADOS DA CONSTRUÇÃO DOS OBSERVADORES DE ESTADO	57
5.2.1 Parâmetros de sintonia dos filtros de Kalman	57
5.2.2 Comparação entre EKF e UKF	59
5.3 RESULTADOS DO PROJETO DOS CONTROLADORES	62
5.3.1 Controle com algoritmo PID convencional	62
5.3.2 Controle avançado: preditivo não linear – NMPC.....	67
5.3.2.1 Parâmetros de sintonia do NMPC	67
5.3.2.2 Resposta do processo a perturbações	68
5.3.2.3 Restrições do processo: limite de operação da temperatura	71

6 CONCLUSÕES.....	74
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	77

1 INTRODUÇÃO

Indústrias químicas dos mais diversos ramos – tais como as de fármacos, indústrias nucleares, petroquímicas, de tintas e de materiais – requerem operações que atuem de forma segura e com especificações de produto que devem ser atingidas com a menor variação possível. Para que se obtenha tais resultados, o controle de processos é indispensável, de maneira que sua ausência pode levar a acidentes industriais ou queda na qualidade dos produtos. No entanto, a implementação efetiva de um sistema de controle só é possível quando se possui as medições das variáveis de processo em tempo real e com alta frequência de amostragem. Algumas dessas variáveis – tais como composição, conversão, diâmetro de partícula e concentração de biomassa – requerem equipamentos de alto custo e manutenção. Por causa disso, sua implementação torna-se muitas vezes inviável do ponto de vista econômico (Morais Jr., 2011).

Como uma solução econômica a esta problemática existe a técnica de implementação de sensores virtuais, que utilizam medições de variáveis de fácil acesso (chamadas de variáveis secundárias) – tais como temperatura, nível, pressão, vazão – para estimar em tempo real o valor de variáveis de difícil medição (variáveis primárias), tornando possível a implementação de um sistema de controle do processo de interesse. Entre algumas técnicas de identificação de modelos usados em sensores virtuais, segundo Lotufo *et al* (2008), estão: identificação paramétrica (ex.: ARMA, ARX, NARX, ARMAX e NARMAX), observadores (ou estimadores) de estados (ex.: filtros de Kalman, estimador de horizonte móvel), redes neurais artificiais (RNA), algoritmos genéricos e métodos estatísticos como análise de componentes principais (ACP), mínimos quadrados parciais (MQP) e regressão ponderada localmente (LWR).

A implementação de cada uma dessas técnicas conta com suas próprias restrições, aplicações, vantagens e desvantagens. Ali *et al* (2015) classificou diversos observadores de estado recentemente utilizados em processos químicos de acordo com a sua natureza. Quando o problema se trata da estimativa de parâmetros de um sistema dinâmico parcialmente definido, os estimadores bayesianos – como o Filtro de Kalman (*Kalman Filter*, KF) e suas derivações – são indicados. Em sua forma mais simples, o KF combina um modelo linear estocástico do sistema com medições em tempo real de variáveis de operação do processo para obter a melhor estimativa possível, otimizada para que tenha a menor covariância. Por utilizar apenas os dados dos instantes de amostragem atual e anterior, durante a sua atuação, seu algoritmo de execução é implementado

com baixo custo computacional. Para sistemas não lineares, o Filtro de Kalman Estendido (*Extended Kalman Filter* – EKF) é amplamente utilizado, obtendo resultados melhores do que o KF simples, que é linear. Jana *et al* (2006) implementou um EKF como sensor virtual em um sistema de controle para uma coluna de destilação usando um modelo compartimentalizado da coluna. O modelo proposto pelo autor representou uma coluna de 20 estágios utilizando apenas uma equação diferencial para cada secção da coluna, totalizando apenas 5 equações diferenciais (secção de retificação, de esgotamento, de alimentação, condensador e refeedor). Mesmo com um modelo simplificado, mas representativo do processo, o controle das composições da coluna foi obtido de maneira satisfatória.

Panda *et al* (2017) comparou os desempenhos de controles inferenciais utilizando um controlador baseado em modelo não linear (NMBC) e um controlador de modelo preditivo, também não linear (NMPC), trabalho no qual ambos os controladores obtiveram eficácia semelhante. Os valores em tempo real das variáveis de estado do processo – que são necessários durante a atuação do controlador NMPC – foram estimados a partir de um *Unscented Kalman Filter* (UKF), uma versão mais robusta do EKF.

Enquanto no algoritmo do EKF é utilizada uma linearização de primeira ordem do modelo matemático do sistema (por expansão em série de Taylor a cada instante de observação ou amostragem), o UKF utiliza, através da transformada *unscented*, pontos amostrais em torno da média da estimativa para fornecer inferências com precisão equivalente à linearização de terceira ordem (Wan *et al*, 2000). Diante disso, espera-se que o UKF obtenha resultados mais satisfatórios para sistemas mais distantes da condição de linearidade (ex.: processos com respostas senoidais), em troca de uma maior complexidade de implementação.

A presente dissertação apresenta metodologias para implementação e construção de sensores virtuais baseados em observadores de estado (EKF e UKF) aplicados a diferentes estratégias de controle (convencionais: cascata e *feedback* simples; e avançada: controle preditivo de modelo), cujos resultados são avaliados comparativamente e quantitativamente. Como estudo de caso, um sistema reacional que consiste em um reator contínuo (CSTR) não linear projetado para produção de propilenoglicol a partir da hidrólise de óxido de propileno foi escolhido. Um sistema de controle inferencial é proposto com o objetivo operacional de manter a concentração do produto próximo a um valor desejado (*setpoint*). Por conter restrições operacionais tais como

limites de segurança de temperatura e comportamento fortemente não linear, torna-se adequada a utilização de estimadores não lineares e estratégias avançadas de controle.

O trabalho é dividido em três etapas:

- ❖ Modelagem e simulação do reator produtivo de propilenoglicol, buscando o entendimento físico do processo e caracterização da sua não linearidade, junto com a análise da estabilidade operacional do processo;
- ❖ Projeto e implementação de sensores virtuais baseados nos observadores de estado de filtro de Kalman – EKF e UKF – através de dados de possíveis sensores físicos do reator e de dados de projeto do mesmo, sendo comparados os desempenhos de cada estimador;
- ❖ Construção e comparação de estratégias clássicas e avançadas de controle – PID convencional, controle em cascata e controle de modelo preditivo não linear (NMPC) com e sem restrições.

2 OBJETIVOS

2.1 OBJETIVO GERAL

Desenvolver e aplicar metodologias de implementação e construção de sensores virtuais para estimativa de variáveis de difícil medição a fim de se implementar esquemas de controle inferencial em um processo de altas não linearidades e restrições, avaliando comparativamente o desempenho de diferentes estimadores e estratégias de controle.

2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Simular dinamicamente o sistema reativo, avaliando a influência dos distúrbios e as restrições do processo quanto às condições de estabilidade operacional;
- Construir e implementar observadores de estado (EKF e UKF) como sensores virtuais, sintonizando-os e comparando o desempenho de cada tipo de estimador;
- Aplicar e comparar estratégias de controle clássica (PID convencional e cascata) e avançada (NMPC) a partir das estimativas dos estados, caracterizando o controle inferencial;
- Implementar restrições no controlador NMPC e efetuar o controle com restrições, comparando com os resultados anteriores;
- Traçar conclusões quanto à contribuição do trabalho em relação ao estudo da estabilidade de um processo na presença de ruídos, da construção e escolha do tipo de sensor virtual e da integração do mesmo a um sistema de controle avançado;

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1 SENSORES VIRTUAIS

Em qualquer sistema de monitoramento e controle a presença dos sensores é indispensável para que se possa observar e identificar o estado atual do sistema e para que se possa tomar ações de controle. No entanto, em algumas aplicações industriais, a medição em tempo real de algumas variáveis importantes ao controle de processos pode se tornar impraticável. Isso pode ocorrer devido a diferentes fatores, como o alto custo de implementação (como analisadores *on-line* de concentrações) ou o alto período de amostragem (Ascencio *et al*, 1998).

Por exemplo, a medição de concentrações em colunas de destilação pode ser feita em tempo real utilizando analisadores de linha, mas esses equipamentos possuem alto custo inicial de investimento e de manutenção, além de requererem pessoas capacitadas para seu uso (Morais Jr, 2015). Diante dessa problemática, surgiu um novo conceito: o de instrumentos inteligentes, que processam computacionalmente as medições obtidas de sensores físicos para fornecer as informações medidas da melhor forma possível (Berni, 2004).

Dentro da família de instrumentos inteligentes estão os **sensores virtuais** – ou *soft sensors* – que possibilitam a medição de variáveis de difícil medição através das medições de outras variáveis de fácil medição. As variáveis químicas e/ou bioquímicas - tais como concentrações, composições, biomassa, pH, parâmetros cinéticos e termodinâmicos – encaixam-se normalmente na categoria de variáveis de difícil medição e são chamadas de variáveis primárias. Variáveis físicas e de fácil medição por sensores reais – como nível, pressão, temperatura – são chamadas de variáveis secundárias (Lotufo *et al*, 2008).

Os sensores virtuais são divididos em duas partes principais. Uma é composta pelo sensor físico, atuando diretamente no processo. A segunda parte é composta por um modelo implementado por software. Ambas as partes podem ser construídas de forma independente e, então, integradas entre si. A modelagem matemática adequada do sistema aparece como um requerimento indispensável à construção do sensor virtual. Tal objetivo pode ser alcançado de diferentes formas. Quando se tem o conhecimento dos princípios fundamentais e fenomenológicos do sistema, a modelagem é construída a partir das equações consolidadas que descrevem aquele processo – tais

como balanços de massa, de energia e de momento, leis de velocidade, entre outras (comuns em processos químicos) – chama-se essa abordagem de modelagem caixa branca (“*white box*”) ou modelagem pela física ou natureza do processo (Aguirre, 2004).

No entanto, reunir os conhecimentos necessários para uma completa modelagem fenomenológica do processo pode se tornar uma tarefa árdua, podendo custar muito tempo e recursos. Quando se estabelece a estrutura do modelo do sistema, ainda permanece a tarefa de se obter os valores exatos dos seus parâmetros, ou seja, a identificação do sistema e estimativa de parâmetros relativos aos dados do processo real. A identificação de sistemas lineares é uma área de conhecimento amadurecida, mas quando se trata de sistemas não lineares – o caso de muitos processos reais – estes processos podem ser aproximados por modelos lineares apenas localmente.

Assim sendo, quando se é possível a obtenção de dados representativos do processo, uma abordagem diferente pode ser utilizada para modelagem do sistema através da aproximação por funções genéricas. Tal abordagem é chamada de modelagem empírica ou caixa preta (“*black box*”) e se torna vantajosa quando não se possui conhecimento total fenomenológico do processo ou quando o mesmo se torna inviável. A maior desvantagem associada a esse tipo de modelagem, no entanto, consiste na ausência de significado físico do modelo obtido, restringindo seu uso à simulação numérica. Os modelos construídos desta forma, no entanto, geralmente também estão sujeitos a uma faixa de operação (da qual os dados do processo foram obtidos) e podem não representar realisticamente o processo em outros pontos operacionais (Lotufo *et al*, 2008).

Diferentes tipos de modelos podem ser identificados e utilizados na construção dos sensores virtuais, sendo possível encontrar uma vasta coleção de trabalhos na literatura a respeito do assunto. A mais simples destas técnicas é a identificação linear paramétrica, na qual as saídas do processo são aproximadas por funções lineares ponderadas das entradas. Os parâmetros de ponderação (ou pesos) podem ser encontrados por métodos de regressão como o somatório de mínimos quadrados. Alguns dos principais modelos desse tipo são Auto Regressivo (AR), Auto Regressivo com Média Móvel (ARMA, do inglês *Auto Regressive Moving Average*), Auto Regressivo com entradas eXógenas Não linear (NARX, *Nonlinear Auto Regressive with eXogenous inputs*), e outras combinações como ARMAX e NARMAX.

Outro tipo de identificação bastante crescente – principalmente com o avanço das aplicações de inteligência artificial (AI, *Artificial Intelligence*) e aprendizado de máquina (*machine*

learning) é a identificação por Redes Neurais Artificiais (RNA ou ANN, *Artificial Neural Networks*), que possuem a capacidade de aquisição e manutenção do conhecimento (baseado em informações) e podem ser definidas como um conjunto de unidades de processamento, caracterizadas por neurônios artificiais, que são interligados por um grande número de interconexões (sinapses artificiais), sendo as mesmas representadas por vetores/matrizes de pesos sinápticos (Silva *et al*, 2010).

Simulando um neurônio biológico, o neurônio artificial é estruturado em: sinais de entrada – representando as entradas do processo (por exemplo, variáveis de fácil medida ou variáveis secundárias); pesos sinápticos – são os valores que ponderam cada entrada; função de ativação – limita o valor de saída da combinação linear (soma) dos sinais de entrada multiplicados pelos seus respectivos pesos sinápticos; e o sinal de saída – valor final calculado (por exemplo, uma inferência de concentração ou outra variável primária do processo).

Quando são utilizados modelos de espaço de estados na construção de um sensor virtual, esse recebe o nome de observador ou estimador de estado (Lotufo *et al*, 2008). Este tipo de sensor virtual será abordado nesta dissertação.

3.2 OBSERVADORES DE ESTADO

Para a implementação de leis de controle de estados em plantas é assumido que se tem as medições de todas as variáveis de estado. No entanto, na prática, a medição de alguns tipos de variáveis pode ser feita por sensores de alto custo ou até indisponíveis (Jana, 2010), como foi dito anteriormente. Por causa disso, os observadores de estado foram desenvolvidos para que se possa reconstruir o vetor de estados e estimar tais variáveis ao mesmo tempo que se reduz o custo de medição (Dochain *et al*, 2009).

Os primeiros trabalhos que introduziram os estudos sobre observadores de estado datam da década de 1960 por Luenberger (1964, 1966, 1967, 1971) e Kalman (Welch *et al*, 1995). Luenberger e Kalman apresentaram conceitos básicos e iniciais sobre observadores aplicados a sistemas multivariáveis e lineares. Diversos novos tipos de observadores foram propostos como modificações ou extensões dos primeiros tipos, desenvolvidos a fim de se aplicar à estimativa de variáveis de processos químicos lineares e não lineares.

Aguirre *et al* (1998) projetou e investigou o desempenho um observador de estado do tipo DOS (*dedicated observer scheme*) para um sistema de tanque real. O sistema possui restrições quanto a sua observabilidade e detectabilidade de falhas e, para superar tal dificuldade, foi proposta uma modificação na construção do observador. Um observador linear foi usado por del-Muro-Cuellar *et al* (2007) na construção de um esquema preditivo Smith para processos instáveis com atraso nas entradas. Huang *et al* (2010) estruturou uma análise robusta da estabilidade de observadores recursivos não lineares discretos no tempo. Um filtro de Kalman estendido, um observador de Luenberger estendido e um observador de ganho fixo foram utilizados na análise de estabilidade no trabalho de Huang.

Quando se assume que todas as variáveis do processo são estocásticas por natureza, a distribuição de variáveis de estado é alcançável baseada nas variáveis mensuráveis. Os observadores de estado que se baseiam na estimativa da distribuição de probabilidade das variáveis de estado utilizando os dados disponíveis do sistema são chamados de estimadores Bayesianos (Chen *et al*, 2004). Filtro de partículas (PF, *Particle Filters*), filtro de Kalman estendido (EKF, *Extended Kalman Filter*) e estimador de horizonte móvel (MHE, *Moving Horizon Estimator*) são alguns tipos de estimadores Bayesianos, que são altamente apropriados para rápida estimativa.

3.2.1 Filtro de Kalman

O filtro de Kalman (KF, *Kalman Filter*) é um procedimento matemático iterativo que utiliza um conjunto de equações e dados em tempo real para estimar rapidamente o valor mais provável de uma variável, quando o sistema possui variações aleatórias (erros) ou incertezas.

Sua formulação é o resultado de várias contribuições de ideias ao longo de várias décadas. Rudolf Emil Kalman tentou aplicar noções de variáveis de estado para o problema de filtragem de Wiener-Kolmogorov, derivando ao que hoje leva o nome de Filtro de Kalman. Seu desenvolvimento foi uma das tecnologias que permitiram a “Era Espacial” e a navegação precisa e eficiente de aeronaves através do sistema solar não poderia ter sido feita sem o KF (Grewal e Andres, 2008).

Para a engenharia química, o KF vem sendo ainda utilizado em diversas aplicações de controle de processos e estimativa de parâmetros. Na área da bioengenharia, Tebbani *et al* (2015) aplicou um filtro de Kalman estendido (modificação do KF para sistemas não lineares) para

estimar em tempo real a concentração de biomassa de um sistema de produção usando microalgas, utilizando as medições disponíveis (pH, intensidade de luz incidente e concentração de dióxido de carbono dissolvido no meio) e aplicando a uma estratégia de controle avançado não-linear formada por um controlador PI agregado a um linearizador com compensação *anti-windup*, obtendo resultados validados experimentalmente.

Um estudo foi feito para o monitoramento de águas de lençol freático para detecção de contaminantes (Schmidt *et al*, 2018). Os autores utilizaram as medições de variáveis de qualidade da água *in situ* como pH e condutância específica para estimar as concentrações de urânio e trício na água via um filtro de Kalman. As estimativas obtiveram resultados bons e consistentes mesmo no caso de medições com maior intervalo de amostragem e o trabalho contribuiu para um sistema de alerta preditivo a respeito de mudanças na qualidade das águas.

Rincón *et al* (2013) analisou o desempenho de um filtro de Kalman estendido (EKF) e um filtro de Kalman *unscented* (UKF) na estimativa da conversão de um reator de polimerização através da calorimetria da reação e de outros parâmetros térmicos. Nesse trabalho, os valores estimados foram calculados a partir de medições das temperaturas do reator e da camisa, obtendo bons resultados apenas para o UKF. No entanto, não foi feita uma análise das diferenças no desempenho entre os dois tipos de filtros utilizados.

Em geral, diante do leque de formulações do filtro de Kalman que foram desenvolvidas – filtro de Kalman estendido (EKF), *unscented* (UKF), *ensemble* (EnKF), *cubature* (CuKF), entre outros – não foi encontrado um trabalho que analisasse, simultaneamente, a decisão de escolha entre diferentes tipos do filtro de Kalman, a diferença entre seus desempenhos e a análise das possíveis causas de tais resultados.

Sendo assim, essa dissertação questiona a necessidade de estimadores mais robustos baseados em filtros de Kalman quando aplicados em processos da engenharia química. Foram escolhidos o filtro de Kalman estendido (EKF) e o *unscented* (UKF) para fazer essa análise comparativa, por serem filtros bastante pesquisados na engenharia química.

3.2.1.1 Filtro de Kalman estendido

Todas as formulações de filtros de Kalman são estruturadas da mesma maneira, na qual a estimativa é feita em duas etapas: a de predição, na qual um modelo do sistema é empregado; e a

de correção, onde as variáveis observadas influenciam na predição para se calcular o valor final estimado. Considere um sistema representado por um modelo estocástico discreto de espaço de estados:

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

$$y_k = h(x_k) + v_k \quad (2)$$

Nas equações acima, \mathbf{x} representa o vetor de espaço de estados, \mathbf{y} o vetor de variáveis observadas e \mathbf{u} o vetor de entradas do sistema. As parcelas \mathbf{w}_k e \mathbf{v}_k são, respectivamente, os ruídos inerentes do processo e da observação (instrumento de medição) com média nula e covariâncias \mathbf{Q} e \mathbf{R} . Os subscritos \mathbf{k} e $\mathbf{k-1}$ representam os instantes de tempo discretizados. Para o EKF, a etapa de predição corresponde ao cálculo do vetor de estados através da expansão em série de Taylor de 1ª ordem e da covariância dessa predição inicial:

$$\hat{x}_{k|k-1} = f(\hat{x}_{k-1|k-1}, u_{k-1}) \quad (3)$$

$$P_{k|k-1} = F_k P_{k-1|k-1} F_k^T + Q_k \quad (4)$$

O sobrescrito “^” representa uma variável estimada (média de uma variável estocástica), quando a sua ausência representa uma variável exata (determinística). O termo \mathbf{P} corresponde a matriz de covariância da estimativa dos estados e \mathbf{F} representa a matriz de transição dos estados. Para o EKF, a matriz de transição dos estados é dada por uma matriz Jacobiana dos estados, ou seja:

$$F_k = \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{\hat{x}_{k-1|k-1}, u_k} \quad (5)$$

A etapa conseguinte corresponde à etapa de correção, onde a observação (medição) das variáveis secundárias (\mathbf{y}) é considerada. A estimativa final, então, corresponde a uma estimativa recursiva dos estados com base nas observações do instante atual \mathbf{k} :

$$\hat{x}_{k|k} = \hat{x}_{k|k-1} + K_k (y_k - H \hat{x}_{k|k-1}) \quad (6)$$

O valor das variáveis observadas é dado por \mathbf{y} , e a matriz \mathbf{H} é chamada de matriz de observação. Semelhante à matriz de transição \mathbf{F} , a matriz de observação consiste na Jacobiana das variáveis observadas, ou seja:

$$H_k = \left. \frac{\partial h}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\hat{\mathbf{x}}_{k|k-1}} \quad (7)$$

A diferença dada por “ $(y_k - H\hat{\mathbf{x}}_{k|k-1})$ ” representa o desvio dos valores de medição obtidos no instante \mathbf{k} em relação ao valor dessas variáveis previsto pelo modelo, ou seja, $H\hat{\mathbf{x}}_{k|k-1}$. Esse erro, chamado também de resíduo, é ponderado pelo ganho de Kalman, \mathbf{K} , sendo:

$$K_k = \frac{P_{k|k-1}H_k^T}{H_k P_{k|k-1}H_k^T + R_k} \quad (8)$$

Os valores limites do ganho \mathbf{K} são 0 ou 1. Quando a covariância das medições (\mathbf{R}) é muito maior do que a covariância da estimativa (\mathbf{P}), o valor de \mathbf{K} tende ao valor nulo. Isso representa que o valor medido tem menos confiabilidade do que o modelo do processo (etapa de predição) e, portanto, a estimativa final se aproxima do valor previsto na primeira etapa. Esse fenômeno pode ser observado substituindo o valor de \mathbf{K} na Equação (6) para se obter $\hat{\mathbf{x}}_{k|k} = \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1}$. O contrário ocorre quando o valor de \mathbf{P} é muito menor do que o valor de \mathbf{R} , fazendo com que o valor do ganho \mathbf{K} na Equação (8) tenda à unidade. Assim, o vetor corrigido da estimativa tende a se aproximar do vetor de observação.

Por fim, a covariância ótima da estimativa é corrigida na seguinte equação:

$$P_{k|k} = (I - K_k H_k) P_{k|k-1} \quad (9)$$

Por depender de uma linearização a cada instante \mathbf{k} de observação, o EKF pode depender da escolha correta de condições iniciais dos estados e das suas covariâncias para poder convergir adequadamente ao problema. O passo de integração da linearização (ou intervalo de amostragem)

também pode afetar no resultado da estimativa, uma vez que sua escolha inadequada pode levar à um modelo não convergente do processo.

3.2.2.2 Filtro de Kalman Unscented

Fundamentalmente, o EKF propaga uma variável aleatória gaussiana (GRV – *Gaussian Random Variable*) através da dinâmica do sistema. A distribuição de estados é aproximada por uma GRV, que então se propaga analiticamente através de uma linearização de primeira ordem do sistema não linear. Esse procedimento pode introduzir erros na média e covariância da GRV, o que pode levar à divergência da estimativa.

Para contornar esse problema, Julier e Uhlman (1997) introduziram a transformada *unscented* como uma extensão do filtro de Kalman para processos não lineares, dando origem ao Filtro de Kalman *Unscented* (UKF – *Unscented Kalman Filter*). O UKF utiliza uma abordagem amostral determinística, na qual a distribuição dos estados ainda é aproximada por uma GRV, mas representada por um conjunto mínimo de pontos amostrais – os pontos sigma. Dessa maneira, o UKF alcança uma precisão de até a terceira ordem (da expansão em série de Taylor) para sistemas não lineares (Wan *et al*, 2000).

A transformada *unscented* é um método para calcular as estatísticas de uma variável aleatória que passa por uma transformação não linear (Julier, 2002). Considere a propagação de uma variável aleatória \mathbf{x} (dimensão \mathbf{L}) através de uma função não linear, $\mathbf{y} = g(\mathbf{x})$. Assumindo que \mathbf{x} tem média $\bar{\mathbf{x}}$ e covariância \mathbf{P}_x , para calcular as estatísticas de \mathbf{y} , forma-se uma matriz χ de $2L+1$ vetores sigma χ_i (com pesos correspondentes \mathbf{W}_i), conforme apresentado:

$$\chi_0 = \bar{\mathbf{x}} \quad (10)$$

$$\chi_i = \bar{\mathbf{x}} + \left(\sqrt{(L + \lambda) \mathbf{P}_x} \right)_i \quad i = 1, \dots, L \quad (11)$$

$$\chi_i = \bar{\mathbf{x}} - \left(\sqrt{(L + \lambda) \mathbf{P}_x} \right)_{i-L} \quad i = L + 1, \dots, 2L \quad (12)$$

$$\mathbf{W}_0^{(m)} = \frac{\lambda}{(L + \lambda)} \quad (13)$$

$$\mathbf{W}_0^{(c)} = \frac{\lambda}{(L + \lambda)} + (1 - \alpha^2 + \beta) \quad (14)$$

$$W_i^{(m)} = W_i^{(c)} = \frac{1}{2(L + \lambda)} \quad i = 1, \dots, 2L \quad (15)$$

Sendo $\lambda = \alpha^2(L + \kappa) - L$ um parâmetro de escala, α determinador do espalhamento dos pontos sigma em torno da média (sendo normalmente um valor baixo e positivo, como 1e-3). κ é um segundo parâmetro de escala, normalmente nulo, e β é usado para incorporar conhecimento *a priori* da distribuição de \mathbf{x} (para distribuições Gaussianas, $\beta = 2$ é o valor ótimo). $(\sqrt{(L + \lambda)P_x})_i$ é a i -ésima linha da matriz raiz quadrada. A primeira estimativa (da etapa de predição) dos estados, $\hat{\mathbf{x}}_{k|k-1}$, portanto, é dada por:

$$\hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} = \sum_{i=0}^{2L} W_i^{(m)} \chi_i \quad (16)$$

A covariância \mathbf{P}_{xx} *a priori* é dada por:

$$P_{xx,k|k-1} = \sum_{i=0}^{2L} W_i^{(c)} \{\chi_i - \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1}\} \{\chi_i - \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1}\}^T + Q \quad (17)$$

O procedimento descrito das Equações (10) até a (17) consiste na primeira etapa (predição) do filtro de Kalman *unscented*. Para o UKF, a etapa de correção, feita a partir de informações do instante \mathbf{k} atual (medições), é bastante semelhante ao que já foi mostrado anteriormente. O vetor de pontos sigma é propagado através da função não linear de observação:

$$Y_i = h(\chi_i) \quad i = 0, \dots, 2L \quad (18)$$

Sendo a média e covariância de \mathbf{y} aproximadas usando uma média e covariâncias amostrais ponderadas dos pontos sigma posteriores,

$$\hat{\mathbf{y}}_k = \sum_{i=0}^{2L} W_i^{(m)} Y_i \quad (19)$$

$$P_{yy} = \sum_{i=0}^{2L} W_i^{(c)} \{Y_i - \hat{y}_k\} \{Y_i - \hat{y}_k\}^T + R \quad (20)$$

O cálculo do ganho de kalman \mathbf{K} é dado por:

$$K = \frac{P_{xy}}{P_{yy}} \quad (21)$$

Sendo \mathbf{P}_{xy} a covariância cruzada entre os estados e as variáveis observadas, dada por:

$$P_{xy} = \sum_{i=0}^{2L} W_i^{(c)} \{\chi_i - \hat{x}_{k|k-1}\} \{Y_i - \hat{y}_k\}^T \quad (22)$$

A estimativa final, corrigida pelas observações, e sua covariância são dadas por:

$$\hat{x}_{k|k} = \hat{x}_{k|k-1} + K(y_k - \hat{y}_k) \quad (23)$$

$$P_{k|k} = P_{k|k-1} - KP_{yy}K^T \quad (24)$$

3.3 CONTROLE DE PROCESSOS NÃO LINEARES

À medida que as exigências ambientais se tornam cada vez maiores e as empresas de processos químicos estão interessadas em cada vez mais em operações mais economicamente eficientes, mas seguras, o controle de processos é explorado como um meio de alcançar esses objetivos (Durand *et al*, 2016). No entanto, quando se trata de processos químicos e bioquímicos, é comum a presença de não linearidades que podem dificultar a implementação de sistemas clássicos de controle linear, que têm uma tendência a possuir baixo desempenho nessas condições (Henson e Seborg, 1997).

Tendo em vista essas limitações, o uso de controladores que se utilizam de modelos não lineares ganha destaque para o controle de processos, já que podem se adaptar a diversas condições de operação (Camacho, 1998). O controle de modelo preditivo (MPC, *Model Predictive Control*)

é uma arquitetura de controle avançado baseada na previsão do comportamento do processo através de um modelo – podendo ser linear ou não – intrínseco ao controlador, que combina as informações desse modelo com observações em tempo real do sistema para prever o comportamento das variáveis controladas e manipular as variáveis de entrada do sistema de forma otimizada.

Por conta dessa abordagem preditiva e otimizada, o MPC traz várias vantagens em relação a estratégias clássicas, tal como o PID convencional. Processos de múltiplas entradas e múltiplas saídas (MIMO) podem ser implementados em um mesmo controlador MPC, uma vez que seu algoritmo já leva em consideração a interação entre os sinais de controle. Considerando sua natureza preditiva, o MPC também já incorpora um controle *feedforward*, podendo antecipar a ação de distúrbios na planta e tomar as decisões de controle adequadas para minimizar os efeitos das perturbações. Também podem ser implementadas na otimização efetuada no algoritmo do MPC restrições relativas a quaisquer variáveis do controlador em tempo real sem afetar a sintonia do controlador. Os parâmetros de sintonia também podem ser ajustados para diferentes restrições e condições operacionais (Wang, 2009).

Neste trabalho, será feita a comparação entre uma abordagem clássica de controle linear caracterizada por um controlador PID convencional e a abordagem moderna de controle não linear representada por um NMPC (*Nonlinear Model Predictive Control*).

3.3.1 Controle convencional: controlador proporcional-integrativo-derivativo (PID)

O controlador PID é um algoritmo de controle de alta simplicidade e implementação, sendo um dos mais utilizados no controle industrial. Essa classe de controladores tem seu funcionamento baseado em *feedback*, onde o controlador recebe um sinal representando a diferença entre o valor da variável controlada e seu valor de referência (*setpoint*). A partir dessa diferença, chamada também de erro, o controlador calcula um sinal de controle adequado a ser enviado para um atuador ou *setpoint* de um controlador responsável por uma variável manipulada, reduzindo, assim, o erro (Smith e Corripio, 2008).

As combinações de três tipos de ação podem compor um controlador PID. O primeiro tipo de ação, a proporcional (P), produz uma resposta composta pelo valor do sinal do erro multiplicado por uma constante proporcional (K_C). Sob esse tipo de operação, à medida que o erro se aproxima do valor de zero (ou seja, enquanto a variável controlada se aproxima do *setpoint*), seu valor se

torna pequeno o bastante até que a resposta do controlador não seja o suficiente para reduzir o erro até zero. Assim, o sistema em malha fechada acaba encontrando um equilíbrio fora do *setpoint*.

Para corrigir esse problema, a segunda resposta – a ação integrativa (I) – integra o sinal do erro em um determinado período de tempo e o multiplica por uma constante integrativa. Isso acaba resultando na eventualmente eliminação de erros, tendo em visto que mesmo erros pequenos aumentam a resposta integral ao serem acumulados ao longo do tempo. No entanto, a ação integrativa pode criar oscilações no sistema.

A terceira resposta, a ação derivativa (D), tem o papel de suavização do sinal de resposta do controlador. Essa ação considera a taxa de variação do erro – multiplicada por uma constante – em vez de valor do sinal de erro em si. Portanto, a resposta do controlador atua até que o erro esteja constante – ou seja, quando a derivada for igual a zero. Na prática, isso resulta na redução de sobrelevações (*overshoots*) e oscilações da resposta do processo. (Coughanowr e Koppel, 2009).

A equação de um controlador PID assume a forma de:

$$u(t) = u_{bias} + K_P e(t) + K_I \int_0^t e(t) dt + K_D e'(t) \quad (25)$$

Sendo $\mathbf{u}(t)$ o sinal do controlador em um tempo qualquer; \mathbf{u}_{bias} o sinal do controlador quando não existe erro; $\mathbf{e}(t)$ o sinal de erro; \mathbf{K}_P o ganho proporcional; \mathbf{K}_I o ganho integrativo, podendo ser escrito como $K_I = K_P / \tau_I$, onde τ_I é a constante de tempo integrativa; e \mathbf{K}_D é o ganho derivativo, podendo escrito por $K_D = K_P \tau_D$, onde τ_D é a constante de tempo derivativa.

O desempenho de um controlador PID depende da sintonia de seus parâmetros e da linearidade do sistema. Essa sintonia pode ser alcançada empregando-se métodos tanto em malha aberta como fechada, tais como métodos de autossintonia (relé) e método do ganho final (Bhagwan *et al*, 2016). No entanto, mesmo quando bem sintonizados, tais controladores possuem suas limitações. Uma delas é a possibilidade de não se obter respostas ótimas em sistemas não lineares, cujas variáveis podem sair da região viável à qual o controlador foi sintonizado. Processos instáveis, ressonantes ou integrativos são apenas alguns dos tipos de processos que podem afetar consideravelmente o desempenho do controlador (Atherton e Majhi, 1999).

3.3.2 Controle avançado: controle de modelo preditivo não linear (NMPC)

O modelo de controle preditivo (MPC, *Model Predictive Control*) é um método avançado de controle que utiliza um modelo interno do processo para antecipar o comportamento de suas variáveis controladas (PV, *process variable*), manipuladas (MV, *manipulated variable*) e distúrbios (D) ao longo de um horizonte de predição (P), calculando otimizada a melhor sequência de sinais de controle ao longo de um horizonte de controle (C) podendo satisfazer quaisquer restrições (ex.: limites de variáveis manipuladas, restrições de segurança para temperatura e pressão, restrições econômicas, taxa de variação dos sinais de controle) estabelecidas nos objetivos de controle.

A implementação dessa estratégia de controle traz várias vantagens importantes:

1. O modelo de processo captura as interações dinâmicas e estacionárias entre as variáveis de entrada, saída e distúrbios da planta;
2. Restrições (representadas por inequações) nas entradas e saídas são consideradas de maneira sistemática;
3. Os cálculos de controle podem ser coordenados com o cálculo de *setpoints* otimizados;
4. Predições do modelo precisas podem antecipar perturbações e alarmes na planta, tomando decisões que evitem esses problemas.

No entanto, a eficácia de um MPC (ou qualquer outra abordagem baseada em modelo) depende da precisão do modelo do processo e da sintonia dos parâmetros do controlador. Predições imprecisas podem acabar piorando o desempenho geral da planta em vez de melhorá-lo (Seborg *et al*, 2011). Assim sendo, quando se tratando de processos químicos, não é incomum encontrar sistemas não lineares, requerendo um modelo representativo das não linearidades do processo. O controle preditivo de modelo não linear (NMPC, *Nonlinear Model Predictive Control*) torna-se, então, uma abordagem adequada para atender a essa exigência, encontrando várias aplicações para diversos processos químicos.

Subramanian *et al* (2015) aplicou uma abordagem de controle preditivo utilizando um NMPC de múltiplos estágios aplicado a um modelo de reator CSTR. Na formulação proposta pelo autor, uma árvore de cenários a respeito da evolução do sistema é incorporada na otimização do controlador, promovendo um controle robusto da planta. No mesmo trabalho, os estados do sistema foram obtidos por um observador do tipo EKF, conseguindo bons resultados. Foram também

inclusas restrições nas saídas e nas variáveis manipuladas, que foram respeitadas por todo o controle.

Ulonska *et al* (2018) fez a comparação entre dois modelos de controle avançado – o MPC (com estados estimados por um EKF) e um controlador baseado em balanços elementais (EBC, *Elemental Balance Controller*) – usando um bioprocesso como estudo de caso. O trabalho foi baseado e validado em dados experimentais e o objetivo de controle era controlar simultaneamente os *setpoints* das taxas de reação de dois substratos em um processo de batelada utilizando o microorganismo *E. coli*. Ambos os controladores obtiveram resultados semelhantes, mas, devido ao seu poder preditivo e melhor flexibilidade em relação às funções objetivas, o MPC foi tido como o controlador de escolha.

Maasoumy *et al* (2014) apresentou duas metodologias para lidar com incerteza do modelo para construção do MPC. Primeiro, foi proposta uma estrutura de modelagem para estimativa *online* de estados e parâmetros desconhecidos utilizando um UKF, levando a um modelo adaptativo paramétrico (PAB, *parameter-adaptive building*). Também foi proposta uma formulação robusta do MPC (RMPC) e, ambos os casos foram comparados com um MPC nominal e um controle baseado em regras (RBC, *rule based control*). Os resultados apresentaram a escolha do controlador com base na incerteza do modelo. O RMPC foi o que obteve os melhores resultados no caso de modelos com um nível intermediário de incerteza (30-67%), enquanto o MPC nominal foi preferido nos casos de menor nível de incerteza (0-30%) e o RBC se sobressaiu nos casos de maior nível de incerteza (acima de 67%).

Markana *et al* (2018) aplicou um MPC econômico (EMPC) em um estudo de controle ótimo com múltiplos objetivos para um bioprocesso em um reator semicontínuo. Os objetivos de controle são a produtividade e a quantia de substrato utilizado no processo. O sensoriamento dos estados foi dado por um EKF e o controle foi alcançado com boa flexibilidade nos seus objetivos, sendo observado que um relaxamento marginal em um objetivo resultava em um melhoramento significativo no outro.

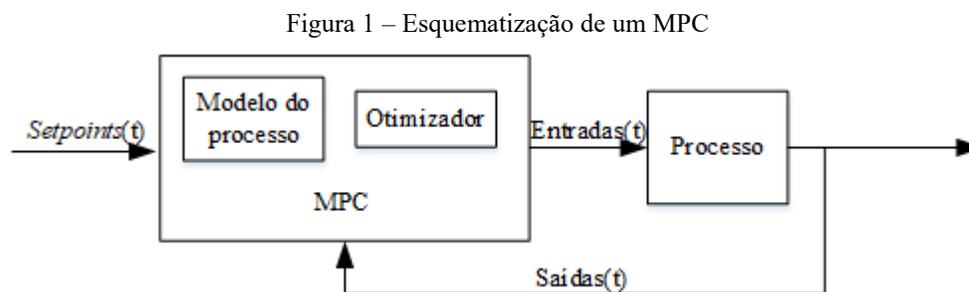
Um estudo de otimização de um fotobiorreator de microalgas foi feito por Yoo *et al* (2016). O objetivo do trabalho é a maximização das concentrações de lipídio e biomassa em sistemas biológicos sob condições mixotrópicas. As concentrações de lipídio foram estimadas utilizando um UKF e fornecidas a um controlador MPC. A trajetória maximizada de biomassa e lipídio foi obtida por otimização em malha aberta e utilizada como trajetória alvo (*setpoint*) pelo MPC. Estudos de

simulação e validação experimental foram conduzidos e melhorias significativas na produtividade de biomassa e lipídio foram alcançadas.

Com base nos trabalhos recentes sobre a aplicação de MPC em processos químicos, tal abordagem de controle avançado se mostra ainda como uma moderna técnica com diferentes aplicações para a engenharia química. A combinação do MPC com a estimativa de estados via filtro de Kalman é uma ferramenta poderosa quando se deseja alcançar boas condições de operação em processos reais com presença de incertezas no modelo ou seus parâmetros e com restrições de operabilidade tais como regiões de estabilidade e limitações como rangeabilidade de instrumentos ou limites de segurança.

3.3.2.1 Funcionamento geral do MPC

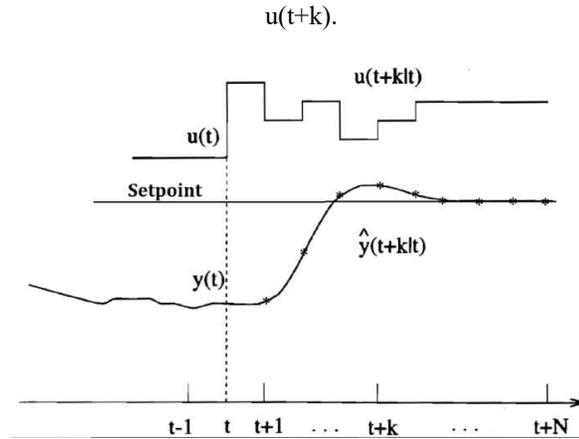
De maneira geral, apesar de haver várias formas de aplicação de um controle de modelo preditivo, um algoritmo genérico comum do MPC pode ser descrito. A base de seu funcionamento consiste em um modelo de processo sendo usado para prever o comportamento futuro da planta com base em informações do instante atual e de ações de controle calculadas por um otimizador, conforme apresentado na Figura 1.



Fonte: o autor.

A cada instante de amostragem quando o controlador recebe informações do sistema, um modelo do processo é usado para prever o comportamento das saídas do processo nos próximos N pontos de amostragem considerando-se as entradas do processo. Ou seja, é calculado $y(t+k|t)$ baseado em $u(t+k|t)$ para $k = 1...N$, como denota a Figura 2.

Figura 2 – Esquematização dos valores preditos de uma variável $y(t+k|t)$ dado uma sequência de sinais de controle



Fonte: Barreto (2018), adaptado de Camacho (1998).

A função custo pode então ser calculada a partir das informações do comportamento do sistema dados os valores de *setpoint* em cada instante amostral e uma sequência de sinais de controle. Normalmente, a função custo toma a forma de:

$$J = \sum_{i=1}^P Q_e e_{k+i}^2 + \sum_{i=1}^C R_{\Delta u} \Delta u_{k+i}^2 \quad (26)$$

Cada parcela da equação do custo representa uma contribuição a ser considerada na otimização. A primeira é devida ao erro quadrático, e_{k+i}^2 , dado pela diferença ao quadrado entre os valores previstos das variáveis controladas a cada instante do **horizonte de previsão (P)** e os valores de *setpoint* fornecidos ao controlador.

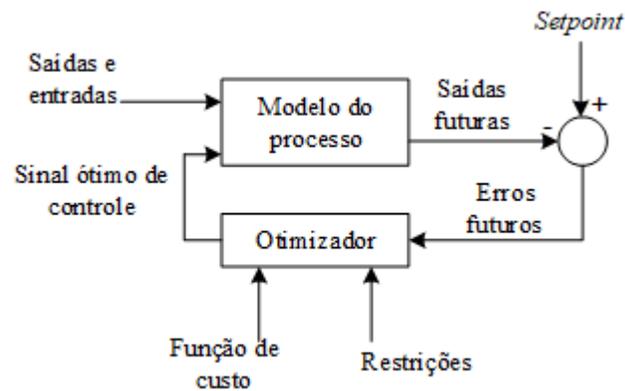
A segunda é relacionada com a mudança de sinal de controle ao longo do **horizonte de controle (C)**. As matrizes de penalidades do erro (Q_e) e da mudança de sinal ($R_{\Delta u}$) determinam o peso de cada contribuição, ou seja, qual delas será mais ou menos priorizada na otimização.

Portanto, o somatório do erro quadrático representa a contribuição do erro total, que deve ser minimizado para controlar o sistema; o somatório das mudanças no sinal de controle é considerado para se garantir a suavização nessas mudanças, devido às limitações do sistema.

Uma vez que se tem o valor da função de custo J levando-se em consideração uma sequência de sinais de controle u , um processo de otimização fornece uma nova sequência de sinais que minimize o valor da função respeitando as restrições impostas do sistema, fechando um ciclo.

Esse processo iterativo se repete até que o processo de convergência do otimizador se cumpra, sendo que apenas o primeiro sinal da sequência de controle é enviado para a planta. Assim sendo, o controlador age de forma robusta a cada instante de amostragem, reajustando sua saída de controle de forma que o controlador se adapte às condições em tempo real da planta, conforme a Figura 3.

Figura 3 – Esquematização da estrutura interna de um controlador MPC genérico.



Fonte: o autor, adaptado de Camacho (1998).

3.3.2.2 Otimização não linear - programação sequencial quadrática (SQP)

Sendo um dos mais eficientes métodos para otimização com restrições não lineares, a SQP resolve subproblemas quadráticos a cada etapa. Esta abordagem consegue resolver problemas com não linearidades significativas em suas restrições com relativa facilidade, em relação a outros métodos (Nocedal e Wright, 2006).

Em problemas de otimização com restrições, o objetivo geral é transformar o problema em um subproblema mais fácil que pode ser resolvido e usado como base de um processo iterativo. Uma grande classe de métodos mais antigos traduz o um problema com restrição para um problema sem restrição através de uma função de penalidade para restrições que estão por volta das restrições limites. Assim, o problema restringido é resolvido utilizando uma sequência de otimizações parametrizadas sem restrições, nas quais o limite da sequência converge para o problema com restrições. Essas abordagens são consideradas relativamente ineficientes hoje em dia e têm sido substituídas por métodos que focam na solução de equações de Karush-Kuhn-Tucker (KKT).

As equações KKT são condições necessárias para otimalidade de problemas de otimização com restrição. Dado um problema geral de otimização por:

$$\min_x f(x) \quad (27)$$

sujeito às restrições

$$\begin{aligned} G_i(x) &= 0 & i = 1, \dots, m_e \\ G_i(x) &\leq 0 & i = m_e + 1, \dots, m \end{aligned} \quad (28)$$

caso se trate de um problema de programação convexa, ou seja, $f(x)$ e $G_i(x)$ são funções convexas, então as equações KKT são necessárias e suficientes para um ponto de solução global. As equações KKT podem ser definidas como:

$$\begin{aligned} \nabla f(x^*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i \cdot \nabla G_i(x^*) &= 0 \\ \lambda_i \cdot \nabla G_i(x^*) &= 0 \quad i = 1, \dots, m_e \\ \lambda_i &\geq 0 \quad i = m_e + 1, \dots, m \end{aligned} \quad (29)$$

A primeira equação descreve um cancelamento dos gradientes entre a função objetivo e as restrições ativas no ponto solução. Para que os gradientes sejam cancelados, multiplicadores de Lagrange ($\lambda_i = 1, \dots, m$) são necessários para balancear os desvios na magnitude da função objetivo e nos gradientes das restrições. Uma vez que apenas as restrições ativas são incluídas nessa operação de cancelamento, restrições que não estão ativas não devem ser incluídas nessa operação e seus multiplicadores de Lagrange são iguais a zero. Isso está colocado implicitamente na segunda e terceira equação.

A solução de equações KKT forma a base para muitos algoritmos de programação não linear, que tentam computar os multiplicadores de Lagrange diretamente. Esses algoritmos são referidos como métodos de programação sequencial quadrática (SQP) e acumulam informação de segunda ordem a respeito das equações KKT usando um procedimento de atualização quasi-Newton. Os métodos SQP resolvem um subproblema de programação quadrática (QP) a cada

iteração. A ideia principal consiste em uma aproximação quadrática da função Lagrangiana dada por:

$$L(x, \lambda) = f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i \cdot g_i(x) \quad (30)$$

O subproblema quadrático é obtido linearizando as restrições não lineares, obtendo:

$$\begin{aligned} \min_{d \in \mathbb{R}^n} & \frac{1}{2} d^T H_k d + \nabla f(x_k)^T d \\ \nabla g_i(x_k)^T d + g_i(x_k) &= 0 \quad i = 1, \dots, m_e \\ \nabla g_i(x_k)^T d + g_i(x_k) &\leq 0 \quad i = m_e + 1, \dots, m \end{aligned} \quad (31)$$

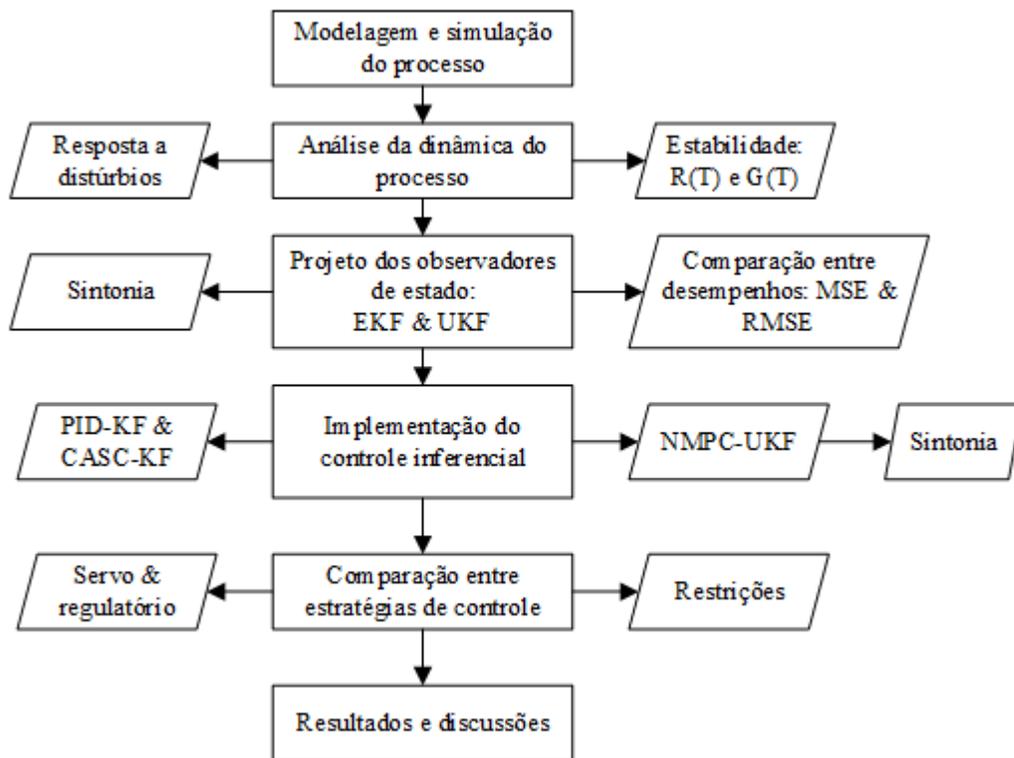
Onde H_k é uma aproximação definida e positiva da matrix Hessiana da função Lagrangiana e pode ser atualizada por qualquer método quasi-Newton. Por fim, o subproblema pode ser resolvido por qualquer algoritmo QP, fornecendo a solução na forma de uma iteração com passo a_k :

$$x_{k+1} = x_k + a_k d_k \quad (32)$$

4 METODOLOGIA

O fluxograma de atividades realizadas é apresentado na Figura 4. As simulações foram feitas em ambiente computacional: sistemas integrados de códigos em linguagem MATLAB® com diagramas de blocos construídos em SIMULINK® formaram a base dos experimentos.

Figura 4 – Fluxograma da metodologia abordada.



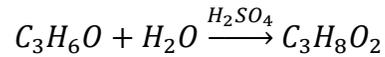
Fonte: o autor.

4.1 ESTUDO DE CASO – REATOR PRODUTIVO DE PROPILENOGLICOL

4.1.1 Modelo do processo

O processo estudado tem como base o modelo proposto por Fogler (2009) de um reator CSTR para produção de propileno glicol. O propileno glicol é um líquido inodoro e incolor utilizado majoritariamente na produção de resinas de poliéster. Também é utilizado na indústria de

alimentos, como solvente de fármacos e em degelo de aeronaves por causa suas propriedades anticongelantes. Este composto pode ser produzido pela hidrólise de óxido de propileno catalisada com ácido sulfúrico, conforme a seguinte reação:



No modelo proposto, o reator opera de forma contínua e possui uma serpentina de resfriamento, cujo líquido refrigerante é água. A vazão de alimentação do reator é composta por óxido de propileno (A), água (B) com ácido sulfúrico diluído e inerte metanol (M) conforme a Figura 5. Excesso de água (ponto de ebulição a 373,15 K à pressão atmosférica) é utilizado pois o óxido de propileno possui um relativo baixo ponto de ebulição (307,4 K), enquanto metanol é adicionado para evitar separação de fases, uma vez que propileno glicol não é completamente solúvel em água.

4.1.1.1 Cinética de reação

A cinética da reação é dada por uma reação de primeira ordem na concentração do óxido de propileno e ordem zero em excesso de água (Furusawa *et al*, 1969), sendo a lei de velocidade da reação definida por:

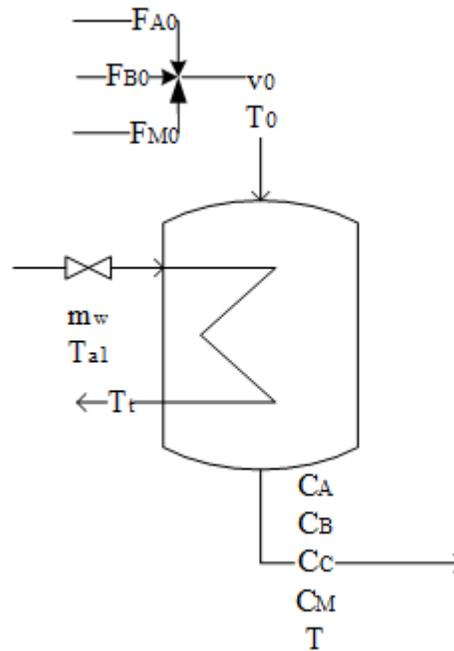
$$-r_A = kC_A \quad (33)$$

E a velocidade específica é definida por:

$$k = k_0 e^{-\frac{E}{RT}} = 16,96 \times 10^{12} \left(e^{\frac{-32.400}{RT}} \right) h^{-1} \quad (34)$$

Sendo a unidade de E em Btu/lbmol.

Figura 5 – Esquemática do CSTR para síntese de propilenoglicol.



Fonte: o autor.

4.1.1.2 Balanços materiais

A partir da realização de balanços de massa realizados no sistema para cada componente, o modelo do mesmo é construído a partir das seguintes equações diferenciais:

$$\frac{dC_A}{dt} = r_A + \left(\frac{C_{A0} - C_A}{V} \right) v_0 \quad (35)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = r_B + \left(\frac{C_{B0} - C_B}{V} \right) v_0 \quad (36)$$

$$\frac{dC_C}{dt} = -r_A + \left(\frac{-C_C}{V} \right) v_0 \quad (37)$$

$$\frac{dC_M}{dt} = \left(\frac{C_{M0} - C_M}{V} \right) v_0 \quad (38)$$

Onde C_i e C_{i0} representam, respectivamente, as concentrações do componente i nas correntes de saída e entrada do sistema; V o volume reacional do reator e v_0 a vazão volumétrica do reator. As concentrações de entrada e a vazão volumétrica são calculadas a partir das seguintes equações explícitas:

$$C_{i0} = \frac{F_{i0}}{v_0} \quad (39)$$

$$v_0 = \frac{F_{A0}}{\rho_A} + \frac{F_{B0}}{\rho_B} + \frac{F_{M0}}{\rho_M} \quad (40)$$

Onde F_{i0} é a vazão molar do componente i na entrada do reator e ρ_i é a densidade molar do componente i .

4.1.1.3 Balanços energéticos

A dinâmica da temperatura do reator é modelada a partir de um balanço de energia. Inicialmente, a partir da aplicação da primeira lei em um sistema aberto, transiente e bem misturado com n componentes, obtém-se:

$$\left[\begin{array}{c} \text{Taxa de acúmulo} \\ \text{de energia dentro} \\ \text{do sistema} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{Taxa de energia} \\ \text{transferida para o} \\ \text{sistema a partir} \\ \text{das vizinhanças} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{Taxa de trabalho} \\ \text{feito pelo sistema} \\ \text{sobre as} \\ \text{vizinhanças} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{Taxa líquida} \\ \text{de energia} \\ \text{por} \\ \text{escoamento} \end{array} \right]$$

$$\frac{d\hat{E}_{sist}}{dt} = \dot{Q} - \dot{W} + \sum_{i=1}^n E_i F_{i_{entrada}} - \sum_{i=1}^n E_i F_{i_{saída}} \quad (41)$$

Onde F_i representa as vazões molares (mols de i por tempo) para cada componente. Expandindo o termo de trabalho em, \dot{W} , em trabalho de escoamento (energia necessária para fazer com que a massa entre e saia do sistema) e outros trabalhos (neste caso, o trabalho de eixo, \dot{W}_s , obtém-se:

$$\dot{W} = - \sum_{i=1}^n F_i P \tilde{V}_{i_{entrada}} + \sum_{i=1}^n F_i P \tilde{V}_{i_{saída}} + \dot{W}_s \quad (42)$$

Sendo P a pressão e \tilde{V}_i o volume molar de cada espécie i . Combinando a Equação (42) com a (41) e agrupando os termos, obtém-se:

$$\frac{d\hat{E}_{sist}}{dt} = \dot{Q} - \dot{W}_s + \sum_{i=1}^n F_i (E_i + P\tilde{V}_i)_{entrada} - \sum_{i=1}^n F_i (E_i + P\tilde{V}_i)_{saída} \quad (43)$$

A energia E_i é a soma da energia interna (U_i), da energia cinética, da energia potencial e de quaisquer outras energias, tais como energias elétrica ou magnética ou radiante. Para reatores químicos, é comum considerar que a energia entálpica influencia muito mais do que os outros tipos de energia – obtendo-se, então, que $E_i = U_i$. A entalpia pode ser definida como:

$$H_i = U_i + P\tilde{V}_i \quad (44)$$

E, portanto:

$$F_i H_i = F_i (U_i + P\tilde{V}_i) \quad (45)$$

Combinando as Equações (43), (44) e (45), obtém-se:

$$\frac{d\hat{E}_{sist}}{dt} = \dot{Q} - \dot{W}_s + \sum_{i=1}^n F_i H_{i_{entrada}} - \sum_{i=1}^n F_i H_{i_{saída}} \quad (46)$$

O termo de energia \hat{E}_{sist} representa a soma total dos produtos das energias específicas de cada espécie pelo número de mols de cada uma delas, e pode ser expandido como:

$$\hat{E}_{sist} = \sum_{i=1}^n N_i E_i = \sum_{i=1}^n N_i U_i = \left[\sum_{i=1}^n N_i (H_i - PV_i) \right]_{sist} = \sum_{i=1}^n N_i H_i - P \underbrace{\sum_{i=1}^n N_i V_i}_V \quad (47)$$

O último termo do lado direito da Equação (47) representa o produto entre a pressão total do sistema e o volume total, PV . Quando a variação desse termo em relação ao tempo puder ser desconsiderada, a combinação entre as Equações (46) e (47) fornece:

$$\dot{Q} - \dot{W}_s + \sum_{i=1}^n F_{i0} H_{i0} - \sum_{i=1}^n F_i H_i = \left[\sum_{i=1}^n N_i \frac{dH_i}{dt} + \sum_{i=1}^n H_i \frac{dN_i}{dt} \right]_{sistema} \quad (48)$$

Temos que a derivada da entalpia pode ser definida como:

$$\frac{dH_i}{dt} = C_{P_i} \frac{dT}{dt} \quad (49)$$

E o balanço molar de uma espécie i pode ser escrito como:

$$\frac{dN_i}{dt} = -\nu_i r_A V + F_{i0} - F_i \quad (50)$$

Combinando as Equações (48), (49) e (50), obtém-se:

$$\dot{Q} - \dot{W}_s + \sum_{i=1}^n F_{i0} H_{i0} - \sum_{i=1}^n F_i H_i = \sum_{i=1}^n N_i C_{P_i} \frac{dT}{dt} + \sum_{i=1}^n \nu_i H_i (-r_A V) + \sum_{i=1}^n F_{i0} H_i - \sum_{i=1}^n F_i H_i \quad (51)$$

Considerando que $\sum v_i H_i$ é igual ao calor de reação e que não há mudança de fase obtém-se:

$$\dot{Q} + \sum_{i=1}^n F_{i0} C_{P_i} (T_0 - T_{ref}) = \sum_{i=1}^n N_i C_{P_i} \frac{dT}{dt} + \Delta H_{Rx} (-r_A V) + \sum_{i=1}^n F_{i0} C_P (T - T_{ref}) \quad (52)$$

Agrupando os termos e isolando a derivada da temperatura, obtém-se, finalmente:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} - F_{A0} \sum \Theta_i C_{P_i} (T - T_0) + (-\Delta H_{Rx}) (-r_A V)}{\sum N_i C_{P_i}} \quad (53)$$

Sendo C_{P_i} a capacidade calorífica do componente i ; Θ_i a razão entre a vazão molar de entrada do componente i e a do componente A; T_0 a temperatura da corrente de alimentação; N_i o número de mols do componente i no reator; ΔH_{Rx} o calor de reação; e \dot{Q} a taxa de calor trocado entre o reator e a camisa, dada por:

$$\dot{Q} = \dot{m}_w C_{P_B} (T_{a1} - T) \left(1 - e^{\frac{-UA}{\dot{m}_w C_{P_B}}} \right) \quad (54)$$

Onde \dot{m}_w é a vazão molar de água no trocador de calor; T_{a1} é a temperatura da corrente de entrada do trocador.

Até então, foram definidas 5 variáveis de estado representadas por cada uma das equações diferenciais mostradas anteriormente, são essas: C_A , C_B , C_C , C_M e T . Este trabalho, no entanto, também traz como contribuição a dinâmica da temperatura no interior do trocador de calor a fim de obter uma sexta variável de estado, a temperatura do trocador, T_t . A definição de mais uma variável de estado mensurável acrescenta mais uma observação que pode incrementar melhorias na estimativa pelo filtro de Kalman, por haver mais uma referência do processo real.

A última variável pode ser encontrada realizando-se um balanço de energia no líquido no interior do trocador, obtém-se:

$$\frac{dT_t}{dt} = \frac{\dot{m}_w C_{PB} (T_{a1} - T_t) - \dot{Q}}{\rho_B V_t C_{PB}} \quad (55)$$

4.1.1.4 Modelo de espaço de estados

Organizando-se todas as variáveis em um modelo de espaço de estados, tem-se que:

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{x}} = f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) \\ \mathbf{y} = h(\mathbf{x}) \end{cases} \quad (56)$$

Onde \mathbf{x} representa o vetor de variáveis de estado; \mathbf{u} o vetor de variáveis de entrada (independentes) do sistema e \mathbf{y} o vetor de variáveis de saída (ou estados observáveis) do sistema. Assim sendo:

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} C_A \\ C_B \\ C_C \\ C_M \\ T \\ T_t \end{bmatrix} \quad \mathbf{u} = \begin{bmatrix} F_{A0} \\ F_{B0} \\ F_{M0} \\ \dot{m}_w \\ T_0 \\ T_{a1} \end{bmatrix} \quad \mathbf{y} = \begin{bmatrix} T \\ T_t \end{bmatrix} \quad (57)$$

4.1.1.5 Ponto de operação do reator e parâmetros utilizados

Fogler (2009) apresenta dois pontos de operação distintos para esse reator. O primeiro ponto, apresentado no exemplo 8-4 (p. 422, 4ª ed.), trata-se de uma escala menor dessa operação, com um reator de volume igual a 1,14 m³ (300 gal) e conversão aproximada de 36,4%. O segundo ponto, apresentado no exemplo 9-5 (p. 498, 4ª ed.), traz a mesma reação operando em um reator de volume igual a 1,89 m³ (500 gal) com conversão aproximada de 75,5%.

São definidos limites de operação diferentes para cada situação. O primeiro reator conta com um limite de operação de 324,8 K (125 °F), enquanto o segundo possui um limite prático de estabilidade de 355,4 K (180 °F). Apenas o segundo ponto de operação foi considerado neste

trabalho. As principais diferenças entre as condições de operação de cada reator estão apresentadas na Tabela 1, junto com os parâmetros e dados de projeto considerados.

Tabela 1 – Parâmetros e dados de projeto utilizados durante as simulações

Nome	Sigla	Valor (P.O. 1)	Valor (P.O. 2)	Unidade
<i>Parâmetros</i>				
Capacidade calorífica	C_{PA}	146,5		kJ/(kmol*K)
	C_{PB}	75,4		kJ/(kmol*K)
	C_{PC}	192,6		kJ/(kmol*K)
	C_{PM}	81,6		kJ/(kmol*K)
Densidade molar	ρ_A	14,8		kmol/m ³
	ρ_B	55,3		kmol/m ³
	ρ_M	24,7		kmol/m ³
Energia de ativação	E	75.362,40		kJ/kmol
Constante dos gases	R	8,314		kJ/(kmol*K)
Constante cinética	k_0	16,96*10 ¹²		h ⁻¹
Entalpia de reação	ΔH_{Rx}	-91.556,90		kJ/kmol
Volume do trocador	V_t	-	1,1	m ³
Volume do reator	V	1,14	1,89	m ³
Tempo de residência	τ	0,1229	0,1513	h
Constante do trocador	UA	7.596,4	30.385,60	kJ/(h*K)
<i>Entradas</i>				
Vazão molar de A	F_{A0}	19,5	36,3	kmol/h
Vazão molar de B	F_{B0}	364,1	453,6	kmol/h
Vazão molar de M	F_{M0}	32,6	45,4	kmol/h
Temperatura de alimentação	T_0	297		K
Vazão molar de água do trocador de calor	\dot{m}_w	453,6		kmol/h
Temperatura da água de resfriamento	T_{a1}	289		K

4.1.2 Sensibilidade e não linearidade do processo: curvas de remoção e geração de calor

Para avaliar a não linearidade do processo, deseja-se saber como o sistema responde a variações em suas entradas e a que valores estacionários tendem as variáveis de estado quando

essas perturbações ocorrem. Para tanto, são analisadas as curvas de remoção – R(T) – e de geração – G(T) – de calor, dadas por:

$$G(T) = (-\Delta H_{Rx}) \frac{\tau k}{(1 + \tau k)} = (-\Delta H_{Rx}) \frac{\tau k_0 e^{-\frac{E}{RT}}}{\left(1 + \tau k_0 e^{-\frac{E}{RT}}\right)} \quad (58)$$

$$R(T) = \sum \Theta_i C_{P_i} (T - T_0) - \frac{\dot{m}_w C_{P_B} (T_{a1} - T) \left(1 - e^{-\frac{-UA}{\dot{m}_w C_{P_B}}}\right)}{F_{A0}} \quad (59)$$

Pode-se perceber que a curva G(T) é afetada pelas entradas que alteram a dinâmica do processo, que são as entradas F_{A0} , F_{B0} e F_{M0} , por alterarem a variável dependente v_0 e, por consequência, a constante de tempo, τ . Já a curva R(T) é sensível a todas as variáveis de entrada. O termo Θ_i é afetado pelas vazões molares de alimentação; e T_0 , \dot{m}_w e T_{a1} aparecem explicitamente na equação.

Por fim, é feita neste trabalho a construção simultânea das curvas R(T) e G(T), onde o(s) encontro(s) entre elas são valores estacionários da temperatura do reator, T. O experimento é feito ao longo de uma larga faixa de temperatura de operação na qual seja possível examinar o comportamento do processo, sendo feitas variações em todas as entradas ao longo de suas faixas de operação.

4.2 CONSTRUÇÃO DOS OBSERVADORES DE ESTADO

É proposta a modelagem de dois sensores virtuais baseados em filtros de Kalman (KF) como observadores de estado. O primeiro modelo é baseado na extensão não linear do KF, o filtro de Kalman estendido (EKF). Um filtro de Kalman *unscented* (UKF) é utilizado na construção do segundo sensor.

Para aproximar a simulação a um processo real, foram introduzidos ruídos tanto nas variáveis de entrada do processo como nas medições (sensores físicos). Os ruídos foram

considerados gaussianos e com desvio padrão igual a 1% do valor das entradas e 1% do valor saídas (medições).

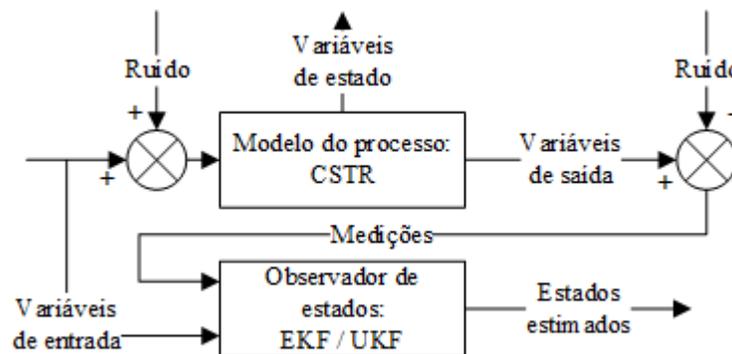
O desempenho da estimativa dos filtros é comparado via os critérios de erro quadrático médio (MSE) e raiz do erro quadrático médio (RMSE):

$$MSE = \frac{\sum_i^n (\hat{x} - x)^2}{n} \quad (60)$$

$$RMSE = \frac{\sum_i^n \sqrt{(\hat{x} - x)^2}}{n} \quad (61)$$

O intervalo de amostragem utilizado para todos os casos foi de 0,015 h. A Figura 6 apresenta uma esquematização de como foi feita a implementação dos sensores virtuais no processo.

Figura 6 – Esquematização da implementação do sensor virtual



Fonte: o autor.

4.2.1 Implementação do filtro de Kalman estendido (EKF)

A implementação do filtro de Kalman é feita a partir da discretização (aproximação por Euler de primeira ordem) do modelo apresentado na Equação (56), considerando as variáveis do

problema definidas nas Equações (57). O algoritmo de implementação do EKF a cada instante de observação \mathbf{k} é dado como:

- I. Estimativa *a priori*: $\hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} = f(\hat{\mathbf{x}}_{k-1|k-1}, \mathbf{u}_{k-1})$
- II. Covariância *a priori*: $P_{k|k-1} = F_{k-1}P_{k-1|k-1}F_{k-1}^T + Q_k$
- III. Ganho de Kalman: $K = \frac{P_{k|k-1}H_{k-1}^T}{H_{k-1}P_{k|k-1}H_{k-1}^T + R_k}$
- IV. Estimativa *a posteriori*: $\hat{\mathbf{x}}_{k|k} = \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} + K(\mathbf{y}_k - \hat{\mathbf{y}}_k)$
- V. Covariância *a posteriori*: $P_{k|k} = (I - KH_{k-1})P_{k|k-1}$

4.2.2 Implementação do filtro de Kalman *unscented* (UKF)

A implementação do UKF segue de maneira semelhante à do EKF, com o acréscimo do cálculo dos pontos sigma. Também é feita a partir de um modelo discreto do problema com dimensão $L = 6$. O algoritmo de implementação considerado é dado como:

- I. Cálculo dos pontos sigma:

$$\chi_0 = \bar{\mathbf{x}} = f(\hat{\mathbf{x}}_{k-1|k-1}, \mathbf{u}_{k-1})$$

$$\chi_i = \bar{\mathbf{x}} + \left(\sqrt{(L + \lambda)P_x} \right)_i \quad i = 1, \dots, L$$

Onde $P_x = P_{x,k-1|k-1}$ e $\lambda = \alpha^2(L + \kappa) - L$

$$\chi_i = \bar{\mathbf{x}} - \left(\sqrt{(L + \lambda)P_x} \right)_{i-L} \quad i = L + 1, \dots, 2L$$
- II. Cálculo dos pesos:

$$W_0^{(m)} = \frac{\lambda}{(L + \lambda)}$$

$$W_0^{(c)} = \frac{\lambda}{(L + \lambda)} + (1 - \alpha^2 + \beta)$$

$$W_i^{(m)} = W_i^{(c)} = \frac{1}{2(L + \lambda)} \quad i = 1, \dots, 2L$$

III. Estimativa *a priori* dos estados:
$$\hat{x}_{k|k-1} = \sum_{i=0}^{2L} W_i^{(m)} \chi_i$$

IV. Covariância *a priori* dos estados:
$$P_{x,k|k-1} = \sum_{i=0}^{2L} W_i^{(c)} \{ \chi_i - \hat{x}_{k|k-1} \} \{ \chi_i - \hat{x}_{k|k-1} \}^T + Q_k$$

V. Estimativa *a priori* das saídas:
$$\hat{y}_k = \sum_{i=0}^{2L} W_i^{(m)} \Upsilon_i$$

Onde $\Upsilon_i = h(\chi_i) \quad i = 0, \dots, 2L$

VI. Covariância *a priori* das saídas:
$$P_y = \sum_{i=0}^{2L} W_i^{(c)} \{ \Upsilon_i - \hat{y}_k \} \{ \Upsilon_i - \hat{y}_k \}^T + R_k$$

VII. Covariância cruzada dos estados e das saídas:
$$P_{xy} = \sum_{i=0}^{2L} W_i^{(c)} \{ \chi_i - \hat{x}_{k|k-1} \} \{ \Upsilon_i - \hat{y}_k \}^T$$

VIII. Ganho de Kalman:
$$K = \frac{P_{xy}}{P_y}$$

IX. Estimativa *a posteriori* dos estados:
$$\hat{x}_{k|k} = \hat{x}_{k|k-1} + K(y_k - \hat{y}_k)$$

X. Covariância *a posteriori* dos estados:
$$P_{x,k|k} = P_{x,k|k-1} - K P_{yy} K^T$$

Os valores assumidos para os parâmetros α , β e κ foram de $1e-3$, 2 e 0 , respectivamente.

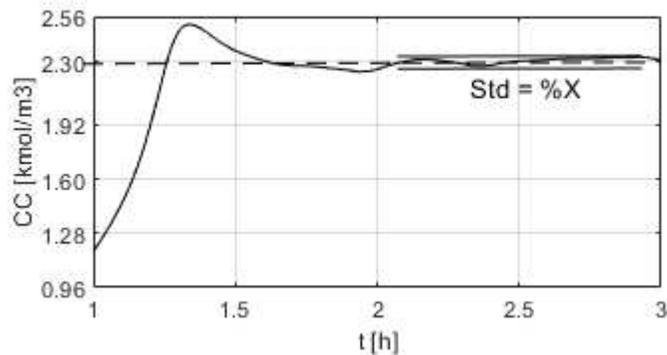
4.2.3 Sintonia dos parâmetros Q e R

A definição correta das matrizes de covariância do processo (Q) e das medições (R) é necessária pra que os observadores de estado estimem com o menor erro possível as variáveis de estado do processo. Neste trabalho, foram testadas três metodologias para sintonizar essas matrizes.

Para a matriz de covariância das medições, a disponibilidade dos dados dos sensores foi considerada. Sendo assim, essa matriz não foi inclusa na etapa de sintonia. Foi considerado que ambas as matrizes são matrizes diagonais com dimensão igual ao número de estados ou de saídas, ou seja, os elementos fora da diagonal principal da matriz são iguais a zero.

Primeiramente, considerou-se que o processo sofre leves oscilações em torno do estado estacionário. Essas oscilações seriam proporcionais ao valor atingido por cada variável de estado, conforme ilustrado na Figura 7.

Figura 7 – Exemplificação de desvio padrão (Std) de porcentagem do valor estacionário da variável de estado (CC – concentração de propilenoglicol)



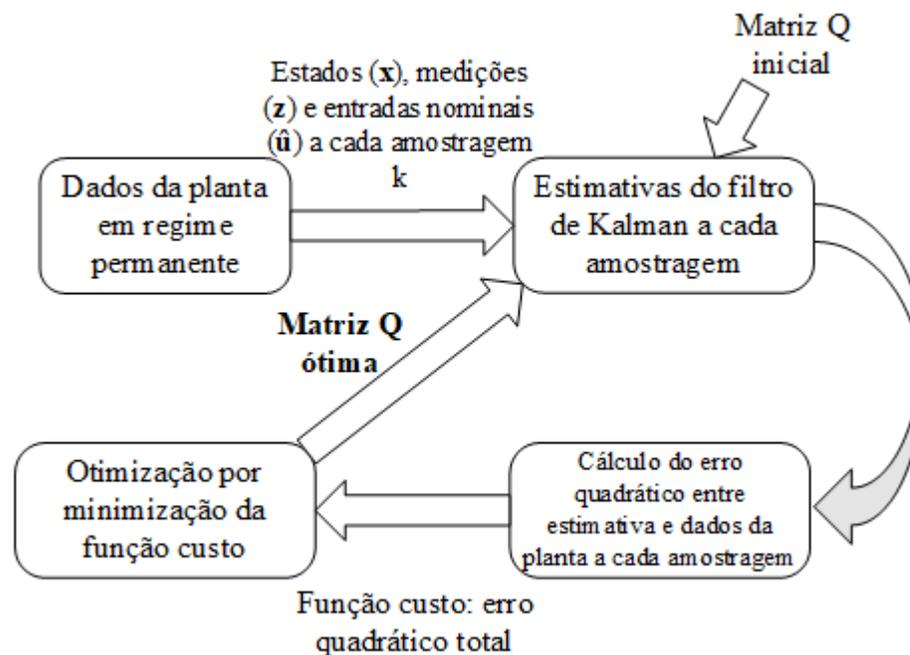
Fonte: o autor.

A segunda abordagem consiste em coletar dados da planta em regime permanente e calcular a variância das oscilações. Essa metodologia tende a ser a mais robusta no sentido de oferecer os valores mais precisos da covariância do processo. Por último, foi executado um algoritmo de otimização com o objetivo de minimizar o erro quadrático total da estimativa, que é incluso em uma função custo a dada pela equação seguinte:

$$J = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m (\hat{x}_{i,j} - x_{i,j})^2 \quad (62)$$

Onde J é o custo total; n é o número de variáveis de estado; m é o número de pontos amostrais coletados; $x_{i,j}$ é o valor da variável de estado i coletado no instante amostral k ; e $\hat{x}_{i,j}$ é o valor da variável de estado i estimado pelo filtro de Kalman no instante amostral k . Este método se assemelha ao método de otimização direta (Bavdekar *et al*, 2011; Rincon *et al*, 2013; Wilson e Agarwal, 1998). O fluxograma dessa abordagem está apresentado na Figura 8.

Figura 8 – Fluxograma da metodologia de sintonia do Q através de otimização por minimização do erro quadrático da estimativa pelo algoritmo programação sequencial quadrática (SQP)



Fonte: o autor.

4.3 IMPLEMENTAÇÃO DE ESTRATÉGIAS DE CONTROLE INFERENCIAL

São testadas e comparadas três configurações de controle inferencial para o processo. Todas as malhas de controle são compostas pelo **controlador**, o **processo** e o **sensor virtual**. Em todos os casos o sensor virtual é construído a partir de um filtro de Kalman no papel de observador de estados a partir das saídas e entradas do processo.

As estratégias de controle são avaliadas a partir dos critérios de erro absoluto integrado (IAE), erro quadrado integrado (ISE), erro absoluto integrado no tempo (ITAE) e erro quadrado integrado no tempo (ITSE), dados pelas equações seguintes:

$$IAE = \int_0^t |e(t)| dt \quad (63)$$

$$ISE = \int_0^t e(t)^2 dt \quad (64)$$

$$ITAE = \int_0^t |e(t)| t dt \quad (65)$$

$$ITSE = \int_0^t e(t)^2 t dt \quad (66)$$

Os critérios de erro absoluto dão a mesma importância a erros de diferentes magnitudes, enquanto os de erro quadrático penalizam erros maiores e tendem a suavizar os erros menores, de magnitude menor do que um. Os critérios de erro no tempo penalizam erros mais atrasados, o que torna um bom critério para avaliar a velocidade de convergência das estimativas.

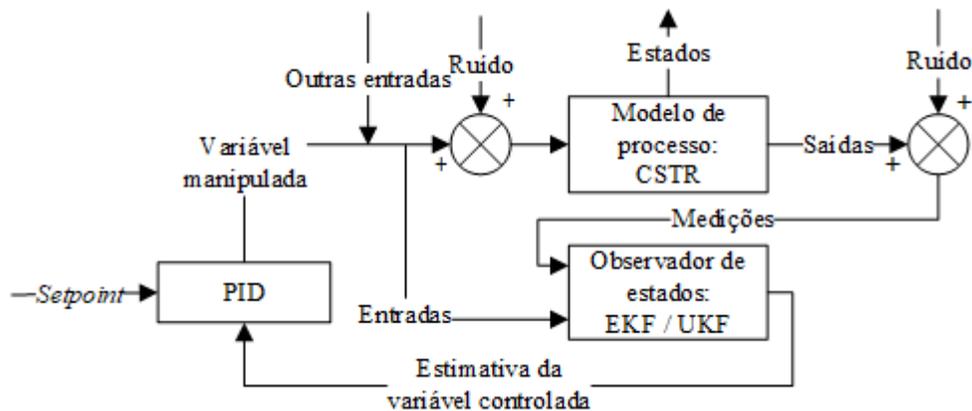
4.3.1 Estratégias convencionais de controle: *feedback* e cascata

O objetivo de controle considerado em todos os esquemas é o mesmo: controlar a concentração de produto (C_C) através da manipulação da vazão de água do trocador de calor (m_w).

Considerou-se que a vazão de água opera entre os limites de 22,7 kmol/h a 1366,2 kmol/h (5 a 300% do valor nominal).

O primeiro esquema de controle utilizado é apresentado na Figura 9, onde apenas um controlador PID é utilizado em estratégia feedback simples. Devido aos ruídos da estimativa, foi incluso um filtro com a intenção de amenizar a ação derivativa.

Figura 9 – Esquematização da aplicação de um controle convencional PI inferencial



Fonte: o autor.

Uma estratégia de controle cascata é implementada no segundo esquema de controle, apresentado na Figura 10. Nessa configuração, o controlador mestre recebe o sinal de erro da concentração e seu sinal de saída é o valor de *setpoint* da temperatura do reator que alimenta o controlador servo.

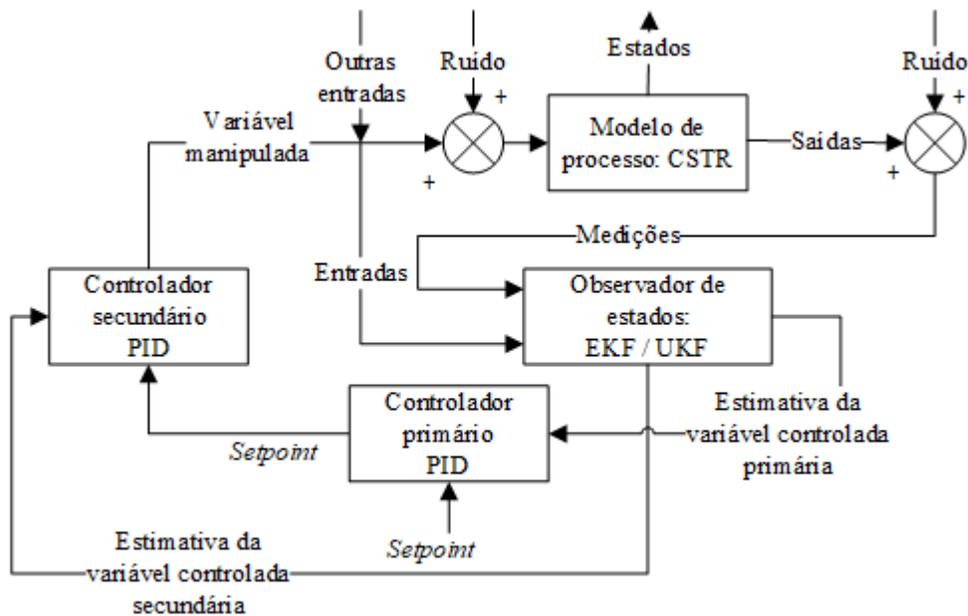
4.3.1.1 Sintonia dos controladores PID

A sintonia dos controladores PID é feita utilizando a ferramenta de sintonia ótima do próprio *software* Simulink® da MathWorks. O algoritmo de ajuste conta com objetivos como: estabilidade em malha fechada, desempenho adequado (rejeição a distúrbios e acompanhamento de *setpoint*) e robustez adequada (para permitir erros de modelagem ou variações na dinâmica do sistema).

O algoritmo MathWorks®, para sintonizar os controladores PID, atende a esses objetivos ajustando os ganhos do PID para obter um bom equilíbrio entre desempenho e robustez. Por padrão, o algoritmo escolhe uma frequência de crossover (largura de banda do loop) com base na dinâmica da planta e projeta para uma margem de fase de 60° .

Para uma dada robustez (margem mínima de fase), o algoritmo de ajuste escolhe um conjunto de ganhos do controlador que equilibra as duas medidas de desempenho: rastreamento de *setpoint* e rejeição a distúrbios (INTRODUCTION, 2019).

Figura 10 – Esquemática da aplicação de um controle cascata inferencial

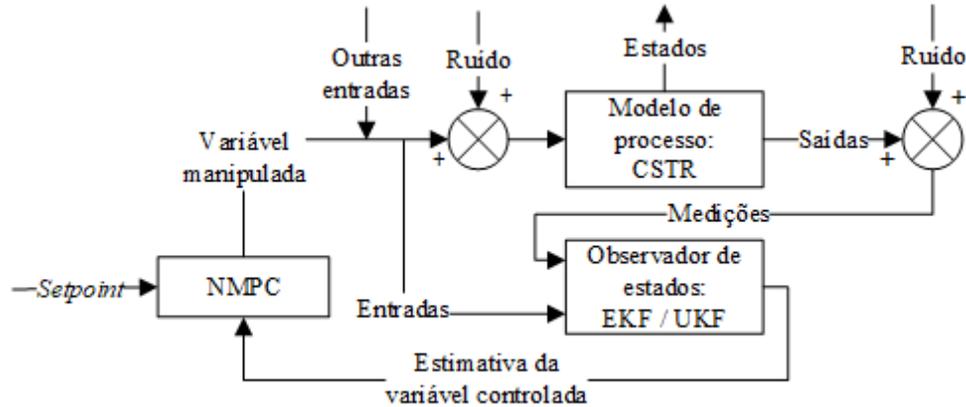


Fonte: o autor.

4.3.2 Estratégia avançada de controle: NMPC

Um controlador não linear NMPC é implementado na terceira estratégia de controle, como apresentado na Figura 11. O algoritmo de otimização usado neste trabalho é o SQP, apresentado na seção 3.3.2.2. Este algoritmo é implementado pela função *fmincon* do MATLAB.

Figura 11 – Esquematização da aplicação de um controlador NMPC inferencial



Fonte: o autor.

4.3.2.1 Função custo de otimização

Uma vez que os estados são estimados pelo filtro de Kalman, a equação de custo do NMPC deve ser ajustada. Tomando o algoritmo do EKF como exemplo, as etapas de I a IV da seção 4.2.1 são combinadas para fornecer a seguinte equação estendida dos estados estimados a cada instante k de amostragem:

$$\hat{x}_k = f(\hat{x}_{k-1}, u_{k-1}) + \frac{(F_{k-1}P_{k-1}F_{k-1} + Q_k)H_{k-1}}{H_{k-1}(F_{k-1}P_{k-1}F_{k-1} + Q_k)H_{k-1} + R_k} [z_k - H_{k-1}f(\hat{x}_{k-1}, u_{k-1})] \quad (67)$$

Combinando com a Equação (26) de custo apresentada na seção 3.3.2.1, obtém-se:

$$J = \sum_{i=1}^P Q_e \left(y_{SP} - \left\{ f(\hat{x}_{k-1}, u_{k-1}) + \frac{(F_{k-1}P_{k-1}F_{k-1} + Q_k)H_{k-1}}{H_{k-1}(F_{k-1}P_{k-1}F_{k-1} + Q_k)H_{k-1} + R_k} [z_k - H_{k-1}f(\hat{x}_{k-1}, u_{k-1})] \right\} \right)_{k+i}^2 + \sum_{i=1}^C R_{\Delta u} \Delta SC_{k+i}^2 \quad (68)$$

Onde ΔSC representa a variação de sinal de controle entre cada instante amostral. A definição das matrizes de penalidade do erro e do sinal de controle foi feita estabelecendo 80% de

prioridade para os erros de controle e 20% para a variação do sinal de controle. Portanto, Q_e assume o valor de 0,8 e $R_{\Delta u}$ assume o valor de 0,2.

Para acelerar a convergência da otimização foram utilizadas razões de escalas para as variáveis envolvidas, além do ajuste das matrizes de penalidade do processo. Isso é feito dividindo o valor do erro (ou da variação de sinal de controle) pelos seus respectivos valores nominais (de projeto ou *setpoint*), conforme a equação abaixo:

$$J = \sum_{i=1}^P Q_e \left(\frac{y_{SP} - \hat{y}}{y_{SP}} \right)^2 + \sum_{i=1}^C R_{\Delta u} \left(\frac{\Delta u}{\bar{u}} \right)^2 \quad (69)$$

4.3.2.2 Sintonia do NMPC

O tempo de amostragem (T_s), o horizonte de predição (p) e o horizonte de controle (m) são os primeiros e principais parâmetros do MPC a serem sintonizados. Ulusoy (2018), da *MathWorks*, apresentou recomendações quanto à escolha desses parâmetros. O tempo de amostragem deve estar entre 1/20 e 1/10 do tempo de ascensão do processo. Quanto ao horizonte de predição, recomenda-se que seja maior ou igual à razão entre o tempo de estabilização do processo e o tempo de amostragem escolhido. Já o horizonte de controle deve estar entre 1/10 e 1/5 do horizonte de predição.

4.3.2.3 Restrições do processo

Foi visto na seção 4.1.1.5 que o processo possui uma restrição de temperatura. Por ter um baixo ponto de ebulição, óxido de propileno pode evaporar a altas temperaturas, sendo 355,4 K (180 °F) considerada a temperatura máxima de operação para o reator no ponto operacional abordado.

A aplicação dessa restrição nas simulações é feita através da função custo no interior do otimizador. Uma condição é estabelecida para que, quando a temperatura do reator aumentar além de um valor preestabelecido, um peso desproporcionalmente grande é dado ao erro associado a essa temperatura, mudando o foco da ação do NMPC para manter o reator dentro do limite de operação, conforme apresentado na equação abaixo:

$$J = \begin{cases} \sum_{i=1}^P Q_e \left(\frac{C_{C_{SP}} - \widehat{C}_C}{C_{C_{SP}}} \right)^2 + \sum_{i=1}^C R_{\Delta u} \left(\frac{\Delta u}{\bar{u}} \right)^2, \text{ para } T < T_{max} \\ \sum_{i=1}^P Q_e \left(\frac{C_{C_{SP}} - \widehat{C}_C}{C_{C_{SP}}} \right)^2 + \sum_{i=1}^C R_{\Delta u} \left(\frac{\Delta u}{\bar{u}} \right)^2 + \sum_{i=1}^P Q_R \left(\frac{T_{max} - \widehat{T}}{T_{max}} \right)^2, \text{ para } T \geq T_{max} \end{cases} \quad (70)$$

Sendo $Q_R \gg Q_e$.

5 RESULTADOS

Esta seção apresenta os resultados de cada etapa da metodologia especificada na seção 4. Primeiramente, são apresentadas as análises quanto à natureza física do processo e ao seu comportamento não linear, reforçando a escolha de estratégias e técnicas de estimativa e controle não lineares.

Em seguida, o procedimento de construção e sintonia dos estimadores – EKF e UKF – é detalhado, bem como a comparação entre eles a partir dos critérios de erro quadrático médio e raiz do erro quadrático médio.

Por último, a sequência de etapas para implementação do controle é apresentada em conjunto com os dados e resultados que levaram à tomada de decisões de projeto. O desempenho de cada controlador/estratégia de controle é avaliado quantitativamente em relação à capacidade do controlador de minimizar os erros transientes frente a perturbações no processo e mudanças no *setpoint* dos controladores.

5.1 RESULTADOS DA ANÁLISE DA DINÂMICA DO PROCESSO

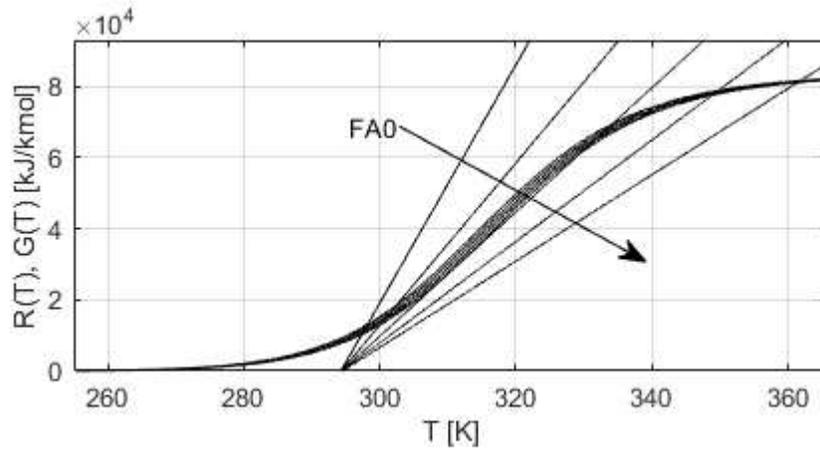
5.1.1 Curvas de remoção e geração de calor: não linearidade do processo

As curvas $R(T)$ e $G(T)$, representadas pelas Equações (58) e (59) apresentadas na seção 4.1.2, foram construídas e simuladas com variações em cada uma das variáveis de entrada ($F_{A0}, F_{B0}, F_{M0}, \dot{m}_w, T_0, T_{a1}$).

A Figura 12 apresenta a resposta a variações em F_{A0} . À medida que a vazão molar de óxido de propileno aumenta, percebe-se que a inclinação da reta que representa a curva de remoção $R(T)$ varia rapidamente, enquanto que a curva de geração $G(T)$ sofre poucas variações.

O ponto de encontro entre as curvas a cada variação de F_{A0} apresenta a temperatura estacionária do reator para o valor de entrada da vazão. Pode-se perceber este valor estacionário se desloca rapidamente por volta do valor médio de F_{A0} , justificando o comportamento não linear do sistema para variações nessa variável de entrada.

Figura 12 – Resposta das curvas de remoção e geração a perturbações em F_{A0}



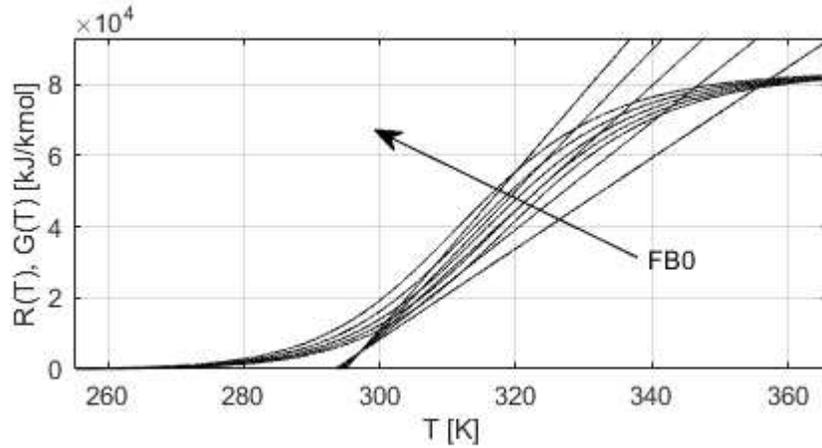
Fonte: o autor.

Por esta causa, espera-se que um controlador convencional PID sintonizado em torno de um desses valores estacionários tenha um baixo desempenho frente a grandes distúrbios ou mudanças no *setpoint*. Um comportamento similar ocorre quando é perturbada a variável de entrada F_{B0} , conforme apresentado na Figura 13.

Além da mudança na inclinação de $R(T)$, as variações na vazão de água (B) alteram significativamente a dinâmica do processo reativo, afetando a também a curva $G(T)$. Isso ocorre pois, para que a cinética da reação seja considerada de primeira ordem em relação ao óxido de propileno, a quantidade de água há de ser em excesso. Nas condições padrões operacionais para qual o reator foi projetado neste estudo de caso, a vazão F_{B0} é da ordem de 453,6 kmol/h, enquanto as vazões F_{A0} e F_{M0} são de 36,3 kmol/h e 45,4 kmol/h – isso faz com que a vazão volumétrica total de alimentação do reator (v_0) seja bastante sensível para essas variações.

Quando se trata da análise da influência de F_{M0} , espera-se que o sistema seja pouco sensível a variações nessa variável de entrada, conforme a Figura 14. Uma vez que o metanol é inerte, não participa da reação e afeta pouco a curva $R(T)$. A sua vazão também tem uma magnitude de baixa ordem em comparação com a vazão de água – afetando menos a curva $G(T)$.

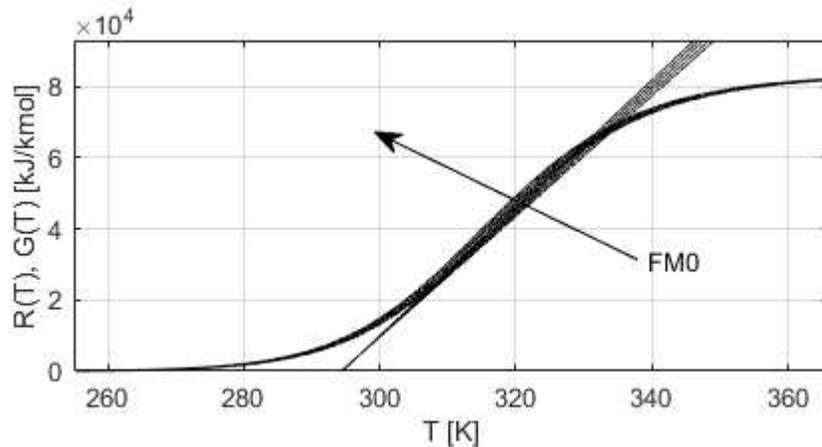
Figura 13 – Resposta das curvas de remoção e geração a perturbações em F_{B0}



Fonte: o autor.

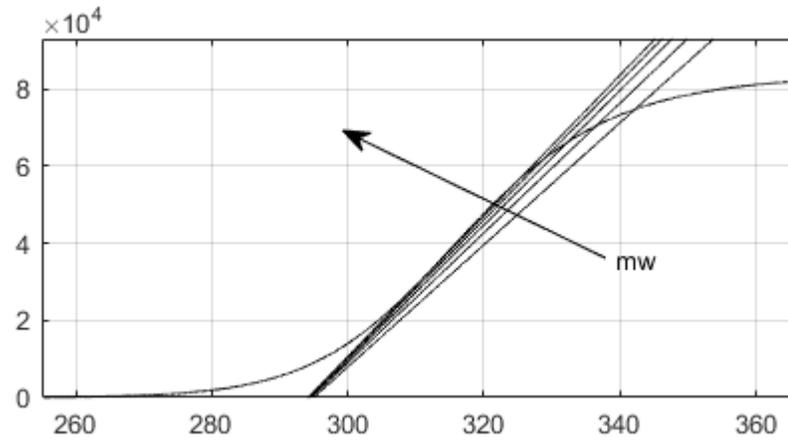
As variáveis restantes a serem analisadas – m_w , T_0 e T_{a1} – não influenciam diretamente na dinâmica do reator, afetando apenas a curva $R(T)$. A Figura 15 apresenta a variação da curva $R(T)$ para variações na vazão de água do trocador de calor. À medida que m_w aumenta, a inclinação da curva de remoção tende a um valor fixo. A temperatura estacionária do reator também transita rapidamente para valores altos desta vazão.

Figura 14 – Resposta das curvas de remoção e geração a perturbações em F_{M0}



Fonte: o autor.

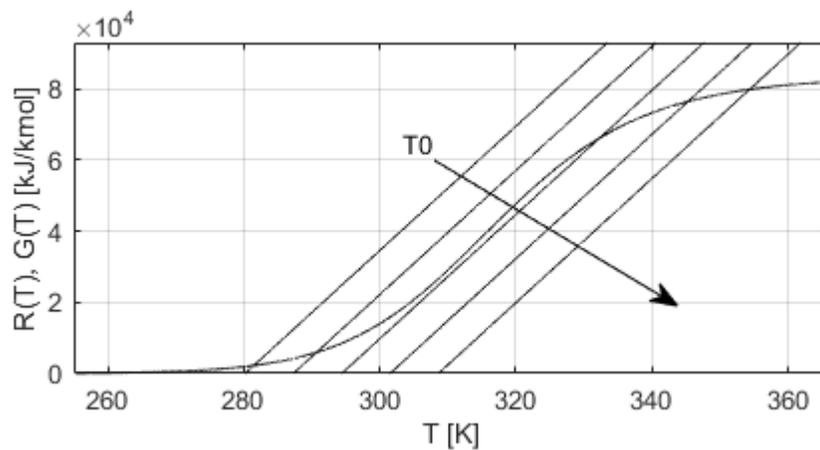
Figura 15 – Resposta das curvas de remoção e geração a perturbações em m_w



Fonte: o autor.

A resposta do sistema a variações na temperatura da corrente de alimentação do reator está apresentada na Figura 16. Percebe-se que a variação de $R(T)$ é dada pelo coeficiente linear da reta. Essa variação também aparece de forma rápida e bastante não linear, assim como quando se variou as vazões molares F_{A0} e F_{B0} .

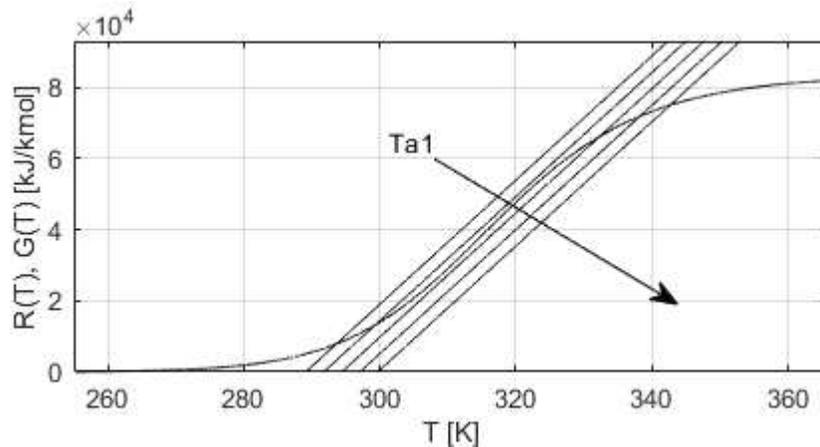
Figura 16 – Resposta das curvas de remoção e geração a perturbações em T_0



Fonte: o autor.

A Figura 17 apresenta a resposta do sistema a variações na temperatura de alimentação da água do trocador de calor. É possível notar que o sistema se comporta de maneira semelhante às perturbações na variável T_0 , mas com menor amplitude. Ainda assim, o salto no valor estacionário da temperatura do reator ainda é possível, tornando o sistema passível de mudanças bastante não lineares e comprometendo o desempenho de controladores lineares.

Figura 17 – Resposta das curvas de remoção e geração a perturbações em T_{a1}



Fonte: o autor.

Um resumo quantitativo de todas as perturbações efetuadas e seus respectivos valores estacionários alcançados pela temperatura do reator está apresentado na Tabela 2, e um gráfico montado a partir desses resultados permite uma melhor visualização das regiões de linearidade do sistema frente a mudanças em cada variável de entrada.

Na Figura 18, é possível visualizar como cada variável de entrada afeta o estado estacionário do sistema. O eixo das abscissas representa um percentual da variável de entrada em relação ao seu valor nominal (em °F para as temperaturas), enquanto o eixo das coordenadas apresenta o valor estacionário da temperatura do reator alcançado para mudanças naquela variável. O gráfico não considera perturbações simultâneas nas entradas.

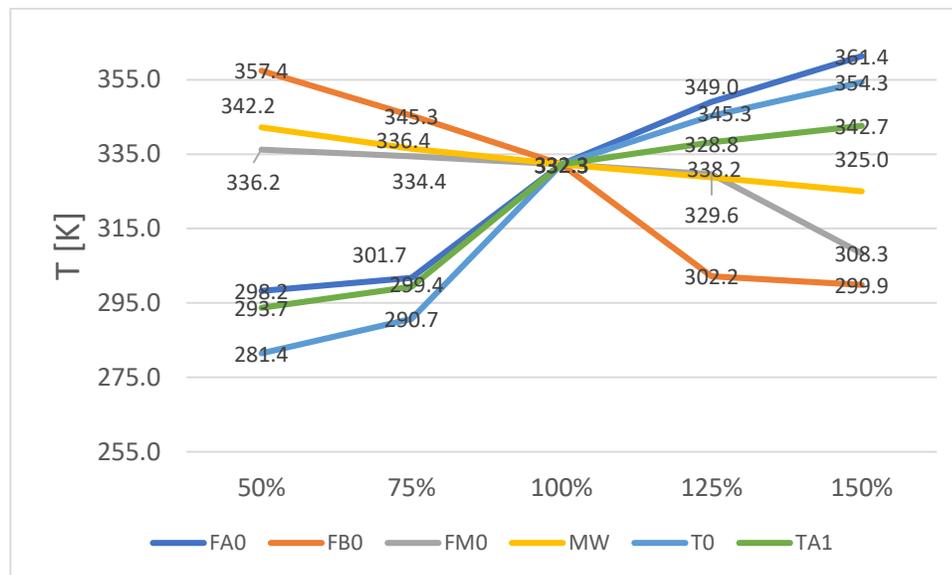
A variável m_w , por exemplo, tem relação quase linear com a temperatura estacionária do reator. Valores baixos das entradas T_0 , T_{a1} e F_{A0} rapidamente deslocam o estado estacionário do sistema e podem ser classificados como distúrbios mais influentes do processo. A variável F_{B0}

afeta mais significativamente o processo quando aumenta além do valor de projeto, enquanto a variável F_{M0} afeta apenas perto dos valores máximos.

Tabela 2 – Valores estacionários de T [K] para cada variação nas entradas em relação às condições de projeto

	F_{AO}	F_{B0}	F_{M0}	m_w	T_0	T_{a1}
50%	298,2	357,4	336,2	342,2	281,4	293,7
75%	301,7	345,3	334,4	336,4	290,7	299,4
100%	332,3	332,3	332,3	332,3	332,3	332,3
125%	349,0	302,2	329,6	328,8	345,3	338,2
150%	361,4	299,9	308,3	325,0	354,3	342,7

Figura 18 – Valores estacionários de T para perturbações nas entradas



Fonte: o autor.

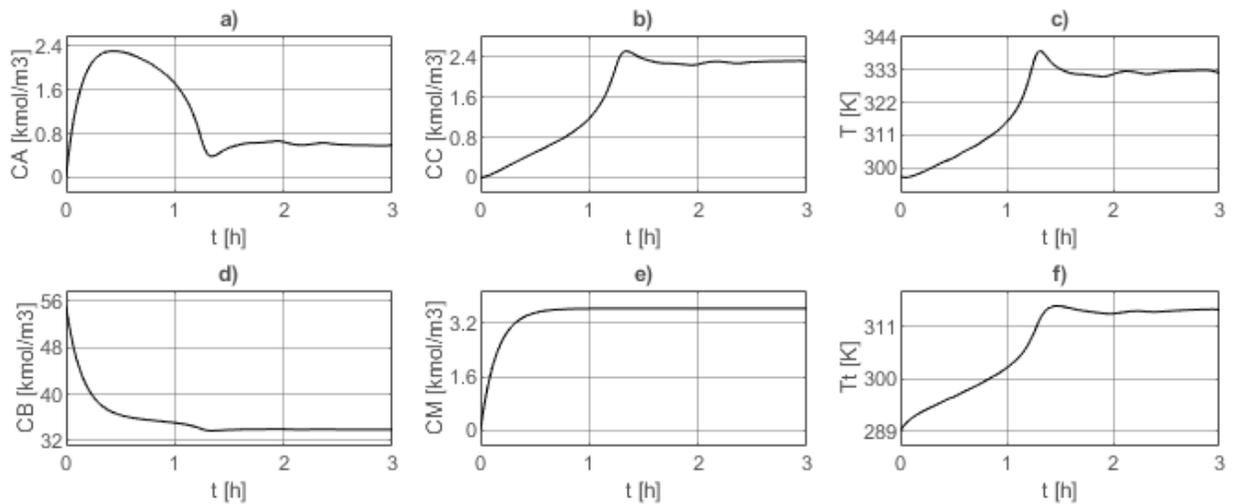
Estes resultados levam a conclusões que serão usadas como base para a tomada de decisões de projeto das etapas seguintes, como a classificação das entradas que mais influenciam no

processo – F_{A0} , F_{B0} , T_0 e T_{a1} –, a relação linear de m_w com o valor estacionário de T ; e a baixa influência de F_{M0} em relação às outras variáveis.

5.1.2 Resposta do sistema a perturbações

Inicialmente, foi analisado o comportamento transiente do reator com ausência de perturbações. A Figura 19 apresenta as respostas do processo até atingir o estado estacionário de operação.

Figura 19 – Partida do CSTR nas condições padrões de operação



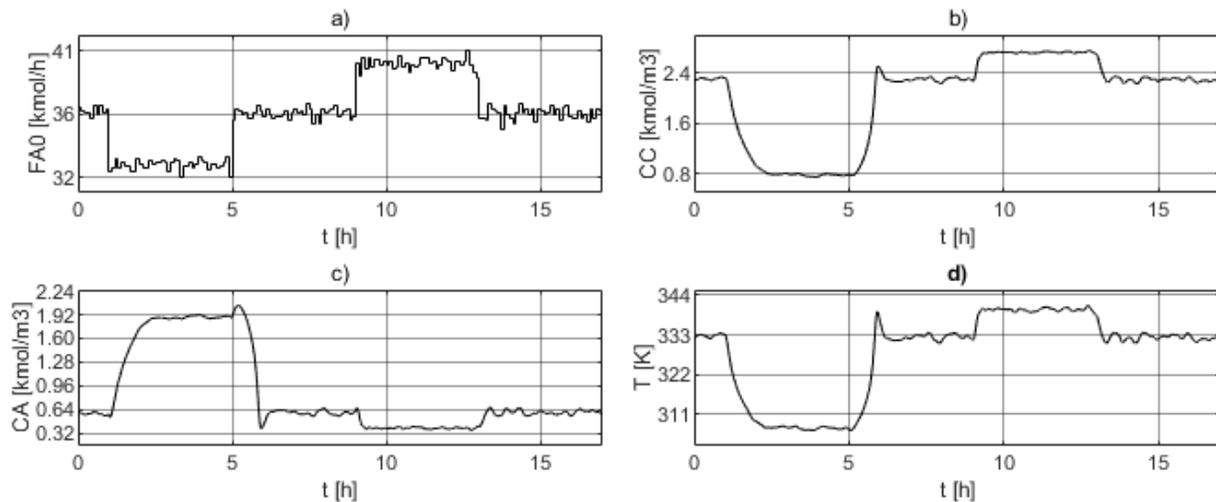
Fonte: o autor.

O comportamento oscilatório que pode ser percebido em algumas variáveis (Figuras 19-a, 19-b, 19-c e 19-f, perto do estado estacionário) é decorrente de ruídos que foram acrescentados às entradas do sistema para simular o ruído de processo a ser estimado na seção 5.2, que trata dos resultados dos observadores de estado.

Seguidamente, perturbações foram feitas com o objetivo de avaliar os casos que mais deslocavam o estado estacionário do sistema, com base no que já foi observado a partir das curvas de remoção e geração. Foram avaliadas as dinâmicas da concentração de reagente (C_A),

concentração do produto (C_C) e da temperatura do reator (T). As próximas simulações foram feitas contando com que o sistema partisse do ponto estacionário. Logo, não é visualizada a partida do CSTR, apenas as perturbações efetuadas. A Figura 20 apresenta a resposta frente a distúrbios na vazão F_{A0} .

Figura 20 – Resposta de C_A , C_C e T para perturbações em F_{A0}



Fonte: o autor.

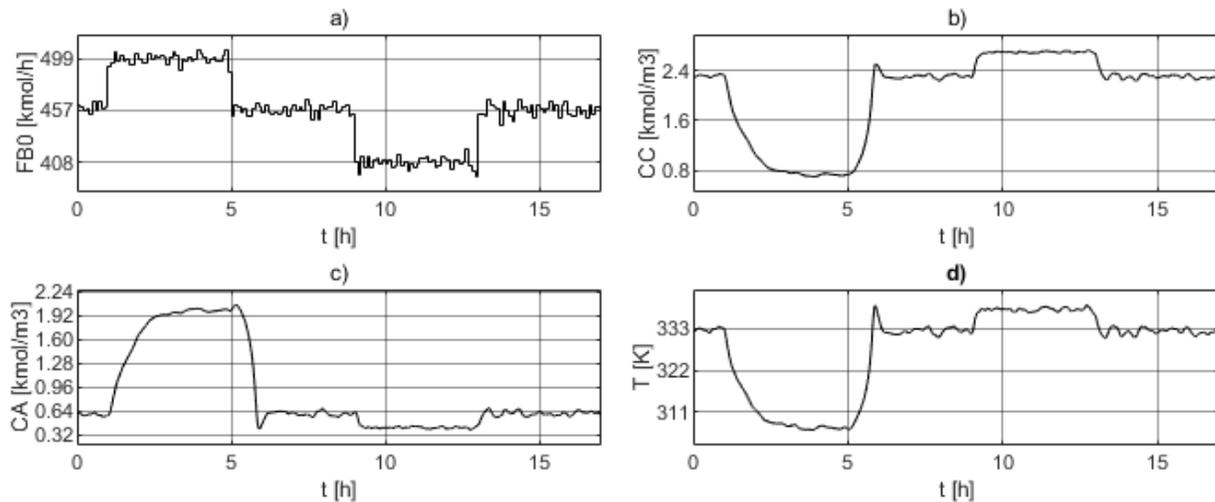
Percebe-se que, quando a vazão $FA0$ (Figura 20-a) cai em 10% ($t = 1$ h), o estado estacionário sofre grande variação, condizente com o que foi visto na Figura 12 da seção 5.1.1. Também se observa que a dinâmica do reator se torna mais lenta (maior constante de tempo do processo), quando se compara com a segunda perturbação (+10% em $FA0$ para $t = 9$ h).

Essa perturbação positiva em $FA0$ ocasiona um deslocamento menor do estado estacionário do que a negativa. Apesar de ambos os distúrbios terem a mesma magnitude, direções diferentes levam a respostas distintas. Esse comportamento reafirma a forte não linearidade do sistema.

A próxima perturbação efetuada foi na vazão de alimentação de água do reator, F_{B0} . Como visto na Figura 13 da seção 5.1.1, esta entrada também tem potencial para deslocar fortemente o estado estacionário do sistema. Foram efetuadas perturbações positivas e negativas, assim como o que foi feito para a vazão de óxido de propileno, para analisar o comportamento transiente do

sistema frente a essas perturbações. A Figura 21 apresenta a dinâmica obtida para distúrbios em F_{B0} .

Figura 21 – Resposta de C_A , C_C e T para perturbações em F_{B0}

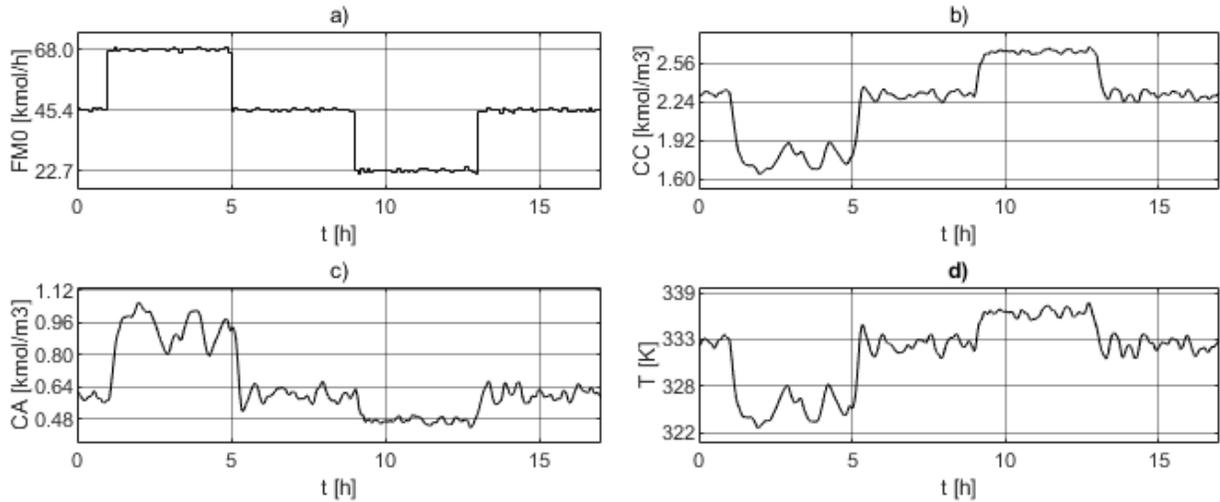


Fonte: o autor.

De maneira bastante semelhante ao que foi observado na Figura 20, o sistema sofre mudanças bruscas para quando a variável F_{B0} opera a 10% acima ($t = 1h$) do valor de projeto. Apesar de ser um reagente, água é alimentada em excesso e não participa da cinética da reação. Sendo assim, um aumento em F_{B0} acaba por retardar o desempenho do reator através de um aumento na constante de tempo e resfriando o processo. O comportamento dúbio quando se refere à resposta do processo frente à direção das perturbações também reafirma a não linearidade que essa variável introduz ao processo.

Conforme observado na Figura 14 da seção 5.1.1, a vazão de alimentação de metanol (inerte) afeta pouco a dinâmica do processo quando comparado às outras variáveis. Para observar melhor a influência de distúrbios nessa entrada, foram efetuadas perturbações de magnitudes superiores às feitas até então. A Figura 22 apresenta o comportamento do sistema para perturbações em F_{M0} .

Figura 22 – Resposta de C_A , C_C e T para perturbações em F_{M0}



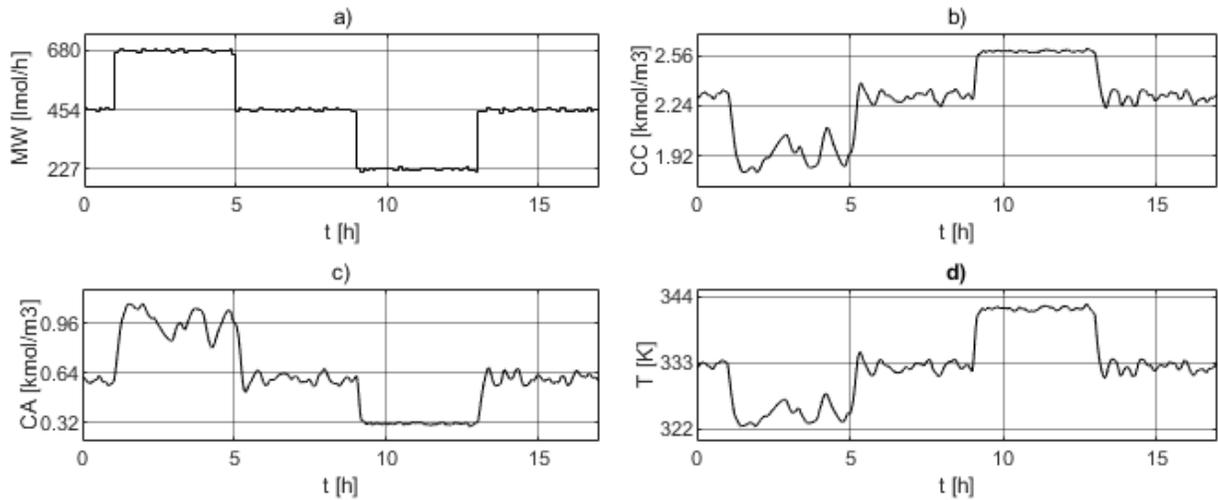
Fonte: o autor.

Quando uma perturbação positiva é efetuada em F_{M0} ($t = 1$ h), o sistema entra em uma região de menor estabilidade, percebida pelo aumento das oscilações que já se distinguem dos ruídos do processo. Isso pode ser explicado pela aproximação das curvas de remoção e geração observados anteriormente na Figura 14 da seção 5.1.1. Nessa região, o sistema está próximo da condição de múltiplos estados estacionários, diferentemente da resposta do processo à perturbação negativa em F_{M0} ($t = 9$ h).

De maneira análoga à vazão de água (F_{B0}), diminuir a vazão de metanol leva a um aumento da velocidade do sistema (diminuição da constante de tempo) e de menor retenção da temperatura do reator, aumentando a taxa de reação e, conseqüentemente, a concentração do produto (CC).

Esse comportamento ocorre de maneira semelhante ao processo quando se efetuam grandes perturbações na vazão de água do trocador de calor, m_w . A resposta transiente do processo apresenta-se na Figura 23.

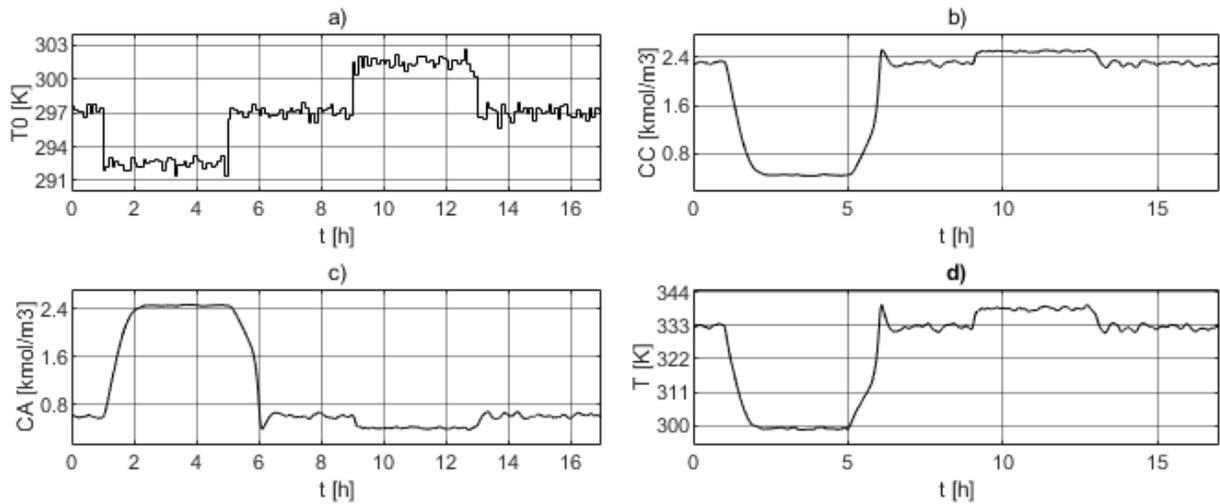
Figura 23 – Resposta de C_A , C_C e T para perturbações em m_w



Fonte: o autor.

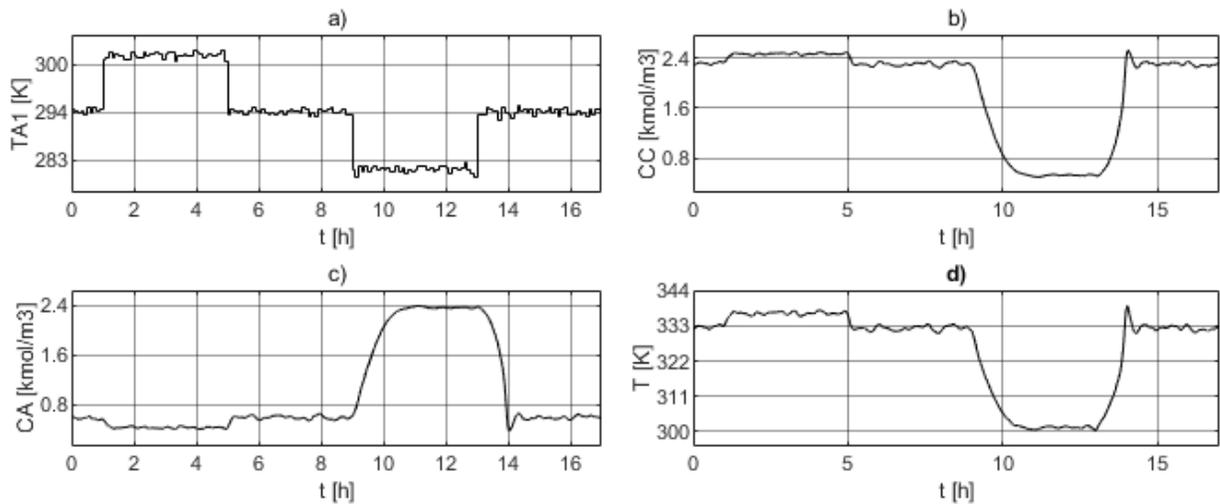
Nesse caso, a resposta transiente obtida é explicada pela maneira que a taxa de reação é afetada pela temperatura do processo. Quando se aumenta a vazão de água no trocador, mais o reator é resfriado e uma queda na formação de produto é percebida. Conforme observado na Figura 15 da seção 5.1.1, as curvas de remoção e geração também se aproximam, diminuindo a estabilidade do sistema (maiores oscilações). Já uma diminuição nessa vazão (-50% em $t = 9$ h) leva a um aumento da temperatura do reator e, conseqüentemente, da formação de propilenoglicol (CC).

Após analisadas as vazões de entrada dos processos, os próximos distúrbios foram nas temperaturas dessas correntes. A penúltima variável avaliada foi a temperatura da corrente de alimentação do reator, T_0 , que apresentou grandes variações no processo semelhantes aos casos de mudanças em F_{A0} e F_{B0} . A Figura 24 apresenta estes resultados.

Figura 24 – Resposta de C_A , C_C e T para perturbações em T_0 

Fonte: o autor.

Uma diminuição de 10% (de 75 °F para 67,5 °F, em $t = 1h$) nessa temperatura leva rapidamente o sistema a um estado estacionário inferior, enquanto o um aumento ($t = 9h$) desloca muito menos. Esse resultado confirma a forte não linearidade do processo frente à essa entrada – assim como FA0 e FB0.

Figura 25 – Resposta de C_A , C_C e T para perturbações em T_{a1} 

Fonte: o autor.

Por último, o comportamento do sistema frente a perturbações na temperatura de entrada do fluido do trocador de calor, T_{al} , é avaliado na Figura 25. Pode-se perceber que o sistema que o sistema sofre um deslocamento brusco do estado estacionário quando cai a temperatura do fluido de refrigeração, resfriando excessivamente a reação e diminuindo sua taxa.

Os resultados até então serviram pra mostrar como cada entrada tem o potencial de afetar não linearmente o comportamento dos estados do sistema. Enquanto leves perturbações (até 10% de magnitude) nas vazões de alimentação de reagente (F_{A0} e F_{B0}) e na temperatura dessas correntes ($T_0[^\circ\text{F}]$) podem deslocar o sistema para estados estacionários inferiores de maneira brusca, as outras entradas requerem perturbações maiores (50% para F_{M0} e m_w e 20% para $T_{al}[^\circ\text{F}]$) para deslocar significativamente o processo. No entanto, essas mesmas entradas podem afetar a estabilidade do processo, como visto no caso da vazão de inerte e de água do refrigerador.

Todas essas perturbações e resultados até então serão considerados no projeto dos sensores virtuais e controladores, com ênfase nos casos que mais afetam a dinâmica do processo.

5.2 RESULTADOS DA CONSTRUÇÃO DOS OBSERVADORES DE ESTADO

Conforme a metodologia descrita na seção 4.2, foram construídos sensores virtuais baseados nos algoritmos de filtro de Kalman estendido (EKF) e *unscented* (UKF) com diferentes configurações e parâmetros de sintonia.

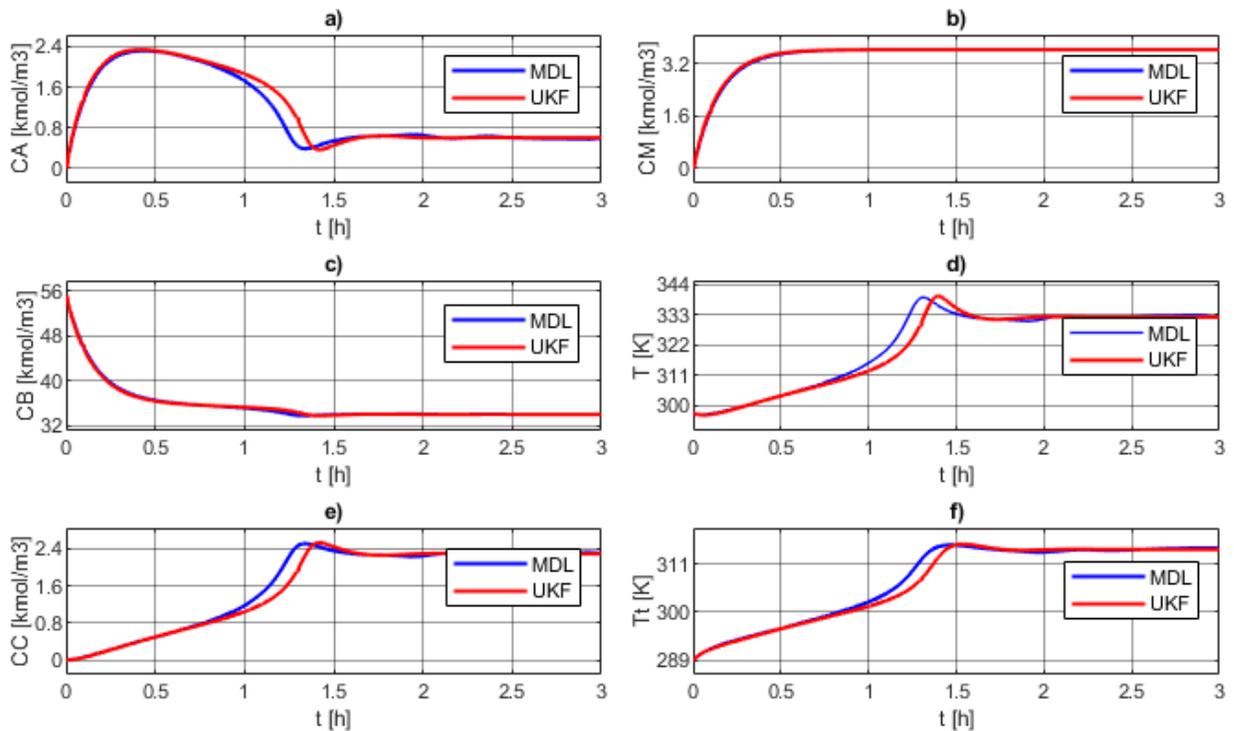
Esta seção traz, em primeiro lugar, os resultados da busca de melhores configurações de cada filtro, separadamente. Após terem sido encontrados os melhores parâmetros de cada filtro, estes são comparados entre si em diferentes situações possíveis para o sistema reativo.

5.2.1 Parâmetros de sintonia dos filtros de Kalman

A matriz de covariância Q, representativa da precisão do modelo matemático do processo, e a matriz de covariância R, representativa dos ruídos dos sensores físicos, são os principais parâmetros de sintonia do filtro de Kalman. A má escolha desses parâmetros pode levar a estimativas com baixa precisão ou até mesmo divergentes. Para ilustrar esse caso, primeiramente

foi testado o filtro considerando apenas o modelo do processo como influente, ou seja, matriz de covariância Q nula. Assim, as medições (sensores físicos) são ignoradas pelo observador de estados e apenas o modelo do processo é incorporado na estimativa. Este resultado está apresentado na Figura 26.

Figura 26 – Estimativa dos estados pelo UKF sem sintonia (matriz Q nula)



Fonte: o autor.

Percebe-se que a dinâmica estimada pelo filtro (UKF) é diferente do modelo matemático (MDL) da planta. Isso pode ser explicado pela presença dos ruídos nas entradas do processo, que podem afetar a não linearmente as variáveis mais sensíveis (CA, CC, T e T_t). Informações desses ruídos não foram consideradas como disponíveis para o observador de estados, que utiliza apenas os dados de projeto das variáveis de entrada. Portanto, faz-se necessário a busca de parâmetros ótimos que consideram tanto os sensores como o modelo para que o observador estime da melhor maneira possível.

Como os valores dos ruídos de sensores podem ser encontrados a partir de informações de fábrica, apenas a matriz de covariância Q foi abordada por uma metodologia de sintonia. Como descrito na seção 4.2.3, três metodologias foram avaliadas:

1. Primeiramente, foram testados desvios padrões iguais a 1%, 2% e 3% do valor estacionário de cada variável de estado;
2. Em seguida, a covariância foi calculada diretamente a partir de dados da planta operando em regime permanente;
3. Por último, uma otimização foi feita com objetivo de minimizar o erro total da estimativa.

5.2.2 Comparação entre EKF e UKF

Foram avaliados os critérios de erro quadrático para as estimativas em cada simulação, para ambos os filtros, e variando a sintonia de Q . Um tempo de simulação igual a 3 horas foi considerado, no qual o sistema parte do início da reação até atingir regime permanente. A Tabela 3 apresenta todos os resultados obtidos.

De maneira geral, a diferença entre os resultados dos critérios de erro obtidos por cada filtro pode ser considerada insignificante. Percebe-se que o fator determinante para a qualidade da estimativa está mais relacionado com a sintonia correta da matriz Q e menos com a natureza do filtro, no caso do EKF e do UKF.

Para a concentração de metanol, C_M , que é inerte para a reação, a indiferença entre os resultados à medida que se varia a sintonia de Q pode ser explicada pela simples dinâmica linear desta variável, que é facilmente modelada e facilmente traduzida pelos filtros. Para o caso das temperaturas, T e T_t , o melhor resultado foi o encontrado pela abordagem de otimização. Isso pode ser explicado pela alta não linearidade desses estados. As derivadas parciais de primeira ordem das temperaturas em relação às outras variáveis de estado (e também em relação às próprias temperaturas) são de maior complexidade.

Tabela 3 - Valores para cada critério de erro considerando ambos os filtros e diferentes configurações de Q

UKF										
MSE						RMSE				
Q	1%	2%	3%	Planta	Otimização	1%	2%	3%	Planta	Otimização
CA	1,06E-06	1,17E-06	1,26E-06	1,12E-06	1,13E-06	0,000757	0,000825	0,000867	0,000784	0,000743
CB	3,36E-05	0,003605	3,83E-05	3,35E-05	3,25E-05	0,003074	0,000361	0,004141	0,000307	0,000291
CC	4,41E-07	0,000571	6,48E-07	5,98E-07	3,91E-07	0,000499	0,000571	0,000615	0,000575	0,000448
CM	1,17E-06	0,000499	1,17E-06	1,17E-06	1,17E-06	0,000491	0,000499	0,000506	4,86E-04	0,000486
T	0,9438	1,382	1,602	0,8961	0,3476	0,7891	0,9588	1,032	0,7632	0,4725
Tt	0,4404	0,7694	0,9254	0,1726	0,02536	0,5438	0,7167	0,785	0,3328	0,1266

EKF										
MSE						RMSE				
Q	1%	2%	3%	Planta	Otimização	1%	2%	3%	Planta	Otimização
CA	1,07E-06	1,19E-06	1,04E-05	1,13E-06	1,14E-06	0,00076	0,000827	0,00087	0,0007	0,000746
CB	3,35E-05	3,55E-05	3,5E-05	3,34E-05	3,25E-05	0,000307	0,003611	0,004149	0,000298	0,002902
CC	4,33E-07	5,44E-07	3,97E-07	5,93E-07	3,92E-07	0,00049	0,000557	0,000598	0,000481	0,000449
CM	1,17E-06	1,17E-06	1,17E-06	1,17E-06	1,17E-06	0,00049	0,000499	0,000506	0,000486	0,000486
T	0,9438	1,382	1,602	0,8962	0,3484	0,789	0,9588	1,032	0,5974	0,4732
Tt	0,4404	0,7694	0,9254	0,1726	0,02542	0,5438	0,7167	0,785	0,419	0,1268

Para as próximas etapas do trabalho, o UKF passa a ser utilizado por ser uma técnica mais moderna do que o EKF. No entanto, os resultados sugerem que a eficácia do filtro varia mais com a sintonia da matriz Q do que da natureza do filtro. Espera-se, portanto, que dois observadores de estado do tipo EKF e UKF estimem com mesma qualidade – de maneira grosseira e para processos da mesma natureza – dado que seus parâmetros de sintonia sejam os mesmos.

As Figuras 27 e 28 apresentam o desempenho final da estimativa pelo UKF utilizando a sintonia otimizada na partida do CSTR e no estado estacionário, respectivamente. Percebe que o filtro foi capaz de minimizar os ruídos de medição das variáveis de saída (Figuras 28-d e 28-f). Os ruídos restantes são propagados na estimativa das variáveis de estado restantes (Figuras 28-a, 28-c, 28-e). Os parâmetros ótimos encontrados, foram:

- $q_{11} = q_{33} = 5,616E-08$
- $q_{22} = 5,616E-05$
- $q_{44} = 2,4246E-13$
- $q_{55} = 3,46356E-02$
- $q_{66} = 6,66123E-03$

Figura 27 – Estimativa dos estados na partida do reator pelo UKF utilizando sintonia otimizada

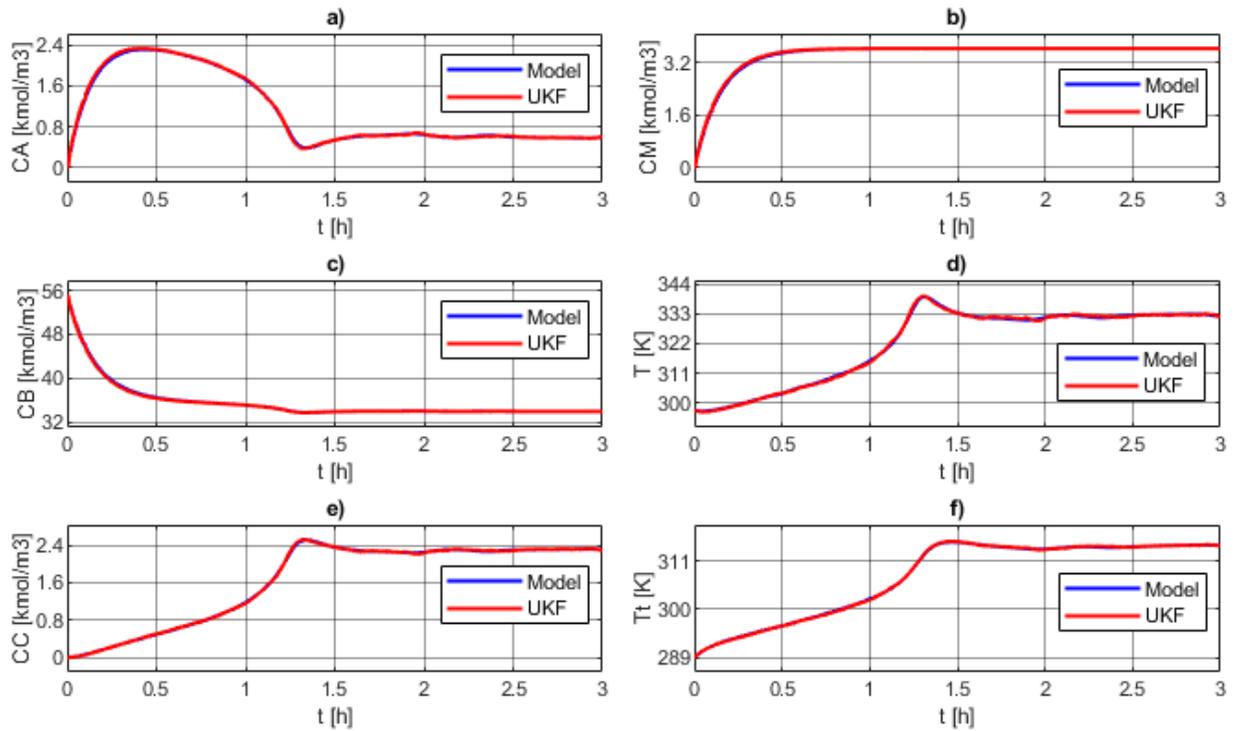
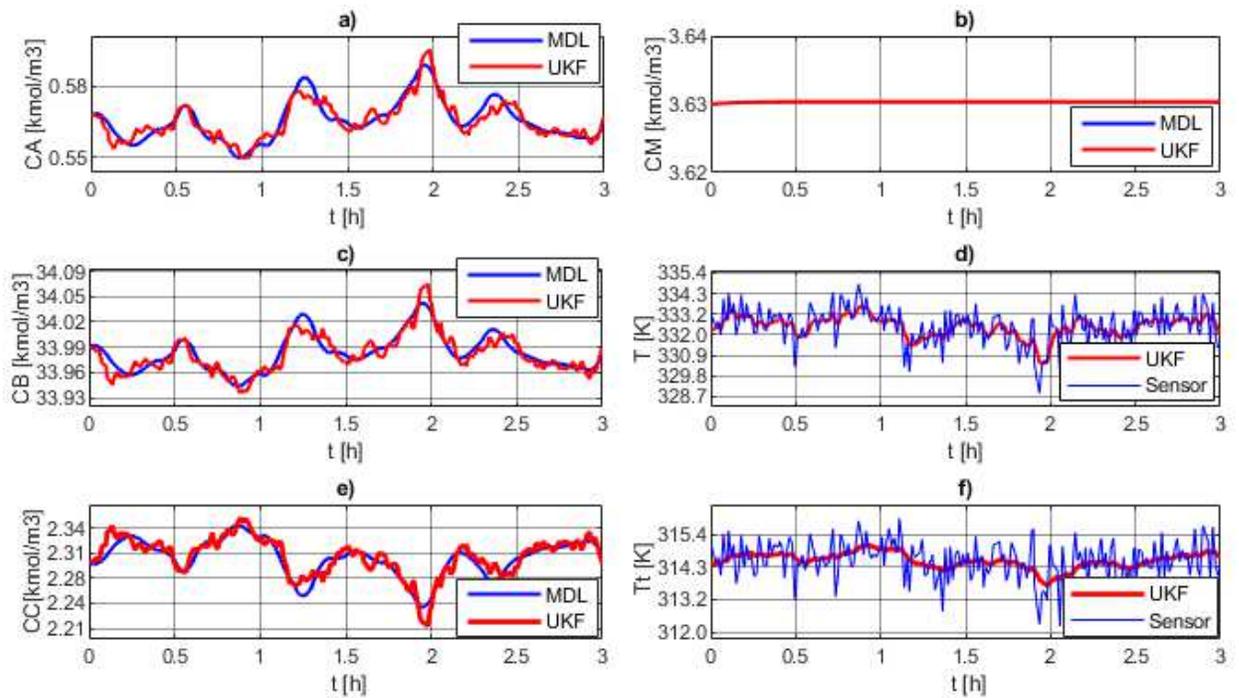


Figura 28 – Estimativa dos estados em regime permanente pelo UKF utilizando sintonia otimizada



Fonte: o autor.

5.3 RESULTADOS DO PROJETO DOS CONTROLADORES

Esta seção contém os parâmetros e resultados relativos à construção e ao desempenho de cada controlador na rejeição de distúrbios e mudanças no *setpoint*. Foram avaliados os critérios de erro integrado – IAE, ISE, ITAE e ITSE – a fim de se comparar quantitativamente o desempenho entre cada abordagem de controle.

A variável manipulada considerada foi a vazão de água da serpentina, m_w , cuja manipulação afeta a temperatura do reator, T , e, conseqüentemente, a taxa de reação. Assim, a concentração de produto, C_C , é acompanhada e controlada a partir da estimativa do sensor virtual, o UKF. Para todos os casos foram considerados os limites de 22,7 kmol/h a 1366,2 kmol/h (5% a 300% do valor nominal) da vazão de água.

5.3.1 Controle com algoritmo PID convencional

Foram construídas e comparadas duas configurações de controle clássico: um único controlador em *feedback*, e uma cascata dupla. No esquema cascata, o controlador servo monitora a temperatura do trocador de calor (T) e fornece o sinal de controle para a vazão de água do trocador (m_w), enquanto o controlador mestre controla a concentração de produto (C_C) fornecendo o *setpoint* de T para o controlador servo.

Os controladores foram sintonizados utilizando a ferramenta *PID Tuner App*, disponível na versão R2018b do Matlab®. Os parâmetros utilizados, considerando as estimativas fornecidas pelo UKF, estão apresentados na Tabela 4.

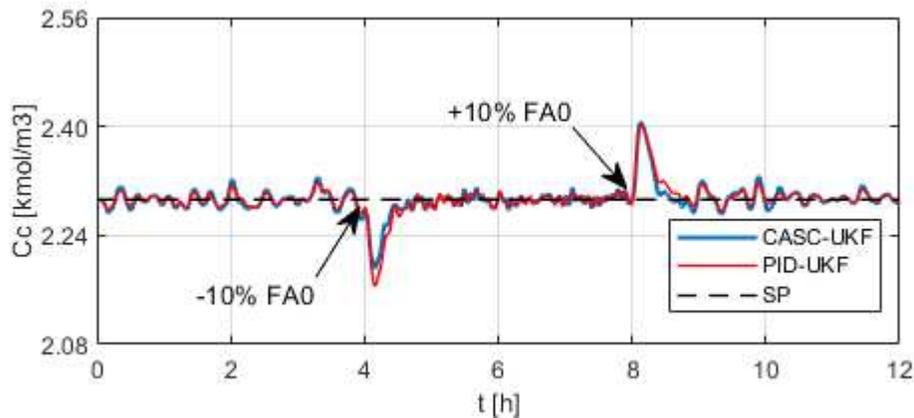
Tabela 4 - Parâmetros dos controladores convencionais

	P	I	D	N
Feedback	-55959,2	-325538	-2169,6	124,2
Servo	-77,16	-601,39	-1,73	76,1
Mestre	250,88	7777,25	0	-

Parar comparar o desempenho entre cada estratégia de controle – simples (*feedback*) e cascata – foram feitos os mesmos testes da seção 5.1.2, mas apenas os distúrbios mais fortes (F_{A0} , F_{B0} , T_0 e T_{A1}) foram considerados. Também foram efetuados testes da função servo do controlador, onde o *setpoint* do processo é perturbado. Além dos critérios de erro integrado (apresentados na seção 4.3, Equações de 63 a 66), foi também avaliada a sobrelevação percentual (*overshoot*, OS%) máxima a fim de destacar o processo que menos se afasta do ponto operacional.

O primeiro distúrbio feito foi na vazão molar de alimentação de óxido de propileno, F_{A0} . O tempo de simulação considerado foi de 12 horas (assim como todos os testes seguintes), e foram feitas duas perturbações em degrau: -10% em $t = 4$ h; e +10% (voltando ao valor de projeto) em $t = 8$ h. O resultado da dinâmica obtida está apresentado na Figura 29.

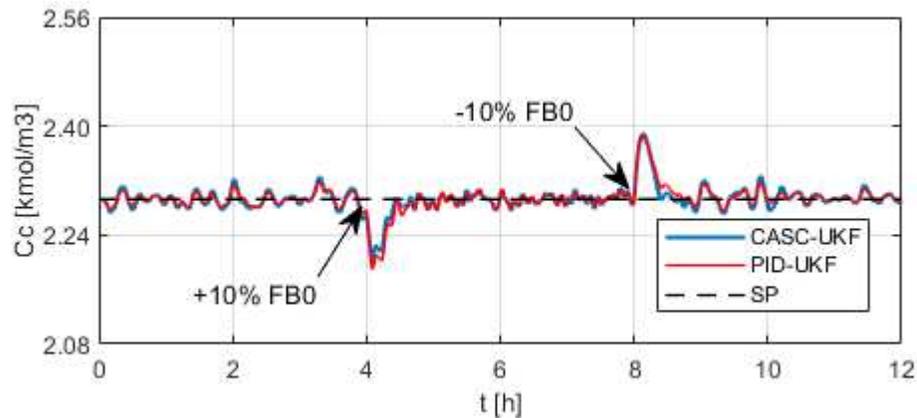
Figura 29 – Resposta dos controles clássicos a perturbações em F_{A0}



Fonte: o autor.

Ambos os esquemas de conseguiram manter a variável de processo em torno do *setpoint* frente às perturbações. O controle cascata possui um *overshoot* ligeiramente menor do que o *feedback* simples. Uma resposta semelhante ocorre quando se perturba a vazão de alimentação de água, F_{B0} , representada na Figura 30. Foram feitos os seguintes distúrbios: +10% em $t = 4$ h; e -10% em $t = 8$ h (voltando ao ponto operacional).

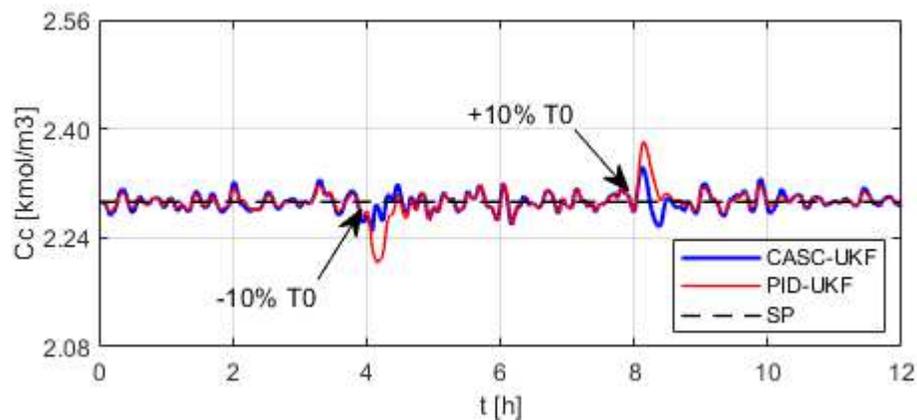
Figura 30 – Resposta dos controles clássicos a perturbações em F_{B0}



Fonte: o autor.

As temperaturas da corrente de alimentação (T_0) e da corrente de água do trocador de calor (T_{al}) não afetam diretamente a constante de tempo do processo, mas transladam a curva de remoção $R(T)$ do processo, podendo levar a diferentes estados estacionários estáveis do sistema. Esse tipo de situação pode ser visto na Figura 31, que apresenta a resposta do sistema a perturbações em T_0 . As seguintes perturbações foram efetuadas: -10% (para $T[^\circ\text{F}]$) em $t = 4$ h; e +10% em $t = 8$ h (voltando ao ponto operacional). Percebe-se que, semelhantemente às perturbações anteriores, a estratégia cascata obteve um *overshoot* menor do que o esquema de *feedback* simples.

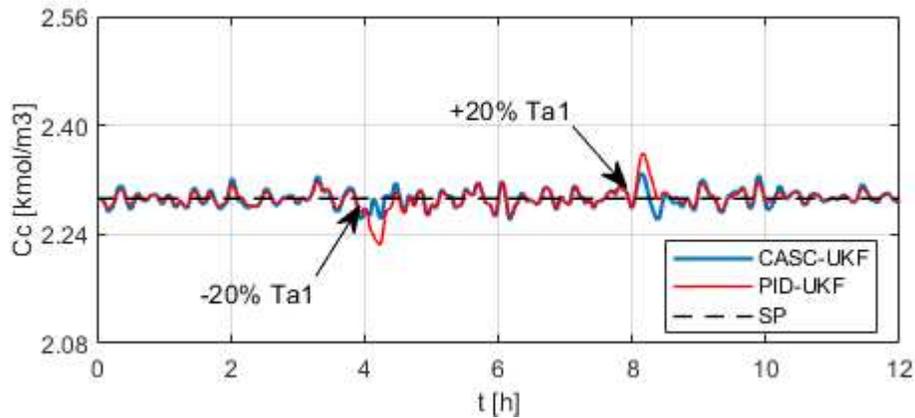
Figura 31 – Resposta dos controles clássicos a perturbações em T_0



Fonte: o autor.

Uma situação semelhante ocorre quando se perturba a temperatura da corrente de alimentação de água do trocador de calor, T_{a1} . Foram efetuados os seguintes distúrbios: -20% (para T [°F]) em $t = 4$ h; e +20% em $t = 8$ h (voltando ao valor de projeto), conforme apresentado na Figura 32.

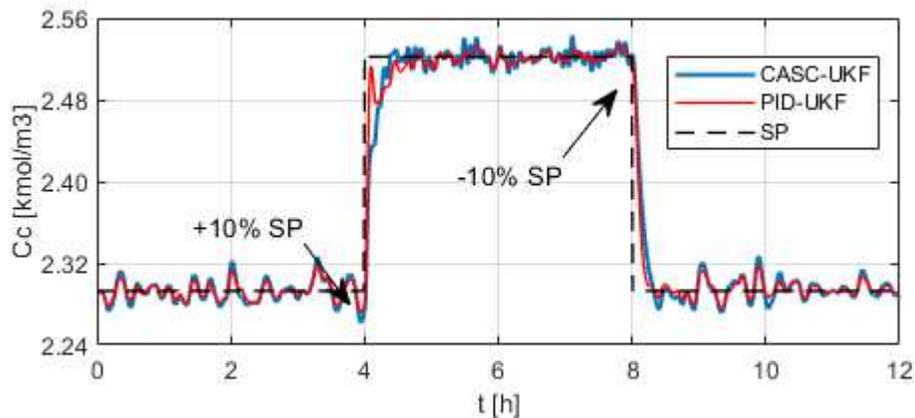
Figura 32 – Resposta dos controles clássicos a perturbações em T_{a1}



Fonte: o autor.

O desempenho de controle servo foi avaliado e está apresentado na Figura 33. Foi efetuada uma perturbação positiva de 10% em $t = 4$ h e negativa de 10% em $t = 8$ h.

Figura 33 – Resposta dos controles clássicos a perturbações no *setpoint*



Fonte: o autor.

O esquema cascata, nesse caso, tem os efeitos dos ruídos propagados em ambos os controladores, tendo maior desempenho levemente abaixo do que o *feedback* simples. Outra possível causa é que as dinâmicas da variável primária (concentração de produto) e secundária (temperatura do reator) possuem velocidades próximas. Isso faz com que o esquema cascata nem sempre opere mais eficientemente do que um *feedback* simples, uma vez que não há antecipação significativa dos distúrbios.

Os valores dos critérios de erro obtidos para os casos apresentados até então apresentados na Tabela 5. Destacados em negrito estão os menores valores de erro integrado para cada critério e variável perturbada. O esquema cascata obteve, em geral, melhores resultados na rejeição de distúrbio (menor *overshoot* em todos os casos). No entanto, os ruídos de estimativa se propagam em ambos os controladores, fazendo com o que o *feedback* simples obtenha menores erros em torno do *setpoint*.

Tabela 5 – Critérios de erro integrado para controle convencional

Distúrbio	Controle	IAE	ISE	ITAE	ITSE	OS%
FA0	Feedback	0,00817	2,30E-05	0,04834	1,37E-04	5,58%
	Cascata	0,00853	1,95E-05	0,05049	1,22E-04	4,96%
FB0	Feedback	0,00771	1,77E-05	0,0454	1,06E-04	4,54%
	Cascata	0,00829	1,67E-05	0,04884	1,02E-04	4,19%
T0	Feedback	0,00754	0,00001	0,04412	0,00008	3,91%
	Cascata	0,0076	8,09E-06	0,04511	4,94E-05	2,23%
TA1	Feedback	0,00682	9,38E-06	0,03973	5,50E-05	3,00%
	Cascata	0,00726	7,04E-06	0,04288	0,00004	1,61%
SP	Feedback	0,00685	2,64E-05	0,04018	1,68E-04	-
	Cascata	0,00921	3,72E-05	0,0547	0,00023	-

Os experimentos até então serviram para mostrar que os observadores de estado podem ser usados no fornecimento de variáveis de difícil medição em processos contaminados por ruídos. Para as próximas etapas, o controle cascata será utilizado em comparação com a estratégia de controle avançado por modelo preditivo não linear (NMPC).

5.3.2 Controle avançado: preditivo não linear – NMPC

Como visto anteriormente, os controladores clássicos são sintonizados em torno de um ponto de operação e mudanças que levem ao deslocamento deste estado (para o qual os controladores foram projetados) podem comprometer a estabilidade e o desempenho do controlador.

Um controle de modelo preditivo não linear foi construído e seu desempenho frente a distúrbios na planta e mudanças no *setpoint* foi comparado com o de um controlador clássico. Esta seção descreve os resultados obtidos nas etapas de sintonia, resposta do processo a perturbações e imposição de restrições do processo ao controlador.

5.3.2.1 Parâmetros de sintonia do NMPC

Para a sintonia dos parâmetros T_s (tempo de amostragem), p (horizonte de previsão) e m (horizonte de controle), foi adotada a metodologia descrita na seção 4.3.2.2. Primeiramente, o tempo de ascensão foi encontrado a partir de uma perturbação em -10% da variável manipulada (m_w) como aproximadamente 0,19625 h. O tempo de estabilização foi encontrado como aproximadamente igual a 0,85 h.

Esses resultados foram considerados na busca do melhor conjunto de parâmetros de sintonia do NMPC, apresentados na Tabela 6. Foi considerado um tempo de simulação total de 12 horas, sendo as seguintes perturbações: -10% em F_{A0} no $t = 2$ h; +10% em F_{A0} (voltando ao valor de projeto) no $t = 4$ h; +10% em F_{A0} no $t = 6$ h; -10% em F_{A0} (voltando ao valor de projeto) no $t = 8$ h; e -10% no *setpoint* no $t = 10$ h.

Tabela 6 - Critérios de erro para diferentes sintonias do NMPC

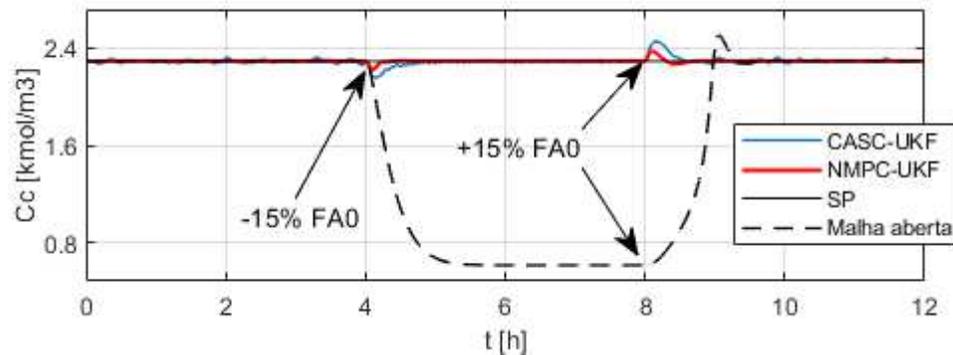
Ts	p	m	IAE	ISE	ITAE	ITSE
		9	0,03368	0,0003483	0,2531	0,002535
0,01	85	13	0,03378	0,0003505	0,2514	0,002543
		17	0,03451	0,0003571	0,2555	0,002574
		6	0,03161	0,0003416	0,2271	0,002457
0,015	57	9	0,03269	0,0003508	0,2344	0,002502
		12	0,03466	0,0003584	0,2512	0,002576
		5	0,03184	0,0003420	0,2344	0,002478
0,02	43	7	0,03210	0,0003435	0,2295	0,002459
		9	0,03317	0,0003486	0,2391	0,002495

Os menos valores de erro encontrados estão em destaque na tabela. Percebe-se que um tempo de amostragem médio de 0,015 h se mostrou ótimo perante os extremos. O menor valor de T_s resulta em menos pontos amostrais para o horizonte de previsão (p), podendo não oferecer uma modelagem com precisão e, consequentemente, pior ação de controle. Já o maior valor pode tornar o processo de otimização robusto demais para o algoritmo, que não consegue convergir adequadamente. A configuração que obteve os melhores resultados foi utilizada nas etapas seguintes.

5.3.2.2 Resposta do processo a perturbações

Para comparar o desempenho entre estratégias de controle clássico e avançado, foram efetuadas perturbações que trariam o sistema a regiões de instabilidade ou estados estacionários inferiores. Tais distúrbios foram testados tanto nas variáveis de entrada como no *setpoint*. A primeira perturbação foi efetuada na vazão de alimentação de óxido de etileno, F_{A0} . Uma queda de 15% do seu valor ocorre no tempo de simulação igual a 4 h, voltando ao seu valor de projeto no tempo igual a 8 h, conforme apresentado na Figura 34.

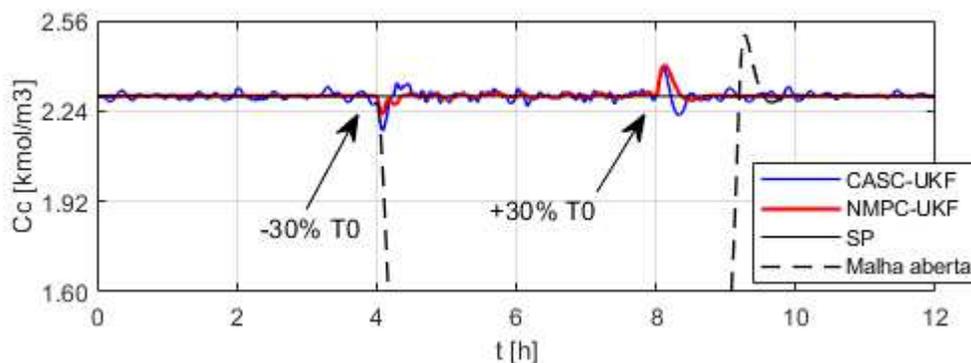
Figura 34 – Resposta do sistema a perturbações em F_{A0} fora da região estável



Fonte: o autor.

Percebe-se que a variável de processo seria bruscamente deslocada em malha aberta, mas ambas as estratégias de controle – cascata e NMPC – foram eficazes em mantê-la controlada. No entanto, o NMPC apresentou uma dinâmica muito mais rápida do que o controle cascata, com um *overshoot* menor e se estabilizando mais rapidamente. O NMPC também foi capaz de reduzir os ruídos da estimativa pelo UKF, pois a otimização acontece em uma região de estabilidade em torno do ponto ótimo, compensando pequenas oscilações e evitando que estes ruídos se propaguem pela ação de controle. Distúrbios na temperatura de alimentação também podem afetar severamente a estacionariedade do sistema, como apresentado na Figura 35. A variável T_0 , nesse caso, sofre uma perturbação de -30% (para $T[^\circ\text{F}]$) em $t = 4$ h e volta ao seu valor de projeto em $t = 8$ h.

Figura 35 – Resposta do sistema a perturbações em T_0 fora da região estável

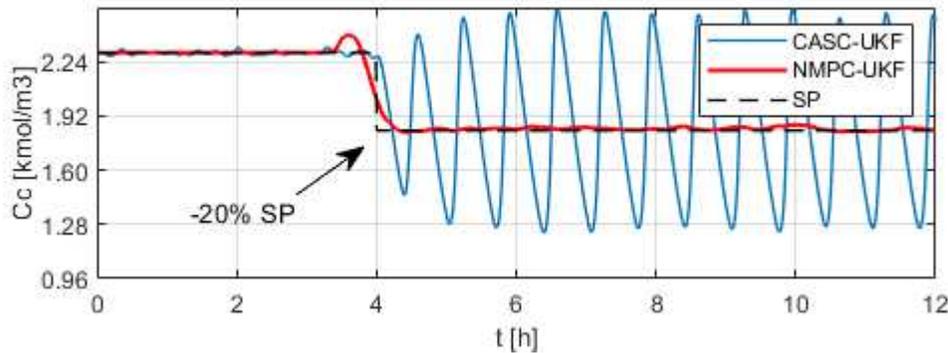


Fonte: o autor.

Percebe-se que o NMPC oferece um menor *overshoot* na primeira perturbação (em $t = 4h$), enquanto, na segunda perturbação (em $t = 8h$), tanto o controle cascata como o NMPC apresentam *overshoots* semelhantes. No entanto, a resposta do cascata ainda oscila um pouco antes de estabilizar, enquanto o NMPC minimiza o erro.

O terceiro teste é feito a partir de mudanças no *setpoint* do controlador. A Figura 36 apresenta o comportamento do sistema frente a uma perturbação de -20% no *setpoint* no tempo de simulação igual a 4 h.

Figura 36 – Resposta do sistema a perturbações no *setpoint* da variável de processo



Fonte: o autor.

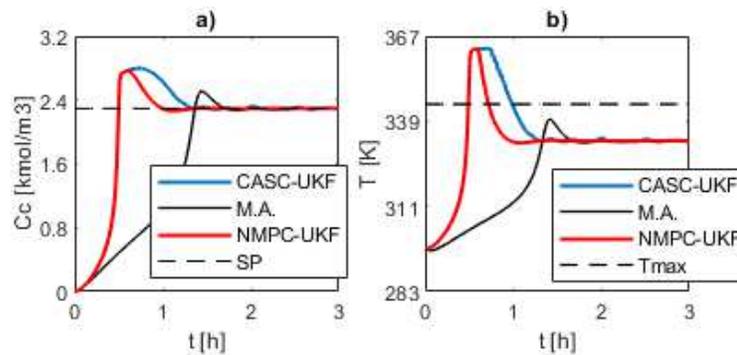
Como a sintonia dos controladores PID ocorre em torno de um ponto operacional, percebe-se que a perturbação apresentada na Figura 36 leva o sistema a um estado de instabilidade, necessitando de ressintonia. O mesmo não ocorre no caso do NMPC, que, mesmo com um comportamento levemente oscilatório, mantém a variável de processo em torno do novo *setpoint*. A Tabela 7 apresenta os resultados dos critérios de erro para todos os casos.

Distúrbio	Controle	IAE	ISE	ITAE	ITSE	OS%
FA0	Cascata-UKF	1,13E-02	4,23E-05	6,82E-02	2,76E-04	7,05%
	NMPC-UKF	2,24E-03	5,76E-06	1,58E-02	3,97E-05	3,70%
T0	Cascata-UKF	9,40E-03	1,85E-05	5,61E-02	1,12E-04	5,30%
	NMPC-UKF	3,39E-03	9,03E-06	2,27E-02	6,65E-05	4,82%
Setpoint	Cascata-UKF	1,89E-01	5,61E-03	1,52E+00	4,60E-02	-
	NMPC-UKF	1,02E-02	4,41E-05	6,22E-02	1,97E-04	-

5.3.2.3 Restrições do processo: limite de operação da temperatura

Como apresentado na seção 4.3.2, o reator conta – no ponto de operação abordado – com uma restrição prática de temperatura de 355,4 K (180 °F) na qual o óxido de propileno (reagente) pode evaporar, comprometendo a estabilidade, segurança e rendimento da operação. Como segurança um limite de 344 K (160 °F) foi adotado neste trabalho. Para ilustrar a operação restrita dos controladores, foi analisado, primeiramente, a partida do CSTR. A Figura 37 apresenta a operação do reator, desde o ponto de partida e sem restrições, com controle clássico, avançado e em malha aberta.

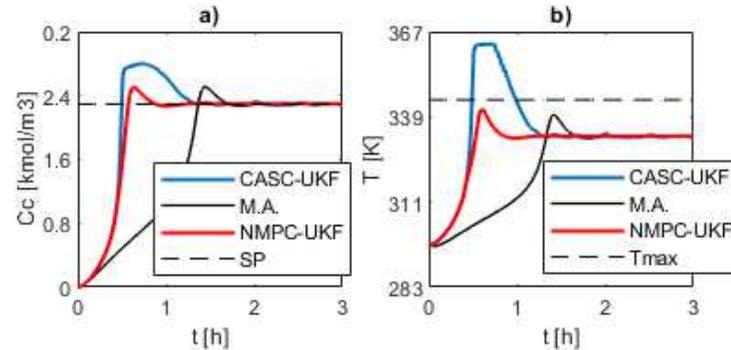
Figura 37 – Partida do CSTR com controle e sem restrições na temperatura



Fonte: o autor.

Percebe-se que, apesar de tanto o NMPC como o controle cascata serem eficazes (com diferentes desempenhos) em trazer a variável de processo para o ponto operacional (Figura 37-**a**), a ausência de restrições faz com que a temperatura do reator se eleve além do limite de segurança (Figura 37-**b**), logo no início da reação. A Figura 38 apresenta a operação com restrição de temperatura inclusa no algoritmo do NMPC.

Figura 38 – Partida do CSTR com restrições de temperatura no NMPC

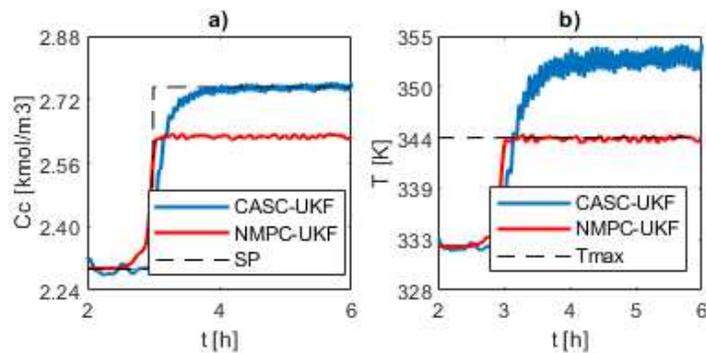


Fonte: o autor.

Nesse caso, à medida que a temperatura se aproxima do limite definido, o controlador NMPC faz ajustes na variável manipulada para que essa restrição seja respeitada. O controle avançado foi capaz manter a operação do reator de maneira mais rápida do que em malha aberta e sem comprometer a restrição imposta. Esse tipo de restrição pode ser incluso em outras variáveis do processo, como, por exemplo, a concentração de reagente ou a temperatura do trocador de calor.

Da maneira que foi programada, a restrição recebe prioridade em relação ao *setpoint*. Na Figura 39, está apresentado o comportamento transiente do processo quando se efetua uma perturbação no *setpoint*.

Figura 39 – Resposta do sistema com restrições na temperatura



Fonte: o autor.

Percebe-se que o controle cascata, que não possui restrição, faz com que a temperatura do reator (Figura 39-**b**) se eleve além do limite estabelecido a fim de cumprir a exigência do *setpoint*. No entanto, para o caso do NMPC, a ação de controle é ajustada (Figura 39-**a**) à medida que a temperatura se aproxima desse limite – priorizando a restrição em vez do *setpoint*. Tal comportamento pode ser considerado como um limite de segurança do processo – ou de outras restrições físicas, por exemplo – que podem ser inclusos no algoritmo do NMPC a fim de se executar a planta da melhor maneira possível.

6 CONCLUSÕES

Essa dissertação trouxe aplicações de metodologias para a análise da linearidade de um reator produtivo do propileno glicol; etapas na construção, sintonia, escolha e comparação entre sensores virtuais baseados em dois tipos de filtro de Kalman bastante utilizados em trabalhos recentes, o EKF e o UKF; projeto e sintonia de controladores através da comparação entre estratégias clássicas e avançada de controle inferencial de processos com ruídos; e implementação de restrições operacionais no algoritmo de controle preditivo.

Quanto a respeito da análise do modelo do processo, foi possível avaliar como as variáveis de entrada deslocavam o ponto estacionário do sistema e quantificar essas perturbações, fornecendo uma visualização de como a operação e estabilidade do processo se comportavam perante distúrbios na planta. Observou-se, através da análise das curvas de remoção e geração de energia, que algumas variáveis de entrada poderiam afetar a constante de tempo do processo, a taxa de reação ou ambas, mostrando a importância de se controlar efetivamente as variáveis de processo para que o sistema não entre em regiões de instabilidade ou estados estacionários inferiores.

A próxima etapa se deu na construção dos sensores virtuais. Observou-se que a sintonia do filtro (matriz de covariância Q do processo) fez mais diferença (na qualidade das estimativas a partir dos critérios de erro) do que a natureza do filtro (EKF ou UKF). A metodologia por otimização dizera foi a que obteve melhores resultados. Tal abordagem permitiu que fosse encontrada uma sintonia capaz de estimar as variáveis de estado do processo com mais precisão do que utilizando as variâncias das variáveis de estado calculadas diretamente dos dados da planta. Esse resultado ressaltou a importância de abordagens de otimização para sintonia de observadores de estado.

Para fins práticos, concluiu-se que, para o processo reativo estudado, tanto o UKF como o EKF podem ser utilizados com eficácia semelhante. A aplicação dessa metodologia é sugerida, como trabalhos futuros, em diferentes processos da engenharia química, tais como vasos separadores, colunas de absorção reativa, colunas de destilação com reação, reatores tubulares catalíticos, reatores de membrana, microprocessos, entre outros.

A aplicação do controle inferencial do processo foi efetuada em duas etapas. Inicialmente, foram propostos controladores convencionais de algoritmo PID em estratégia *feedback* simples e cascata. Um filtro foi incluso na ação derivativa como forma de amenizar os efeitos dos ruídos da estimativa do observador de estados (UKF). Os ruídos nas entradas dos processos geraram respostas oscilatórias que foram amplificadas pela ação dos controladores. Essas condições, desfavoráveis ao processo, impediram que os controladores convencionais alcançassem desempenho satisfatório em algumas ocasiões.

Dada a alta não linearidade do processo frente a distúrbios, as perturbações que traziam o sistema a outros pontos estacionários muito distintos do qual os controladores foram sintonizados acarretaram em respostas com notável *overshoot* e/ou comportamento instável, principalmente quando se trava de mudanças no *setpoint* do controlador PID. Um esquema inferencial NMPC-UKF foi construído a fim de controlar mais eficientemente a planta. Primeiramente, um procedimento experimental foi conduzido para encontrar a sintonia que fornecesse os menores valores de erro. Essa abordagem encontrou um conjunto de parâmetros (tempo de amostragem e horizontes de predição e de controle) que foi utilizado nos próximos testes.

Em seguida, foram feitas perturbações nas entradas que mais afetavam o processo e comparados os desempenhos do NMPC-UKF e Cascata-UKF (controles inferenciais). O NMPC-UKF forneceu, em todos os casos, menores valores para todos os critérios de erro integrado e para *overshoot*, como já era esperado. No entanto, observou-se também que, no caso do controle avançado, os ruídos da estimativa do filtro não afetaram o desempenho do controlador preditivo, cuja resposta às perturbações se apresentou praticamente sem oscilações em todos os casos. Distúrbios no *setpoint* para regiões de instabilidade do processo também foram controlados eficazmente pelo NMPC-UKF.

Além dos testes de resposta a distúrbios (no controle servo e regulatório), foi implementado uma restrição operacional da temperatura do reator e avaliados dois casos. O primeiro foi a partida do reator CSTR com controle, no qual foi observada a capacidade do NMPC-UKF em fornecer uma resposta mais rápida do que em malha aberta sem infringir as restrições, o que o Cascata-UKF não foi capaz de fazer. No segundo caso, uma mudança positiva no *setpoint* evidenciou que o controle avançado com restrição prioriza os limites estabelecidos em detrimento de fazer com que a concentração do produto – variável controlada – atinja o *setpoint*. Essas restrições podem

ser impostas ao NMPC como forma de garantir objetivos da planta, sejam esses de segurança (como limites de pressão e temperatura), econômicos ou operacionais (como vazão máxima de uma válvula de controle).

Os resultados com o NMPC-UKF sugerem que é possível implementar o controle de forma eficiente e segura em casos normalmente difíceis, tais como em processos de batelada ou a partida de equipamentos.

Como forma de expansão deste trabalho, a estimativa de estados e aplicação de controle avançado inferencial em outros processos é encorajada. Técnicas de controle modernas podem ser comparadas, como:

- PID com autossintonia em tempo real (*real-time autotuning*);
- Controladores de lógica *fuzzy*;
- Controle de modelo preditivo integrado a redes neurais (*Neural MPC*);
- entre outras.

Por fim, este trabalho trouxe contribuições para a análise da não linearidade de processos reativos; construção e sintonia de observadores de estado (EKF e UKF), trazendo uma aplicação de otimização na etapa de sintonia do filtro de Kalman; implementação de controle inferencial clássico (PID-UKF, Cascata-UKF e NMPC-UKF com e sem restrições), junto a uma metodologia heurística de sintonia do controle de modelo preditivo.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AGUIRRE, L. A. **Introdução à identificação de sistemas: Técnicas lineares e não-lineares aplicadas a sistemas reais.** 2ª revista e ampliada. Belo Horizonte: Editora UFMG, 2004. 728 p.

AGUIRRE, L.A. ; PEREIRA, M.F. **A modified observer scheme for fault detection and isolation applied to a poorly observed process with integration.** *Journal of Process Control*, 8(1), pp.47-56. 1998.

ALI, J.M., HOANG, N.H., HUSSAIN, M.A. ; DOCHAIN, D. **Review and classification of recent observers applied in chemical process systems.** *Computers & Chemical Engineering*, 76, pp.27-41, 2015.

ASCENCIO, R.R. L.; HERRERA LÓPEZ, E.J. **Sensores virtuales mediante redes neuronales artificiales.** Dos estudios de caso en biotecnología. In: Memorias de la Conferencia Internacional CONIELECOMP, México. 1998.

ATHERTON, D. P., & MAJHI, S. **Limitations of PID Controllers.** *Proceedings of the American Control Conference*, (pp. 3843 - 3847). San Diego, Califórnia, 1999.

BARRETO, M. C. **Controle preditivo multivariável aplicado a processos químicos não lineares.** 66 f. Monografia (Graduação em Engenharia Química). Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa. 2018.

BAVDEKAR, V. A. ; DESHPANDE, A. P. ; PATWARDHAN, S. C. **Identification of process and measurement noise covariance for state and parameter estimation using extended Kalman filter.** *Journal of Process Control*, vol. 21, no. 4, pp. 585–601, Apr. 2011.

BERNI, C.D.C. ; GARCIA, C. **Implementação em hardware/firmware de um sensor virtual utilizando algoritmos de identificação fuzzy.** 2004

BHAGWAN, S., & AL, E. **A Review on: PID Controller.** *International Journal on Recent Technologies in Mechanical and Electrical Engineering (IJRMEE)*, 3(2), pp. 2349-7947. 2016.

CAMACHO, E. F. **Model Predictive Control.** Londres: Springer-Verlag London, 1998.

CHEN, W.S., BAKSHI, B.R., GOEL, P.K.; UNGARALA, S. **Bayesian estimation via sequential Monte Carlo sampling: unconstrained nonlinear dynamic systems.** *Industrial & engineering chemistry research*, 43(14), pp.4012-4025. 2004.

COUGHANOWR, D; KOPPEL. **Process Systems Analysis and Control.** McGraw Hill, 2nd, 2009.

DEL-MURO-CUELLAR, B., VELASCO-VILLA, M., JIMÉNEZ-RAMÍREZ, O., FERNÁNDEZ-ANAYA, G. ; ÁLVAREZ-RAMÍREZ, J. **Observer-based Smith prediction scheme for unstable plus time delay processes.** *Industrial & engineering chemistry research*, 46(14), pp.4906-4913. 2007.

DOCHAIN, D., COUENNE, F. ; JALLUT, C. **Enthalpy based modelling and design of asymptotic observers for chemical reactors.** *International Journal of Control*, 82(8), pp.1389-1403. 2009.

DURAND, H., ELLIS, M. ; CHRISTOFIDES, P.D. **Economic model predictive control designs for input rate-of-change constraint handling and guaranteed economic performance.** *Computers & Chemical Engineering*, 92, pp.18-36. 2016.

FOGLER, H. S. **Elementos de Engenharia das Reações Químicas**, 4ª Ed. Rio de Janeiro: LTC, 2009.

FURUSAWA, T.; NISHIMURA, H.; MIYAUCHI, T. **Experimental study of a bistable continuous stirred-tank reactor.** *Journal of Chemical Engineering of Japan*, 2(1), pp.95-100. 1969.

GREWAL, M. S.; ANDREWS, A. P. **Kalman filtering: theory and practice using MATLAB**, 2008.

HENSON, M. A., & SEBORG, D. E. **Nonlinear Process Control**. Upper Saddle River, New Jersey: Prentice Hall PTR, 1997.

HUANG, R., PATWARDHAN, S.C. ; BIEGLER, L.T. **Stability of a class of discrete-time nonlinear recursive observers**. *Journal of Process Control*, 20(10), pp.1150-1160.2010.

INTRODUCTION to Model-Based PID Tuning in Simulink. [S. l.]: MathWorks, 2019.

Disponível em: <https://www.mathworks.com/help/slcontrol/ug/introduction-to-automatic-pid-tuning.html>. Acesso em: 5 set. 2019.

JANA, A. K.; SAMANTA, A. N. **A hybrid feedback linearizing-Kalman filtering control algorithm for a distillation column**. *ISA Transactions®*, v. 45, n. 1, p. 87-98, 2006.

JANA, A.K. **A nonlinear exponential observer for a batch distillation**. In 2010 11th International Conference on Control Automation Robotics & Vision (pp. 1393-1396). IEEE. 2010.

JULIER, S.J. ; UHLMANN, J.K. **New extension of the Kalman filter to nonlinear systems**. *Signal processing, sensor fusion, and target recognition VI* (Vol. 3068, pp. 182-194). International Society for Optics and Photonics. 1997.

JULIER, S.J. **The scaled unscented transformation**. *Proceedings of the 2002 American Control Conference* (IEEE Cat. No. CH37301) (Vol. 6, pp. 4555-4559). IEEE. 2002.

LOTUFO, F. A.; GARCIA, C. **Sensores virtuais ou soft sensors: uma introdução**. 7th Brazilian Conference on Dynamics, Control and Applications, FCT – UNESP, São Paulo. 2008.

LUENBERGER, D. **An introduction to observers**. *IEEE Transactions on automatic control*, 16(6), pp.596-602. 1971.

LUENBERGER, D. **Canonical forms for linear multivariable systems.** *IEEE Transactions on Automatic Control*, 12(3), pp.290-293. 1967.

LUENBERGER, D. **Observers for multivariable systems.** *IEEE Transactions on Automatic Control*, 11(2), pp.190-197. 1966.

LUENBERGER, D.G. **Observing the state of a linear system.** *IEEE Transactions on military electronics*, 8(2), pp.74-80. 1964.

MAASOUMY, M., RAZMARA, M., SHAHBAKHTI, M. ; VINCENELLI, A.S. **Handling model uncertainty in model predictive control for energy efficient buildings.** *Energy and Buildings*, 77, pp.377-392. 2014.

MARKANA, A., PADHIYAR, N. ; MOUDGALYA, K. **Multi-criterion control of a bioprocess in fed-batch reactor using EKF based economic model predictive control.** *Chemical Engineering Research and Design*, 136, pp.282-294. 2018.

MORAIS Jr, A. A. **Uso de sensores virtuais (soft sensors) para estimativa de impurezas em colunas de destilação de alta pureza.** Tese (Doutorado em Engenharia Química). Universidade Federal de Campina Grande, Paraíba. 2015.

MORAIS Jr., A. A. **Elaboração de um analisador virtual utilizando sistema híbrido neuro-fuzzy para inferenciar a composição em um processo de destilação.** 82 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Universidade Federal de Alagoas, Maceió. 2011.

NOCEDAL, J.; WRIGHT, S. **Numerical optimization.** Springer Science & Business Media, 2006.

PANDA, A.; JAGADEESAN, P. **State estimation and non-linear model based control of a continuous stirred tank reactor using unscented Kalman filter.** *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 95(7), pp.1323-1331. 2017.

PEDRO, M. P.; BRANDÃO, W. Y. A.; LIRA, J. O. B.; SANTOS, J. L. A. M.; MARIZ, P. R. A.; VIEIRA, E. L.; ROJAS, L. O. A.; MORAIS JR., A. A. **Extended Kalman Filter (EKF) and Artificial Neural Networks (ANN) for Estimate of Concentration in a Non Isothermic CSTR of Production of Propylene Glycol.** *XXXVIII Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering*, Florianópolis, SC, Brazil, CILAMCE, 2017.

RINCÓN, F.D., ESPOSITO, M., DE ARAÚJO, P.H.H., SAYER, C. ; LE ROUX, G.A.C. **Calorimetric estimation employing the unscented Kalman filter for a batch emulsion polymerization reactor.** *Macromolecular Reaction Engineering*, 7(1), pp.24-35. 2013.

SCHMIDT, F., WAINWRIGHT, H.M., FAYBISHENKO, B., DENHAM, M. ; EDDY-DILEK, C. **In Situ Monitoring of Groundwater Contamination Using the Kalman Filter.** *Environmental science & technology*, 52(13), pp.7418-7425. 2018.

SEBORG, D.E.; MELLICHAMP, D.A.; EDGAR, T.F. ; DOYLE III, F.J. **Process dynamics and control.** John Wiley & Sons. 2010.

SILVA, I.D., SPATTI, D.H. ; FLAUZINO, R.A. **Redes neurais artificiais para engenharia e ciências aplicadas.** São Paulo: Artliber, 23(5), pp.33-111. 2010.

SMITH, C. A. e CORRIPIO, A. **Princípios e prática de controle automático de processo.** 3ª Edição, Editora Gen e LTC, 2008.

SUBRAMANIAN, S., LUCIA, S. ;ENGEL, S. **Adaptive Multi-stage Output Feedback NMPC using the Extended Kalman Filter for time varying uncertainties applied to a CSTR.** *IFAC-PapersOnLine*, 48(23), pp.242-247. 2015.

TEBBANI, S., LOPES, F. ; CELIS, G.B. **Nonlinear control of continuous cultures of *Porphyridium purpureum* in a photobioreactor.** *Chemical Engineering Science*, 123, pp.207-219. 2015.

ULONSKA, S., WALDSCHITZ, D., KAGER, J. ; HERWIG, C. **Model predictive control in comparison to elemental balance control in an E. coli fed-batch.** *Chemical Engineering Science*, 191, pp.459-467. 2018.

ULUSOY, M. **Understanding Model Predictive Control: Part 3: MPC Design Parameters.** [S. l.]: MathWorks, 2018. Disponível em: <https://www.mathworks.com/videos/understanding-model-predictive-control-part-3-mpc-design-parameters-1530607670393.html>. Acesso em: 4 set. 2019.

WAN, E. A.; VAN DER MERWE, R. **The unscented Kalman filter for nonlinear estimation.** In Proceedings of the IEEE 2000 Adaptive Systems for Signal Processing, Communications, and Control Symposium (Cat. No. 00EX373) (pp. 153-158). *IEEE*. 2000.

WANG, L.. **Model Predictive Control System Design and Implementation Using MATLAB®.** Springer Verlag London, 2009.

WELCH, G. ; BISHOP, G. **An introduction to the Kalman filter.** 1995.

WILSON, D.I; AGARWAL, M. **Experiences implementing the extended Kalman filter on an industrial batch reactor.** *Computers & Chemical Engineering*, vol. 22, no. 11, pp. 1653–1672, 1998.

YOO, S.J., JEONG, D.H., KIM, J.H. AND LEE, J.M. **Optimization of microalgal photobioreactor system using model predictive control with experimental validation.** *Bioprocess and biosystems engineering*, 39(8), pp.1235-1246. 2016.