



ESTRATÉGIAS NÃO LINEARES PARA O MONITORAMENTO E  
CONTROLE PREDITIVO DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO UTILIZANDO  
MODELOS DE ORDEM REDUZIDA

Guilherme Augusto de Almeida Gonçalves

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Orientadores: Argimiro Resende Secchi  
Evaristo Chalbaud Biscaia Jr.

Rio de Janeiro  
Dezembro de 2013

ESTRATÉGIAS NÃO LINEARES PARA O MONITORAMENTO E  
CONTROLE PREDITIVO DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO UTILIZANDO  
MODELOS DE ORDEM REDUZIDA

Guilherme Augusto de Almeida Gonçalves

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO  
ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE  
ENGENHARIA (COPPE) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE  
JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A  
OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA  
QUÍMICA.

Examinada por:

---

Prof. Argimiro Resende Secchi, D.Sc.

---

Prof. Evaristo Chalbaud Biscaia Junior, D.Sc.

---

Prof. André Luiz Hemerly Costa, D.Sc.

---

Prof. Maurício Bezerra de Souza Júnior, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL  
DEZEMBRO DE 2013

Gonçalves, Guilherme Augusto de Almeida

Estratégias não lineares para o monitoramento e controle preditivo de colunas de destilação utilizando modelos de ordem reduzida/Guilherme Augusto de Almeida Gonçalves. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2013.

XVI, 79 p.: il.; 29, 7cm.

Orientadores: Argimiro Resende Secchi

Evaristo Chalbaud Biscaia Jr.

Dissertação (mestrado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia Química, 2013.

Referências Bibliográficas: p. 70 – 73.

1. Modelos Reduzidos. 2. Controle Preditivo. 3. Sistemas não lineares. 4. Estimação de estados. I. Secchi, Argimiro Resende *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Química. III. Título.

*Àquele que é poderoso para vos  
guardar de tropeçar, e  
apresentar-vos irrepreensíveis,  
com alegria, perante a sua glória  
Judas 1:24*

# Agradecimentos

Aos meus pais e minha irmã, por apoiarem as minhas decisões e mudanças de vida.

À minha namorada Luana, pela companhia diária.

Aos meus orientadores, professores Argimiro e Evaristo, pelo empenho, dedicação e disponibilidade sem a qual não seria possível a realização desse trabalho.

Aos amigos da sala G-130, companheiros de trabalho, pela amizade e contribuições para este trabalho.

Aos amigos do LADES, com os quais compartilhei muitas ideias sobre controle e estimação de estados.

Ao programa de Engenharia Química da COPPE e a todos os seus funcionários e professores, pela oportunidade concedida e pela contribuição inestimável à minha formação profissional.

A Niwton Macêdo e Adalberto (Tico), pela imensa ajuda na chegada ao Rio de Janeiro.

Aos amigos do grupo de incerteza da UFBA: Professor Ricardo Kalid, Reiner, Márcio, Robson, Léo, Narciso, Giga, Gesner e todos os outros, por terem concedido a primeira oportunidade na pesquisa acadêmica e enriquecido minha graduação.

Aos amigos Filipe, Lúcio, Paulo, Vinícius, Thiago, Daniel, Léo Ohara, Géba, Tarlen, Sanches e Rafa, pelos momentos de descontração nos últimos tempos.

Resumo da Dissertação apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

ESTRATÉGIAS NÃO LINEARES PARA O MONITORAMENTO E  
CONTROLE PREDITIVO DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO UTILIZANDO  
MODELOS DE ORDEM REDUZIDA

Guilherme Augusto de Almeida Gonçalves

Dezembro/2013

Orientadores: Argimiro Resende Secchi  
Evaristo Chalbaud Biscaia Jr.

Programa: Engenharia Química

Os modelos rigorosos de colunas de destilação, em geral, são constituídos de um grande número de equações diferenciais e restrições algébricas que devem ser resolvidas simultaneamente. A dimensão do sistema pode ser um obstáculo para a aplicação desses modelos em estratégias de controle preditivo não linear e estimação de estados, dado que essas técnicas demandam muitas avaliações das equações do modelo. O propósito desse trabalho foi aplicar uma técnica de redução adaptativa em estratégias de controle preditivo não linear e estimação de estados, utilizando uma quadratura discreta de Gauss-Lobatto para avaliar os momentos dos resíduos dos balanços de massa, que mostrou ser de elevada acurácia, especialmente na predição dos estágios de topo e fundo da coluna. Nesse trabalho, mostrou-se que o uso da técnica de momentos para redução de ordem pode proporcionar uma redução no tempo de processamento em torno de 50%, considerando uma situação onde existe incerteza entre a planta e o modelo, em comparação com o modelo completo. O desempenho obtido nos controladores e estimadores aproximou-se bastante do modelo completo, o que mostra que a incerteza inserida pela redução de ordem não degradou a performance nem causou a perda da estabilidade do sistema em malha fechada. A análise de observabilidade do sistema mostrou que um número menor de medições são necessárias para o sistema reduzido ser completamente observável, quando comparado com o sistema completo. Por fim, o cálculo dos autovalores das matrizes jacobianas dos modelos revelou que a técnica de momentos pode eliminar autovalores complexos que em geral estão presentes quando a redução é feita através da colocação ortogonal e provocam oscilações inexistentes no modelo completo.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

NONLINEAR STRATEGIES FOR MONITORING AND PREDICTIVE  
CONTROL OF DISTILLATION COLUMNS USING REDUCED-ORDER  
MODELS

Guilherme Augusto de Almeida Gonçalves

December/2013

Advisors: Argimiro Resende Secchi

Evaristo Chalbaud Biscaia Jr.

Department: Chemical Engineering

The rigorous models of distillation columns may have a large number of differential equations and algebraic constraints that should be solved simultaneously. The system dimension can preclude the application of those models in nonlinear predictive control strategies or state estimation, since these techniques demand several evaluations of the model equations. The purpose of this work is to apply an adaptive technique of model order reduction in nonlinear predictive control and state estimation algorithms, which uses a discrete Gauss-Lobatto quadrature to evaluate the moments of the mass balance residuals, the resulting reduced model has a high accuracy, especially at the top and bottom stages of the distillation column. The results of the present technique show that the use of moments reduction technique, in the nonlinear predictive control and state estimation, provides a time reduction around 50% in the control action computation, considering a situation with plant/model mismatch, when compared with the complete rigorous model with similar performance. The results reveal that the obtained controller can perform as well as the controller using the complete model, which shows that the degree of uncertainty inserted by the model reduction does not cause performance degradation or loss of stability of the closed loop system. The analysis of the linearized models in each sampling time shows that the reduced models have a full rank observability matrix while the full model is rank deficient. In addition, the moments technique does not present the oscillatory behaviour of the classical orthogonal collocation, producing a jacobian matrix without complex eigenvalues, similarly to the full model.

# Sumário

|   |             |
|---|-------------|
| <b>Lista de Figuras</b>   | <b>x</b>    |
| <b>Lista de Tabelas</b>   | <b>xiii</b> |
| <b>Lista de Símbolos</b>  | <b>xiv</b>  |
| <b>1 Introdução</b>   | <b>1</b>    |
| <b>2 Revisão Bibliográfica</b>  | <b>4</b>    |
| 2.1 Estimadores de estado . . . . .   | 4           |
| 2.1.1 Filtro de Kalman estendido . . . . .  | 4           |
| 2.1.2 Estimadores de horizonte móvel (MHE) e o filtro de Kalman<br>com restrições (CEKF) . . . . .          | 6           |
| 2.1.3 Filtro de Kalman <i>Unscented</i> . . . . .   | 8           |
| 2.2 Controle preditivo e controle de colunas de destilação . . . . .  | 11          |
| 2.3 Redução de ordem de modelos de torres de destilação . . . . .   | 15          |
| <b>3 Método Proposto</b>  | <b>19</b>   |
| 3.1 Introdução aos métodos baseados em resíduos ponderados . . . . .  | 19          |
| 3.2 Desenvolvimento da técnica de redução baseada em colocação orto-<br>gonal no domínio discreto . . . . . | 20          |
| 3.3 Desenvolvimento da técnica de momentos . . . . .  | 22          |
| 3.4 Estrutura de estimação e controle preditivo . . . . .   | 24          |
| 3.5 Modelo simplificado utilizado nas simulações . . . . .  | 27          |
| <b>4 Resultados e Discussões</b>  | <b>29</b>   |
| 4.1 Descrição, simulações e comparações entre os modelos utilizados . . . . .                               | 29          |
| 4.2 Comparação entre as estratégias para estimação de estados utilizando<br>modelos reduzidos . . . . .     | 34          |
| 4.2.1 Estimação conjunta de parâmetros e estados com o CEKF . . . . .                                       | 42          |
| 4.2.2 Avaliação da observabilidade dos modelos utilizados nos esti-<br>madores . . . . .                    | 46          |

|          |   |           |
|----------|---|-----------|
| 4.3      | Controle preditivo utilizando modelos reduzidos . . . . .   | 48        |
| 4.3.1    | Motivação: Melhoria de desempenho em relação ao controle<br>linear . . . . .                      | 49        |
| 4.3.2    | Controle Preditivo não linear baseado em modelos reduzidos .                                      | 55        |
| 4.4      | Avaliação dos valores característicos dos modelos . . . . .                                       | 65        |
| <b>5</b> | <b>Conclusões e Sugestões</b>   | <b>68</b> |
|          | <b>Referências Bibliográficas</b>   | <b>70</b> |
| <b>A</b> | <b>Cálculo das matrizes jacobianas dos modelos reduzidos utilizados<br/>nos Filtros de Kalman</b> | <b>74</b> |

# Lista de Figuras

|      |   |    |
|------|---|----|
| 3.1  | Esquema de janela móvel utilizado no controlador preditivo não linear.  | 26 |
| 3.2  | Fluxo de informações entre as diferentes rotinas numéricas. . . . .   | 26 |
| 4.1  | Evolução temporal da composição de topo diante de um estado inicial não estacionário. . . . .                             | 32 |
| 4.2  | Evolução temporal da composição de fundo diante de um estado inicial não estacionário. . . . .                            | 33 |
| 4.3  | Variação do perfil de composição ao longo da coluna. . . . .  | 33 |
| 4.4  | Perfil de esparsidade das matrizes jacobianas dos modelos. . . . .  | 34 |
| 4.5  | Representação esquemática da redução de ordem. . . . .  | 35 |
| 4.6  | Ruído adicionado às medidas da composição de topo. . . . .  | 36 |
| 4.7  | Comparação entre diferentes tipos de modelos para a filtragem da composição de topo da coluna. . . . .                    | 37 |
| 4.8  | Comparação entre diferentes tipos de modelos para a estimação da composição de fundo da coluna. . . . .                   | 38 |
| 4.9  | Comparação entre diferentes tipos de modelos para a filtragem da composição de topo da coluna utilizando o UKF. . . . .   | 38 |
| 4.10 | Comparação entre diferentes tipos de modelos para a estimação da composição de fundo da coluna utilizando o UKF. . . . .  | 39 |
| 4.11 | Vantagens e desvantagens dos estimadores de estado (adaptado de SIMON (2006)). . . . .                                    | 40 |
| 4.12 | Comparação entre diferentes tipos de modelos para a filtragem da composição de topo da coluna utilizando o CEKF. . . . .  | 41 |
| 4.13 | Comparação entre diferentes tipos de modelos para a estimação da composição de fundo da coluna utilizando o CEKF. . . . . | 41 |
| 4.14 | Comparação entre diferentes tipos de modelos para a filtragem da composição de topo da coluna utilizando o UKF. . . . .   | 42 |
| 4.15 | Comparação entre diferentes tipos de modelos para a estimação da composição de fundo da coluna utilizando o UKF. . . . .  | 42 |
| 4.16 | Filtragem da composição de topo diante de uma mudança na composição de alimentação. . . . .                               | 43 |

|      |   |    |
|------|---|----|
| 4.17 | Filtragem da composição de topo diante de uma mudança na composição de alimentação, após mudar a sintonia para uma confiança maior nas medidas. . . . . | 44 |
| 4.18 | Filtragem da composição de fundo diante de uma mudança na composição de alimentação após mudar a sintonia para uma confiança maior nas medidas. . . . . | 44 |
| 4.19 | Estimativa da composição da corrente de alimentação utilizando o CEKF. . . . .  | 45 |
| 4.20 | Estimativa da composição de topo com atualização do valor da composição da corrente de alimentação. . . . .   | 46 |
| 4.21 | Estimativa da composição de fundo com a atualização do valor da composição da corrente de alimentação. . . . .  | 46 |
| 4.22 | Variação do posto da matriz de observabilidade. . . . .   | 47 |
| 4.23 | Variação do posto da matriz de observabilidade do sistema aumentado utilizando a medição da composição de topo. . . . .                                 | 48 |
| 4.24 | Variação do posto da matriz de observabilidade do sistema aumentado utilizando como variáveis medidas a composição de topo e fundo. . . . .             | 49 |
| 4.25 | Teste inserido no refluxo de topo para identificação do modelo linear. . . . .  | 50 |
| 4.26 | Teste inserido na vazão de vapor para identificação do modelo linear. . . . .   | 50 |
| 4.27 | Comparação entre o modelo identificado e a resposta da planta (modelo completo). . . . .  | 51 |
| 4.28 | Comparação entre o modelo identificado e a resposta da planta (modelo completo). . . . .  | 51 |
| 4.29 | Comparação entre o modelo identificado e a resposta da planta (modelo completo). . . . .  | 52 |
| 4.30 | Comparação entre o modelo identificado e a resposta da planta (modelo completo). . . . .  | 52 |
| 4.31 | Comparação entre os controladores lineares e não lineares para uma resposta ao degrau no <i>setpoint</i> da composição de topo. . . . .                 | 54 |
| 4.32 | Comparação entre os controladores lineares e não lineares para uma resposta ao degrau no <i>setpoint</i> da composição do fundo. . . . .                | 54 |
| 4.33 | Comparação entre os controladores lineares e não lineares: manipulações no refluxo de topo. . . . .   | 55 |
| 4.34 | Comparação entre os controladores lineares e não lineares: manipulações na vazão de vapor do refeedor. . . . .  | 55 |
| 4.35 | Comparação entre os controladores não lineares utilizando diferentes modelos para a composição de topo. . . . .   | 58 |
| 4.36 | Comparação entre os controladores não lineares utilizando diferentes modelos para a composição de fundo. . . . .  | 58 |

|      |  |    |
|------|--|----|
| 4.37 | Ação de controle no fundo da coluna na vazão de vapor para o refulvedor.   | 59 |
| 4.38 | Ação de controle na razão de refluxo de topo. . . . .  | 59 |
| 4.39 | Comportamento dinâmico do topo da coluna diante de uma mudança nos <i>setpoints</i> de topo e fundo. . . . .   | 60 |
| 4.40 | Comportamento dinâmico do fundo da coluna diante de uma mudança nos <i>setpoints</i> de topo e fundo . . . . .                                       | 60 |
| 4.41 | Manipulação de vapor diante das mudanças nos <i>setpoints</i> . . . . .  | 61 |
| 4.42 | Manipulação da razão de refluxo diante das mudanças nos <i>setpoints</i> . . . . .   | 61 |
| 4.43 | Resposta da composição de topo diante de medidas ruidosas. . . . .   | 63 |
| 4.44 | Resposta da composição de fundo diante de medidas ruidosas. . . . .  | 63 |
| 4.45 | Manipulação da vazão de vapor diante do controlador operando com medidas ruidosas. . . . .   | 64 |
| 4.46 | Manipulação da razão de refluxo diante do controlador operando com medidas ruidosas. . . . .   | 64 |
| 4.47 | Convergência dos autovalores dos modelos reduzidos. . . . .  | 66 |
| 4.48 | Partes reais e complexas dos modelos reduzidos e do modelo da planta. . . . .  | 66 |
| 4.49 | Partes reais e complexas dos modelos reduzidos e do modelo da planta, para um modelo reduzido com cinco estágios nas seções de topo e fundo. . . . . | 67 |

# Lista de Tabelas

|      |   |    |
|------|---|----|
| 2.1  | Resumo de outros trabalhos de redução de ordem de modelos de colunas de destilação . . . . .  | 17 |
| 4.1  | Número de estágios por seção dos modelos empregados . . . . .   | 31 |
| 4.2  | Valores e descrição dos parâmetros e variáveis do modelo da coluna de destilação . . . . .  | 32 |
| 4.3  | Erro relativo percentual dos métodos de redução . . . . .   | 34 |
| 4.4  | Tempo médio de processamento (segundos) . . . . .   | 36 |
| 4.5  | Tempo máximo de processamento (segundos) . . . . .  | 37 |
| 4.6  | Somatório do erro absoluto para a composição de topo . . . . .  | 39 |
| 4.7  | Somatório do erro absoluto para a composição de fundo . . . . .   | 39 |
| 4.8  | Somatório do erro absoluto para a composição do prato de alimentação . . . . .  | 39 |
| 4.9  | Sintonia utilizada nos controladores para a comparação . . . . .  | 53 |
| 4.10 | Índices de desempenho dos controladores . . . . .   | 54 |
| 4.11 | <i>Setpoints</i> desejados para o topo e fundo da coluna . . . . .  | 56 |
| 4.12 | Avaliação da redução dos tempos de CPU por iteração. . . . .  | 57 |
| 4.13 | Comparação dos índices de desempenho . . . . .  | 57 |
| 4.14 | Comparação dos índices de desempenho para duas mudanças de <i>setpoint</i> utilizando incerteza nos modelos . . . . .                       | 62 |
| 4.15 | Avaliação da redução dos tempos de CPU por iteração para o caso com duas mudanças de <i>setpoint</i> . . . . .                              | 62 |
| 4.16 | Comparação dos índices de desempenho para duas mudanças de <i>setpoint</i> utilizando ruído nas medidas . . . . .                           | 64 |
| 4.17 | Avaliação da redução dos tempos de CPU por iteração para o caso com duas mudanças de <i>setpoint</i> utilizando ruído nas medidas . . . . . | 65 |

# Lista de Símbolos

|       |  |
|-------|--|
| $B$   | Vazão do fundo da coluna, p. 13                          |
| $D$   | Vazão do destilado, p. 13                                |
| $F$   | Vazão de entrada da coluna, p. 27                        |
| $H_c$ | Horizonte de controle, p. 24                             |
| $H_p$ | Horizonte de predição, p. 24                             |
| $L$   | Corrente de líquido recirculado no topo da coluna, p. 13 |
| $L_r$ | Vazão de líquido da seção de retificação, p. 27          |
| $L_s$ | Vazão de líquido da seção de esgotamento, p. 27          |
| $M$   | Acúmulo dos estágios, p. 13                              |
| $N$   | Número de estágios da coluna, p. 27                      |
| $NR$  | Número de estágios da seção de retificação, p. 27        |
| $Q$   | Matriz de covariância dos estados , p. 9                 |
| $Q_n$ | Polinômio ortogonal de Hahn, p. 20                       |
| $R$   | Matriz de covariância das medidas , p. 9                 |
| $R_f$ | Razão de refluxo, p. 49                                  |
| $V$   | Corrente de vapor recirculado pelo refeedor, p. 13       |
| $V_r$ | Vazão de vapor da seção de retificação, p. 27            |
| $V_s$ | Vazão de vapor da seção de esgotamento, p. 27            |
| $V_T$ | Vazão de vapor no topo da coluna, p. 13                  |
| $W$   | Pesos do filtro <i>Unscented</i> , p. 9                  |

|                                      |  |
|--------------------------------------|--|
| $W(s)$                               | Função peso do caso discreto, p. 19                                |
| $W(x)$                               | Função peso do caso contínuo, p. 19                                |
| $X$                                  | Composição de líquido modificada do método dos momentos, p. 30     |
| $Y$                                  | Composição de vapor modificada do método dos momentos, p. 30       |
| $\Gamma$                             | Parâmetro de sintonia do UKF, p. 9                                 |
| $\Theta$                             | Vetor com as variáveis de otimização no CEKF, p. 7                 |
| $\alpha$                             | Volatilidade relativa, p. 27                                       |
| $\chi$                               | Pontos sigma, p. 9   |
| $\delta$                             | Função delta de Dirac, p. 19                                       |
| $\kappa$                             | Ação de controle ótima implementada, p. 25                         |
| $\lambda$                            | Calor latente de vaporização, p. 27                                |
| <b>A</b>                             | Matrizes de diferenças, p. 21                                      |
| <b>B</b>                             | Matriz auxiliar do método dos momentos, p. 22                      |
| <b>F</b> <sub><math>k-1</math></sub> | Matriz de derivadas parciais em relação aos estados, p. 5          |
| <b>H</b> <sub><math>k</math></sub>   | Matriz de derivadas parciais em relação às medidas, p. 5           |
| <b>I</b>                             | Matriz identidade, p. 44   |
| <b>K</b>                             | Ganho de Kalman, p. 6  |
| <b>L</b> <sub><math>k-1</math></sub> | Matriz de derivadas parciais em relação ao ruído do modelo, p. 5   |
| <b>M</b> <sub><math>k</math></sub>   | Matriz de derivadas parciais em relação ao ruído das medidas, p. 5 |
| <b>P</b>                             | Matriz de covariância do erro da estimativa do estado, p. 5        |
| <b>R</b> ( $x$ )                     | Resíduo da aproximação polinomial, p. 19                           |
| <b>V</b> <sub><math>i</math></sub>   | Matriz auxiliar do método dos momentos, p. 22                      |
| <b>Ψ</b>                             | Matriz de observabilidade, p. 47                                   |

|               |   |
|---------------|---|
| $\mathcal{Q}$ | Matriz de ponderação do erro de rastreamento das variáveis controladas, p. 11 |
| $\mathcal{R}$ | Matriz de ponderação dos movimentos de controle, p. 11                        |
| $\mathcal{S}$ | Matriz de ponderação do erro de rastreamento das variáveis manipuladas, p. 11 |
| $W_s$         | Vazão de vapor para o refervedor, p. 49                                       |
| $\omega$      | Ruído do modelo, p. 4   |
| $\omega_i$    | Pesos da quadratura de Gauss-Lobatto, p. 22                                   |
| $\theta$      | Parâmetro estimado recursivamente, p. 44                                      |
| $d(k)$        | Distúrbio estimado no instante $k$ , p. 56                                    |
| $f$           | Vetor de equações do sistema, p. 4  |
| $h$           | Vetor de equações de medição, p. 4  |
| $l_j$         | Polinômio interpolador de lagrange, p. 21                                     |
| $n$           | Número de estágios do modelo reduzido, p. 29                                  |
| $nr$          | Número de estágios da seção de retificação do modelo reduzido, p. 29          |
| $q$           | Condição de saturação da carga, p. 27   |
| $r_k$         | Inovação dos estados atualizados pelos filtros, p. 43                         |
| $s^{(j)}$     | Ponto de interpolação, p. 22  |
| $u$           | Variáveis manipuladas, p. 11  |
| $v$           | Ruído das medidas, p. 4   |
| $x$           | Composição de líquido, p. 13  |
| $x_F$         | Composição da corrente de entrada da coluna, p. 27                            |
| $x_k$         | Estado do sistema não linear, p. 4  |
| $y$           | Composição de vapor, p. 13  |
| $y_k$         | Medidas do sistema, p. 4  |

# Capítulo 1

## Introdução

Entre os processos que receberam grande atenção da área de computação aplicada à engenharia química, as colunas de destilação e os reatores químicos são os que mais se destacam. São numerosos os desafios presentes em uma coluna de destilação. O primeiro deles está relacionado à grande dimensão e complexidade dos modelos rigorosos de destilação. Em SECCHI (1992), é mostrado que uma rede de 7 colunas e 143 pratos cada, pode chegar a oito mil variáveis. Sistemas dessa dimensão exigem técnicas especiais para a simulação, controle e monitoramento.

A simulação desses sistemas pode ser efetuada em tempo hábil através da utilização de códigos especiais para a simulação de sistemas de grande porte, utilizando, por exemplo, técnicas de computação paralela, como feito em SECCHI (1992). Outra estratégia, que pode ser empregada em conjunto com a primeira, surge das técnicas de redução de ordem dos modelos. A redução de ordem questiona se são necessários para a simulação do sistema todos estes estágios e conseqüentemente os estados do sistema resultante. Seria, então, possível simular esses sistemas em um tempo menor utilizando um número menor de equações e sem perda considerável de acurácia? Através de novas abstrações do sistema, muitos autores têm mostrado que é possível. No presente trabalho, técnicas de redução são empregadas com o intuito de simular esses sistemas com um número reduzido de equações, representando com qualidade comparável a modelagem usual dos sistemas de destilação.

No quesito controle de colunas de destilação, o tema é muito antigo, por se constituir de um dos assuntos de maior importância para a indústria de processos. Por exemplo, em um artigo de revisão sobre controle de colunas de SKOGESTAD (1997), é mostrado que o comportamento de colunas de destilação em estado estacionário é estudado desde 1920 e dinâmico desde 1950. Portanto, o campo de estudo está prestes a completar um século. Entre os desenvolvimentos que ajudaram a simplificar a estratégia de controle de colunas está o controle preditivo.

É possível fazer um paralelo entre as estratégias clássicas e o modo como são tratadas na estratégia de controle preditivo. Um componente que é tema recor-

rente no controle de colunas é a interação existente entre topo e fundo. Diversas técnicas foram produzidas com o intuito de identificar e eliminar a interação presente na coluna, por exemplo, as técnicas basadas em RGA (*Relative Gain Array*) e as técnicas de *detuning*. No controle preditivo, a interação inerente da coluna é utilizada de maneira vantajosa, pois pode ser aproveitada para um menor gasto energético. Outro problema bastante estudado é o pareamento, onde devem ser escolhidos quais pares de variáveis devem ser utilizados nas malhas de controle. Na estratégia clássica, podem ser utilizados o RGA, estratégias de otimização, entre outras técnicas para a solução deste problema. Aplicando a estratégia preditiva, este problema é simplificado, pois devem ser fornecidos ao sistema apenas quais os objetivos de controle, quais variáveis podem ser manipuladas e o modelo do processo, sendo a solução ótima para cada manipulação encontrada a cada instante de amostragem. Por fim, podemos ressaltar o problema do tempo morto existente em colunas de grande porte. Este foi tratado durante algum tempo com a utilização de compensadores de tempo morto (como os preditores de Smith), os quais eram projetados caso a caso. Tal problema é inerentemente solucionado com o controle preditivo, bastando apenas que o modelo utilizado na predição caracterize o atraso. Entretanto, a aplicação desta técnica em colunas de grande porte está atualmente restrita ao caso linear, no qual o problema de otimização pode ser solucionado em tempo hábil. O uso dos modelos lineares em plantas não lineares pode resultar em controladores conservadores, como será mostrado no Capítulo 4.

A estimação de estados representa um desafio imenso para colunas de destilação. Por exemplo, no sistema citado anteriormente, caso fosse necessário monitorar 10% das variáveis, seriam utilizados 800 instrumentos, o que provavelmente não é uma situação viável. Diversas técnicas foram desenvolvidas para o monitoramento de sistemas dinâmicos através da incorporação do conhecimento *a priori* proveniente de um modelo do processo, entre as quais a estimação em horizonte móvel (RAO, 2000), estimação de Kalman (KALMAN, 1960), filtragem com transformação *unscented* (JULIER *et al.*, 2000), entre outras estratégias. Essas metodologias procuram combinar a informação das medidas disponíveis e o modelo de processo para estimar as variáveis que não são medidas. A solução de maneira satisfatória desse problema é essencial, tanto para propósitos de monitoramento da coluna quanto para a utilização de controladores preditivos com modelos em espaço de estados, dado que a simulação desses necessita da condição inicial do sistema.

O objetivo dessa dissertação é mostrar que os modelos reduzidos baseados em resíduos ponderados, obtidos através das técnicas de colocação ortogonal e momentos, têm potencial para prover uma redução do tempo de simulação expressiva, de maneira a permitir a utilização das estratégias citadas anteriormente em tempo real em sistemas de destilação. Como objetivo secundário, deseja-se mostrar que

a técnica de momentos possui propriedades mais atrativas para a utilização em controle preditivo não linear e estimação de estados, quando comparada à técnica clássica baseada em colocação ortogonal.

A estrutura do trabalho foi dividida da seguinte maneira: no Capítulo 2, são apresentadas as revisões da bibliografia das metodologias, constando de um estudo sobre estimadores de estado, seguido do controle preditivo de colunas de destilação e, por fim, uma apresentação das diferentes técnicas para a redução de modelos para colunas de destilação. No Capítulo 3, as técnicas de redução são descritas, juntamente com os algoritmos de controle e estimação de estados. Os resultados e discussões do trabalho estão no Capítulo 4, divididos em três subseções: a primeira mostra a comparação entre o modelo completo e os reduzidos; a segunda contém os resultados da estimação de estados; e a terceira do controle preditivo não linear. Por fim, as conclusões e sugestões de trabalhos futuros são apresentadas no Capítulo 5.

# Capítulo 2

## Revisão Bibliográfica

### 2.1 Estimadores de estado

O estado de um sistema dinâmico é definido como o menor conjunto de variáveis tal que o conhecimento dessas no tempo inicial e das entradas do sistema nos tempos posteriores determina completamente o comportamento do sistema para qualquer instante de tempo (OGATA, 2010). Portanto, o estado é determinado univocamente pelo estado no tempo inicial e a entrada para  $t \geq t_0$ .

Caso não seja possível medir todos os estados do sistema, ou mesmo se a saída do sistema consistir de combinações lineares ou não lineares dos estados, faz-se necessário o uso de estimadores de estados (MACIEJOWSKY, 2000). Tratando-se de sistemas não lineares, existem algumas técnicas utilizadas, das quais destacam-se o filtro de Kalman estendido (EKF), o filtro de Kalman estendido com restrições (CEKF), os estimadores de horizonte móvel (MHE) e os filtros baseados na transformação *unscented*, conhecidos como UKF. A seguir são mostradas cada uma dessas estratégias.

#### 2.1.1 Filtro de Kalman estendido

Considerando um sistema não-linear, discreto, genérico:

$$\begin{aligned}x_k &= f(x_{k-1}, u_{k-1}, \omega_{k-1}) \\y_k &= h(x_k, \nu_k) \\ \omega &\sim (0, Q_k) \\ \nu &\sim (0, R_k)\end{aligned}\tag{2.1}$$

Na Equação (2.1) as funções  $h$  e  $f$  são não lineares. É possível realizar uma expansão em série de Taylor dessas funções em torno de  $\hat{x}_{k-1}^+$ , com truncamento no

termo de primeira ordem da maneira mostrada na Equação (2.2) (SIMON, 2006):

$$\begin{aligned}
x_k &= f(\hat{x}_{k-1}^+, u_{k-1}, 0) + \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{\hat{x}_{k-1}^+} (x_{k-1} - \hat{x}_{k-1}^+) + \left. \frac{\partial f}{\partial \omega} \right|_{\hat{x}_{k-1}^+} \omega_{k-1} \\
&= f(\hat{x}_{k-1}^+, u_{k-1}, 0) + F_{k-1}(x_{k-1} - \hat{x}_{k-1}^+) + L_{k-1}\omega_{k-1} \\
&= F_{k-1}x_{k-1} + [f(\hat{x}_{k-1}^+, u_{k-1}, 0) - F_{k-1}\hat{x}_{k-1}^+] + L_{k-1}\omega_{k-1} \\
&= F_{k-1}x_{k-1} + \tilde{u}_{k-1} + \tilde{\omega}_{k-1}
\end{aligned} \tag{2.2}$$

Sendo as matrizes  $F_{k-1}$ ,  $L_{k-1}$ ,  $\tilde{u}_k$ ,  $\tilde{\omega}_k$  dadas por:

$$\begin{aligned}
F_{k-1} &= \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{\hat{x}_{k-1}^+} \\
L_{k-1} &= \left. \frac{\partial f}{\partial \omega} \right|_{\hat{x}_{k-1}^+} \\
\tilde{u}_k &= f(\hat{x}_k^+, u_k, 0) - F_k \hat{x}_k^+ \\
\tilde{\omega}_k &\sim (0, L_k Q_k L_k^T)
\end{aligned} \tag{2.3}$$

Repetindo o mesmo procedimento para a equação de medição  $h$ , chega-se a seguinte equação:

$$y_k = H_k x_k + z_k + \tilde{\nu}_k \tag{2.4}$$

As matrizes são analogamente definidas:

$$\begin{aligned}
H_k &= \left. \frac{\partial h}{\partial x} \right|_{\hat{x}_k^-} \\
M_k &= \left. \frac{\partial h}{\partial \nu} \right|_{\hat{x}_k^-} \\
z_k &= h(\hat{x}_k^-, 0) - H_k \hat{x}_k^- \\
\tilde{\nu}_k &\sim (0, M_k R_k M_k^T)
\end{aligned} \tag{2.5}$$

O modelo obtido é, portanto, um sistema em espaço de estados linear, sendo possível aplicar o filtro de Kalman clássico (KALMAN, 1960), o qual consiste no algoritmo adaptado para o modelo linearizado mostrado a seguir.

- Inicialização do filtro (no instante  $k = 0$ )

$$\begin{aligned}
\hat{x}_0^+ &= E(x_0) \\
P_0^+ &= E[(x_0 - \hat{x}_0^+)(x_0 - \hat{x}_0^+)^T]
\end{aligned} \tag{2.6}$$

- Nos instantes  $k = 1, 2, \dots, n$ , a seguinte sequência de cálculos deve ser realizada:
  - Cálculo das matrizes das derivadas parciais  $F_{k-1}$  e  $L_{k-1}$
  - Atualização da matriz de covariância e predição dos estados (estimação *a priori*)

$$\begin{aligned}
 P_{(k|k-1)} &= F_{k-1}P_{(k-1|k-1)}F_{k-1}^T + L_{k-1}Q_{k-1}L_{k-1}^T \\
 \hat{x}_{(k|k-1)} &= f(\hat{x}_{(k-1|k-1)}, u_{(k-1)}, 0)
 \end{aligned} \tag{2.7}$$

- Cálculo das matrizes  $H_k$  e  $M_k$
- Atualização dos estados estimados e da matriz de covariância (estimação *a posteriori*):

$$\begin{aligned}
 K_k &= P_{(k|k-1)}H_k^T(H_kP_{(k|k-1)}H_k^T + M_kR_kM_k^T)^{-1} \\
 \hat{x}_{(k|k)} &= \hat{x}_{(k|k-1)} + K_k[y_k - h(\hat{x}_{(k|k-1)}, 0)] \\
 P_{(k|k)} &= (I - K_kH_k)P_{(k|k-1)}
 \end{aligned} \tag{2.8}$$

### 2.1.2 Estimadores de horizonte móvel (MHE) e o filtro de Kalman com restrições (CEKF)

A estimação dos estados utilizando o filtro de Kalman é uma estratégia rápida e de baixo custo computacional. Nota-se, através da análise do filtro, que o estado estimado utiliza apenas o dado naquele instante, sendo conhecido como um estimador de horizonte nulo. Outra estratégia consiste em utilizar os dados anteriores para a estimativa dos estados e à medida que um novo estado fosse obtido este é adicionado ao conjunto e efetua-se a estimação. Não é difícil perceber que a dimensão desse problema eleva-se rapidamente, tornando essa estratégia, conhecida como estimação em batelada, pouco eficiente e sem possibilidade de implementação prática. Uma proposta alternativa, a qual considera apenas uma quantidade fixa de dados, é a estimação em horizonte móvel, que desliza uma janela de tamanho fixo de dados ao longo de um horizonte. Quando surge uma nova medida, a mesma é adicionada ao conjunto e a medição mais antiga é removida (RAO, 2000). Em SALAU (2009), é apresentado o equacionamento para o MHE mostrado a seguir.

Dado o modelo não linear do sistema dinâmico discreto (Equação 2.1), o pro-

blema de otimização na formulação MHE é dado por:

$$\begin{aligned} \min_{\omega_{(k-N-1|k)} \dots \omega_{(k-1|k)} v_{(k-N|k)} \dots v_{(k|k)}} \Psi_k^N &= \hat{\omega}_{(k-N-1|k)}^T P_{(k-N-1|k-1)}^{-1} \hat{\omega}_{(k-N-1|k)} \\ &+ \sum_{j=k-N}^{k-1} \hat{\omega}_{(j|k)}^T Q_{k-1}^{-1} \hat{\omega}_{(j|k)} \\ &+ \sum_{j=k-N}^k \hat{v}_{(j|k)}^T R_{(k)}^{-1} \hat{v}_{(j|k)} \end{aligned}$$

Sujeito às restrições:

$$\begin{aligned} \hat{x}_{(k-N|k)} &= \hat{x}_{(k-N|k-1)} + \hat{\omega}_{(k-N-1|k)} \\ \hat{x}_{(j+1|k)} &= f(\hat{x}_{(j|k)}, u_j) + \hat{\omega}_{(j|k)} \quad \text{para } j = k-N, \dots, k-1 \\ y_j &= h(\hat{x}_{(j|k)}) + \hat{v}_{(j|k)} \quad \text{para } j = k-N, \dots, k \\ \hat{x}_{min} &\leq \hat{x}_{(j|k)} \leq \hat{x}_{max} \\ \hat{\omega}_{min} &\leq \hat{\omega}_{(j-1|k)} \leq \hat{\omega}_{max} \quad \text{para } j = k-N, \dots, k \\ \hat{v}_{min} &\leq \hat{v}_{(j|k)} \leq \hat{v}_{max} \quad \text{para } j = k-N, \dots, k \end{aligned} \quad (2.9)$$

Após resolver o problema de otimização não linear (NLP) (2.9), obtêm-se os valores dos vetores  $\omega^*$  e  $v^*$  e os estados podem ser atualizados da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \hat{x}_{(k-N|k)} &= \hat{x}_{(k-N|k-1)} + \hat{\omega}_{(k-N-1|k)}^* \\ \hat{x}_{(j+1|k)} &= f(\hat{x}_{(j|k)}, u_j) + \hat{\omega}_{(j|k)}^* \quad \text{para } j = k-N, \dots, k-1 \\ y_j &= h(\hat{x}_{(j|k)}) + \hat{v}_{(j|k)} \quad \text{para } j = k-N, \dots, k \end{aligned} \quad (2.10)$$

Colocando-se um horizonte igual a zero ( $N = 0$ ), e sendo a equação de medição  $h$  linear (ou linearizada), o problema da MHE é reduzido ao chamado CEKF (*Constrained Extended Kalman Filter*), que pode ser formulado como um problema de otimização quadrática (QP) cuja solução tem um custo computacional inferior ao problema NLP. As equações do CEKF se resumem, portanto, a:

$$\min_{\hat{\Theta}_{(k|k)}} \hat{\Theta}_{(k|k)}^T S_{(k|k)}^{-1} \hat{\Theta}_{(k|k)} + d^T \hat{\Theta}_{(k|k)} \quad (2.11)$$

Onde:

$$\begin{aligned}\hat{\Theta}_{(k|k)} &= \begin{bmatrix} \omega_{(k-1|k)} \\ v_{(k|k)} \end{bmatrix} \\ S &= \begin{bmatrix} P_{(k-1|k-1)} & 0 \\ 0 & R_k \end{bmatrix} \\ d &= \mathbf{0}\end{aligned}\tag{2.12}$$

As restrições de igualdade da equação (2.9) podem ser reescritas como:

$$[H \ I]\Theta_{(k|k)} = y_k - h(\hat{x}_{(k|k-1)})\tag{2.13}$$

As matrizes das restrições de desigualdade, na forma  $A\Theta \leq b$ , são:

$$A = \begin{bmatrix} -I \\ I \end{bmatrix} \quad b = \begin{bmatrix} \hat{x} - x_{min} \\ y_{max} - y_k \\ x_{max} - \hat{x} \\ y_k - y_{min} \end{bmatrix}$$

A formulação CEKF, apesar de ter uma acurácia menor que a MHE, apresenta um tempo de processamento muito menor, pois não é necessário resolver um problema de programação não-linear (NLP) a cada estimativa dos estados, sendo a formulação quadrática (QP), empregada no CEKF, menos custosa.

### 2.1.3 Filtro de Kalman *Unscented*

A partir da ideia que é mais fácil aproximar uma função densidade de probabilidade do que uma função não linear qualquer, foi proposto o filtro para sistemas não lineares chamado *Unscented* (JULIER *et al.*, 2000). Esse é baseado na transformação que leva o mesmo nome, tendo suas origens no Método de Monte Carlo.

Supondo um modelo do tipo  $y = f(x)$ , é possível obter a média amostral de  $y$  e de  $x$ , mesmo que a função  $f$  seja desconhecida. Para tanto, seria necessário ter um número grande de medições dessas duas variáveis e utilizar as funções estatísticas usuais de maneira a obter, por exemplo, a média amostral e a matriz de covariância.

No contexto da filtragem, não seria possível realizar um número grande de medidas de  $x$ , calcular os valores de  $y$  através da função  $f$ , e então determinar a matriz de covariância de  $y$  e a sua média amostral (devido ao curto tempo disponível para a resolução do problema). A técnica proposta por JULIER *et al.* (2000) consiste em obter poucas realizações do vetor  $x$ , sendo estas realizações representativas, de maneira que as estatísticas calculadas não se distanciem das que utilizam um

grande número de realizações (AGUIRRE, 2007). É importante ressaltar que a transformação é projetada para o cálculo dos momentos estatísticos de ordem zero e um, sendo suficiente para caracterizar uma distribuição normal.

A transformação *Unscented* reduz o grande número de realizações necessárias para caracterizar os momentos de ordem zero e um das variáveis do vetor  $y$  a um pequeno número de vetores, chamados de pontos sigma, os quais são escolhidos de maneira que:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2n_a} \sum_{i=1}^{2n_a} \chi_i &= \bar{\mathbf{x}} \\ \text{cov}(\chi) &= \mathbf{P} \end{aligned} \quad (2.14)$$

O algoritmo consiste em obter os pontos sigma, utilizar a função  $f$  para obter os pontos  $\mathcal{Y}_i$  e, por fim, calcular a sua média e covariância:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2n_a} \sum_{i=1}^{2n_a} \mathcal{Y}_i &\approx \bar{\mathbf{y}} \\ \text{cov}(\mathcal{Y}_i) &\approx \mathbf{P}_{yy} \end{aligned} \quad (2.15)$$

Existem, basicamente, três algoritmos para a implementação prática do filtro *Unscented*, diferindo basicamente na maneira como os pontos sigma são selecionados e como as matrizes  $\mathbf{Q}$  e  $\mathbf{R}$  são utilizadas. No algoritmo proposto por SIMON (2006), são escolhidos  $2n$  pontos sigma e as matrizes  $\mathbf{Q}$  e  $\mathbf{R}$  são adicionadas ao sistema (ruído aditivo). O algoritmo pode ser resumido pelo seguinte conjunto de equações:

- O primeiro passo do algoritmo é a obtenção dos pontos sigma e a propagação destes no modelo não linear:

$$\mathcal{X}_{k-1} = [\hat{\chi}_{k-1} + \Gamma \sqrt{\mathbf{P}_{\chi_{k-1}}} \quad \hat{\chi}_{k-1} - \Gamma \sqrt{\mathbf{P}_{\chi_{k-1}}}] \quad (2.16)$$

$$\mathcal{X}_{k,i}^- = f(\mathcal{X}_{k-1,i}^x, u_{k-1}) \quad (2.17)$$

- São obtidas as estimativas *a priori* dos estados e a matriz de covariância:

$$\hat{\chi}_k^- = \sum_{i=1}^{2n} W_i^x \mathcal{X}_{k,i}^- \quad (2.18)$$

$$\mathbf{P}_{\chi_k}^- = \sum_{i=1}^{2n} W_i^c (\mathcal{X}_{k,i}^- - \hat{\chi}_k^-) (\mathcal{X}_{k,i}^- - \hat{\chi}_k^-)^T + \mathbf{Q}_k \quad (2.19)$$

- Em seguida são atualizadas as equações de medição através da propagação dos

pontos sigma:

$$\gamma_{k,i} = h(\mathcal{X}_{k,i}^{x^-}) \quad (2.20)$$

- Obtêm-se as medidas previstas no instante  $k$ , a matriz de covariância dos estados previstos ( $\mathbf{P}_{y_k y_k}$ ) e a matriz de covariância cruzada ( $\mathbf{P}_{x_k y_k}$ ):

$$\hat{y}_k = \sum_{i=1}^{2n} W_i^x \gamma_{k,i} \quad (2.21)$$

$$\mathbf{P}_{y_k y_k} = \sum_{i=1}^{2n} W_i^c (\gamma_{k,i} - \hat{y}_k)(\gamma_{k,i} - \hat{y}_k)^T + \mathbf{R}_k \quad (2.22)$$

$$\mathbf{P}_{x_k y_k} = \sum_{i=1}^{2n} W_i^c (\mathcal{X}_{k,i}^{x^-} - \hat{\chi}_k^-)(\gamma_{k,i} - \hat{y}_k)^T \quad (2.23)$$

- Finalmente, obtêm-se o ganho de Kalman *unscented* ( $\mathbf{K}_k$ ) e as estimativas *a posteriori* dos estados e da matriz de covariância:

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_k &= \mathbf{P}_{\chi_k y_k} \mathbf{P}_{y_k y_k}^{-1} \\ \hat{\chi}_k &= \hat{\chi}_k^- + \mathbf{K}_k (y_k - \hat{y}_k) \\ \mathbf{P}_{\chi_k} &= \mathbf{P}_{\chi_k}^- - \mathbf{K}_k \mathbf{P}_{y_k y_k} \mathbf{K}_k^T \end{aligned} \quad (2.24)$$

Observando-se as equações do algoritmo, percebe-se que as matrizes  $\mathbf{Q}$  e  $\mathbf{R}$  são adicionadas ao sistema. A primeira equação de (2.16) é uma representação que indica que cada vetor  $\hat{\chi}$  é adicionado e subtraído das colunas da matriz  $\Gamma \sqrt{\mathbf{P}_{\chi_{k-1}}}$ . No algoritmo proposto por JULIER *et al.* (2000) e MERWE (2004), o valor do estado anterior estimado  $\hat{\chi}_{k-1}$  é adicionado ao conjunto de pontos sigma, modificando a primeira equação de (2.16) para:

$$\mathcal{X}_{k-1} = [\hat{\chi}_{k-1} \quad \hat{\chi}_{k-1} + \Gamma \sqrt{\mathbf{P}_{\chi_{k-1}}} \quad \hat{\chi}_{k-1} - \Gamma \sqrt{\mathbf{P}_{\chi_{k-1}}}] \quad (2.25)$$

resultando em uma matriz com  $2n + 1$  pontos sigma.

Em MERWE (2004), é proposto o método UKF com estados aumentados. Nessa metodologia, as matrizes  $\mathbf{Q}$  e  $\mathbf{R}$  não são adicionadas ao sistema. Uma matriz contendo  $\mathbf{P}$ ,  $\mathbf{Q}$  e  $\mathbf{R}$  é construída e utilizada para o cálculo dos pontos sigma. A matriz aumentada é mostrada na equação (2.26).

$$\mathbf{P}^a = \begin{bmatrix} \mathbf{P}_{\chi_{k-1}} & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{Q}_{k-1} & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{R}_{k-1} \end{bmatrix} \quad (2.26)$$

Nota-se que essa metodologia aumenta bastante o número de pontos sigma, dependendo agora, além do número de estados, do número de medidas. Por exemplo, no caso de um sistema com 3 estados e 3 medidas a dimensão de  $\mathbf{P}^a$  será  $9 \times 9$ , a soma e a subtração do estado aumentado  $\hat{\chi}_{k-1}^a$  com  $\Gamma\sqrt{\mathbf{P}^a_{\chi_{k-1}}}$  resultará em 18 pontos sigma, com a adição de  $\hat{\chi}_{k-1}^a$  totalizar-se-á 19 pontos sigma. É importante contrastar que, para esse exemplo, o algoritmo formulado com as equações (2.16) resultaria em 6 pontos sigma. Observa-se que o vetor de estados aumentado é composto por  $\hat{\chi}_{k-1}^a = [\hat{\chi}_{k-1} \ 0 \ 0]^T$ .

## 2.2 Controle preditivo e controle de colunas de destilação

O algoritmo de controle avançado de processo que teve o maior sucesso e aplicação na indústria química, sem dúvida alguma, foi o de controle preditivo baseado em modelos, em inglês *model predictive control* (MPC). Este recebeu tamanha aceitação devido a características peculiares, como a capacidade de controlar processos caracterizados por longos transientes, atingir requisitos de qualidade, permitir a incorporação de restrições, entre outras vantagens (DONES *et al.*, 2010).

O algoritmo básico de controle preditivo é baseado em um modelo que é capaz de prever as ações de controle necessárias para levar o processo de um estado a outro. Essas ações são obtidas através da minimização de uma função objetivo de mínimos quadrados do tipo mostrado na equação (2.27), em que  $\mathbf{x}$  são os valores das variáveis controladas no presente e futuro e  $\mathbf{u}$  das variáveis manipuladas (GRUNE e PANNEK, 2011).

$$l(\mathbf{x}_k, \mathbf{u}_k) = (\mathbf{x} - \mathbf{x}_s)^T \mathcal{Q}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_s) + (\mathbf{u} - \mathbf{u}_s)^T \mathcal{S}(\mathbf{u} - \mathbf{u}_s) + \Delta \mathbf{u}^T \mathcal{R} \Delta \mathbf{u} \quad (2.27)$$

Onde  $\mathcal{Q}$ ,  $\mathcal{S}$  e  $\mathcal{R}$  são matrizes utilizadas para a sintonia do controlador, as quais ponderam o objetivo de atingir o *setpoint* ( $\mathcal{Q}$  e  $\mathcal{S}$ ) em relação ao esforço de controle ( $\mathcal{R}$ ). Um modelo do processo fornecerá as estimativas futuras:

$$\mathbf{x}_{k+1} = f(\mathbf{x}_k, \mathbf{u}_k) \quad (2.28)$$

A função objetivo pode ser interpretada como a minimização da distância entre a planta e uma trajetória de referência ( $\mathbf{x}_s$  e  $\mathbf{u}_s$ ) com o mínimo esforço de controle. O problema de otimização é posto como mostrado na equação (2.29).

$$\min_{\mathbf{u}_k} J = \sum_{k=0}^{N-1} l(\mathbf{x}_k, \mathbf{u}_k)$$

sujeito à:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{x}_{k+1} &= f(\mathbf{x}_k, \mathbf{u}_k) \\
 \mathbf{y}_{k+1} &= h(\mathbf{x}_{k+1}, \mathbf{u}_{k+1}) \\
 \mathbf{u}_k &\in \mathbb{U} \\
 \mathbf{x}_k &\in \mathbb{X} \\
 \Delta u_{max} &\geq \Delta u \geq \Delta u_{min}
 \end{aligned} \tag{2.29}$$

Nota-se que nenhuma consideração a respeito do modelo da planta(2.28) foi feita até o momento. Quando o modelo escolhido é linear, o problema de otimização tem uma solução previamente conhecida. Entretanto, quando o modelo empregado na otimização é não linear, diversas dificuldades surgem e alguns algoritmos existem para solucionar o problema.

O processo de otimização e aplicação das ações de controle é feito utilizando o horizonte móvel. Tal estratégia consiste na utilização de dois parâmetros: os horizontes de controle e de predição. O primeiro corresponde à faixa de tempo em que as ações de controle serão calculadas pela rotina de otimização para levar a planta à trajetória de referência desejada dentro do segundo horizonte, o de predição. Apesar de calcular todas as ações do controlador dentro do horizonte de controle, apenas a primeira ação é aplicada e movem-se, então, os horizontes de controle e de predição um instante de tempo à frente e todas as ações de controle são recalculadas (MANNENTI, 2011). Esse procedimento é realizado para que distúrbios que acontecem entre os instantes de amostragem possam ser detectados pelo controlador.

Diversos processos da engenharia química possuem características não lineares ou de difícil controle. Nesses casos, os controladores típicos lineares, sejam eles baseados em modelos sejam os clássicos PIDs, não têm um desempenho satisfatório e podem causar instabilidades no processo. Uma alternativa quando existem acentuadas não linearidades no processo ou quando o desempenho de um controlador linear não é satisfatório, é o emprego de controladores não lineares. Em adição, alguns processos químicos exibem incertezas que podem variar ao longo do tempo de operação. Por exemplo, em um processo onde existe troca de calor, invariavelmente, acontecerá uma mudança no coeficiente global de troca térmica em maior ou menor proporção. Por fim, ressalta-se que algumas não linearidades acentuadas causam forte perda de desempenho dos controladores lineares, como a inversão de ganho ao longo da faixa de controle e a histerese. Esses, entre outros fatores, justificam o emprego de modelos não lineares em controladores, os quais podem incorporar esses aspectos à estratégia preditiva.

Quando se trata de controle de colunas de destilação, o campo de estudo é extremamente vasto. Segundo SKOGESTAD (1997) no mínimo cinquenta artigos

são dedicados anualmente a este tema, numerosos também são os livros dedicados ao assunto. Uma pesquisa realizada nos principais periódicos sobre o tema revela que, na última década, mais de 500 artigos foram publicados sobre o controle de colunas de destilação, mostrando que o tema se mantém bastante ativo e que novos desafios surgiram nos últimos anos, como o controle de colunas de destilação reativa, controle de colunas de parede dividida, controle de destilação com membranas entre outros temas que impulsionaram e mantiveram a área bastante ativa. Entretanto, muitos desafios persistem ao longo dessas décadas ou encontraram soluções mais eficientes com o desenvolvimento das estratégias de controle avançado de processo.

Os processos de destilação podem ser tratados, de maneira simplificada, como um sistema  $5 \times 5$ , onde as variáveis manipuladas  $u$  e controladas  $y$  podem ser vistas na equação 2.30 (observa-se que abordando o sistema dessa maneira, apesar de simplificar o problema, não leva em conta a possibilidade de utilização de outras variáveis manipuladas, como as cargas térmicas, e outras controladas, como as temperaturas de topo e fundo):

$$\begin{aligned} u &= [L \ V \ D \ B \ V_T] \\ y &= [y_D \ x_B \ M_D \ M_B \ M_v] \end{aligned} \quad (2.30)$$

Em boa parte dos casos é possível considerar que o perfil de pressão da coluna ( $M_v$ ) e os inventários ( $M_D$  e  $M_B$ ) são facilmente controlados através de *loops* individuais, restando uma estrutura de controle  $2 \times 2$  de composição de topo e fundo, em geral, usando duas das variáveis  $[L \ V \ D \ B]$  (SKOGESTAD, 1997). Observa-se que duas das variáveis são escolhidas para o controle de inventário e as duas restantes são usadas para o controle de composição ( $L$  é a corrente de líquido recirculado no topo da coluna,  $V$  a corrente de vapor recirculada pelo refeedor,  $D$  é a vazão de destilado,  $B$  é a vazão da corrente de fundo,  $V^T$  é a vazão de vapor no topo). Esse problema (quando tratado usando a estratégia *multiloop*) recai na escolha da melhor estrutura para o controle da composição. Esse procedimento em geral é trabalhoso, sendo necessário, muitas vezes, o teste de diversas configurações com variadas sintonias dos controladores. Muitas das estratégias utilizadas até os dias atuais empregam ferramentas para reduzir as interações entre os dois *loops* de composição (conhecidos como desacopladores), não aproveitando as interações entre as malhas para evitar maiores gastos de energia.

Problemas devido às não linearidades podem surgir em diversos tipos de coluna, sendo as mais comuns (SKOGESTAD, 1997):

- Colunas de alta pureza

- Colunas de destilação azeotrópica
- Colunas de destilação reativa

A utilização de controle preditivo não linear em colunas de destilação é uma estratégia que pode prover um controle de alta qualidade sem ser necessário fazer uso de estratégias de desacoplamento. Entretanto, essa estratégia, como mostrado anteriormente, resulta em um problema de otimização não linear, o qual deve ser resolvido em tempo real. Alguns trabalhos trataram desse assunto e diferentes estratégias foram empregadas para solucionar o problema. TROTTA e BAROLO (1995) utilizaram um modelo não linear concentrado para representar cada uma das seções da coluna. Os resultados desse trabalho mostraram que, mesmo utilizando um modelo bastante simplificado da coluna, o desempenho foi muito superior quando comparado à operação com controladores PID.

KAWATHEKAR e RIGGS (2007) empregaram a estratégia NMPC no controle de uma coluna de destilação reativa. Nesse trabalho, os modelos foram discretizados utilizando colocação ortogonal em cada um dos estágios, resultando em uma série de equações algébricas que foram consideradas como restrições de igualdade no problema de otimização. Esse trabalho mostrou que a utilização do controlador preditivo não linear pode reduzir a variabilidade por um fator entre 2 e 3 quando comparado ao controle *multiloop* convencional.

Outros autores tentaram modelar a coluna utilizando modelos não lineares identificados (WALLER e BÖLING, 2005). Entretanto, esse tipo de modelagem, em geral, pode estar sujeita a maiores incertezas quando comparada a um modelo fenomenológico, pois apenas alguns tipos de não linearidades são adicionadas ao modelo empírico.

GRUNER *et al.* (2001) utilizaram modelos baseados em propagação não linear de ondas (MARQUARDT, 2000) para efetuar a simplificação do modelo da coluna e então empregá-los em uma estratégia de controle não linear. Esse fenômeno, segundo os autores, ocorre em processos de separação em contracorrente. Nesse trabalho o modelo de onda foi utilizado no observador e no controlador. Os resultados não foram comparados com outras estratégias de controle, não sendo possível quantificar a vantagem obtida devido à inserção do controlador preditivo.

NAGY *et al.* (2007) compararam diferentes estratégias para o controle de uma coluna de destilação reativa. As estratégias de controle lineares MPC e PID, foram comparadas à estratégia de controle NMPC. Os controladores PID foram sintonizados utilizando as técnicas recomendadas para colunas de destilação como desacoplamento e prevenção *anti-windup* e mesmo assim o controlador não teve desempenho aceitável. O controlador MPC linear também não foi capaz de estabilizar o sistema satisfatoriamente. Por fim, o controlador NMPC conseguiu um desempenho de con-

trole muito superior às duas outras técnicas, revelando uma grande potencialidade.

LOPEZ-NEGRETE *et al.* (2013) apresentaram aplicações do algoritmo asNMPC (*advanced step NMPC*) a uma torre de destilação de quarenta pratos. Esse utiliza uma simplificação do problema de otimização original tornando a resolução mais rápida. O modelo rigoroso utilizado para a torre possuía 6 mil variáveis. O desempenho do controlador obtido foi similar ao do NMPC usual com um tempo de processamento menor.

## 2.3 Redução de ordem de modelos de torres de destilação

Modelos rigorosos de colunas de destilação são compostos de balanços de massa, energia, correlações para a hidráulica, relações termodinâmicas, entre outras restrições algébricas que podem compor o modelo, as quais devem ser aplicadas a cada estágio da coluna. Quando a dimensão da coluna é elevada, o número de equações que devem ser resolvidas é muito grande. Muitos trabalhos tentaram reduzir a ordem desses modelos empregando as mais diversas técnicas para a obtenção de modelos lineares e não lineares.

Um trabalho importante na área de redução de colunas foi o publicado por STEWART *et al.* (1985). Esse trabalho, além de apresentar uma nova técnica de redução, estabeleceu critérios claros para a comparação de modelos reduzidos de colunas, os quais são:

- O método de redução deve preservar a estrutura em estágios do modelo original
- Deve prever os estados em todos os estágios
- O método deve convergir para a solução do sistema em estágios original
- Em ordens menores, o modelo reduzido deve se ajustar de maneira ótima ao sistema original
- Por conveniência e generalidade, o método não deve precisar da solução do sistema completo
- O método deve funcionar, de maneira direta, com sistemas não lineares e multicomponente
- Deve permitir a utilização de eficiências locais
- A utilização de qualquer pacote ou relação termodinâmica deve ser possível

Os diferentes trabalhos analisados na revisão que se segue foram avaliados à luz desses critérios.

Um dos primeiros trabalhos a utilizar técnicas de colocação ortogonal para a redução de ordem de colunas de destilação foi o método proposto por WONG e LUUS (1980). Nesse trabalho, as equações diferenciais de diferenças da coluna de destilação foram transformadas em equações diferenciais parciais. Por exemplo, dado um balanço simplificado em um prato de uma coluna de destilação:

$$M_j \frac{dx_j}{dt} = L(x_{j-1} - x_j) + V(y_{j+1} - y_j) \quad (2.31)$$

Expandindo em série de Taylor as composições de líquido e vapor:

$$\begin{aligned} x_{j-1} &= x_j - \frac{\partial x}{\partial z} \Delta z \\ y_{j+1} &= y_j + \frac{\partial y}{\partial z} \Delta z \end{aligned} \quad (2.32)$$

Dessa maneira, foi possível passar as variáveis do espaço discreto para o espaço contínuo:

$$M \frac{\partial x}{\partial t} = V \frac{\partial y}{\partial z} - L \frac{\partial x}{\partial z} \quad (2.33)$$

Nesse modelo contínuo, a colocação clássica foi aplicada (VILLADSEN e MICHELSEN, 1978). Esse método seria satisfatório para colunas de recheio, entretanto a solução não é ótima para sistemas em estágios e a solução não converge para a solução do sistema original.

Avançando na linha proposta por WONG e LUUS (1980), CHO e JOSEPH (1983) propuseram um método onde a transformação da equação 2.32 não era necessária. Nessa estratégia, os perfis ao longo da coluna foram considerados contínuos, e as aproximações polinomiais foram aplicadas diretamente aos balanços da coluna. Nessa metodologia, assim como em WONG e LUUS (1980), a solução original do sistema não era recuperada.

Na tentativa de solucionar o problema de convergência da solução para a original, retendo a característica discreta do sistema, STEWART *et al.* (1985) surgiram com a utilização de polinômios ortogonais discretos para formulação do problema de colocação. Essa estratégia satisfaz aos critérios mencionados acima, produzindo resultados mais próximos à solução original.

Aproveitando a ideia seminal de STEWART *et al.* (1985), PINTO e BISCAIA (1988) ampliaram o estudo, explorando diferentes maneiras de aproximar uma coluna através de polinômios ortogonais em domínio discreto. Concluiu-se que a melhor opção era aproximar uma coluna utilizando polinômios para cada uma das suas

seções e fazer com que estes assumissem o mesmo valor no prato de alimentação.

Posteriormente, SECCHI (1988) utilizou os modelos polinomiais por seção sem extrapolação em uma estratégia de controle adaptativo de colunas de destilação. Nesse trabalho foi efetuado um estudo a respeito da função peso associada aos polinômios ortogonais.

Uma nova técnica de redução foi proposta por RIBEIRO (2011). Esta difere da colocação clássica, sendo intitulada método dos momentos no domínio discreto. Na colocação clássica, os resíduos são anulados nos pontos de colocação, na técnica proposta, os momentos dos resíduos são anulados, proporcionando uma qualidade superior de aproximação. A técnica foi testada em algumas aplicações (RIBEIRO *et al.*, 2010) e (VALLERIOTE *et al.*, 2012), mostrando ser uma técnica bastante eficiente. VALLERIOTE (2013) empregou essa técnica na otimização de colunas de destilação. Por ser a principal técnica de redução utilizada nesse trabalho será detalhada no Capítulo 3.

Existem outras técnicas que não são baseadas em resíduos ponderados, na tabela 2.3 é mostrado um resumo de algumas técnicas frequentemente empregadas.

Tabela 2.1: Resumo de outros trabalhos de redução de ordem de modelos de colunas de destilação

| <b>Técnica utilizada</b>               | <b>Autores</b>                      |
|--|-------------------------------------|
| Identificação não linear               | WALLER e BÖLING (2005)              |
| Decomposição ortogonal                 | VAN DEN BERG (2005) e ASTRID (2004) |
| Colocação ortogonal em volumes finitos | KAWATHEKAR e RIGGS (2007)           |
| Modelo agregado                        | LINHART e SKOGESTAD (2012)          |

A técnica de identificação não linear empregada por WALLER e BÖLING (2005), apesar da obtenção de um modelo de baixa ordem, necessita da avaliação do modelo completo, além de não preservar a estrutura em estágios e não convergir para a solução original quando a ordem é aumentada. Nesse trabalho, os modelos utilizados foram do tipo quasi-ARMAX, no qual uma não linearidade é adicionada ao modelo linear.

Na técnica de decomposição ortogonal (VAN DEN BERG, 2005) (ASTRID, 2004), também é necessária a avaliação do modelo completo para a obtenção do modelo reduzido. Essa técnica é baseada na semelhança dos padrões existentes em dados experimentais ou simulações. Os dados coletados através da perturbação do modelo completo geralmente possuem padrões, alguns destes são selecionados e o perfil é expresso através de sua combinação:

$$P(t) = a_1(t)\phi_1 + a_2(t)\phi_2 + a_3(t)\phi_3 + \dots + a_k(t)\phi_k \quad (2.34)$$

$\phi_k$  são as funções base ortogonais.  $a_k(t)$  são coeficientes que variam no tempo. Como as funções base representam os padrões do sistema, elas não variam no tempo, logo, se o modelo de variação dos coeficientes for conhecido, é possível obter a variação de certa variável do processo com o tempo. Na técnica de decomposição ortogonal, os dados originais são agrupados (decompostos) em conjuntos de padrões independentes por nível de importância de cada padrão. Apenas os  $k$  padrões mais importantes são utilizados para representar a dinâmica do sistema.

No trabalho proposto por KAWATHEKAR e RIGGS (2007), as equações diferenciais de diferenças do modelo foram transformadas em equações de diferenças algébricas através da colocação em volume finitos, essas equações foram utilizadas como restrições de igualdade na otimização do sistema. Essa formulação do controle preditivo não linear, conhecida como estratégia simultânea, pode não diminuir de maneira satisfatória o tempo de processamento do sistema, sendo necessária uma comparação com a estratégia sequencial para a obtenção da redução no tempo de processamento.

LINHART e SKOGESTAD (2012) utilizaram a estratégia de modelo agregado, entretanto não foi utilizada a termodinâmica rigorosa do sistema, etapa que é responsável por grande parte do tempo de processamento. Nessa metodologia, são escolhidos alguns pontos no espaço, conhecidos como pontos de agregação, nos quais elementos de agregação são inseridos. Entre os elementos de agregação o sistema é tratado como se estivesse em estado estacionário. Portanto, as equações diferenciais de diferenças dos estágios agregados têm as condições de contorno fornecidas por essas equações algébricas. Os estágios que são considerados em estado estacionário têm sua dinâmica compensada através dos estágios agregados, onde a dinâmica é mais lenta que nos estágios originais. Em VALLERIOTE (2013) é mostrado que os modelos baseados em resíduos ponderados têm uma acurácia maior que os modelos agregados.

# Capítulo 3

## Método Proposto

### 3.1 Introdução aos métodos baseados em resíduos ponderados

Nos métodos denominados de resíduos ponderados, uma forma funcional é proposta como solução aproximada da equação diferencial ou de diferenças. Tal solução não satisfaz a equação em todos os seus pontos, gerando uma função denominada resíduo. As técnicas diferem basicamente em como o resíduo é minimizado, de maneira a encontrar uma função que mais se aproxima da solução.

De maneira a solucionar este problema, é necessário estabelecer uma métrica, por exemplo, no caso contínuo, a integral ponderada por um peso em todo o domínio pode ser minimizada:

$$\int_V R(x)w_k(x)dx \quad (3.1)$$

Existem alguns métodos para lidar com a solução desse problema, nesse trabalho serão utilizados dois desses métodos, conhecidos como colocação ortogonal e método dos momentos. No método da colocação a função peso é o delta de Dirac:

$$w_k = \delta(x - x_k) \quad (3.2)$$

Das propriedades dessa função chega-se à (RICE e DO, 1994):

$$\int_V R(x)\delta(x - x_k)dx = R(x_k) \quad (3.3)$$

A escolha das raízes dos polinômios ortogonais como pontos de colocação permite que a solução se aproxime da solução ótima (conhecida como solução de Galerkin), maiores detalhes podem ser vistos em VILLADSEN e MICHELSEN (1978).

No método dos momentos a função peso escolhida são os momentos de ordem  $k$ :

$$w_k = x^k \quad k \in [0 \ N - 1] \quad (3.4)$$

A solução perfeita seria encontrar todos os momentos iguais a zero. Como, na realidade, obtém-se uma solução aproximada, uma maneira viável é zerar os primeiros momentos:

$$\int_V W(x)x^k R(x)dx = 0 \quad (3.5)$$

Essa técnica pode proporcionar resultados superiores ao método da colocação, em especial por atenuar oscilações características das aproximações polinomiais.

## 3.2 Desenvolvimento da técnica de redução baseada em colocação ortogonal no domínio discreto

Os conceitos de ortogonalidade de funções podem ser estendidos para funções discretas através da operação somatório (analogamente ao operador integral no domínio contínuo). Uma sequência de funções reais é ortogonal em relação ao peso  $W(s)$  em um intervalo  $(a, b)$  se:

$$\sum_{s=a}^b W(s)\phi_m(s)\phi_n(s) = 0 \quad (n \neq m) \quad (3.6)$$

$$\sum_{s=a}^b W(s)[\phi_n(s)]^2 \geq 0 \quad (n = m) \quad (3.7)$$

Existem na literatura muitos polinômios ortogonais, inclusive no domínio discreto. Nesse trabalho serão utilizados os polinômios ortogonais de Hahn, que podem ser gerados recursivamente segundo:

$$Q_n(s) = \left( \frac{g_n + h_n - s}{g_n} \right) Q_{n-1}(s) - \frac{h_n}{g_n} Q_{n-2}(s) \quad (3.8)$$

em que:

$$g_n = \frac{(n + \alpha + \beta)(n + \alpha)(N - n)}{(2n + \alpha + \beta - 2)(2n + \alpha + \beta - 1)} \quad (3.9)$$

$$h_n = \frac{(n - 1)(n + \beta - 1)(n + \alpha + \beta + N - 1)}{(2n + \alpha + \beta - 2)(2n + \alpha + \beta - 1)} \quad (3.10)$$

$Q_0(s) = 1$  e  $Q_{-1}(s) = 0$ . Os pontos de colocação são as raízes desse polinômio.

Utilizando interpolação lagrangeana de diferenças (domínio discreto), aproxima-se a função  $f(s)$  e suas diferenças, respectivamente, por:

$$f(s) \approx \sum_{j=0}^{n+1} l_j(s) f(s^{(j)}) \quad (3.11)$$

$$f(s \pm k) \approx \sum_{j=0}^{n+1} l_j(s \pm k) f(s^{(j)}) \quad (3.12)$$

Os valores das diferenças podem ser armazenados matricialmente da seguinte maneira:

$$A_{i,j}^+ = l_j(s^{(i)} + 1) \quad (3.13)$$

$$A_{i,j}^- = l_j(s^{(i)} - 1) \quad (3.14)$$

Sendo possível aproximar os perfis para os estágios  $k$ ,  $k + 1$ ,  $k - 1$ , por:

$$\begin{aligned} \hat{x}(s, t) &\approx \sum_{j=0}^{n+1} l_j(s) x_j(t) \\ \hat{x}(s^{(i)} + 1, t) &\approx \sum_{j=0}^{n+1} \mathbf{A}_{i,j}^+ x_j(t) \\ \hat{x}(s^{(i)} - 1, t) &\approx \sum_{j=0}^{n+1} \mathbf{A}_{i,j}^- x_j(t) \\ \hat{y}(s^{(i)} + 1, t) &\approx \sum_{j=0}^{n+1} \mathbf{A}_{i,j}^+ k_j x_j(t) = \sum_{j=0}^{n+1} \mathbf{A}_{i,j}^+ y_j \end{aligned} \quad (3.15)$$

Um estágio genérico de uma coluna de destilação pode ser representado pela seguinte equação diferencial de diferenças (RIBEIRO, 2011):

$$\frac{dx_i(t)}{dt} = f[x_{i-1}(t)] + g[x_i(t)] + h[x_{i+1}(t)] \quad (3.16)$$

Substituindo as aproximações 3.15 na equação 3.16, chega-se à expressão do

resíduo:

$$R^{n+1}(s^{(i)}, t) = \frac{dx_i(t)}{dt} - \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j}^- f[x_j(t)] - g[x_i(t)] - \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j}^+ h[x_j(t)] \quad (3.17)$$

No método da colocação ortogonal, os resíduos são anulados nos pontos de colocação, logo:

$$R^{n+1}(s^{(i)}, t) = \frac{dx_i(t)}{dt} - \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j}^- f[x_j(t)] - g[x_i(t)] - \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j}^+ h[x_j(t)] = 0 \quad (3.18)$$

Essas equações (3.18) foram utilizadas no modelo reduzido através do método da colocação ortogonal, juntamente com as condições de contorno:

$$x_0(t) = p(t) \quad (3.19)$$

$$x_{n+1}(t) = q(t) \quad (3.20)$$

### 3.3 Desenvolvimento da técnica de momentos

Na técnica de momentos, os coeficientes do polinômio são encontrados através da anulação dos  $n$  primeiros momentos :

$$R_k^{n+1}(t) = \sum_{j=1}^N \left( \frac{j-1}{N} \right)^{k-1} R^{n+1} \left( \frac{j-1}{N}, t \right) = 0 \quad (k = 1, 2, \dots, n) \quad (3.21)$$

Esse somatório pode ser avaliado através de uma quadratura de Gauss-Lobatto em sua forma discreta (RIBEIRO, 2011):

$$R_k^{n+1}(t) = \sum_{i=0}^{n+1} M_{k,i} R^{n+1}(s^{(i)}, t) = 0 \quad (3.22)$$

em que:  $M_{k,i} = \omega_i (s^{(i)})^{k-1}$  e  $\omega_i$  são os pesos da quadratura, a qual é exata para polinômios até o grau  $2n + 1$ . No caso linear, a quadratura é sempre exata, pois  $R^{n+1}(s^{(i)}, t)$  é um polinômio de grau  $n + 1$ .

Dado que as equações provenientes de 3.21 são lineares, uma forma mais conveniente de escrevê-las é:

$$R^{n+1}(s^{(i)}, t) + V_{i,0} R^{(n+1)}(s^{(0)}, t) + V_{i,1} R^{(n+1)}(s^{(n+1)}, t) = 0, \quad i = 1, \dots, n \quad (3.23)$$

Na equação 3.23 as colunas da matriz  $\mathbf{V}$  são:

$$\mathbf{V}_0 = \tilde{\mathbf{M}}^{-1}b_0 \quad (3.24)$$

$$\mathbf{V}_1 = \tilde{\mathbf{M}}^{-1}b_1 \quad (3.25)$$

$\tilde{\mathbf{M}}$  é uma matriz quadrada fruto da remoção da primeira e última coluna de  $\mathbf{M}$ . Substituindo as aproximações e após alguma manipulação (ver o Apêndice 3 de RIBEIRO (2011)), é possível chegar ao modelo reduzido:

$$\frac{dX_i(t)}{dt} - \sum_{j=0}^{n+1} B_{i,j}^- f[x_j(t)] + G[x_i(t)] + \sum_{j=0}^{n+1} B_{i,j}^+ h[x_j(t)] \quad (3.26)$$

Os termos dessa equação são:

$$X_i(t) = x_i(t) + V_{i,0}x_0(t) + V_{i,1}x_{n+1}(t) \quad (3.27)$$

$$B_{i,j}^- = A_{i,j}^- + V_{i,0}A_{0,j}^- + V_{i,1}A_{n+1,j}^- \quad (3.28)$$

$$B_{i,j}^+ = A_{i,j}^+ + V_{i,0}A_{0,j}^+ + V_{i,1}A_{n+1,j}^+ \quad (3.29)$$

$$G[x_i(t)] = g[x_i(t)] + V_{i,0}g[x_0(t)] + V_{i,1}g[x_{n+1}(t)] \quad (3.30)$$

Duas condições de contorno completam o sistema de equações:

$$x_0(t) = p(t) \quad (3.31)$$

$$x_{n+1}(t) = q(t) \quad (3.32)$$

RIBEIRO (2011) enfatiza as propriedades desejáveis obtidas utilizando a técnica de momentos:

- Os balanços globais são obedecidos e dados pelo momento de ordem zero
- Os pontos de colocação não são fixos, proporcionando uma característica adaptativa desejável ao método
- O método da colocação pode ser recuperado utilizando  $V_{i,0} = V_{i,1} = 0$

Além das vantagens inerentes do método dos momentos, as raízes do polinômio ortogonal de Hahn podem ser obtidas com exatidão utilizando um reescalonamento da variável independente discreta, resultando em uma forma numericamente menos sujeita ao acúmulo de erros de truncamento.

### 3.4 Estrutura de estimação e controle preditivo

Durante o procedimento de estimação e de controle, o modelo reduzido será utilizado no estimador e no controlador. A função objetivo do problema de controle, equação 2.27, foi reescrita ao longo dos horizontes de controle e de predição, e sem a utilização dos *setpoints* para as variáveis manipuladas da seguinte maneira:

$$\min_{\mathbf{u}} J(k) = \left[ \sum_{i=1}^{H_p} (\mathbf{y}(k+i|k) - \mathbf{y}_{sp}(k+i|k))^T \mathcal{Q} (\mathbf{y}(k+i|k) - \mathbf{y}_{sp}(k+i|k)) + \sum_{i=0}^{H_c} \Delta \mathbf{u}(k+i|k)^T \mathcal{R} \Delta \mathbf{u}(k+i|k) \right] \quad (3.33)$$

Sujeito às restrições:

$$\mathbf{x}_{k+1} = f(\mathbf{x}_k, \mathbf{u}_k) \quad (3.34)$$

$$\mathbf{y}_{k+1} = h(\mathbf{x}_{k+1}, \mathbf{u}_{k+1}) \quad (3.35)$$

$$\mathbf{u}_k \in \mathbb{U} \quad (3.36)$$

$$\mathbf{x}_k \in \mathbb{X} \quad (3.37)$$

$$\Delta u_{max} \geq \Delta u \geq \Delta u_{min} \quad (3.38)$$

Para simular a equação do modelo, é necessário conhecer o estado inicial em cada instante de tempo. Este papel é preenchido pelo estimador de estados, o qual resolve o problema de otimização 2.9. Existem, basicamente, duas maneiras de resolver um problema do tipo 3.33 ou 2.9, conhecidos como métodos simultâneo e sequencial (BIEGLER e HUGHES, 1985).

No método sequencial existem duas rotinas: uma de otimização e outra de integração. Logo, o modelo é avaliado separadamente da otimização. Nesse método apenas as variáveis de controle são discretizadas, devendo-se notar que o integrador deve fornecer uma solução viável a cada iteração da otimização (MANENTI, 2011).

No método simultâneo, é utilizada apenas a rotina de otimização. Neste caso, as equações do modelo são discretizadas e colocadas como restrições de igualdade. Dessa maneira é dito que a otimização e a integração convergem simultaneamente.

Segundo MANENTI (2011), ambos os métodos possuem vantagens e desvantagens. No método simultâneo a dimensão do problema é aumentada, sendo a confiabilidade do método fortemente dependente da qualidade da rotina de otimização. No método sequencial, soma-se a maior facilidade de implementação ao fato do problema de otimização ser de menor dimensão. Entretanto, em alguns casos, o problema torna-se computacionalmente mais dispendioso.

TONEL (2008) avaliou 3 estratégias para a solução desse tipo de otimização não linear, duas abordagens sequenciais, utilizando os integradores ode45 (MATLAB, 2008) e DASSLC (SECCHI, 1992–2007), e uma abordagem simultânea utilizando colocação ortogonal para discretizar as equações do modelo. A estratégia sequencial foi a mais rápida, quando foi utilizado o integrador DASSLC, superando o método simultâneo. No presente trabalho foi adotada essa abordagem utilizando o mesmo integrador.

Após obter o resultado do problema de controle, tem-se um vetor de variáveis manipuladas de dimensão  $H_c$  (tamanho do horizonte de controle):

$$\mathbf{u}^{otimo} = [\mathbf{u}^0, \mathbf{u}^1 \dots \mathbf{u}^{H_c}] \quad (3.39)$$

Entretanto apenas a primeira ação de controle é aplicada à planta:

$$\kappa = \mathbf{u}^0 \quad (3.40)$$

No caso da estratégia de controle preditivo linear, as outras ações de controle são desprezadas no instante de tempo posterior. Porém, no algoritmo não linear, esses valores desempenham um papel fundamental. Os valores restantes da otimização são utilizados como estimativa inicial do próximo problema de otimização, repetindo-se o último valor. Desta maneira a estimativa inicial no instante  $k + 1$  será:

$$u_0(k + 1) = [\mathbf{u}^1, \mathbf{u}^2, \mathbf{u}^3 \dots \mathbf{u}^{H_c}, \mathbf{u}^{H_c}] \quad (3.41)$$

Essa estratégia é conhecida como horizonte móvel. Uma visualização mais adequada desta está mostrada na Figura 3.1, adaptada de MANENTI (2011).

A Figura 3.2 mostra a integração de todas as etapas do procedimento para a simulação do controle da coluna.

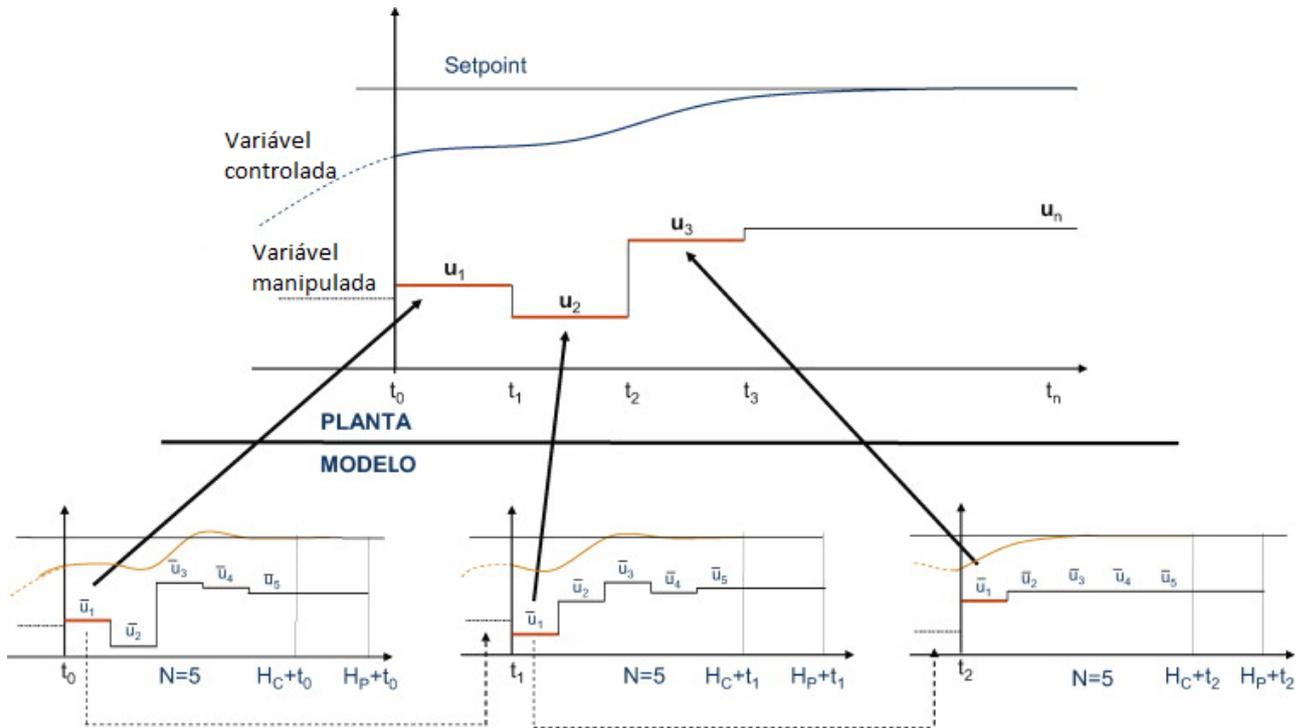


Figura 3.1: Esquema de janela móvel utilizado no controlador preditivo não linear.

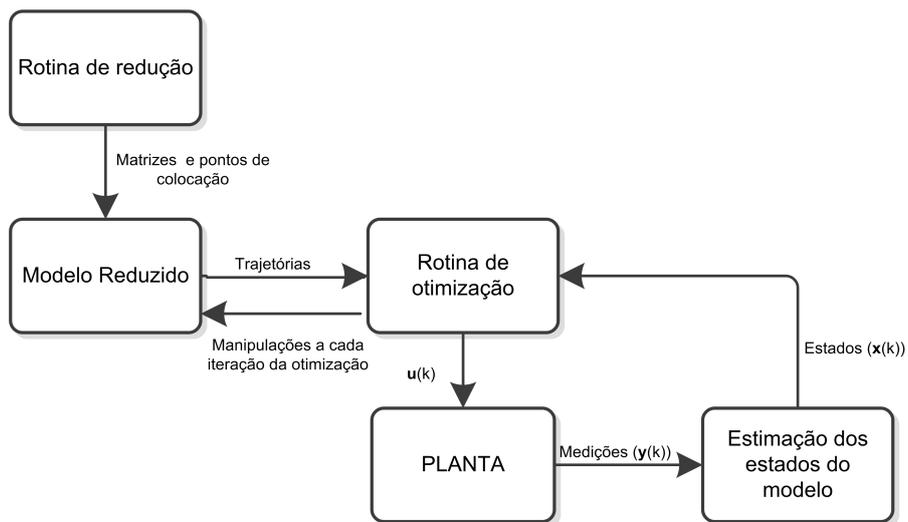


Figura 3.2: Fluxo de informações entre as diferentes rotinas numéricas.

### 3.5 Modelo simplificado utilizado nas simulações

Devido ao tempo necessário para os diversos testes para a validação do método e, posteriormente, para a sintonia dos controladores obtidos, optou-se por utilizar um modelo simplificado de uma coluna de destilação. Esse permitiu a avaliação da melhoria no tempo de processamento obtido através da redução e viabilizou a realização de vários testes que seriam demasiadamente longos ou inviáveis em um modelo mais rigoroso. As hipóteses para a formulação do modelo foram:

- Volatilidade relativa constante ao longo da coluna
- Vazões de líquido e de gás constantes ao longo de uma seção
- Mistura perfeita e binária
- Acúmulo constante e apenas de líquido em cada estágio
- Equilíbrio termodinâmico nos estágios
- Condensador total, sem sub-resfriamento

As equações que constituem o modelo são:

- Balanço no condensador:

$$M_0(t) \frac{dx_d(t)}{dt} = V_r[y_1(t) - x_0(t)] \quad (3.42)$$

- Balanço na seção de retificação (estágios de 1 a NR):

$$M_i \frac{dx_i}{dt} = L_r(t)[x_{i-1} - x_i] + V_r(t)[y_{i+1} - y_i] \quad (3.43)$$

- Estágio de Alimentação (K=NR+1):

$$M_K \frac{dx_K}{dt} = L_r(t)x_{K-1} + Fx_F + V_s(t)y_{K+1} - V_r(t)y_K(t) - L_s(t)x_K(t) \quad (3.44)$$

- Seção de esgotamento (NR+2 a N-1):

$$M_i \frac{dx_i}{dt} = L_s(t)[x_{i-1} - x_i] + V_s(t)[y_{i+1} - y_i] \quad (3.45)$$

- Por fim, balanço no refeedor:

$$M_N(t) \frac{dx_N}{dt} = L_s(t)[x_{N-1}(t) - x_N(t)] - V_s(t)[y_N(t) - x_N(t)] \quad (3.46)$$

- Aplicando o conceito de volatilidade relativa ( $\alpha$ ) e a equação da linha de alimentação (onde  $q$  é a condição de saturação da alimentação):

$$y_i(t) = \frac{\alpha x_i(t)}{1 + (\alpha - 1)x_i(t)} \quad (3.47)$$

$$V_r(t) = V_s(t) + (1 - q)F(t) \quad (3.48)$$

- Definição do refluxo:

$$R_f = \frac{L_r}{D} \quad (3.49)$$

- Relação entre o vapor recirculado pelo refeedor ( $V_s$ ) e vazão de vapor de água utilizado como fonte de energia. Nessa equação  $\lambda_{W_s}$  e  $\lambda_s$  são os calores latentes de vaporização do vapor e da mistura da coluna respectivamente:

$$V_s = \frac{\lambda_{W_s}}{\lambda_s} W_s \quad (3.50)$$

- Relação entre as vazões de líquido e a vazão de entrada na coluna:

$$L_s = L_r + qF \quad (3.51)$$

As simulações e as técnicas de redução foram aplicadas neste modelo.

# Capítulo 4

## Resultados e Discussões

### 4.1 Descrição, simulações e comparações entre os modelos utilizados

Para a obtenção do modelo reduzido foi necessário aplicar a técnica mostrada nas Seções 3.2 e 3.3 ao modelo completo mostrado na Seção 3.5. Aplicando as aproximações da técnica de colocação ortogonal, resultou no seguinte modelo:

- Balanço no condensador:

$$\frac{dx_0}{dt} = \frac{V_r(t)}{M_0(t)} \left[ \sum_{j=0}^{nr+1} \mathbf{A}_{0,j}^{+(ret)} y_j(t) - x_0 \right] \quad (4.1)$$

- Balanços da seção de retificação:

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{L_r(t)}{M_i} \left[ \sum_{j=0}^{nr+1} \mathbf{A}_{i,j}^{-(ret)} x_j(t) - x_i \right] + \frac{V_r(t)}{M_i} \left[ \sum_{j=0}^{nr+1} \mathbf{A}_{i,j}^{+(ret)} y_j(t) - y_i \right] \quad (4.2)$$

- Prato de alimentação:

$$\begin{aligned} \frac{dx_{nr+1}}{dt} = & \frac{L_r}{M_{nr+1}} \sum_{j=0}^{nr+1} \mathbf{A}_{i,j}^{-(ret)} x_j(t) + \frac{F}{M_{nr+1}} x_F(t) + \frac{V_s(t)}{M_{nr+1}} \sum_{j=nr+1}^n \mathbf{A}_{i,j}^{+(esg)} y_j \\ & - \frac{V_r(t)}{M_{nr+1}} y_{nr+1}(t) - \frac{L_s(t)}{M_{nr+1}} x_{nr+1}(t) \end{aligned} \quad (4.3)$$

- Seção de esgotamento:

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{L_s(t)}{M_i} \left[ \sum_{j=nr+1}^n \mathbf{A}_{i,j}^{-(esg)} x_j(t) - x_i \right] + \frac{V_s(t)}{M_i} \left[ \sum_{j=nr+1}^n \mathbf{A}_{i,j}^{+(esg)} y_j(t) - y_i \right] \quad (4.4)$$

- Refervedor:

$$\frac{dx_n}{dt} = \frac{L_s(t)}{M_n(t)} \left[ \sum_{j=nr+1}^n \mathbf{A}_{n,j}^{-(esg)} x_j(t) - x_n(t) \right] - \frac{V_s(t)}{M_n(t)} [y_n(t) - x_n(t)] \quad (4.5)$$

Os parâmetros  $nr$ ,  $k$  e  $n$  são, respectivamente, o número de estágios da seção de retificação, posição do prato de alimentação e número do estágio final. Na técnica de momentos, as equações do condensador, prato de alimentação e refervedor funcionam como condições de contorno, portanto, as interpolações mostradas nas equações 4.1, 4.5 e 4.3 foram utilizadas também no modelo reduzido pela técnica de momentos. Foi necessário, entretanto, desenvolver as equações para as seções de retificação e esgotamento. Substituindo as aproximações e utilizando as variáveis modificadas  $X$  e  $Y$ , resultou nas equações:

- Seção de retificação:

$$\frac{dX_i}{dt} = \frac{L_r(t)}{M_i} \left[ \sum_{j=0}^{nr+1} \mathbf{B}_{i,j}^{-(ret)} x_j(t) - X_i \right] + \frac{V_r(t)}{M_i} \left[ \sum_{j=0}^{nr+1} \mathbf{B}_{i,j}^{+(ret)} y_j(t) - Y_i \right] \quad (4.6)$$

- Seção de esgotamento:

$$\frac{dX_i}{dt} = \frac{L_s(t)}{M_i} \left[ \sum_{j=nr+1}^n \mathbf{B}_{i,j}^{-(esg)} x_j(t) - X_i \right] + \frac{V_s(t)}{M_i} \left[ \sum_{j=nr+1}^n \mathbf{B}_{i,j}^{+(esg)} y_j(t) - Y_i \right] \quad (4.7)$$

As variáveis modificadas  $X$  e  $Y$  se relacionam com as composições de líquido ( $x$ ) e vapor ( $y$ ) através das matrizes  $\mathbf{V}$ . Portanto, é possível escrever os vetores de variáveis como mostrado nas equações 4.8 e 4.9. Note que o valor de  $k$  (posição do prato de alimentação) coincide com o valor  $nr + 1$ .

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} X_0 \\ \vdots \\ X_i - V_{1,i}^{top} X_0 - V_{2,i}^{top} X_{nr+1} \\ \vdots \\ X_{nr+1} \\ \vdots \\ X_i - V_{1,i}^{esg} X_{nr+1} - V_{2,i}^{esg} X_n \\ \vdots \\ X_n \end{bmatrix} \quad (4.8)$$

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} y_0 \\ \vdots \\ y_i + V_{1,i}^{top} y_0 + V_{2,i}^{top} y_{nr+1} \\ \vdots \\ y_{nr+1} \\ \vdots \\ y_i + V_{1,i}^{esg} y_{nr+1} + V_{2,i}^{esg} y_n \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \quad (4.9)$$

As equações constitutivas 3.47 e 3.48 permanecem inalteradas nos modelos reduzidos, sendo uma vantagem das técnicas de resíduos ponderados. No modelo completo foram considerados 14 estágios na seção de retificação e 23 na seção de fundo, somando-se o condensador, refervedor e prato de alimentação, chega-se ao total de 40 estágios. Os modelos reduzidos foram simulados com 2 estágios na retificação e 3 na seção de fundo, totalizando oito estágios. A Tabela 4.1 sumariza os modelos utilizados.

Tabela 4.1: Número de estágios por seção dos modelos empregados

| Modelo              | Número de estágios | Retificação | Esgotamento |
|---------------------|--------------------|-------------|-------------|
| Completo            | 40                 | 14          | 23          |
| Colocação ortogonal | 8                  | 2           | 3           |
| Momentos            | 8                  | 2           | 3           |

Os parâmetros e variáveis dos modelos estão mostrados na Tabela 4.2.

Tabela 4.2: Valores e descrição dos parâmetros e variáveis do modelo da coluna de destilação

| Símbolo                           | Valor      | Unidade |
|-----------------------------------|------------|---------|
| $M_0$                             | 90,7       | kmol    |
| $M_N$                             | 90,7       | kmol    |
| $M$                               | 204,1      | kmol    |
| $q$                               | 1          | -       |
| $F$                               | 1587       | kmol/h  |
| $D$                               | 871        | kmol/h  |
| $x_f$                             | 0.4        | -       |
| $\alpha$                          | 1.55       | -       |
| $x_i$                             | calculadas | -       |
| $y_i$                             | calculadas | -       |
| $L_r$                             | calculada  | kmol/h  |
| $V_r$                             | calculada  | kmol/h  |
| $L_s$                             | calculada  | kmol/h  |
| $V_s$                             | calculada  | kmol/h  |
| $R_f$                             | manipulada | kmol/h  |
| $W_s$                             | manipulada | kg/h    |
| $\frac{\lambda_{W_s}}{\lambda_s}$ | 0.0687     | -       |

O cálculo da matriz jacobiana analítica desses sistemas está no Apêndice A. As Figuras 4.1 e 4.2 mostram uma simulação dinâmica das composições de topo ( $x_0$ ) e de fundo ( $x_n$ ), que foram as variáveis controladas na estratégia de controle.

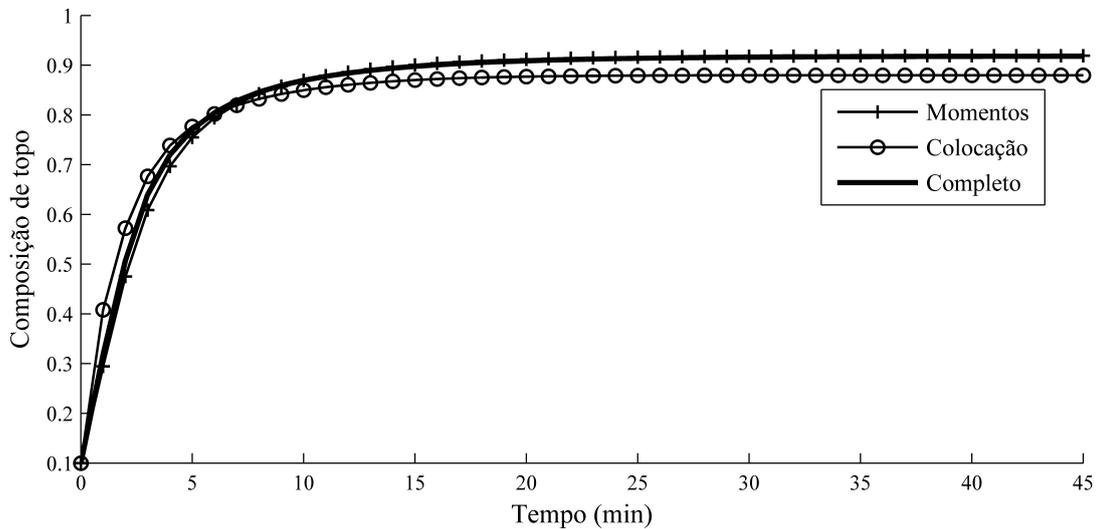


Figura 4.1: Evolução temporal da composição de topo diante de um estado inicial não estacionário.

Analisando o comportamento dinâmico desses estados, percebe-se que o modelo reduzido utilizando a técnica de momentos possui um comportamento mais próximo ao do modelo completo com quarenta estágios. O melhor desempenho da técnica de

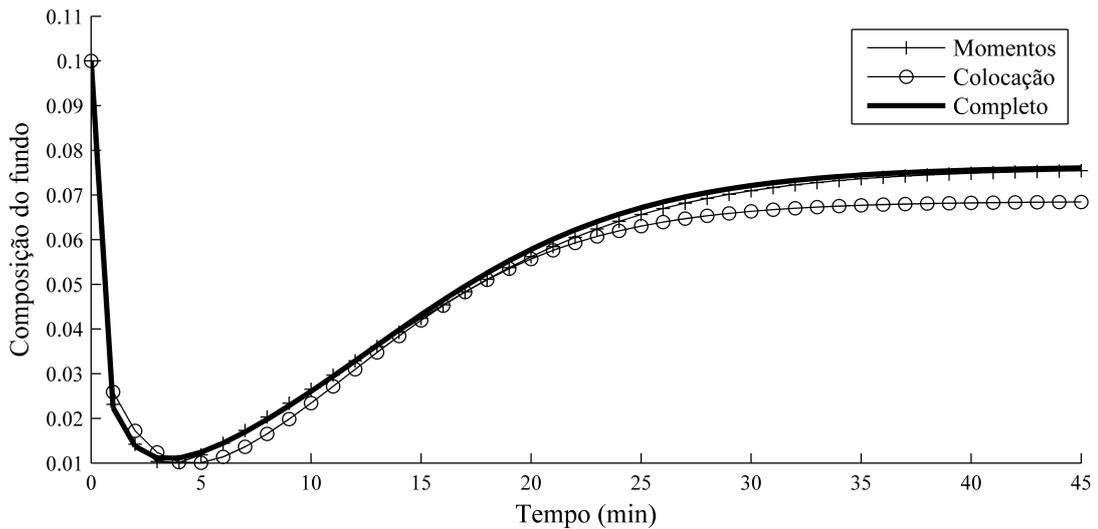


Figura 4.2: Evolução temporal da composição de fundo diante de um estado inicial não estacionário.

momentos é acentuado no estado estacionário, em que esse modelo apresenta um erro consideravelmente menor quando comparado à técnica usual baseada em colocação ortogonal. Para uma confirmação do melhor desempenho no estado estacionário, os perfis das colunas reduzidas no estado estacionário foram comparados ao da coluna completa. Percebe-se que o método dos momentos reproduz, de maneira bastante satisfatória, o perfil da coluna, como visto na Figura 4.3. Na Tabela 4.3 estão mostrados os erros percentuais entre o modelo completo e as técnicas de momentos e colocação ortogonal para os pratos de topo, fundo e alimentação.

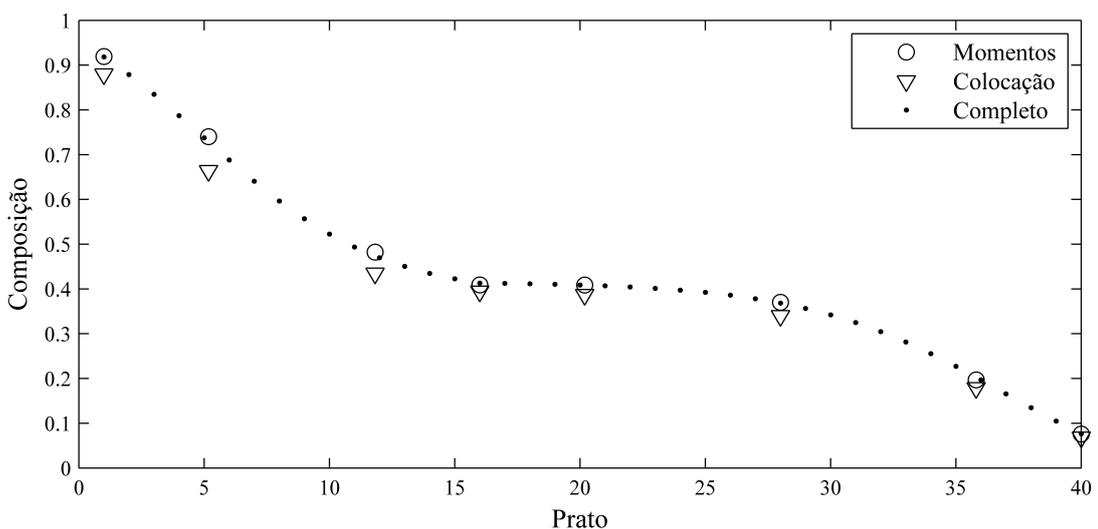


Figura 4.3: Variação do perfil de composição ao longo da coluna.

Nota-se, através da análise das equações dos modelos reduzidos, que o estado de cada equação depende dos estados presentes naquela seção. Por exemplo, o estado do estágio dois depende das composições dos estágios da seção de retificação, con-

Tabela 4.3: Erro relativo percentual dos métodos de redução

| Técnica             | Erro topo (%) | Erro fundo (%) | Erro alimentação (%) |
|---------------------|---------------|----------------|----------------------|
| Momentos            | 0,103         | 0,771          | 1,01                 |
| Colocação ortogonal | 4,208         | 10,359         | 4,500                |

densador e do prato de alimentação, sendo os dois últimos as condições de contorno daquela seção (o prato de alimentação e o refeedor são as condições de contorno da seção de fundo). Essa dependência faz com que a matriz jacobiana do sistema reduzido seja mais densa que a do modelo completo, no qual a composição de um estágio depende imediatamente apenas do estágio superior e inferior. O perfil de esparsidade dessas matrizes é visto na Figura 4.4.

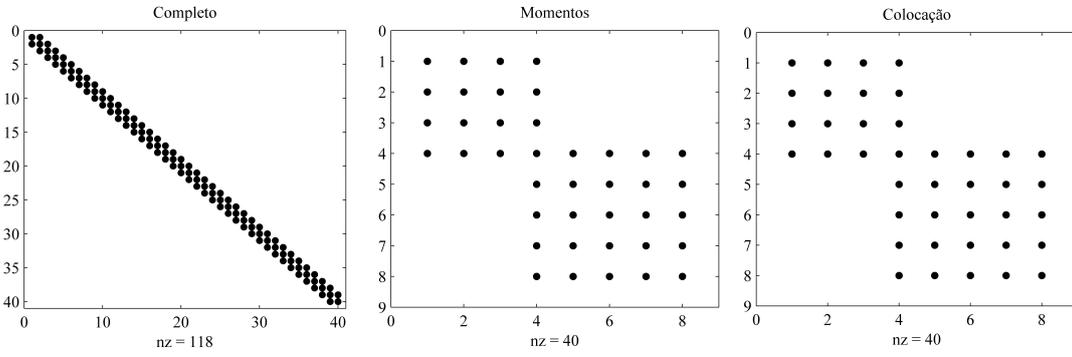


Figura 4.4: Perfil de esparsidade das matrizes jacobianas dos modelos.

Essa não esparsidade do modelo reduzido pode ser interpretada como um estágio teórico que influenciaria todos os estágios da seção na qual o mesmo está presente. Por exemplo, caso se suponha uma seção com três estágios, cada um dos três estágios estaria em contato com toda a seção, enquanto em uma coluna completa apenas o estágio central estaria em contato com os outros dois estágios, conforme esboçado na Figura 4.5.

## 4.2 Comparação entre as estratégias para estimação de estados utilizando modelos reduzidos

O monitoramento de colunas de destilação, dado o grande número de estados, é sempre uma tarefa difícil. Como a limitação de custo e, algumas vezes, de tecnologia impede o monitoramento de temperaturas e composições de todos os estágios em tempo real, o uso de sensores virtuais para uma estimativa do estado da coluna pode

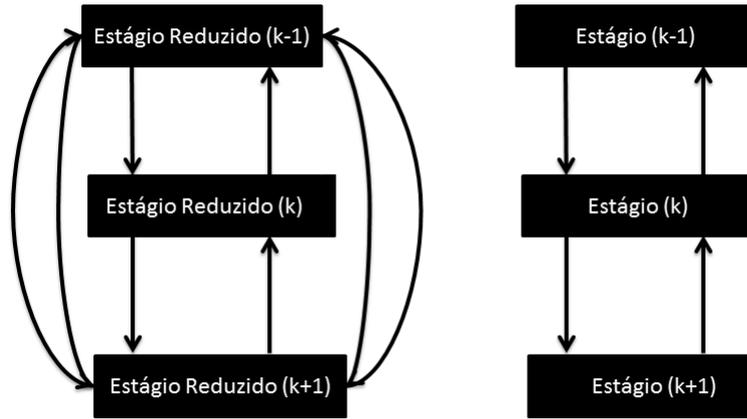


Figura 4.5: Representação esquemática da redução de ordem.

ser empregada. Nos casos em que a medição de interesse está disponível, a utilização de filtros é muitas vezes necessária para atenuar ruídos presentes nas medidas.

Como mencionado na revisão bibliográfica, existem diferentes maneiras de estimar o estado de um sistema, uma conveniente, rápida e eficiente é a utilização de técnicas baseadas em filtros. Nesta seção, os estimadores CEKF, EKF e UKF foram empregados na estimativa dos estados de uma coluna de destilação para o monitoramento das composições de topo e fundo. Os estimadores foram analisados em diferentes condições, os filtros com o melhor desempenho foram utilizados em uma estratégia de controle não linear baseada em realimentação de estados na próxima seção. O desempenho dos modelos reduzidos foi comparado com um estimador projetado em uma situação nominal hipotética.

As estimações foram realizadas considerando que a única variável medida foi o estado do topo da coluna, os outros estados foram estimados pelos filtros diante de diferentes condições de ruído. Analisou-se o comportamento qualitativo do sistema através de gráficos e quantitativo utilizando alguns índices, como a integral absoluta do erro (IAE) e o tempo de processamento. Por fim, avaliou-se como a observabilidade dos sistemas linearizados (utilizados nos filtros de Kalman estendidos) se comportou em cada instante de amostragem para os três modelos. Todas as simulações foram efetuadas utilizando uma máquina com processador *intel core i5* com 2,53 GHz e 4 GB de memória RAM.

A planta foi simulada utilizando o modelo completo com quarenta estágios e a medida da composição de topo foi corrompida com ruído proveniente de uma distribuição normal com média zero e desvio padrão de 1% do valor nominal. Na Figura 4.6 é mostrado o histograma do ruído adicionado às medidas durante 200 simulações.

A matriz  $\mathbf{R}$ , que nesse caso de uma única medida é um escalar, foi colocada

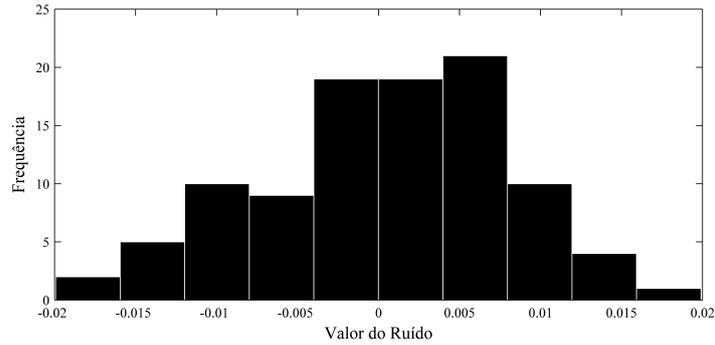


Figura 4.6: Ruído adicionado às medidas da composição de topo.

como o valor da variância das medidas. Para a matriz  $\mathbf{Q}$  foi atribuída uma diagonal preenchida com os valores dos estados no estado estacionário multiplicado por  $10^{-6}$ , o mesmo foi feito para a estimativa inicial da matriz de covariância ( $\mathbf{P}_0$ ), multiplicando os valores de estado estacionário por  $10^{-3}$ . Esses valores foram obtidos através de diversas simulações dinâmicas, até se conseguir uma sintonia satisfatória.

Os resultados da filtragem mostraram que os modelos reduzidos podem diminuir bastante o tempo computacional para a estimativa do estado. No caso dos filtros baseados na linearização do sistema ao longo da trajetória (CEKF e EKF), a redução foi menor, devido ao menor custo computacional do algoritmo, no qual o modelo não linear não precisa ser avaliado muitas vezes. Os fatores de redução foram em torno de 2,5 para o tempo médio nos algoritmos EKF e CEKF. No caso do algoritmo UKF o fator de redução foi maior, em média 7 para o método dos momentos e 10 para o método da colocação ortogonal. No quesito tempo máximo, muito importante para sistemas aplicados em tempo real, o fator de redução foi ainda maior no método UKF chegando a 12 e 9 para os métodos da colocação e momentos, respectivamente. Os resultados dos tempos médios e máximos para os algoritmos e modelos estão dispostos nas Tabelas 4.4 e 4.5, calculados utilizando uma média de 100 simulações. O tempo maior do filtro UKF se deve à maior complexidade do algoritmo, sendo necessária a integração das equações não lineares, nesse caso os modelos reduzidos conseguiram uma redução mais significativa.

Tabela 4.4: Tempo médio de processamento (segundos)

| Modelo Utilizado    | EKF   | CEKF  | UKF   |
|---------------------|-------|-------|-------|
| Momentos            | 0,028 | 0,037 | 0,427 |
| Colocação ortogonal | 0,021 | 0,034 | 0,308 |
| Nominal             | 0,068 | 0,105 | 3,210 |

Como mostrado, as duas técnicas de redução proporcionaram uma redução considerável no tempo de processamento. Entretanto a qualidade da estimativa das composições foi maior ao se utilizar o método dos momentos. Na Figura 4.7, nota-se

Tabela 4.5: Tempo máximo de processamento (segundos)

| Modelo Utilizado    | EKF   | CEKF  | UKF   |
|---------------------|-------|-------|-------|
| Momentos            | 0,094 | 0,468 | 0,562 |
| Colocação ortogonal | 0,078 | 0,468 | 0,421 |
| Nominal             | 0,156 | 0,889 | 5,250 |

que o filtro utilizando a técnica de colocação apresentou um erro de estado estacionário considerável quando comparado ao valor esperado para o estado. As sintonias dos filtros foram satisfatórias atenuando os ruídos das medidas. O modelo baseado em momentos praticamente permaneceu sem erro de estado estacionário e conseguiu acompanhar bem tanto a dinâmica do topo da coluna (Figura 4.7) como a dinâmica do fundo (Figura 4.8), que foi estimada a partir das medidas do topo. O filtro CEKF teve a mesma solução que o filtro EKF, pois nessas simulações as restrições impostas às composições (variar entre 0 e 1) não foram violadas.

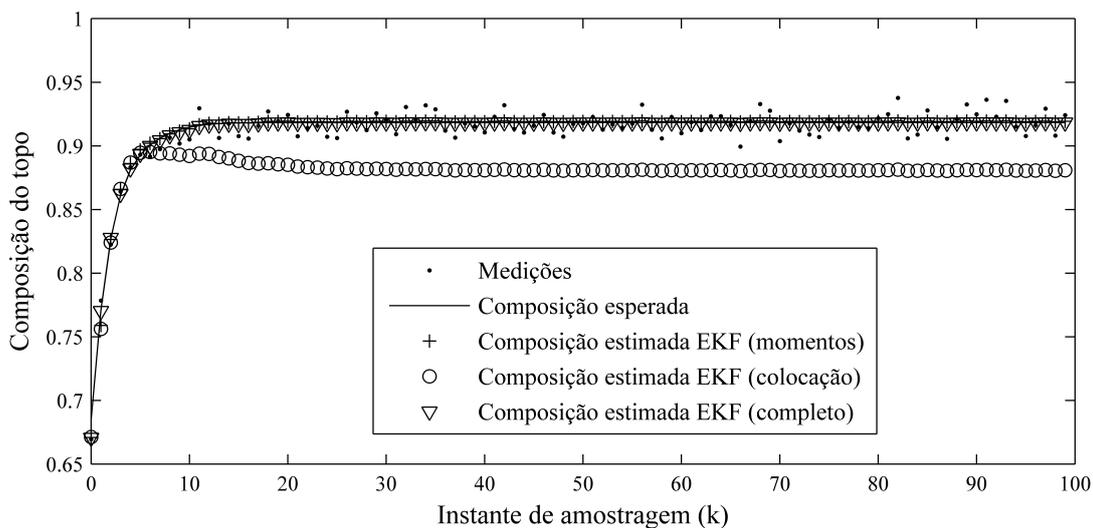


Figura 4.7: Comparação entre diferentes tipos de modelos para a filtragem da composição de topo da coluna.

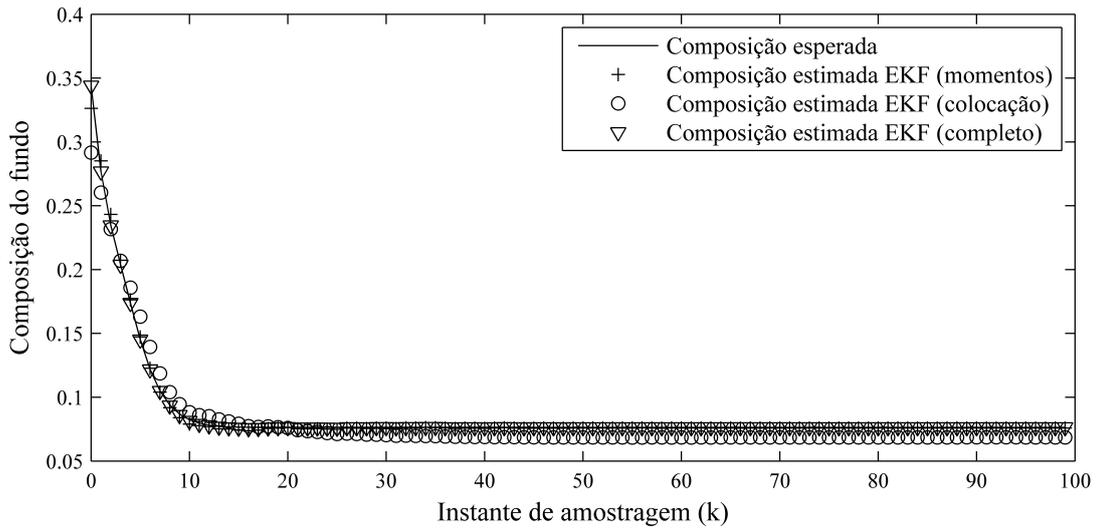


Figura 4.8: Comparação entre diferentes tipos de modelos para a estimativa da composição de fundo da coluna.

Os filtros UKF tiveram um desempenho abaixo dos filtros de Kalman convencionais, demorando mais para que seus valores convergissem para o valor correto. Em algumas situações, onde a incerteza do modelo era acentuada (como no caso da estimativa da composição do fundo com o modelo baseado na colocação ortogonal, por exemplo), o UKF teve um desempenho melhor, como pode ser verificado através do índice IAE. A filtragem da composição de topo e de fundo utilizando o filtro UKF estão mostradas nas Figuras 4.9 e 4.10.

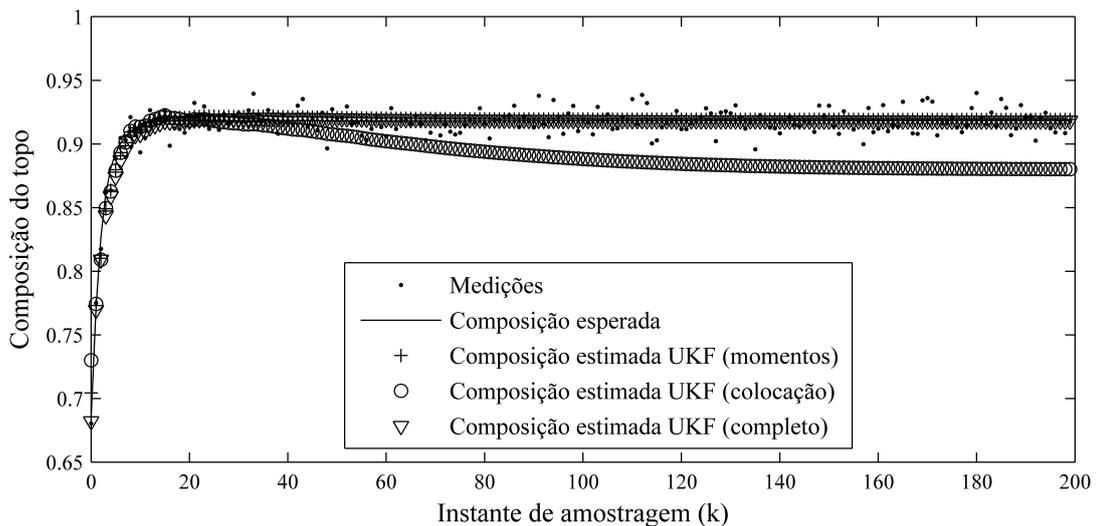


Figura 4.9: Comparação entre diferentes tipos de modelos para a filtragem da composição de topo da coluna utilizando o UKF.

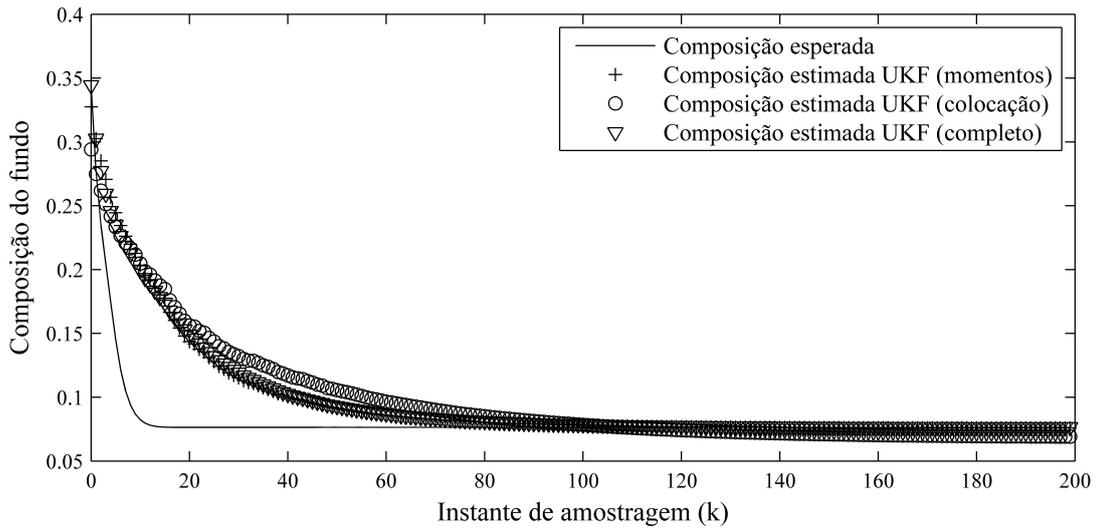


Figura 4.10: Comparação entre diferentes tipos de modelos para a estimação da composição de fundo da coluna utilizando o UKF.

Os valores do somatório do erro absoluto ao longo das simulações confirmam a superioridade da técnica de momentos quando comparada à colocação ortogonal. Tais valores estão exibidos para os estágios de alimentação, fundo e topo nas Tabelas 4.6, 4.7 e 4.8.

Tabela 4.6: Somatório do erro absoluto para a composição de topo

| Modelo Utilizado    | EKF   | CEKF  | UKF   |
|---------------------|-------|-------|-------|
| Momentos            | 0,208 | 0,201 | 5,175 |
| Colocação ortogonal | 1,539 | 1,516 | 7,162 |
| Nominal             | 0,014 | 0,014 | 6,695 |

Tabela 4.7: Somatório do erro absoluto para a composição de fundo

| Modelo Utilizado    | EKF   | CEKF  | UKF   |
|---------------------|-------|-------|-------|
| Momentos            | 0,224 | 0,232 | 0,580 |
| Colocação ortogonal | 6,746 | 6,788 | 2,805 |
| Nominal             | 0,069 | 0,062 | 0,391 |

Tabela 4.8: Somatório do erro absoluto para a composição do prato de alimentação

| Modelo Utilizado    | EKF   | CEKF  | UKF   |
|---------------------|-------|-------|-------|
| Momentos            | 0,928 | 0,901 | 1,723 |
| Colocação ortogonal | 3,566 | 3,512 | 3,561 |
| Nominal             | 0,012 | 0,011 | 0,731 |

O desempenho aquém do esperado do filtro UKF, deveu-se ao cenário das simulações, onde o ruído é proveniente de uma distribuição gaussiana e o modelo utilizado não possui não linearidades acentuadas, de maneira que o modelo linearizado em torno de cada um dos pontos do tempo de amostragem é satisfatório. A Figura 4.11 mostra as situações onde os filtros de Kalman clássicos tem o desempenho afetado. No lado esquerdo da figura é mostrado que o aumento do custo computacional é compensado pela melhora na acurácia da estimativa quando se utiliza um modelo não linear com medidas não gaussianas. O inverso não acontece, como mostrado do lado direito.

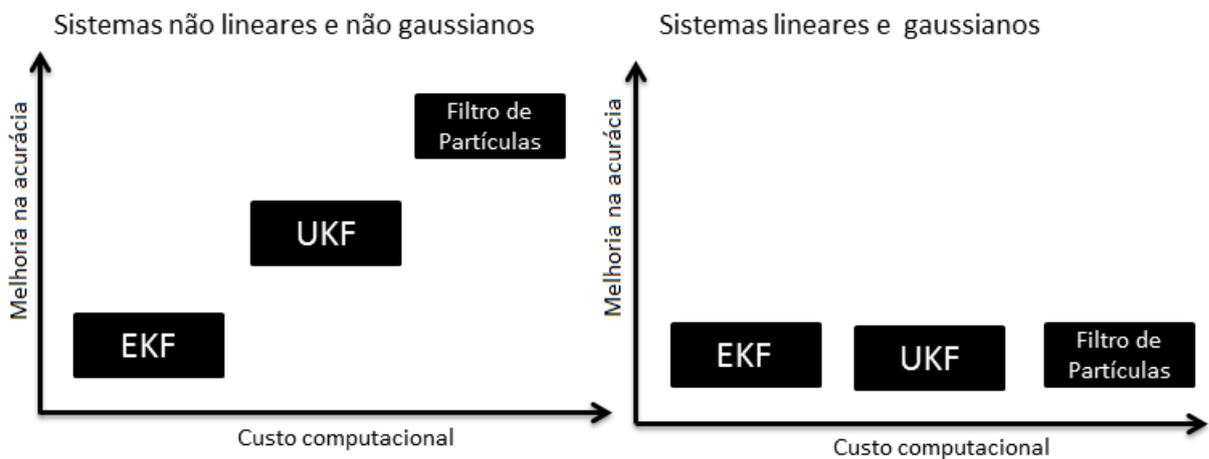


Figura 4.11: Vantagens e desvantagens dos estimadores de estado (adaptado de SIMON (2006)).

Em seguida, situações não ideais para avaliar os estimadores foram investigadas. Nesse caso, dois cenários foram simulados, o primeiro está relacionado à incerteza nas medidas e o segundo à incerteza que existe entre o modelo e a planta (mostrado na Subsecção 4.2.1).

No primeiro cenário, o ruído das medidas foi elevado para 5% e a sintonia dos filtros não foi alterada, apenas o valor relacionado à nova variância foi inserido na matriz  $\mathbf{R}$ . A Figura 4.12 mostra o resultado para a filtragem das novas medidas, mais ruidosas, revelando que o filtro de Kalman continuou com um bom resultado diante da elevação do nível do ruído. Novamente o filtro utilizando o modelo reduzido por momentos teve um desempenho melhor que o modelo utilizando a técnica de colocação ortogonal, na filtragem e também na estimação como visto na Figura 4.13 para a estimação da composição de fundo. Os resultados dos estimadores de Kalman estão exibidos para o filtro CEKF que teve um resultado idêntico ao EKF. Os resultados para o filtro UKF estão mostrados nas Figuras 4.14 e 4.15, nas quais, novamente, nota-se que o desempenho do filtro de Kalman convencional foi superior. Porém, a diferença de desempenho foi menor, principalmente na filtragem da

composição de topo. A estimativa da composição do fundo, novamente, apresentou um elevado tempo para a convergência.

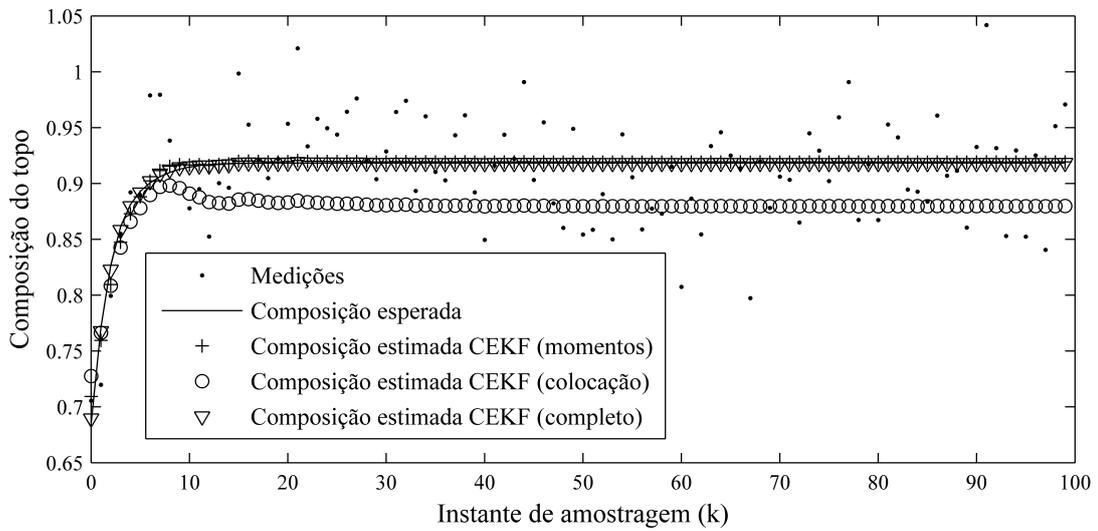


Figura 4.12: Comparação entre diferentes tipos de modelos para a filtragem da composição de topo da coluna utilizando o CEKF.

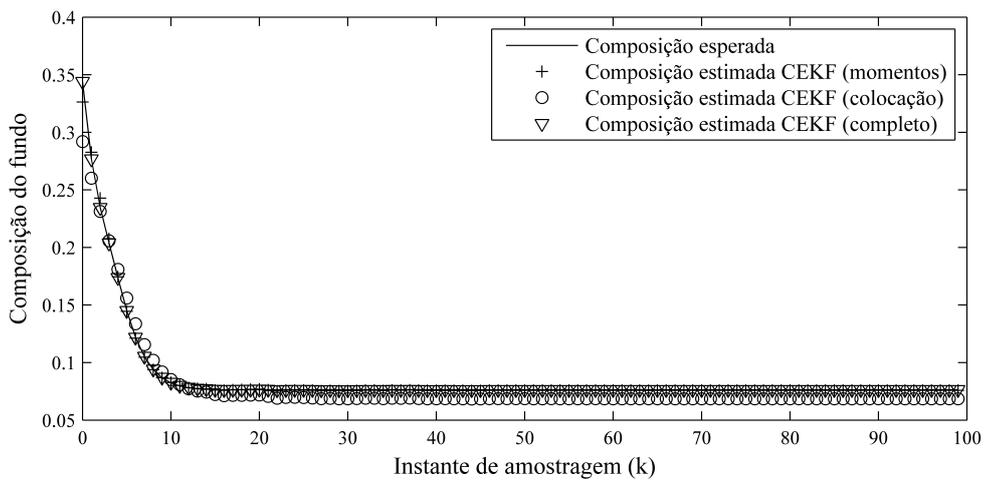


Figura 4.13: Comparação entre diferentes tipos de modelos para a estimativa da composição de fundo da coluna utilizando o CEKF.

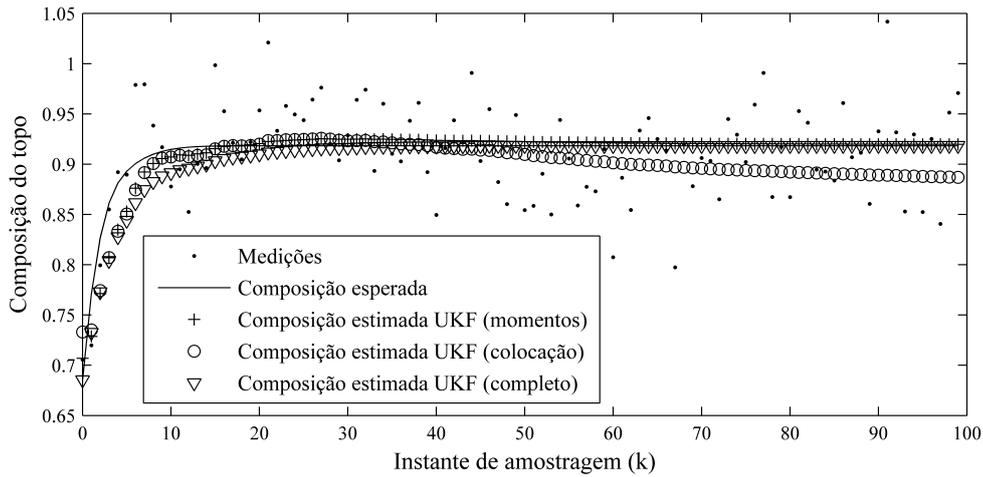


Figura 4.14: Comparação entre diferentes tipos de modelos para a filtragem da composição de topo da coluna utilizando o UKF.

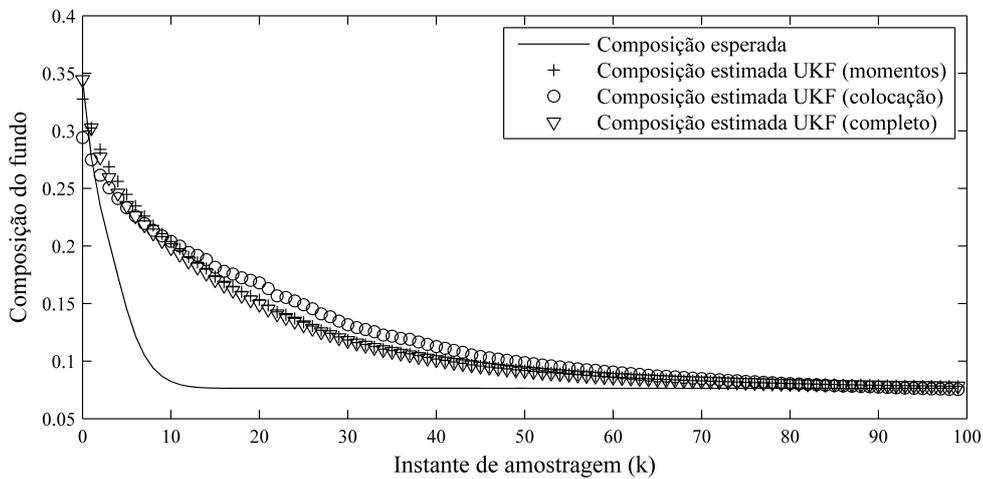


Figura 4.15: Comparação entre diferentes tipos de modelos para a estimativa da composição de fundo da coluna utilizando o UKF.

### 4.2.1 Estimação conjunta de parâmetros e estados com o CEKF

Nesta seção foi realizada a estimativa de parâmetros e estados de maneira conjunta, utilizando o filtro de Kalman clássico, que obteve um resultado superior ao UKF, em sua versão com restrições.

Em um primeiro momento, considerou-se que a composição de entrada ( $x_F$ ) do modelo igual a 0,4 e, no instante de amostragem  $k = 150$ , elevou-se esse valor em 10%. Em situações reais, esse valor raramente é constante dependendo da condição da carga, entretanto, nas estimativas apresentadas anteriormente, tal valor é apenas um parâmetro fixo do modelo.

Os resultados mostrados na Figura 4.16 revelam que, com a atual sintonia, não é possível uma boa estimativa ou filtragem das composições de topo e de fundo.

Isso se deve ao baixo valor da diagonal da matriz  $\mathbf{Q}$  (que representa a confiança no modelo) não permitir uma estimativa adequada da composição.

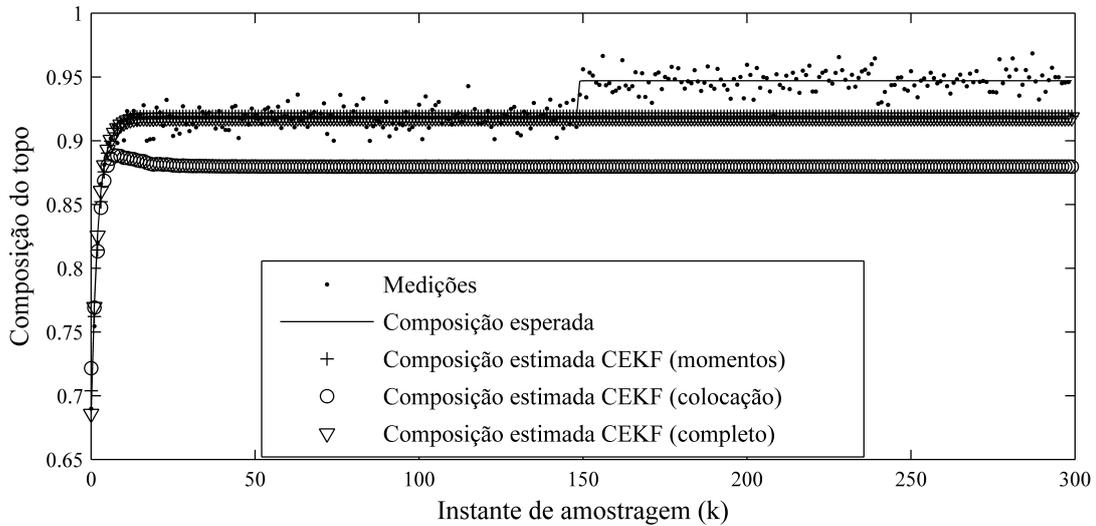


Figura 4.16: Filtragem da composição de topo diante de uma mudança na composição de alimentação.

Portanto, a incerteza inserida pela composição da corrente de entrada faz com que o filtro não consiga acompanhar o valor verdadeiro. Uma maneira de verificar o quanto as medidas estão influenciando a estimativa da composição é a variável definida como inovação (SIMON (2006)):

$$r_k = y_k - H_k \hat{x}_k^- \quad (4.10)$$

Quanto maior a inovação mais se permite que o estado estimado seja afetado pelas medições. Um valor baixo da inovação significa que a contribuição do modelo para a estimativa do estado é predominante. Nas estimativas anteriores foi utilizada uma alta confiança nos modelos para que fosse possível uma comparação entre os mesmos. Entretanto, essa sintonia não pode ser mantida quando existir uma incerteza grande no modelo. Nesse caso, uma influência maior das medidas é desejável. Diminuiu-se, então, a confiança dada ao modelo, permitindo uma maior influência das medidas. Porém, como pode ser verificado na Figura 4.17, o resultado não foi satisfatório e o modelo continuou sem conseguir estimar corretamente, por exemplo, a composição do fundo (Figura 4.18) e ainda não conseguiu filtrar o ruído da composição do topo. Deve-se observar que existe um compromisso entre a redução do ruído provocada pelo filtro e a estimativa próxima ao estado real. À medida que a estimativa é afetada pelas medições, a estimativa do estado fica mais ruidosa, se as medições forem corrompidas.

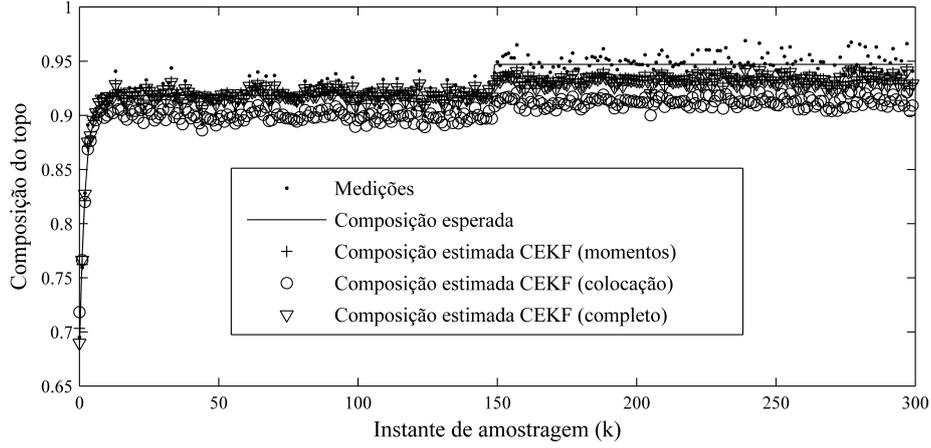


Figura 4.17: Filtragem da composição de topo diante de uma mudança na composição de alimentação, após mudar a sintonia para uma confiança maior nas medições.

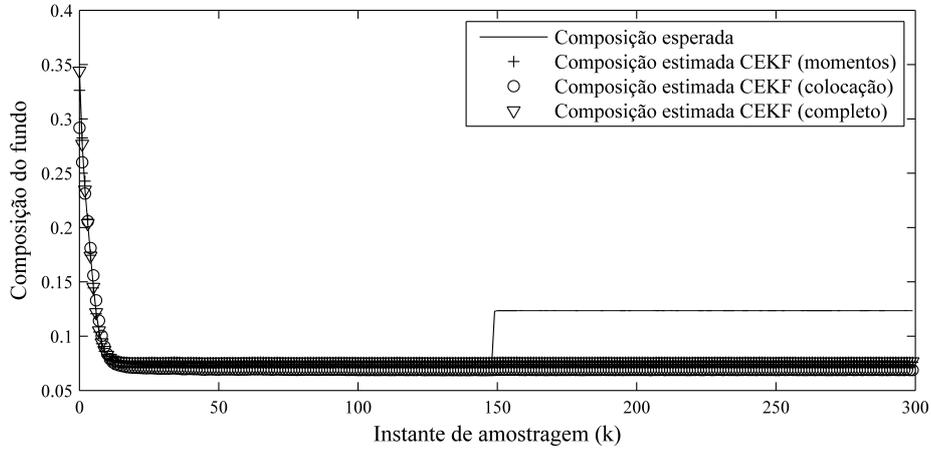


Figura 4.18: Filtragem da composição de fundo diante de uma mudança na composição de alimentação após mudar a sintonia para uma confiança maior nas medições.

Outra abordagem para solucionar esse problema é incluir a composição da corrente de entrada da torre como um parâmetro adicional a ser estimado pelo filtro. Nesse caso, a composição de entrada deve ser um estado artificial do modelo, levando ao modelo estendido discreto:

$$\begin{bmatrix} \hat{\mathbf{x}}_{k+1}^+ \\ \hat{\theta}_{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_k & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{x}}_k^+ \\ \hat{\theta}_k \end{bmatrix} \quad (4.11)$$

Em que o valor de  $\hat{\theta}_k$  representa o parâmetro a ser estimado que é, neste caso, o valor de  $x_F$ . Note que, na equação 4.11, foi adotada a hipótese do parâmetro apresentar uma dinâmica desprezível, em comparação com a dinâmica dos estados. Essa consideração permite estimar seu valor sem efetuar a etapa de predição. Outro fato que deve ser observado é que a incerteza entre a planta e o modelo será atribuída

a esse parâmetro, podendo o mesmo convergir para um valor diferente do valor real. Por exemplo, como mostrado anteriormente, o modelo baseado em colocação ortogonal não coincide no estado estacionário com o modelo completo, nesse caso, ambos os modelos possuíam o mesmo parâmetro  $x_F$  e essa incerteza foi obtida devido ao processo de redução. Entretanto, no cenário atual, essa incerteza será atribuída a  $x_F$  e obviamente o valor que o parâmetro do modelo de colocação ortogonal converge é diferente do valor da planta.

A Figura 4.19 mostra o resultado da estimativa de  $x_F$  para os diferentes modelos, utilizando como única variável medida a composição de topo da coluna. Os valores estimados utilizando o modelo de momentos e completo se aproximam mais da composição real devido à menor incerteza entre o modelo e a planta. O modelo de colocação ortogonal atribui a  $x_F$  a incerteza do processo de redução, levando a um valor irreal dessa composição. O resultado da adição desse estado artificial é a melhoria sensível da estimação dos estados, como visto nas Figuras 4.20 e 4.21 para a composição de topo e fundo. O filtro de Kalman, neste cenário, acompanhou o valor verdadeiro, a exceção foi a composição de fundo estimada com o modelo de colocação que continuou com erro de estado estacionário.

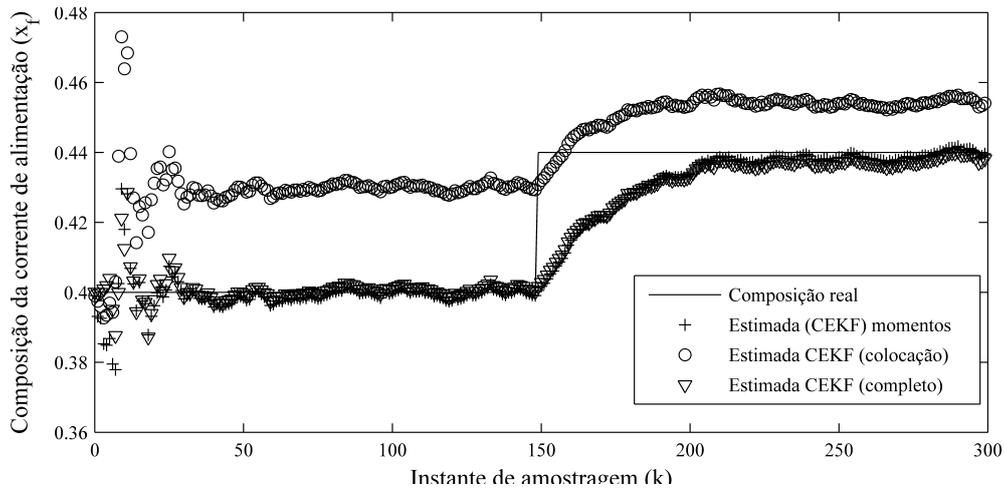


Figura 4.19: Estimativa da composição da corrente de alimentação utilizando o CEKF.

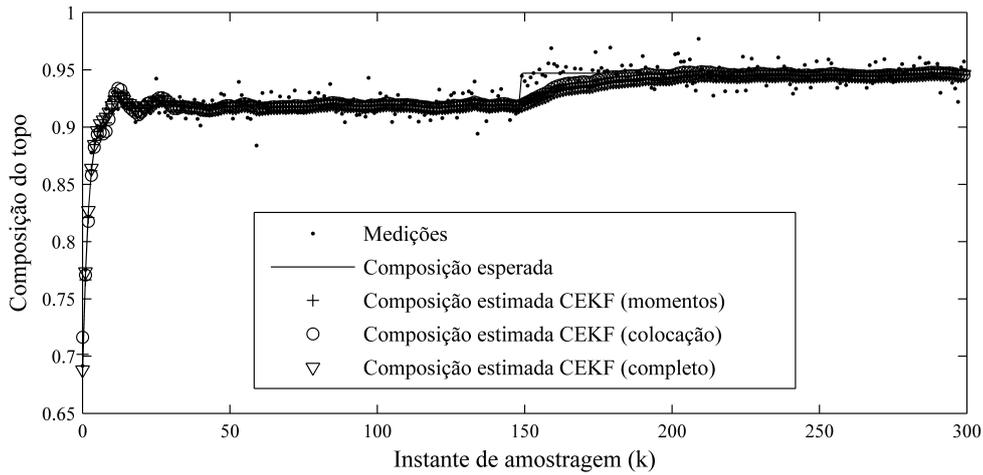


Figura 4.20: Estimativa da composição de topo com atualização do valor da composição da corrente de alimentação.

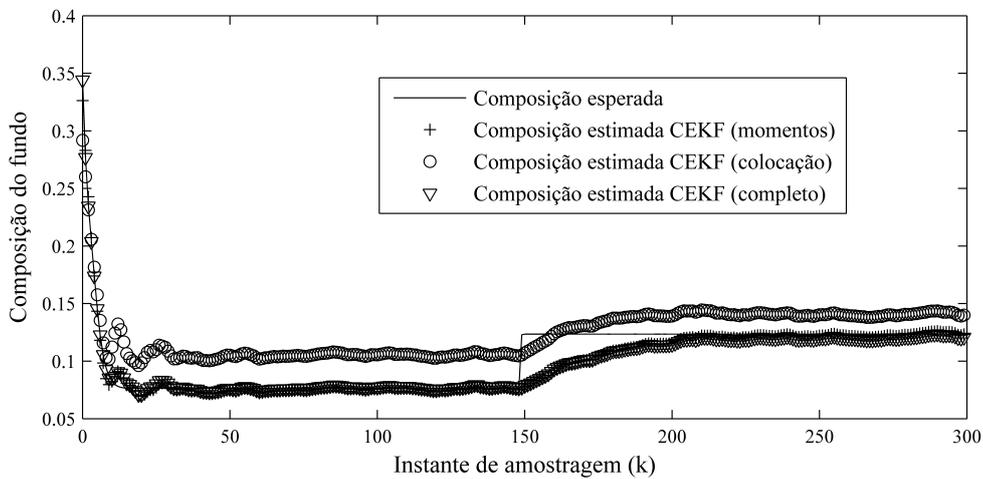


Figura 4.21: Estimativa da composição de fundo com a atualização do valor da composição da corrente de alimentação.

## 4.2.2 Avaliação da observabilidade dos modelos utilizados nos estimadores

Um sistema discreto é definido como observável se, para qualquer estado inicial  $x_0$  e instante de tempo final  $k$ , o estado inicial pode ser unicamente determinado pelo conhecimento do sinal de entrada e das medidas no intervalo  $i \in [0, k]$  (SIMON, 2006).

Existem diversas maneiras de testar a observabilidade de sistemas, sendo a maioria delas desenvolvidas para os lineares. Um dos critérios mais práticos é a verificação do posto da matriz de observabilidade (4.12), com o qual é possível provar que se o sistema for observável o posto da matriz de observabilidade é igual ao número de

estados do sistema.

$$\Psi = \begin{bmatrix} \mathbf{H} \\ \mathbf{HF} \\ \vdots \\ \mathbf{HF}^{n-1} \end{bmatrix} \quad (4.12)$$

Neste trabalho o posto das matrizes de observabilidade foi acompanhado em cada iteração das estimativas do filtro de Kalman. Os resultados estão mostrados na Figura 4.22 para os instantes  $k \in [0 \ 100]$ .

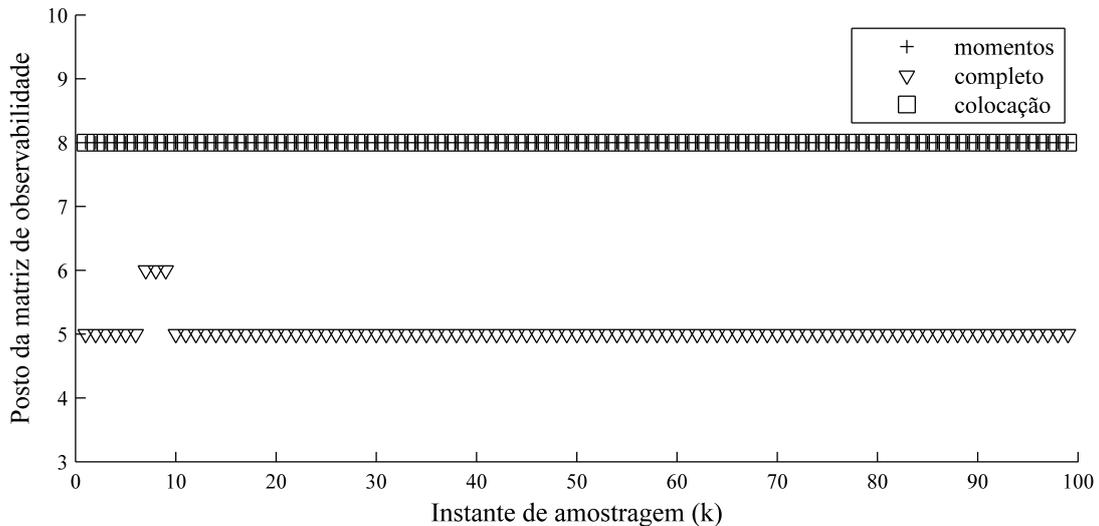


Figura 4.22: Variação do posto da matriz de observabilidade.

Essa figura é um importante resultado para a estimação dos estados, pois revela que o modelo reduzido tem todos os seus estados observáveis, mesmo com uma única medida, enquanto que o modelo completo tem um posto muito menor que o total dos seus estágios. O sistema em questão teve os estados estimados por ser detectável. Um sistema é detectável se ele é observável ou estável, ou se os modos não observáveis são estáveis. Como, neste caso, todos os estados do sistema são estáveis em malha aberta (ver seção 4.4), o sistema é detectável.

O fato de modelos de grande dimensão, em especial colunas de destilação, terem uma observabilidade piorada foi mencionado em SINGH e HAHN (2005), em que foi mostrado que sistemas de grande dimensão em geral podem ser muito sensíveis ao ruído e ter estados não observáveis ou muito perto da não observabilidade. Nesse artigo os autores mostraram que modelos lineares do sistema têm uma observabilidade melhor que os modelos completos de grande dimensão, os autores estudaram uma coluna de trinta estágios.

No presente trabalho, é mostrado que os modelos reduzidos baseados em técnicas de resíduo ponderado, além de preservar as não linearidades do sistema, são ob-

serváveis diante de poucas medições. Tal fato pode abrir uma série de possibilidades para o monitoramento de colunas, pois o uso desse tipo de modelo pode reduzir o número de medidas necessárias para monitorar e para utilizar controladores preditivos com realimentação de estados.

Adicionando-se um estado artificial para estimar a composição da corrente de entrada, o modelo reduzido passou a ter 9 estados, logo, o posto da sua matriz de observabilidade, para total observabilidade, teria que ser aumentado em um e o valor do posto da matriz de observabilidade do modelo completo teria que ser igual a 41. Os resultados da Figura 4.23 mostram que o posto do modelo reduzido oscila entre 8 e 9. O modelo completo permaneceu com uma observabilidade ruim, oscilando entre 5 e 6. Por fim é mostrado na Figura 4.24, que a adição de mais uma medida torna o modelo reduzido completamente observável enquanto o modelo completo continua parcialmente observável.

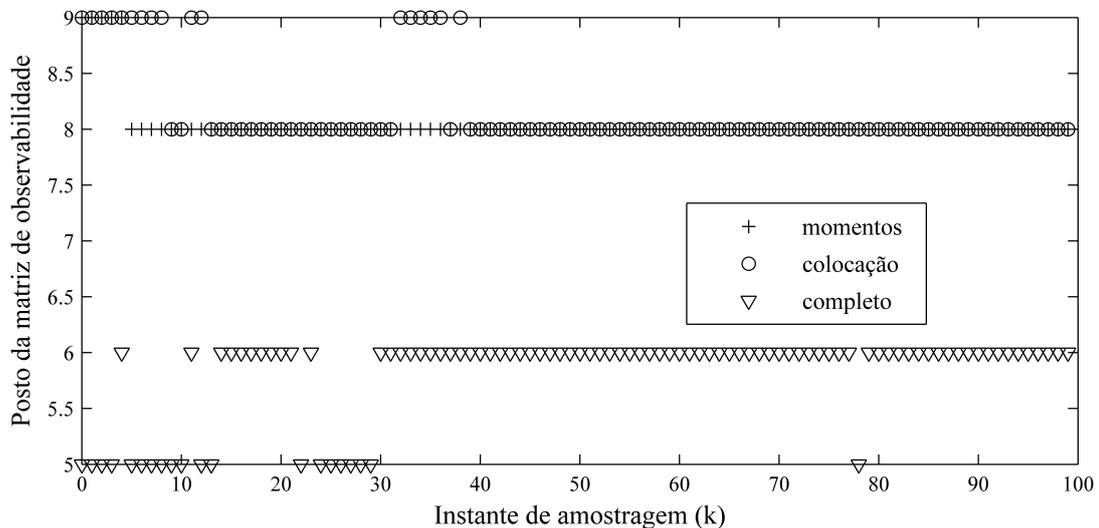


Figura 4.23: Variação do posto da matriz de observabilidade do sistema aumentado utilizando a medição da composição de topo.

### 4.3 Controle preditivo utilizando modelos reduzidos

À medida que a capacidade de processamento computacional avança, técnicas de controle que tem um alto custo computacional se tornam mais atrativas. Entretanto, para modelos de elevada dimensão, essa realidade ainda é pouco comum, sendo os controladores industriais em sua maioria lineares.

O emprego de técnicas de controle não lineares deve ser justificado através de uma melhoria no controle da qualidade do produto ou economia na energia gasta para a operação da coluna. Portanto, o primeiro ponto dessa seção foi a comparação de

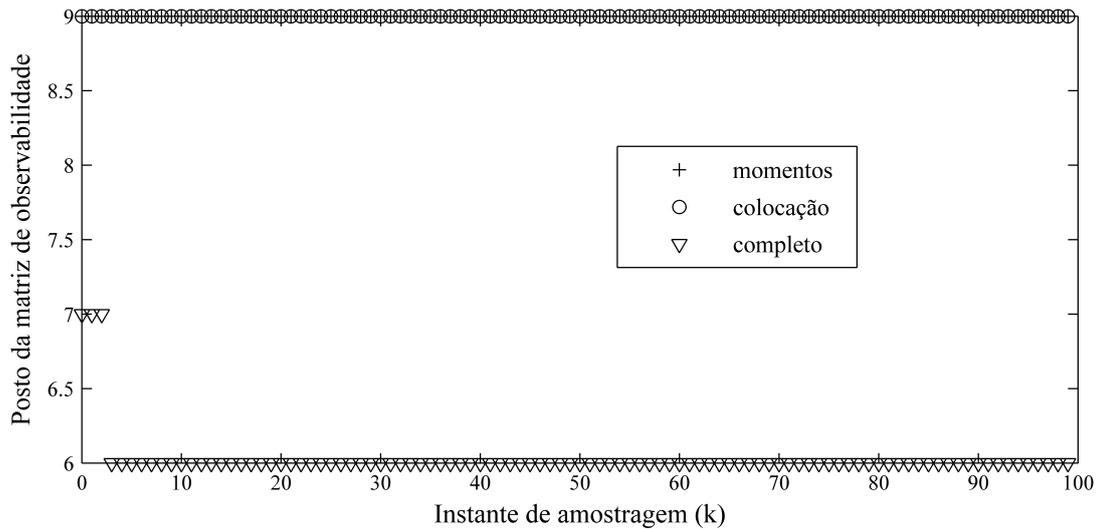


Figura 4.24: Variação do posto da matriz de observabilidade do sistema aumentado utilizando como variáveis medidas a composição de topo e fundo.

desempenho entre um controlador MPC convencional e um NMPC (*nonlinear model predictive control*). Na segunda etapa avaliou-se a redução no tempo computacional utilizando as técnicas de colocação e momentos em relação ao modelo completo. Por fim, o desempenho dos controladores foi comparado diante de dois cenários, no primeiro um cenário servo e no segundo regulatório.

### 4.3.1 Motivação: Melhoria de desempenho em relação ao controle linear

O modelo simplificado empregado nesse trabalho possui uma não linearidade inserida pela equação 3.47, que representa o equilíbrio líquido vapor do sistema, esta equação, como a maioria das equações para prever equilíbrio de fases, é não linear. O primeiro passo para a reprodução de um sistema de controle preditivo industrial linear é a identificação do sistema. Para tanto, com o sistema em malha aberta, foi inserido um sinal de perturbação nas variáveis manipuladas. Neste caso, a vazão de vapor para o refeedor e o refluxo do topo. As perturbações inseridas na planta para identificação estão mostradas nas Figuras 4.25 e 4.26.

Em seguida, foram identificadas quatro funções de transferência de primeira ordem com a possibilidade de inclusão de tempo morto, relacionando as duas variáveis manipuladas: razão de refluxo ( $R_f$ ) e vazão de vapor de aquecimento para o refeedor (carga térmica) ( $W_s$ ) com as duas variáveis controladas: composição do fundo  $x_0$  e composição do topo  $x_N$ . O procedimento de identificação foi conduzido com os sinais normalizados, utilizando o *toolbox* para identificação de modelos de processo do *software* MATLAB (2008). Entretanto, o resultado da estimação foi ruim, pois as não linearidades do sistema se manifestaram mesmo diante de pequenas per-

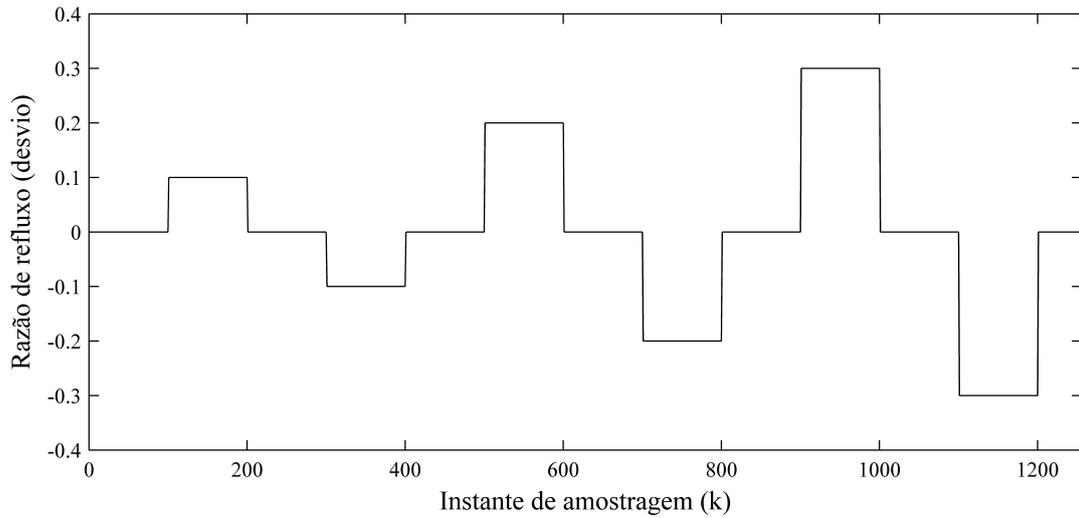


Figura 4.25: Teste inserido no refluxo de topo para identificação do modelo linear.

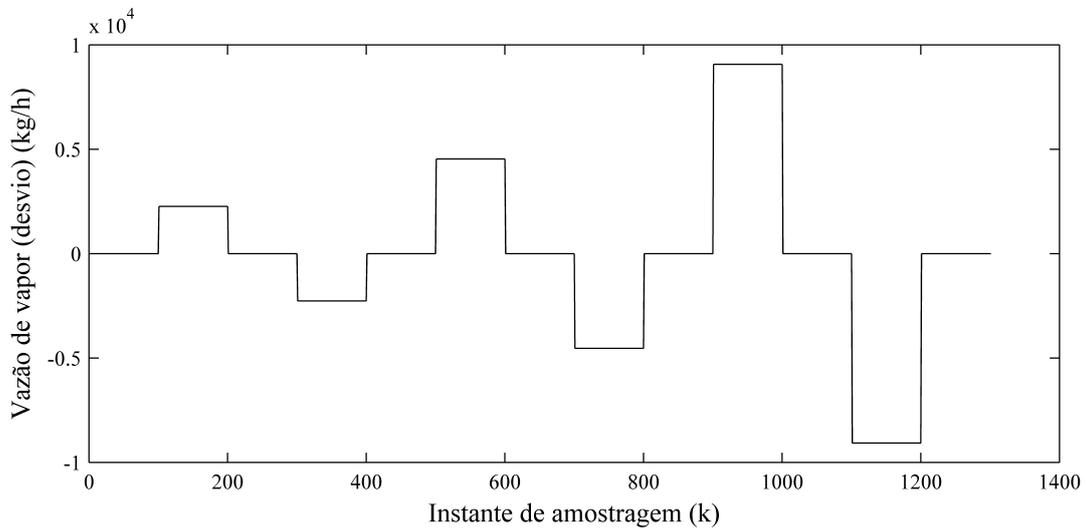


Figura 4.26: Teste inserido na vazão de vapor para identificação do modelo linear.

turbações, sendo as principais a variação no ganho e histerese, como pode ser visto nas Figuras 4.27 a 4.30, em que as respostas dos modelos identificados aos sinais de entrada das Figuras 4.25 e 4.26 são comparadas às respostas da planta. Um único modelo linear não consegue modelar tal variação. Por exemplo, uma perturbação na vazão de vapor para o refeedor tem um efeito diferente se for feita na direção positiva ou negativa. O valor do ganho também varia, exercendo um efeito degradador na performance do modelo linear.

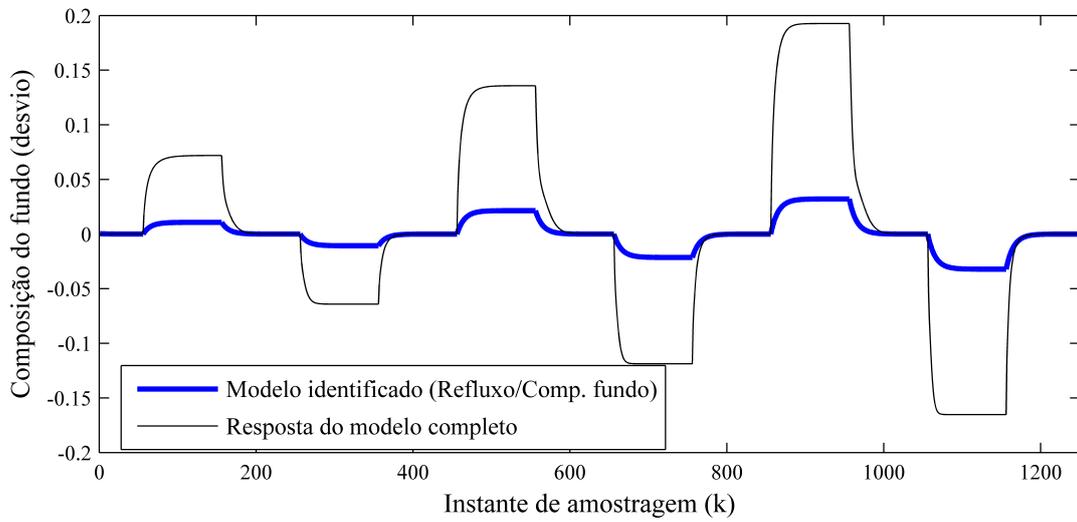


Figura 4.27: Comparação entre o modelo identificado e a resposta da planta (modelo completo).

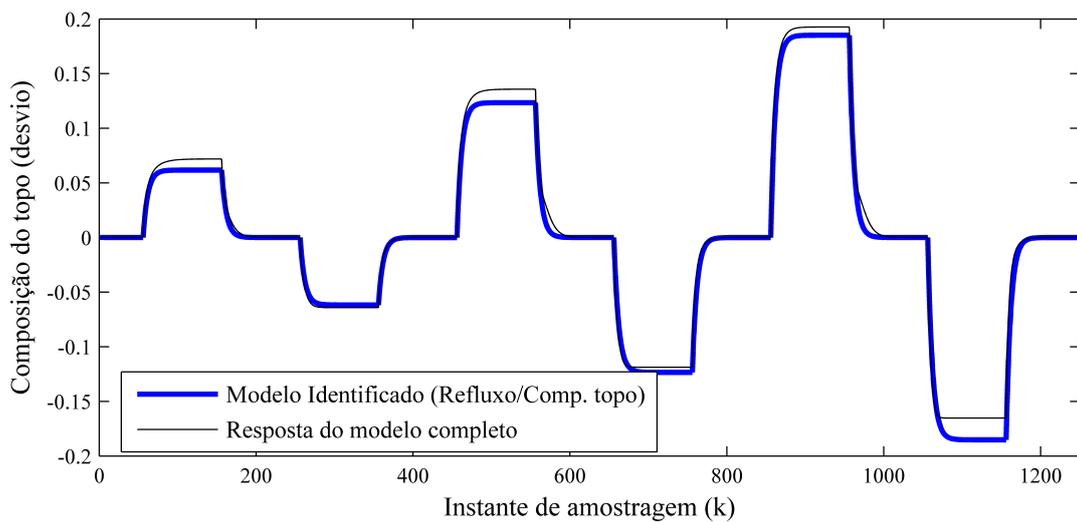


Figura 4.28: Comparação entre o modelo identificado e a resposta da planta (modelo completo).

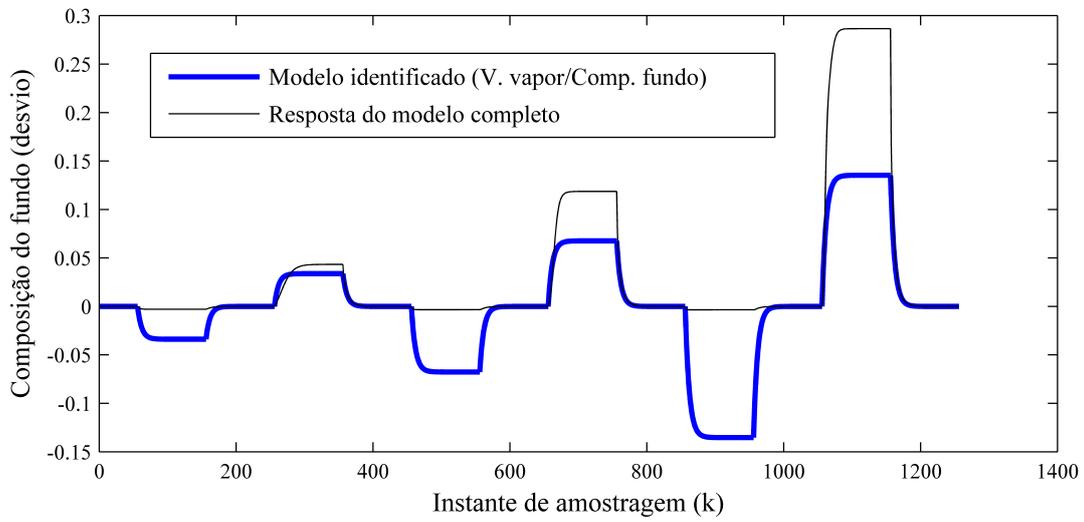


Figura 4.29: Comparação entre o modelo identificado e a resposta da planta (modelo completo).

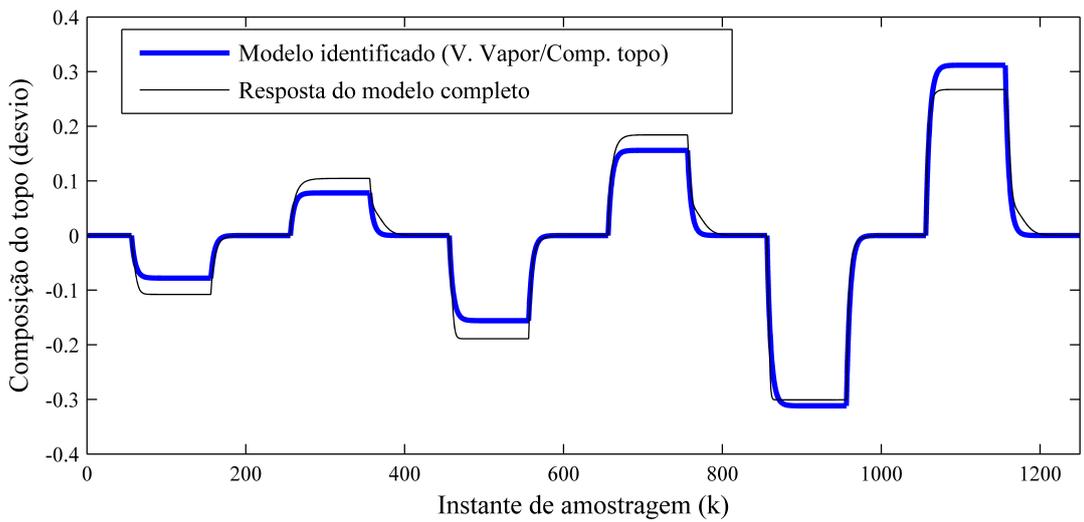


Figura 4.30: Comparação entre o modelo identificado e a resposta da planta (modelo completo).

Posteriormente, comparou-se o desempenho do controlador projetado com os modelos lineares identificados com o desempenho de um controlador operando com o modelo não linear da planta aproximado pela técnica de momentos e colocação ortogonal. Todos os controladores foram sintonizados com os mesmos valores mostrados na Tabela 4.9. As variáveis seguem a ordem:

$$\mathbf{x} = [x_0 \ x_N] \quad (4.13)$$

e o vetor de variáveis manipuladas:

$$\mathbf{u} = [R_f \ W_s] \quad (4.14)$$

Os vetores de pesos seguem a ordem dos vetores de variáveis. A sintonia foi obtida de maneira que o melhor desempenho do controlador linear fosse alcançado. Os modelos lineares estão mostrados na equação 4.15:

$$G(s) = \begin{bmatrix} \frac{0,38747}{6,4017s+1} & \frac{-0,31161}{4,5194s+1} \\ \frac{0,31621}{5,4509s+1} & \frac{-0,13534}{5,8643s+1} \end{bmatrix} \quad (4.15)$$

Tabela 4.9: Sintonia utilizada nos controladores para a comparação

| Parâmetro                      | Valor     |
|--------------------------------|-----------|
| Peso nas variáveis controladas | [2,5 2,5] |
| Peso nas variáveis manipuladas | [2 1]     |
| Horizonte de predição          | 10        |
| Horizonte de controle          | 3         |
| Máxima variação permitida      | [0,5 0,5] |
| Tempo de amostragem            | 6 minutos |

Os resultados das Figuras 4.31 e 4.32 mostram o comportamento dinâmico do sistema operando com os diferentes controladores diante de uma perturbação em degrau no *setpoint* da composição do topo e do fundo, em uma estratégia de controle dual. A melhoria proporcionada pelo controle não linear é nítida e confirmada pelos dados presentes na Tabela 4.10, a qual mostra os índices de desempenho para os três controladores.

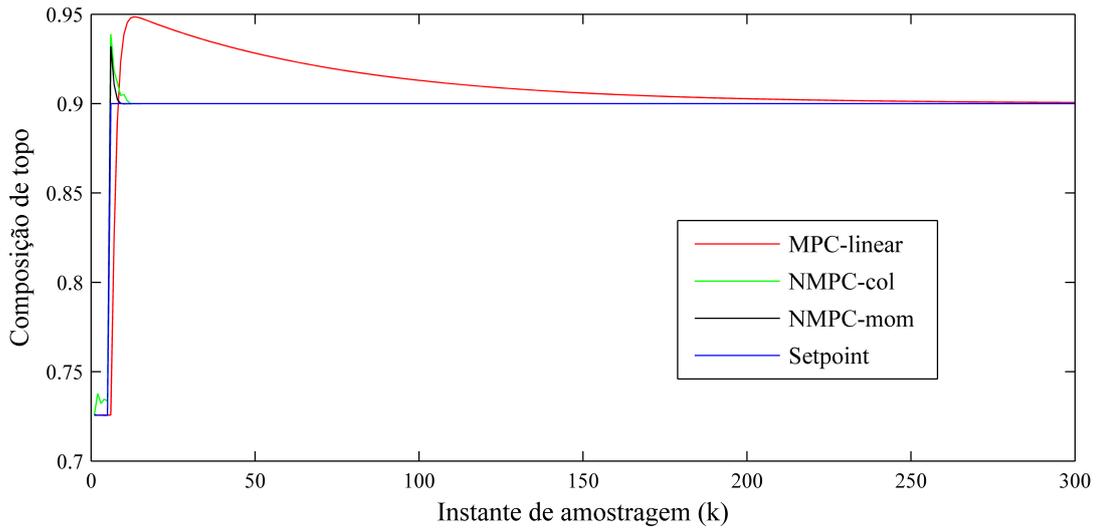


Figura 4.31: Comparação entre os controladores lineares e não lineares para uma resposta ao degrau no *setpoint* da composição de topo.

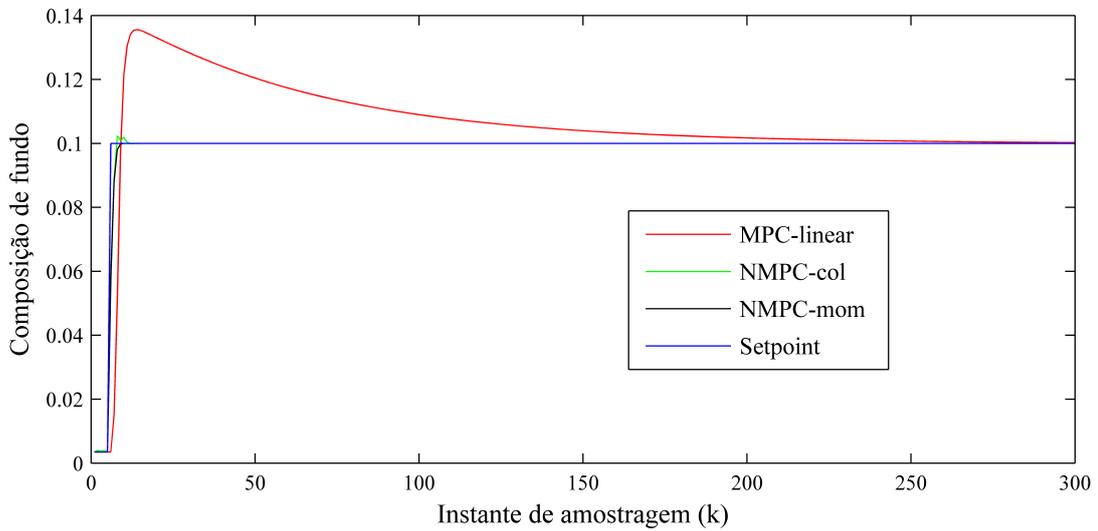


Figura 4.32: Comparação entre os controladores lineares e não lineares para uma resposta ao degrau no *setpoint* da composição do fundo.

Tabela 4.10: Índices de desempenho dos controladores

| Índice                      | MPC-linear | NMPC-colocação | NMPC-momentos |
|-----------------------------|------------|----------------|---------------|
| IAE (topo)                  | 3,6        | 0,12           | 0,046         |
| IAE (fundo)                 | 2,6        | 0,062          | 0,056         |
| <i>Overshoot</i> (topo)(%)  | 5,4        | 4,3            | 3,6           |
| <i>Overshoot</i> (fundo)(%) | 35,5       | 2,4            | 0,0050        |

Para conseguir um bom desempenho de controle, como o relatado, o controlador NMPC agiu com mais vigor na manipulação do refluxo que o controlador linear e manteve a manipulação de vapor para o fundo da coluna em um patamar com-

parável ao do controlador linear. A variação temporal das variáveis manipuladas está disposta nas Figuras 4.33 e 4.34.

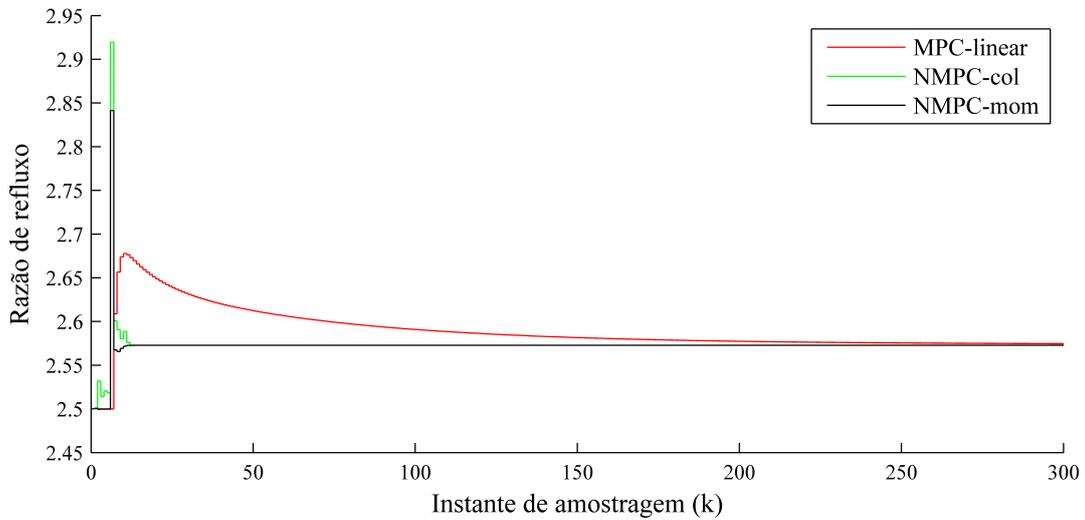


Figura 4.33: Comparação entre os controladores lineares e não lineares: manipulações no refluxo de topo.

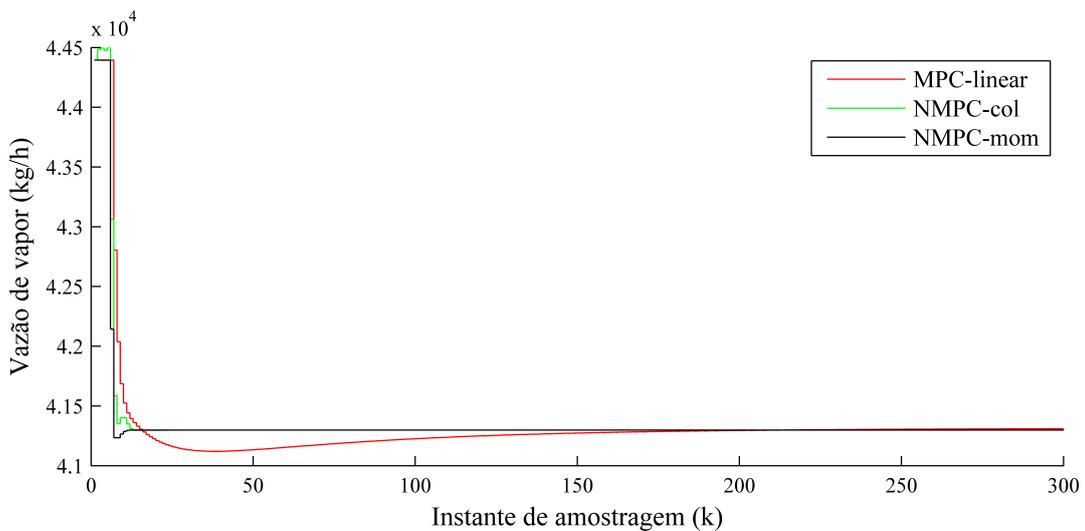


Figura 4.34: Comparação entre os controladores lineares e não lineares: manipulações na vazão de vapor do refeedor.

A partir dos resultados mostrados nessa subseção, os controladores preditivos não lineares foram explorados em seguida.

### 4.3.2 Controle Preditivo não linear baseado em modelos reduzidos

O primeiro teste foi a comparação dos controladores utilizando os modelos reduzidos com o controlador operando com um modelo nominal, em condições sem ruído

e considerando que as duas variáveis controladas (composição de topo e fundo) eram medidas. Os outros estados foram estimados pelo CEKF, dado que esse filtro teve um bom desempenho nos testes anteriores e pode incorporar restrições.

Como mencionado no Capítulo 2, no algoritmo de controle NMPC, a solução do problema de otimização não linear no instante  $k - 1$  desempenha um papel fundamental no instante  $k$ , funcionando como estimativa inicial para o otimizador. Logo, quanto maior a diferença entre a planta e o modelo do controlador, maior deverá ser o tempo necessário para a obtenção da ação de controle, pois a estimativa do instante  $k - 1$  estará distante da solução do instante  $k$ . A diferença entre a planta e o modelo do controlador é expressa no algoritmo de controle preditivo através do modelo do distúrbio. Neste trabalho optou-se por utilizar o modelo mais simples definido como (MACIEJOWSKY, 2000):

$$d(k) = y(k) - y_p(k|k - 1) \quad (4.16)$$

Na equação 4.16  $d(k)$  é o distúrbio estimado no instante  $k$ ,  $y(k)$  é a medida filtrada ou estimada (caso não possa ser medida) e  $y_p(k|k - 1)$  é o estado predito no instante  $k$  com a informação até o instante  $k - 1$ . O valor do distúrbio é um indicativo do desvio entre a planta e o modelo.

Para avaliar a redução de tempo provocada, foram monitorados o tempo de CPU médio e máximo para obtenção das ações de controle, diante de uma mudança de *setpoint*. Critérios relacionados ao desempenho do controlador, como a integral do erro absoluto e *overshoot*, também foram avaliados.

O primeiro estudo de caso está relacionado à mudança de *setpoint* para atingir a especificação do topo e fundo da coluna. Na tabela 4.11 estão mostrados os *setpoints* desejados para as duas variáveis, sendo que foi confirmado previamente que existem valores de  $R_f$  e  $W_s$  de maneira que fosse possível atingir os valores desejados.

Tabela 4.11: *Setpoints* desejados para o topo e fundo da coluna

| Variável                                 | Valor desejado |
|--|----------------|
| Composição de topo ( $y_{sp}^{topo}$ )   | 0,9            |
| Composição de fundo ( $y_{sp}^{fundo}$ ) | 0,1            |

No primeiro estudo de caso as composições de topo e fundo estavam em um estado estacionário fora do valor desejado, eram 0,72 e 0,0034, respectivamente. Foram inseridas perturbações em degrau nos *setpoints* para os valores mostrados na Tabela 4.11.

O comportamento das variáveis de topo e fundo estão mostrados nas Figuras 4.35 e 4.36, onde pode ser observado que o modelo utilizando a técnica de momentos

obtem ações de controle mais próximas das obtidas utilizando o modelo nominal do que o modelo baseado em colocação ortogonal. Os tempos por iteração mostram que, mesmo o modelo nominal provendo uma boa estimativa inicial a cada iteração ( $d(k) = 0$  para todo  $k$ ), os modelos reduzidos diminuem significativamente o tempo de processamento: o tempo médio em 40% (momentos) e 50% (colocação) e o tempo máximo em 47% (momentos) e 74% (colocação).

Ao analisar os índices de desempenho dos controladores (Tabela 4.13), nota-se que o controlador utilizando o método dos momentos consegue se aproximar bastante do desempenho do resultado nominal, principalmente para a composição de topo. Nas Figuras 4.37 e 4.38 estão as variáveis manipuladas, mostrando que os modelos reduzidos resultaram em um esforço um pouco maior para o refluxo de topo e comparável ao nominal na quantidade de vapor para o refeedor. Não houve um *overshoot* considerável das variáveis de topo e fundo.

Tabela 4.12: Avaliação da redução dos tempos de CPU por iteração.

| Índice           | NMPC-nominal | NMPC-colocação | NMPC-momentos |
|------------------|--------------|----------------|---------------|
| Tempo médio (s)  | 100,71       | 50,59          | 62,59         |
| Tempo máximo (s) | 397,27       | 101,83         | 209,72        |

Tabela 4.13: Comparação dos índices de desempenho

| Índice                    | NMPC-nominal | NMPC-colocação | NMPC-momentos |
|---------------------------|--------------|----------------|---------------|
| IAE (composição de topo)  | 0,0977       | 0,1442         | 0,0618        |
| IAE (composição de fundo) | 0,2978       | 0,2987         | 0,2985        |

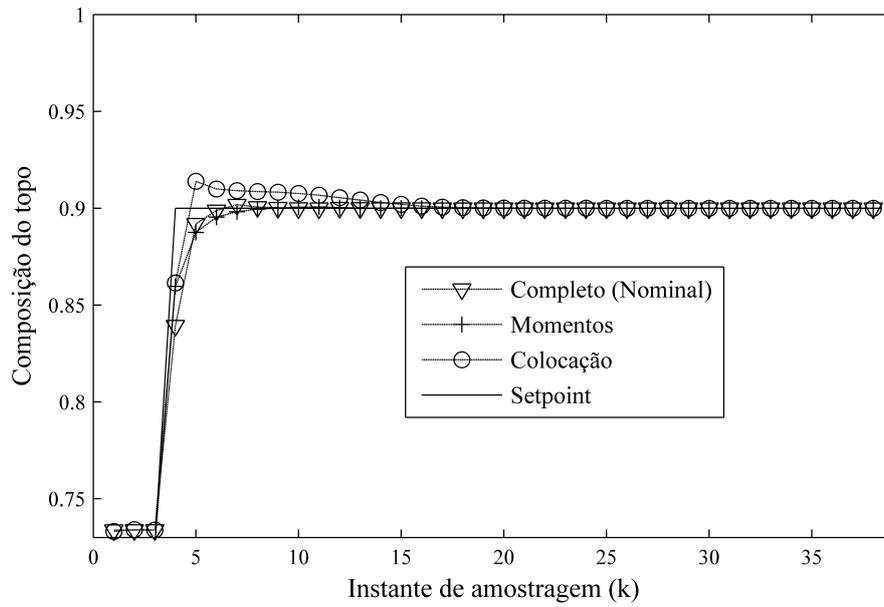


Figura 4.35: Comparação entre os controladores não lineares utilizando diferentes modelos para a composição do topo.

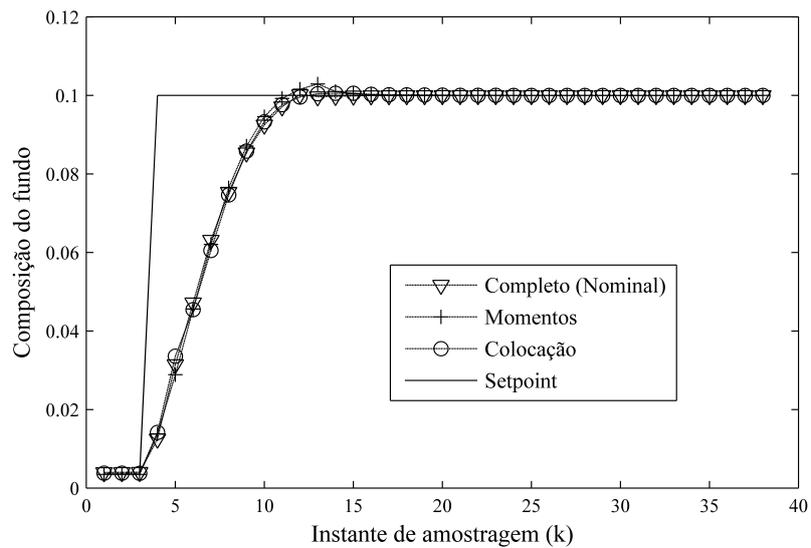


Figura 4.36: Comparação entre os controladores não lineares utilizando diferentes modelos para a composição do fundo.

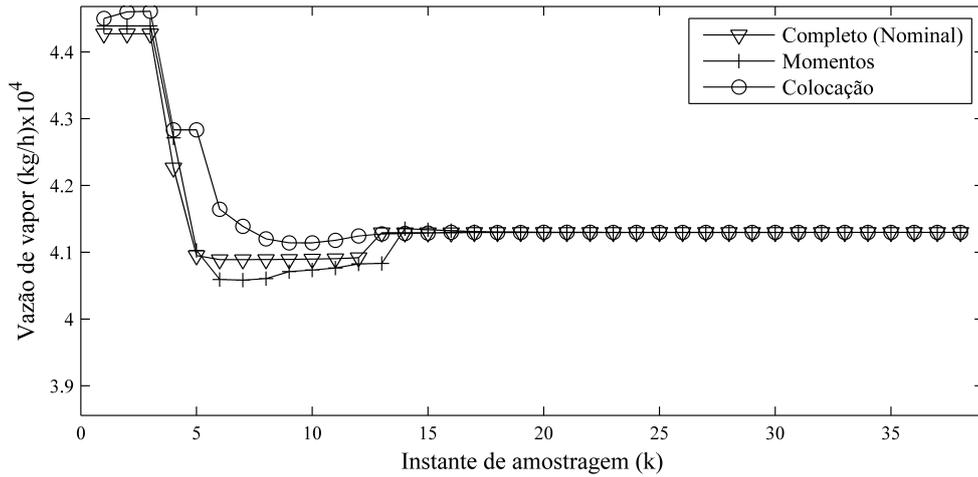


Figura 4.37: Ação de controle no fundo da coluna na vazão de vapor para o refervedor.

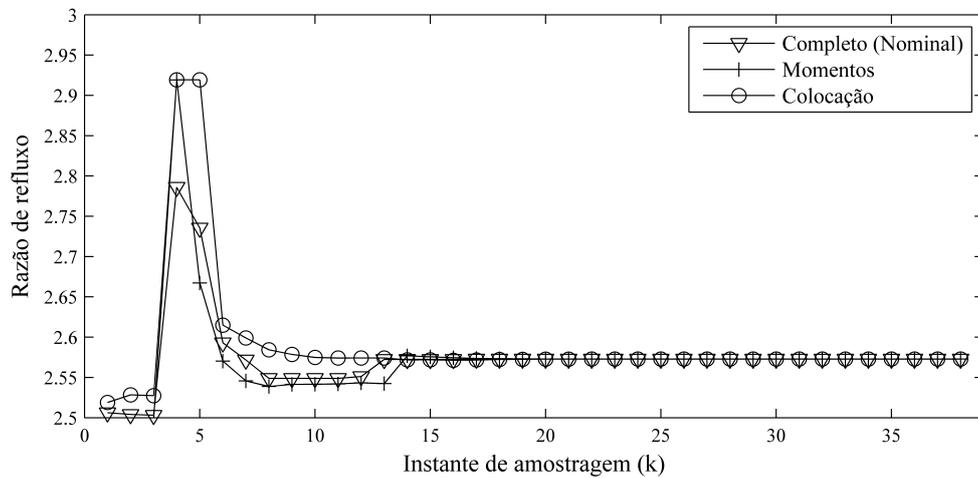


Figura 4.38: Ação de controle na razão de refluxo de topo.

No segundo estudo de caso os *setpoints* são modificados em diferentes instantes de tempo. No instante  $k = 0$  a coluna está no estado estacionário, fora dos valores desejados, estando a composição de topo em 0,92 e de fundo em 0,08. Então o *setpoint* da composição do fundo é modificado em  $k = 10$  para o valor desejado e no tempo  $k = 40$  o *setpoint* do topo da coluna é levado à especificação. Os controladores agora possuem uma incerteza adicionada à volatilidade relativa da planta, existindo, portanto, uma diferença entre o modelo completo e a planta simulada. A incerteza também foi inserida nos modelos reduzidos para realizar uma comparação justa.

Utilizando essa estratégia, é possível observar a ação do controlador do topo diante do distúrbio causado pela mudança de *setpoint* no fundo da coluna e vice-versa. Desta maneira, a capacidade do modelo reduzido em reproduzir as interações existentes entre o topo e o fundo da coluna foi verificada. Na Figura 4.39 é mostrado o comportamento do topo da coluna, onde percebe-se que a mudança do *setpoint* no fundo da coluna causa um grande distúrbio no controlador de topo. Entretanto, o

controlador que utiliza o modelo baseado na técnica de momentos para a predição consegue acomodar o distúrbio de maneira mais satisfatória que o modelo baseado em colocação ortogonal. Esse último leva a oscilações que não são reproduzidas pelo modelo completo com incerteza e o modelo de momentos.

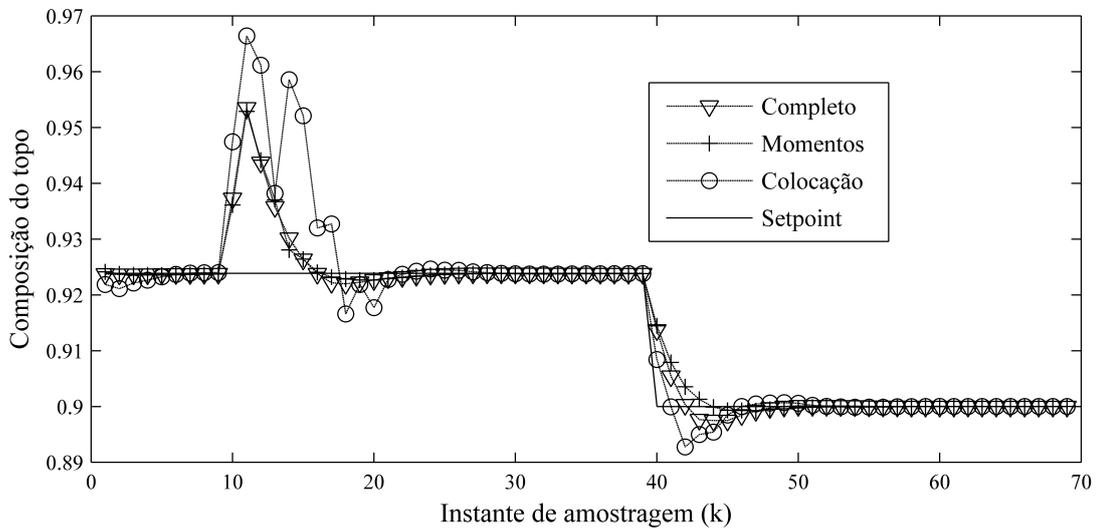


Figura 4.39: Comportamento dinâmico do topo da coluna diante de uma mudança nos *setpoints* de topo e fundo.

Para a composição de fundo o resultado é um pouco diferente. Na Figura 4.40, nota-se que a mudança de *setpoint* no topo da coluna afeta bem menos o fundo do que o contrário. Em adição ao resultado anterior, a predição com o modelo de momentos leva vantagem, sendo capaz de estabilizar o fundo da coluna mais rapidamente, dado que o modelo utilizando o método da colocação produz um comportamento bastante oscilatório, pior que o registrado para o topo da coluna.

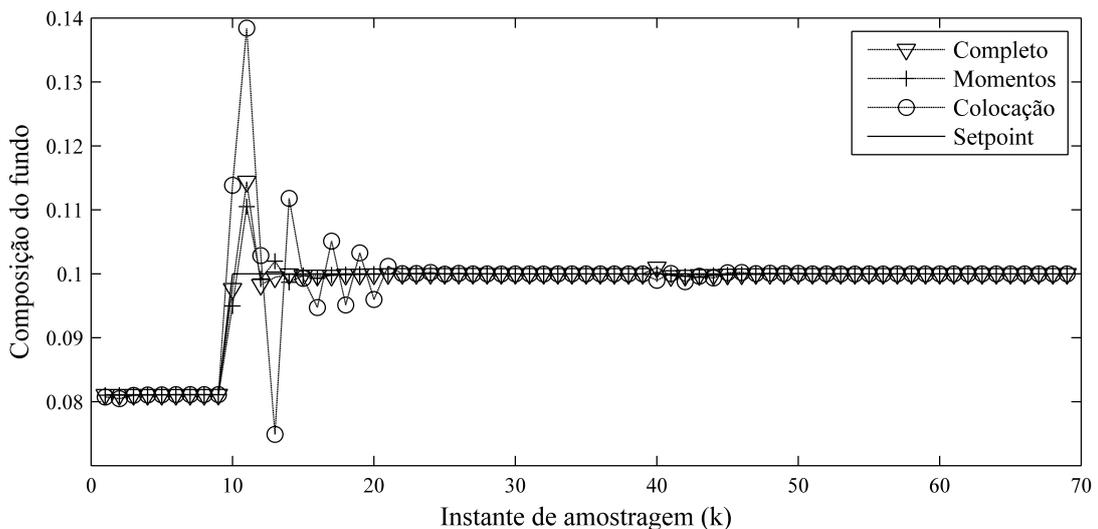


Figura 4.40: Comportamento dinâmico do fundo da coluna diante de uma mudança nos *setpoints* de topo e fundo

Quando se observam as variáveis manipuladas, nota-se o prejuízo causado pela utilização do modelo baseado em colocação. A vazão de vapor da coluna (Figura 4.42) é bastante oscilatória, logo no início, na mudança de *setpoint* do fundo ( $k = 10$ ), o controlador mantém a vazão de vapor em um valor muito acima dos valores obtidos pelo método dos momentos e pelo modelo completo, o que, conseqüentemente, provoca um esforço de controle desnecessário. Outro fato bastante interessante é a variação da vazão de vapor diante da mudança de *setpoint* no topo da coluna ( $k = 40$ ) e a variação da razão de refluxo diante da mudança no fundo. Em ambos os casos o modelo de momentos leva vantagem produzindo um menor esforço de controle.

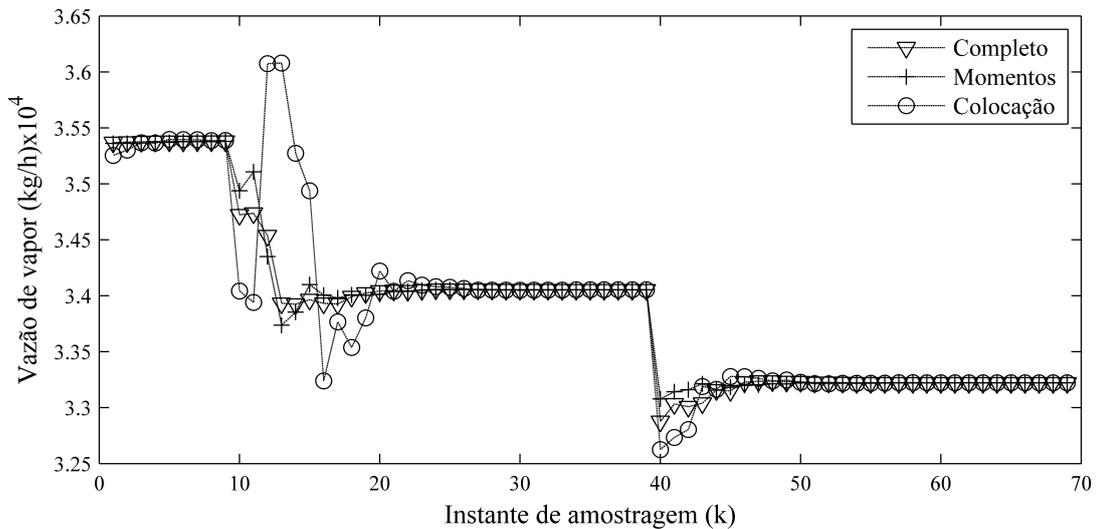


Figura 4.41: Manipulação de vapor diante das mudanças nos *setpoints*.

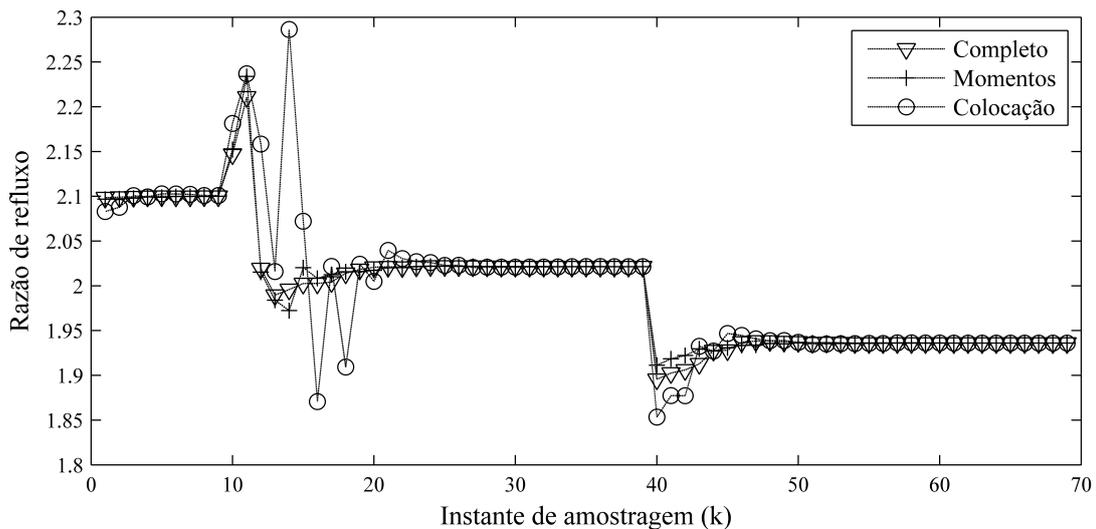


Figura 4.42: Manipulação da razão de refluxo diante das mudanças nos *setpoints*.

A análise do *overshoot* e do índice IAE (Tabela 4.14), confirma a superioridade da utilização da técnica dos momentos ante à técnica de colocação. Ressalta-se que

o desempenho do modelo de momentos foi muito próximo ao do modelo completo, tendo, inclusive, menor *overshoot* no fundo da coluna, o que pode ser um indicativo da menor sensibilidade desse modelo diante de incertezas paramétricas, como a inserida nas últimas simulações.

Tabela 4.14: Comparação dos índices de desempenho para duas mudanças de *setpoint* utilizando incerteza nos modelos

| Índice                       | NMPC-completo | NMPC-colocação | NMPC-momentos |
|------------------------------|---------------|----------------|---------------|
| IAE (topo)                   | 0,1242        | 0,2569         | 0,1222        |
| IAE (fundo)                  | 0,0226        | 0,1222         | 0,0231        |
| <i>Overshoot</i> (%) (topo)  | 29,63         | 42,55          | 29,01         |
| <i>Overshoot</i> (%) (fundo) | 14,43         | 38,42          | 10,49         |

Por fim, a análise da redução dos tempos de processamento (Tabela 4.15) mostra que ambos os métodos foram eficazes, com certa vantagem para o método da colocação. O modelo de momentos reduziu o tempo médio em 53% e o da colocação em 70%. No quesito tempo máximo a redução foi de 40 e 75% para momentos e colocação, respectivamente.

Tabela 4.15: Avaliação da redução dos tempos de CPU por iteração para o caso com duas mudanças de *setpoint*

| Índice          | NMPC-completo | NMPC-colocação | NMPC-momentos |
|-----------------|---------------|----------------|---------------|
| Tempo médio (s) | 104,71        | 30,40          | 48,77         |
| Tempo máximo(s) | 388,17        | 95,33          | 225,95        |

Em seguida, foi analisado o efeito de medidas ruidosas no desempenho e tempo de processamento dos controladores. Mantendo-se a incerteza entre a planta e os modelos dos controladores, inseriu-se um ruído gaussiano com média zero e desvio igual a 1% do valor nominal. Na figura 4.43 a resposta temporal da composição do topo da coluna mostra que o ruído afeta os controladores, porém todos conseguem estabilizar o sistema. Novamente o modelo baseado na técnica dos momentos foi superior quando comparado ao de colocação, principalmente na rejeição do distúrbio causado pela mudança no *setpoint* do controlador do fundo da coluna.

No fundo da coluna (Figura 4.44), percebe-se que as oscilações provocadas pelo método da colocação ortogonal são mais evidentes, levando a indícios que esse modelo seja mais sensível a medidas ruidosas.

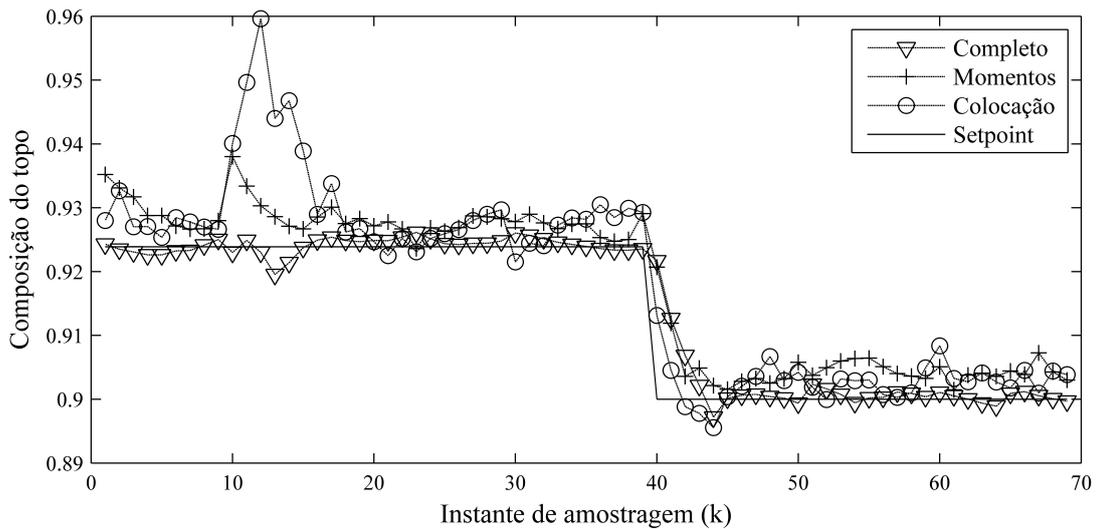


Figura 4.43: Resposta da composição de topo diante de medidas ruidosas.

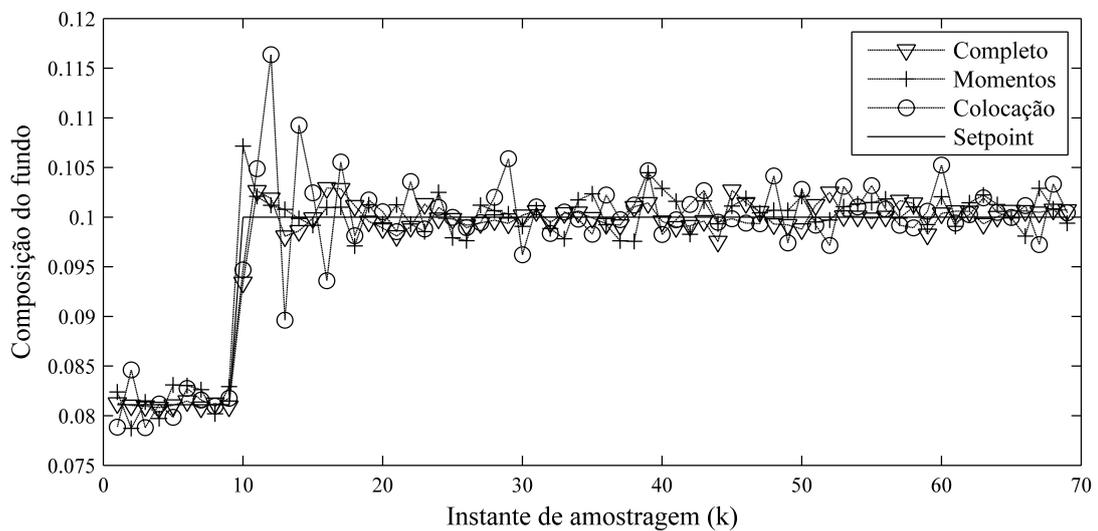


Figura 4.44: Resposta da composição de fundo diante de medidas ruidosas.

O mesmo comportamento pode ser visto nas variáveis manipuladas (Figuras 4.45 e 4.46), onde o método da colocação precisa de um maior esforço para estabilizar o sistema, deixando as variáveis manipuladas com excessiva manipulação.

Nas Figuras 4.43 e 4.44, verifica-se que o modelo utilizando a colocação apresenta também um elevado *overshoot*. Esse valor quantificado em termos percentuais está mostrado na Tabela 4.16, onde, principalmente no topo da coluna, o valor é bastante acentuado. O índice IAE mostra que o modelo completo foi o menos sensível a inserção de ruído nas medidas, apresentando o menor valor. O *overshoot* do método dos momentos foi comparável ao do modelo completo.

O cômputo dos tempos médios e máximos mostra que a redução exerce um papel fundamental quando se trata de medidas ruidosas, devido ao aumento do tempo de processamento nesse cenário, como mostrado na Tabela 4.17. A elevação do tempo

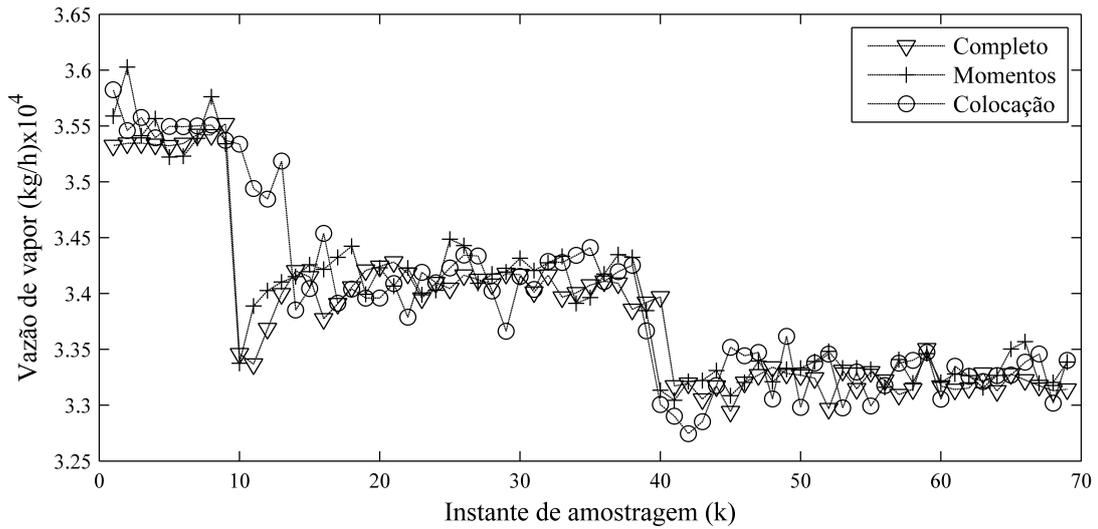


Figura 4.45: Manipulação da vazão de vapor diante do controlador operando com medidas ruidosas.

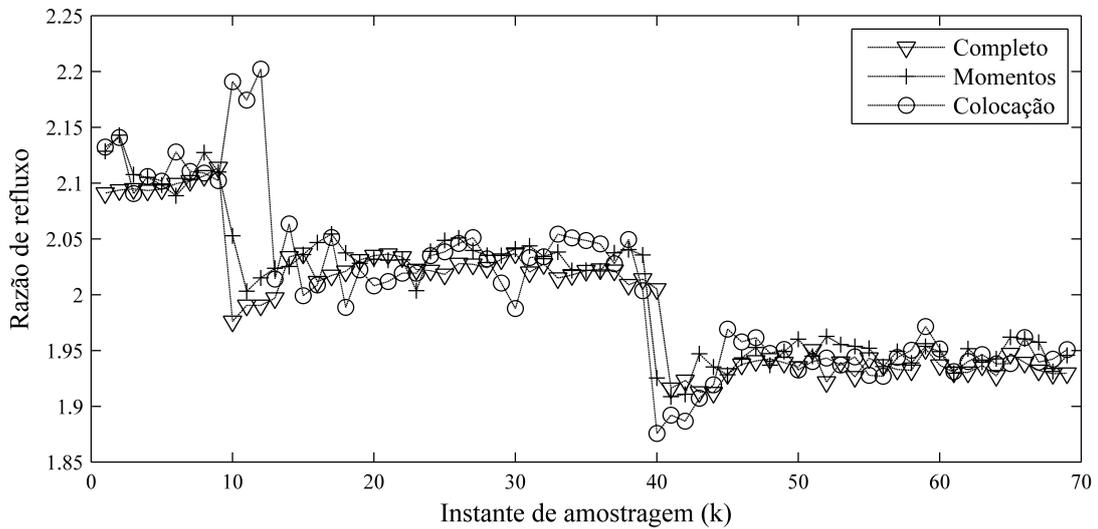


Figura 4.46: Manipulação da razão de refluxo diante do controlador operando com medidas ruidosas.

Tabela 4.16: Comparação dos índices de desempenho para duas mudanças de *setpoint* utilizando ruído nas medidas

| Índice                       | NMPC-completo | NMPC-colocação | NMPC-momentos |
|------------------------------|---------------|----------------|---------------|
| IAE (topo)                   | 0,1021        | 0,3544         | 0,3216        |
| IAE (fundo)                  | 0,0645        | 0,1590         | 0,1022        |
| <i>Overshoot</i> (%) (topo)  | 21,67         | 35,74          | 20,69         |
| <i>Overshoot</i> (%) (fundo) | 6,57          | 16,36          | 7,14          |

de processamento utilizando o modelo completo, quando comparado ao caso sem ruído, foi de 50 segundos para o tempo médio e de 146 para o tempo máximo.

No método dos momentos não houve elevação no tempo máximo e o tempo médio aumentou em 29 segundos. Ressalta-se que o modelo completo diante de medições ruidosas teve um tempo máximo de 534 segundos, que é bastante elevado.

Tabela 4.17: Avaliação da redução dos tempos de CPU por iteração para o caso com duas mudanças de *setpoint* utilizando ruído nas medidas

| Índice          | NMPC-completo | NMPC-colocação | NMPC-momentos |
|-----------------|---------------|----------------|---------------|
| Tempo médio (s) | 150,98        | 60,10          | 76,99         |
| Tempo máximo(s) | 534,27        | 197,76         | 162,42        |

## 4.4 Avaliação dos valores característicos dos modelos

Uma boa estratégia de redução de ordem deve reproduzir o modelo completo quando o número de estágios reduzidos forem iguais ao número de estágios reais (STEWART *et al.*, 1985). Nessa seção, avaliou-se a convergência dos autovalores para as duas técnicas mostradas nesse trabalho e os autovalores dos modelos reduzidos utilizados nas seções anteriores.

Utilizando as matrizes jacobianas analíticas dos modelos reduzidos (Apêndice A), é possível avaliar os valores característicos do sistema para diferentes graus de redução. O primeiro teste efetuado foi a verificação de convergência, onde foi selecionado um grau de redução igual ao número de estágios da coluna. Na Figura 4.47 estão os autovalores calculados para os três sistemas, confirmando a propriedade. Ressalta-se que nenhum dos autovalores possui parte complexa. O sistema foi linearizado em torno do ponto desejado para o controle da coluna (Tabela 4.11).

Posteriormente, verificou-se o comportamento dos autovalores dos modelos reduzidos utilizados nas estratégias de controle e estimação. Os resultados são um indicativo do desempenho ruim obtido pelo modelo de colocação. Enquanto o modelo completo não possui nenhum autovalor complexo, a redução do modelo pela técnica de colocação produz dois autovalores com parte complexa, o que pode levar a uma predição de comportamento oscilatório que não existe na realidade. Esse comportamento não é visto quando o modelo é reduzido utilizando a técnica de momentos, onde apenas autovalores reais são obtidos. Na Figura 4.48, a parte real e a parte complexa dos autovalores são colocadas em um único gráfico, ficando evidenciado que apenas o modelo de colocação produziu partes complexas.

Avançando-se, percebe-se que não é o nível de redução elevado que está produzindo os autovalores com parte complexa. Na Figura 4.49 os modelos reduzidos foram aumentados para cinco estágios na retificação e cinco estágios no fundo da

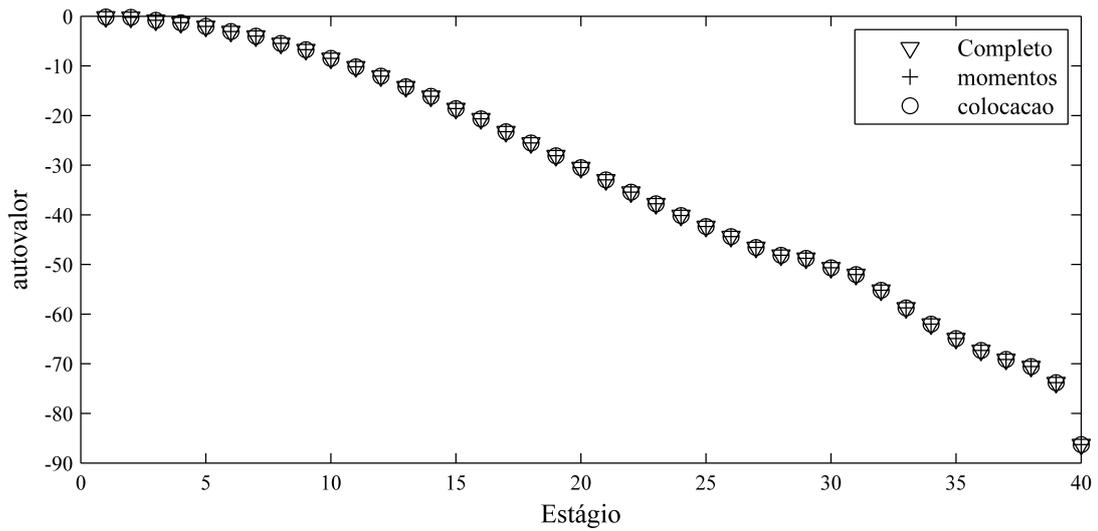


Figura 4.47: Convergência dos autovalores dos modelos reduzidos.

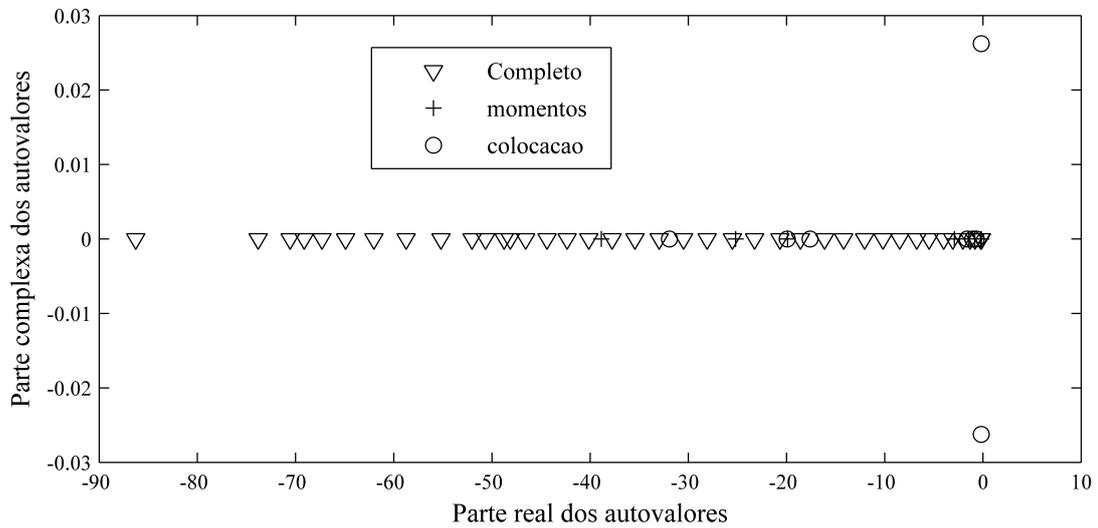


Figura 4.48: Partes reais e complexas dos modelos reduzidos e do modelo da planta.

coluna e o resultado é que mais autovalores complexos são produzidos pelo método da colocação no estado estacionário enquanto o método dos momentos permaneceu apenas com autovalores reais.

A característica oscilatória da técnica de colocação ortogonal é vista em diversos problemas, principalmente quando o grau do polinômio utilizado para aproximar a solução é elevado. Esse tipo de problema pode levar a interpretações errôneas ou até ao projeto de um controlador com desempenho insatisfatório, como o mostrado nesse trabalho. A técnica de momentos para a redução de colunas de destilação pode atenuar ou eliminar esses problemas, como visto nessa seção.

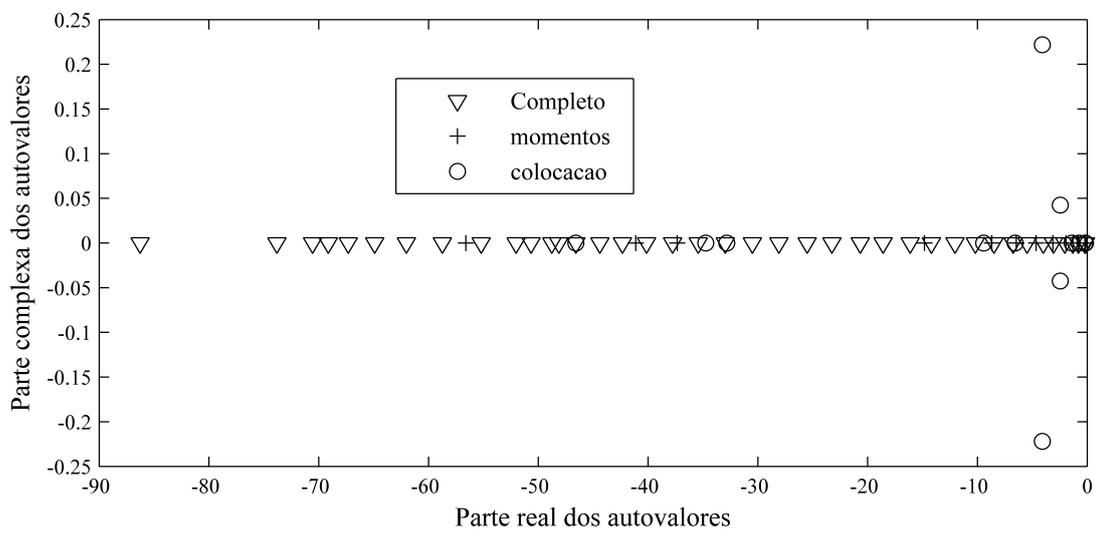


Figura 4.49: Partes reais e complexas dos modelos reduzidos e do modelo da planta, para um modelo reduzido com cinco estgios nas seoes de topo e fundo.

# Capítulo 5

## Conclusões e Sugestões

Nas últimas décadas, é crescente o número de trabalhos que buscam tornar real a aplicação mais frequente dos algoritmos de controle preditivo não linear. O tempo de processamento é muitas vezes um obstáculo a ser superado, principalmente em sistemas de elevada dimensão, como colunas de destilação. Muitas das aplicações atuais são restringidas a modelos lineares e utilização baseada em modelos empíricos, que, apesar de amplamente difundidos, muitas vezes têm uma faixa de aplicação restrita e sofrem com a degradação dos parâmetros devido a mudanças no processo que, em geral, não podem ser caracterizadas por esse tipo de modelo. Tem-se uma competição, onde os modelos empíricos podem ter uma solução de qualidade ruim porém de menor custo, como mostrado na Seção 4.3.1, e os modelos fenomenológicos podem ter uma dimensão impossível de ser solucionada em uma estratégia de otimização em tempo real. Esse trabalho procurou demonstrar que existe uma solução intermediária, que é a redução de ordem dos modelos fenomenológicos, a qual pode reduzir de maneira significativa o tempo de processamento mantendo a qualidade de predição inerente desses modelos.

Os resultados apresentados na Seção 4.2, mostraram que a qualidade da estimação de estados utilizando a técnica de redução de momentos foi superior à técnica de colocação. As duas técnicas conseguiram reduzir o tempo de processamento de maneira significativa. A estimação utilizando modelos reduzidos demonstrou que são necessárias menos medidas para tornar o modelo reduzido observável quando comparado ao modelo completo. Por fim, a estimação conjunta de parâmetros e estados revelou que a atualização dos parâmetros pode ser uma ferramenta poderosa para melhorar a estimação de estados quando existe uma grande incerteza entre a planta e o modelo utilizado no filtro.

O controle preditivo baseado em modelos não lineares reduzidos, apresentado na Seção 4.3, conseguiu reduzir o tempo de processamento de maneira promissora, sendo uma potencial técnica para utilização em aplicações industriais. A qualidade da técnica de momentos reduziu satisfatoriamente as oscilações causadas pela técnica

de colocação ortogonal, reproduzindo os autovalores da planta de maneira mais próxima.

Sugere-se, para trabalhos futuros, o emprego de técnicas não lineares para a avaliação da observabilidade global do sistema reduzido não linear e também da estabilidade, através da comparação das funções de Lyapunov dos sistemas completo e reduzido. Além disso, a validação das estratégias apresentadas em colunas reais pode ratificar o emprego das técnicas. Outro trabalho interessante seria a avaliação dos custos financeiros para a obtenção e manutenção dos modelos reduzidos, permitindo a associação da qualidade do controlador resultante com os custos necessários para obter, reduzir e manter o modelo não linear e compará-los com as estratégias clássicas baseadas em identificação. Por fim, a aplicação de estimadores mais dispendiosos computacionalmente como o MHE e o filtro de partículas poderia ser empregada para a avaliação de desempenho dos modelos reduzidos em sistemas em estágios, onde a utilização desses métodos é muito restrita.

# Referências Bibliográficas

- AGUIRRE, L. A., 2007, *Introdução a identificação de sistemas: técnicas lineares e não-lineares aplicadas a sistemas reais*. 3<sup>a</sup> ed. Belo Horizonte, Editora UFMG. ISBN: 9788570415844.
- ASTRID, P., 2004, *Reduction of Process Simulation Models: a proper orthogonal decomposition approach*. Tese de Doutorado, Technische Universiteit Eindhoven.
- BIEGLER, L. T., HUGHES, R. R., 1985, “Feasible path optimization with sequential modular simulators”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 9, n. 4, pp. 379–394.
- CHO, Y. S., JOSEPH, B., 1983, “Reduced-order steady-state and dynamic models for separation processes. Part I. Development of the model reduction procedure”, *AIChE Journal*, v. 29, n. 2, pp. 261–269. ISSN: 1547-5905. doi: 10.1002/aic.690290213. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/aic.690290213>>.
- DONES, I., MANENTI, F., PREISIG, H. A., et al., 2010, “Nonlinear Model Predictive Control: A Self-Adaptive Approach”, *Ind. Eng. Research*, v. 49, pp. 4782–4791.
- GRUNE, L., PANNEK, J., 2011, *Nonlinear Model Predictive Control: theory and Algorithms*. 1<sup>a</sup> ed. Londres, Springer.
- GRUNER, S. S., SCHWARZKOPF, USLU, et al., 2001, *Nonlinear Model Predictive Control of Multicomponent Distillation Columns Using Wave Models*. Relatório técnico.
- JULIER, S., UHLMANN, J., DURRANT-WHYTE, H. F., 2000, “A New Method for the Nonlinear Transformation of Means and Covariances in Filters and Estimators”, *IEEE TRANSACTIONS ON AUTOMATIC CONTROL*, v. 45, n. 3, pp. 477–482.

- KALMAN, R. E., 1960, “A New Approach to Linear Filtering and Prediction Problems”, *Transactions of the ASME—Journal of Basic Engineering*, v. 82, n. Series D, pp. 35–45.
- KAWATHEKAR, R., RIGGS, JAMES, B., 2007, “Nonlinear model predictive control of a reactive distillation column”, *Control Engineering Practice*, v. 15, pp. 231–239. doi: 10.1016/j.conengprac.2006.07.004.
- LINHART, A., SKOGESTAD, S., 2012, “An Aggregation Model Reduction Method for One-Dimensional Distributed Systems”, *AIChE*, v. 58, n. 5, pp. 1524–1537. doi: 10.1002/aic.
- LOPEZ-NEGRETE, R., D’AMATO, F. J., BIEGLER, L. T., et al., 2013, “Fast nonlinear model predictive control: Formulation and industrial process applications”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 51 (abr.), pp. 55–64. ISSN: 00981354. doi: 10.1016/j.compchemeng.2012.06.011. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0098135412001871>>.
- MACIEJOWSKY, J. M., 2000, *Predictive Control with Constraints*. New York, Prentice Hall.
- MANENTI, F., 2011, “Considerations on nonlinear model predictive control techniques”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 35, pp. 2491–2509.
- MARQUARDT, W., 2000, *Nonlinear Model Reduction for Optimization Based Control of Transient Chemical Processes Optimization Based Operation Support*. Relatório técnico, RWTH Aachen.
- MATLAB, 2008, *version 7.8.0 (R2008a)*. Natick, Massachusetts, The MathWorks Inc.
- MERWE, R., 2004, *Sigma-Point Kalman Filters for Probabilistic Inference in Dynamic State-Space Models*. Tese de Doutorado, Oregon Health & Science University.
- NAGY, Z. K., KLEIN, R., KISS, A. A., et al., 2007, “Advanced Control of a Reactive Distillation Column”. In: Plesu, V., Agachi, P. S. (Eds.), *ESCAPE17*, pp. 805–810. Elsevier B.V.
- OGATA, K., 2010, *Engenharia de Controle Moderno*. 5<sup>a</sup> ed. São Paulo, Pearson. ISBN: 9788576058106.

- PINTO, J. C., BISCAIA, E. C., 1988, “Order Reduction Strategies for Models of Staged Separation Systems”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 12, n. 8, pp. 821–831.
- RAO, C. V., 2000, *Moving Horizon Strategies for the Constrained Monitoring and Control of Nonlinear Discrete-Time Systems*. Tese de Doutorado, Wisconsin-Madison.
- RIBEIRO, L. D., 2011, *Nova Técnica de Redução de Ordem de Modelo Baseada em Resíduos Ponderados no Domínio Discreto*. Tese de Mestrado, COPPE/UFRJ.
- RIBEIRO, L. D., SECCHI, A. R., BISCAIA, E. C., 2010, “A New Technique of Model Order Reduction Based on Weighted Residuals in Discrete Domain”. In: *20th European Symposium on Computer Aided Process Engineering – ESCAPE20*, pp. 1639–1644.
- RICE, R. G., DO, D. D., 1994, *Applied Mathematics And Modeling For Chemical Engineers*. 1<sup>a</sup> ed. New Jersey, John Wiley and Sons.
- SALAU, N., 2009, *Abordagem Sistemática para Construção e Sintonia de Estimadores de Estados Não- Lineares*. Tese de Doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.
- SECCHI, A. R., 1992, *Simulação dinâmica de processos químicos pelo método da relaxação em forma de onda em computadores paralelos*. Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- SECCHI, A. R., 1992–2007. “Differential-Algebraic System Solver in C”. <http://www.enq.ufrgs.br>.
- SECCHI, A. R., 1988, *Controle Adaptativo de colunas de destilação utilizando modelos reduzidos*. Tese de Mestrado, COPPE/UFRJ.
- SIMON, D. J., 2006, *Optimal State Estimation*. New Jersey, John Wiley & Sons. ISBN: 9780471708582.
- SINGH, A. K., HAHN, J., 2005, “State estimation for high-dimensional chemical processes”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 29, n. May, pp. 2326–2334. doi: 10.1016/j.compchemeng.2005.05.009.
- SKOGESTAD, S., 1997, “Dynamics and control of distillation columns - a critical survey”, *Modeling, Identification and Control*, v. 18, pp. 177–217.

- STEWART, W. E., LEVIEN, K. L., MORARI, M., 1985, “Simulation of fractionation by orthogonal collocation”, *Chemical Engineering Science*, v. 40, n. 3, pp. 409–421.
- TONEL, G., 2008, *Avaliação dos Estimadores EKF, CEKF e MHE para Aplicações em Linha em Processos*. Tese de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.
- TROTTA, A., BAROLO, M., 1995, “Nonlinear model-based control of a binary distillation column”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 19, n. 95, pp. 519–524.
- VALLERIOTE, A. J. V., 2013, *Análise de Modelos Reduzidos de Colunas de Destilação para Aplicações em Tempo Real*. Tese de Mestrado, COPPE/UFRJ.
- VALLERIOTE, A. J. V., DORIGO, L. D., SECCHI, A. R., et al., 2012, “Reduced Rigorous Models for Efficient Dynamic Simulation and Optimization of Distillation Columns”. In: Bogle, Fairweather (Eds.), *Symposium on Computer Aided Process Engineering, 17 - 20 June 2012, London.*, n. June, pp. 17–20, London.
- VAN DEN BERG, J., 2005, *Model Reduction for Dynamic Real-Time Optimization of Chemical Processes*. Tese de Doutorado, Technische Universiteit Delft.
- VILLADSEN, J. V., MICHELSEN, M. L., 1978, *Solution of differential equation models by polynomial approximation*. 1<sup>a</sup> ed. New Jersey, Prentice Hall.
- WALLER, J. B., BÖLING, J. M., 2005, “Multi-variable nonlinear MPC of an ill-conditioned distillation column”, *Journal of Process Control*, v. 15, n. 1 (fev.), pp. 23–29. ISSN: 09591524. doi: 10.1016/j.jprocont.2004.04.003. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0959152404000502>>.
- WONG, K. T., LUUS, R., 1980, “Model reduction of high-order multistage systems by the method of orthogonal collocation”, *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, v. 58, n. 3, pp. 382–388. ISSN: 1939-019X. doi: 10.1002/cjce.5450580315. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/cjce.5450580315>>.

# Apêndice A

## Cálculo das matrizes jacobianas dos modelos reduzidos utilizados nos Filtros de Kalman

Balço no condensador ( $i = 0$ )

$$\frac{dX_0}{dt} = \frac{V_r(t)}{M_0(t)} \left[ \sum_{j=0}^{nr+1} \mathbf{A}_{0,j}^{+(ret)} y_j(t) - X_0 \right] \quad (\text{A.1})$$

Seção de retificação ( $i = 2$  a  $nr$ )

$$\frac{dX_i}{dt} = \frac{L_r(t)}{M_i} \left[ \sum_{j=0}^{nr+1} \mathbf{B}_{i,j}^{-(ret)} x_j(t) - X_i \right] + \frac{V_r(t)}{M_i} \left[ \sum_{j=0}^{nr+1} \mathbf{B}_{i,j}^{+(ret)} y_j(t) - Y_i \right] \quad (\text{A.2})$$

Balço no prato de alimentação ( $i = nr + 1$ )

$$\begin{aligned} \frac{dX_{nr+1}}{dt} &= \frac{L_r}{M_{nr+1}} \sum_{j=0}^{nr+1} \mathbf{A}_{nr+1,j}^{-(ret)} x_j(t) + \frac{F}{M_{nr+1}} x_F(t) + \frac{V_s(t)}{M_{nr+1}} \sum_{j=nr+1}^n \mathbf{A}_{nr+1,j}^{+(esg)} y_j \\ &- \frac{V_r(t)}{M_{nr+1}} y_{nr+1}(t) - \frac{L_s(t)}{M_K} x_{nr+1}(t) \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Seção de esgotamento ( $i = (nr + 2)$  a  $(n-1)$ )

$$\frac{dX_i}{dt} = \frac{L_s(t)}{M_i} \left[ \sum_{j=nr+1}^n \mathbf{B}_{i,j}^{-(esg)} x_j(t) - X_i \right] + \frac{V_s(t)}{M_i} \left[ \sum_{j=nr+1}^n \mathbf{B}_{i,j}^{+(esg)} y_j(t) - Y_i \right] \quad (\text{A.4})$$

Balço no refervedor ( $i = n$ )

$$\frac{dX_n}{dt} = \frac{L_s(t)}{M_n(t)} \left[ \sum_{j=nr+1}^n \mathbf{A}_{n,j}^{-(esg)} x_j(t) - x_n(t) \right] - \frac{V_s(t)}{M_n(t)} [y_n(t) - x_n(t)] \quad (\text{A.5})$$

Relações algébricas

$$x_i = X_i - V_{i,1}x_0 - V_{i,2}x_n \quad (\text{A.6})$$

$$Y_i = y_i + V_{i,1}y_0 + V_{i,2}y_n \quad (\text{A.7})$$

$$y_i(t) = \frac{\alpha x_i(t)}{1 + (\alpha - 1)x_i(t)} \quad (\text{A.8})$$

É possível relacionar a variável  $x$  com a variável  $X$  da seguinte maneira (dado que em  $i = 1$ ,  $i = nr + 1$  e  $i = n$ ,  $x = X$ ) :

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} X_0 \\ \vdots \\ X_i - V_{1,i}^{top} X_0 - V_{2,i}^{top} X_{nr+1} \\ \vdots \\ X_{nr+1} \\ \vdots \\ X_i - V_{1,i}^{esg} X_{nr+1} - V_{2,i}^{esg} X_n \\ \vdots \\ X_n \end{bmatrix} \quad (\text{A.9})$$

De forma análoga a relação entre a variável  $Y$  e  $y$

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} y_0 \\ \vdots \\ y_i + V_{1,i}^{top} y_0 + V_{2,i}^{top} y_{nr+1} \\ \vdots \\ y_{nr+1} \\ \vdots \\ y_i + V_{1,i}^{esg} y_{nr+1} + V_{2,i}^{esg} y_n \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \quad (\text{A.10})$$

As derivadas podem ser escritas matricialmente:

$$\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x_0}{\partial X_0} & \frac{\partial x_1}{\partial X_0} & \frac{\partial x_2}{\partial X_0} & \cdots & \frac{\partial x_n}{\partial X_0} \\ \frac{\partial x_0}{\partial X_1} & \frac{\partial x_1}{\partial X_1} & \frac{\partial x_2}{\partial X_1} & \cdots & \frac{\partial x_n}{\partial X_1} \\ \vdots & & & & \\ \frac{\partial x_0}{\partial X_n} & \frac{\partial x_1}{\partial X_n} & \frac{\partial x_2}{\partial X_n} & \cdots & \frac{\partial x_n}{\partial X_n} \end{bmatrix} \quad (\text{A.11})$$

$$\frac{\partial \mathbf{Y}}{\partial \mathbf{y}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial Y_0}{\partial y_0} & \frac{\partial Y_1}{\partial y_0} & \frac{\partial Y_2}{\partial y_0} & \cdots & \frac{\partial Y_n}{\partial y_0} \\ \frac{\partial Y_0}{\partial y_1} & \frac{\partial Y_1}{\partial y_1} & \frac{\partial Y_2}{\partial y_1} & \cdots & \frac{\partial Y_n}{\partial y_1} \\ \vdots & & & & \\ \frac{\partial Y_0}{\partial y_n} & \frac{\partial Y_1}{\partial y_n} & \frac{\partial Y_2}{\partial y_n} & \cdots & \frac{\partial Y_n}{\partial y_n} \end{bmatrix} \quad (\text{A.12})$$

Fazendo as derivadas chega-se a:

$$\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}} = \begin{bmatrix} 1 & -V_{1,i}^{top} & -V_{1,i}^{top} & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & & & & \\ 0 & -V_{2,i}^{top} & -V_{2,i}^{top} & \cdots & 1 & -V_{1,i}^{esg} & -V_{1,i}^{esg} & \cdots 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -V_{2,i}^{esg} & -V_{2,i}^{esg} & \cdots 1 \end{bmatrix} \quad (\text{A.13})$$

$$\frac{\partial \mathbf{Y}}{\partial \mathbf{y}} = \begin{bmatrix} 1 & V_{1,i}^{top} & V_{1,i}^{top} & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & & & & \\ 0 & V_{2,i}^{top} & V_{2,i}^{top} & \cdots & 1 & V_{1,i}^{esg} & V_{1,i}^{esg} & \cdots 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & V_{2,i}^{esg} & V_{2,i}^{esg} & \cdots 1 \end{bmatrix} \quad (\text{A.14})$$

A derivada da relação de equilíbrio é dada por:

$$\frac{\partial x_i}{\partial y_i} = \frac{\alpha}{x(\alpha - 1) + 1} - \frac{\alpha \cdot x(\alpha - 1)}{(x(\alpha - 1) + 1)^2} \quad (\text{A.15})$$

Considerando-se que:  $\frac{\partial X_i}{\partial X_k} = 1$  se  $i = k$  e  $\frac{\partial X_i}{\partial X_k} = 0$  se  $i \neq k$ , derivando as equações do modelo em relação a um  $X_k$  qualquer:

### Técnica de momentos

- Condensador

$$f_0 = \frac{V_r(t)}{M_0(t)} \left[ \sum_{j=0}^{nr+1} \mathbf{A}_{0,j}^{+(ret)} y_j(t) - X_0 \right] \quad (\text{A.16})$$

$$\frac{\partial f_0}{\partial X_k} = \frac{V_r(t)}{M_0(t)} \left[ \sum_{j=0}^{nr+1} \mathbf{A}_{0,j}^{+(ret)} \frac{\partial y_j}{\partial x_j} \frac{\partial x_j}{\partial X_k} - \frac{\partial X_0}{\partial X_k} \right] \quad (\text{A.17})$$

-Seção de retificação (i = 1 a nr+1)

$$f_i = \frac{L_r(t)}{M_i} \left[ \sum_{j=0}^{nr+1} \mathbf{B}_{i,j}^{-(ret)} x_j(t) - X_i \right] + \frac{V_r(t)}{M_i} \left[ \sum_{j=0}^{nr+1} \mathbf{B}_{i,j}^{+(ret)} y_j(t) - Y_i \right] \quad (\text{A.18})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_i}{\partial X_k} &= \frac{L_r(t)}{M_i} \left[ \sum_{j=0}^{nr+1} \mathbf{B}_{i,j}^{-(ret)} \frac{\partial x_j}{\partial X_k} - \frac{\partial X_i}{\partial X_k} \right] \\ &+ \frac{V_r(t)}{M_i} \left[ \sum_{j=0}^{nr+1} \mathbf{B}_{i,j}^{+(ret)} \frac{\partial y_j}{\partial x_j} \frac{\partial x_j}{\partial X_k} - \left( \frac{\partial Y_i}{\partial y_i} \frac{\partial y_i}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial X_k} + \frac{\partial Y_{nr+1}}{\partial y_{nr+1}} \frac{\partial y_{nr+1}}{\partial x_{nr+1}} \frac{\partial x_{nr+1}}{\partial X_k} + \frac{\partial Y_0}{\partial y_0} \frac{\partial y_0}{\partial x_0} \frac{\partial x_0}{\partial X_k} \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

- Prato de alimentação (i = nr+1)

$$\begin{aligned} f_{nr+1} &= \frac{L_r}{M_{nr+1}} \sum_{j=0}^{nr+1} \mathbf{A}_{nr+1,j}^{-(ret)} x_j(t) + \frac{F}{M_{nr+1}} x_F(t) + \frac{V_s(t)}{M_{nr+1}} \sum_{j=nr+1}^n \mathbf{A}_{nr+1,j}^{+(esg)} y_j \\ &- \frac{V_r(t)}{M_{nr+1}} y_{nr+1}(t) - \frac{L_s(t)}{M_{nr+1}} x_{nr+1}(t) \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{nr+1}}{\partial X_k} &= \frac{L_r}{M_{nr+1}} \sum_{j=0}^{nr+1} \mathbf{A}_{nr+1,j}^{-(ret)} \frac{\partial x_j}{\partial X_k} + \frac{V_s(t)}{M_{nr+1}} \sum_{j=nr+1}^n \mathbf{A}_{nr+1,j}^{+(esg)} \frac{\partial y_j}{\partial x_j} \frac{\partial x_j}{\partial X_k} \\ &- \frac{V_r(t)}{M_{nr+1}} \frac{\partial y_{nr+1}}{\partial x_{nr+1}} \frac{\partial x_{nr+1}}{\partial X_k} - \frac{L_s(t)}{M_{nr+1}} \frac{\partial x_{nr+1}}{\partial X_k} \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

- Seção de esgotamento (i = nr+2 a n-1)

$$f_i = \frac{L_s(t)}{M_i} \left[ \sum_{j=nr+1}^n \mathbf{B}_{i,j}^{-(esg)} x_j(t) - X_i \right] + \frac{V_s(t)}{M_i} \left[ \sum_{j=nr+1}^n \mathbf{B}_{i,j}^{+(esg)} y_j(t) - Y_i \right] \quad (\text{A.22})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_i}{\partial X_k} = & \frac{L_s(t)}{M_i} \left[ \sum_{j=nr+1}^n \mathbf{B}_{i,j}^{-(esg)} \frac{\partial x_j}{\partial X_k} - \frac{\partial X_i}{\partial X_k} \right] \\ & + \frac{V_s(t)}{M_i} \left[ \sum_{j=nr+1}^n \mathbf{B}_{i,j}^{+(esg)} \frac{\partial y_j}{\partial x_j} \frac{\partial x_j}{\partial X_k} - \left( \frac{\partial Y_i}{\partial y_i} \frac{\partial y_i}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial X_k} + \frac{\partial Y_n}{\partial y_n} \frac{\partial y_n}{\partial x_n} \frac{\partial x_n}{\partial X_k} + \frac{\partial Y_{nr+1}}{\partial y_{nr+1}} \frac{\partial y_{nr+1}}{\partial x_{nr+1}} \frac{\partial x_{nr+1}}{\partial X_k} \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

- Refervedor (i = n)

$$f_n = \frac{L_s(t)}{M_n(t)} \left[ \sum_{j=nr+1}^n \mathbf{A}_{n,j}^{-(esg)} x_j(t) - x_n(t) \right] - \frac{V_s(t)}{M_n(t)} [y_n(t) - x_n(t)] \quad (\text{A.24})$$

$$\frac{\partial f_n}{\partial X_k} = \frac{L_s(t)}{M_n(t)} \left[ \sum_{j=nr+1}^n \mathbf{A}_{n,j}^{-(esg)} \frac{\partial x_j}{\partial X_k} - \frac{\partial X_n}{\partial X_k} \right] - \frac{V_s(t)}{M_n(t)} \left[ \frac{\partial y_n}{\partial x_n} \frac{\partial x_n}{\partial X_k} - \frac{\partial x_n}{\partial X_k} \right] \quad (\text{A.25})$$

### Método da colocação

Nesse método as equações dos pratos de alimentação, topo e fundo permanecem iguais ao método dos momentos. Logo é necessário modificar apenas as equações dos estágios internos. Derivando as equações dos estágios internos em relação a um  $x_k$  qualquer:

-Seção de retificação (i = 1 a nr+1)

$$f_i = \frac{L_r(t)}{M_i} \left[ \sum_{j=0}^{nr} \mathbf{A}_{i,j}^{-(ret)} x_j(t) - x_i \right] + \frac{V_r(t)}{M_i} \left[ \sum_{j=0}^{nr} \mathbf{A}_{i,j}^{+(ret)} y_j(t) - y_i \right] \quad (\text{A.26})$$

para  $i = k$ :

$$\frac{\partial f_i}{\partial x_k} = \frac{L_r(t)}{M_i} \left[ \mathbf{A}_{i,k}^{-(ret)} - 1 \right] + \frac{V_r(t)}{M_i} \left[ \mathbf{A}_{i,k}^{+(ret)} \frac{dy_i}{dx_k} - \frac{dy_i}{dx_k} \right] \quad (\text{A.27})$$

para  $i \neq k$ :

$$\frac{\partial f_i}{\partial x_k} = \frac{L_r(t)}{M_i} \left[ \mathbf{A}_{i,k}^{-(ret)} \right] + \frac{V_r(t)}{M_i} \left[ \mathbf{A}_{i,k}^{+(ret)} \frac{dy_i}{dx_k} \right] \quad (\text{A.28})$$

-Seção de esgotamento (i = nr+2 a n-1)

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{L_s(t)}{M_i} \left[ \sum_{j=nr+1}^n \mathbf{A}_{i,j}^{-(esg)} x_j(t) - x_i \right] + \frac{V_s(t)}{M_i} \left[ \sum_{j=nr+1}^n \mathbf{A}_{i,j}^{+(esg)} y_j(t) - y_i \right] \quad (\text{A.29})$$

para  $i = k$ :

$$\frac{\partial f_i}{\partial x_k} = \frac{L_s(t)}{M_i} \left[ \mathbf{A}_{i,k}^{-(esg)} - 1 \right] + \frac{V_s(t)}{M_i} \left[ \mathbf{A}_{i,k}^{+(esg)} \frac{dy_i}{dx_k} - \frac{dy_i}{dx_k} \right] \quad (\text{A.30})$$

para  $i \neq k$ :

$$\frac{\partial f_i}{\partial x_k} = \frac{L_s(t)}{M_i} \left[ \mathbf{A}_{i,k}^{-(esg)} \right] + \frac{V_s(t)}{M_i} \left[ \mathbf{A}_{i,k}^{+(esg)} \frac{dy_i}{dx_k} \right] \quad (\text{A.31})$$